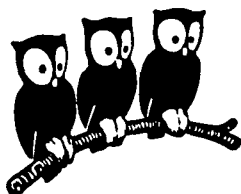


**DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE**



THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS VI

pour obtenir le titre de
Docteur de l'Université Paris VI

présentée par
Markus HOLZMANN

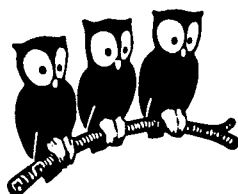
SUJET de la thèse :

La Transition de Bose-Einstein dans un gaz dilué

Soutenue le 23 juin 2000 devant le jury composé de :

M. Jean ZINN-JUSTIN	Rapporteur
M. Henk STOOF	Rapporteur
M. Jacques TREINER	Examineur
M. Jean DALIBARD	Examineur
M. Werner KRAUTH	Directeur de thèse
M. Claude COHEN-TANNOUDJI	Invité

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE



THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS VI

pour obtenir le titre de
Docteur de l'Université Paris VI

présentée par
Markus HOLZMANN

SUJET de la thèse :

La Transition de Bose-Einstein dans un gaz dilué

Soutenue le 23 juin 2000 devant le jury composé de :

M. Jean ZINN-JUSTIN	Rapporteur
M. Henk STOOF	Rapporteur
M. Jacques TREINER	Examineur
M. Jean DALIBARD	Examineur
M. Werner KRAUTH	Directeur de thèse
M. Claude COHEN-TANNOUDJI	Invité

Table des matières

Remerciements	5
Introduction	7
1 Le gaz parfait	11
Encadré 1 : Gaz parfait au voisinage de la transition	16
2 Gaz en interaction : calculs analytiques	21
2.1 Hamiltonien du modèle	23
2.2 Approximation du champ moyen	24
Encadré 2 : Approche variationnelle, champ moyen	26
2.3 Développement de la fonction de partition	27
2.3.1 Calcul de la fonction de partition au deuxième ordre en a/λ	28
Encadré 3 : Développement en opérateurs d'Ursell	29
Encadré 4 : Méthode de la théorie des champs	35
2.3.2 Au-delà du deuxième ordre en a/λ	36
2.4 Développement de l'opérateur densité à un corps	38
2.5 Formalisme des fonctions de Green	42
Encadré 5 : La fonction de Green à température finie	45
2.5.1 Théorie auto-cohérente pour calculer $\Delta T_c/T_c$	48
2.6 Annexe	52
2.6.1 Calcul de U_2 en théorie de perturbation	52
2.6.2 Calcul de U_3 en théorie de perturbation	53
3 Calcul de Monte-Carlo quantique	55
3.1 Méthode générale de Monte-Carlo quantique	56
Encadré 6 : Conditions aux limites	58
3.2 Approche dans la limite du gaz dilué	59
3.2.1 Action exacte	60
3.2.2 Longueur de diffusion	60
3.2.3 Influence des interactions sur la fraction superfluide	61
3.2.4 Algorithme de génération des configurations du gaz parfait	62
Encadré 7 : Loi d'échelle	64
3.2.5 Taille finie et résultat de $\Delta T_c/T_c$	65
3.3 Annexe	66
3.3.1 Calcul de g_2 avec l'approximation primitive	66
3.3.2 Calcul analytique de g_2	68
3.3.3 Validité de l'approximation en produit de paires	70

4	Calcul dans un piège harmonique	71
4.1	Gaz parfait	73
4.2	Gaz piégé en interaction	75
4.3	Fraction condensée	77
	Bibliographie	81
	Publications Commentées	87
	Publication I:	
	Bose-Einstein condensation in interacting gases	
	M. Holzmann, P. Grüter, and F. Laloë, Eur. Phys. J. B 10 , 739 (1999) . . .	87
	Publication II:	
	The Transition Temperature of the Dilute Interacting Bose Gas	
	G. Baym, J.-P. Blaizot, M. Holzmann, F. Laloë, and D. Vautherin,	
	Phys. Rev. Lett. 83 , 1703 (1999)	111
	Publication III:	
	Transition Temperature of the Homogeneous, Weakly Interacting	
	Bose Gas	
	M. Holzmann and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. 83 , 2687 (1999)	117
	Publication IV:	
	Precision Monte Carlo test of the Hartree-Fock approximation	
	for a trapped Bose gas	
	M. Holzmann, W. Krauth, and M. Naraschewski, Phys. Rev. A 59 , 2956 (1999)	123
	Publication V:	
	Pair correlation function of an inhomogeneous interacting Bose-	
	Einstein condensate	
	M. Holzmann and Y. Castin, Eur. Phys. J. D 7 , 425 (1999)	131

Remerciements

Cette thèse a été réalisée au Laboratoire de Physique Statistique et au Laboratoire Kastler Brossel à l'Ecole Normale Supérieure. Je remercie ses directeurs successifs, Sébastien Balibar et Jacques Meunier, ainsi que Michèle Leduc et Elisabeth Giacobino pour m'y avoir accueilli.

Mon premier contact avec le Département de Physique date du mois de septembre 1996, quand j'ai rencontré Yvan Castin à l'occasion d'une conférence sur l'optique quantique. Je lui suis profondément reconnaissant d'avoir lu ma demande de thèse quelques mois plus tard et d'avoir cherché la possibilité de faire une thèse avec Werner Krauth et Franck Laloë dans (et pas entre) les deux laboratoires.

Je dois beaucoup à Werner Krauth qui m'a guidé pendant ces années avec beaucoup d'enthousiasme. Il m'a appris la "physique théorique pratique sur l'ordinateur" avec beaucoup de patience et j'ai profité de son imagination incroyable pour trouver des moyens pour résoudre presque n'importe quel problème.

Je remercie également Franck Laloë, avec qui j'ai eu des discussions quotidiennes. Son intuition, sa précision et sa connaissance générale de la physique m'ont apporté énormément.

Tous les travaux présentés dans cette thèse sont les fruits de collaborations avec des personnalités exceptionnelles : Gordon Baym, Jean-Paul Blaizot, Yvan Castin, Werner Krauth, Franck Laloë et Dominique Vautherin. Par ailleurs j'ai profité de travailler avec Gora Shlyapnikov et de discuter avec Christophe Salomon, Jean Dalibard et Maxim Olshanii.

Je dois beaucoup à David Guery-Odelin et Emmanuel Courtade, sans eux la thèse serait probablement illisible. Ils ont sacrifié beaucoup de leur temps pour m'aider à la formuler en français. Ces nombreuses discussions m'ont aidé aussi à former plus précisément mes idées. Je remercie également Jean Vannimenus d'avoir bien voulu corriger attentivement la version finale "en urgence".

Mes remerciements vont à toutes les personnes qui ont accepté de faire partie de mon jury, Claude Cohen-Tannoudji, Jean Dalibard, Jacques Treiner et en particulier Henk Stoof et Jean Zinn-Justin au titre de rapporteurs.

Je remercie mes voisins dans mes divers bureaux pour une atmosphère très agréable : Lionel Pérennes (Yo), Patrick Giron, Nathalie Piegay, Karen Sauer, François Marion, Emmanuel Courtade, Xavier Müller, David Guery-Odelin, Chris Herzog, Iacopo Carusotto, Anna Minguzzi, Erich Müller, Xavier Maître, François Treussart, Nicolas Dureuil, Pierre Desbiolles, Hervé Henry, Chi-Toung Pham, Eric Brunet, Alberto Rosso, Cécile Appert. J'ai bénéficié de nombreux échanges scientifiques avec eux comme avec Micha Baranov, Isabelle Bouchoule, Roland Combescot, Philipp Cren, Ralph Dum, Peter Fedichev, Gabriele Ferrari, Vincent Hakim, Didier Herschkowitz, Christian Huepe, Tom Hijman, Unni

Krishna, Krik Madison, Emmanuel Mandonnet, Stéphane Métens, Bill Mullin, Martin Narachewski, Pierre-Jean Nacher, Francesco Pavone, Francisco Perales, Dima Petrov, Ludger Santen, Franck Pereira Dos Santos, Pedro Patricio da Silva, Alice Sinatra, Geneviève Tastevin, Jean Vannimendus et tous les autres membres dans le département de physique. Je remercie également les équipes des secrétariats, Angélique Manchon, Carole Philippe, Nora Sadaoui, Michèle Sanchez, Geneviève Piard et Zohra Ouassoum comme les membres de l'Atelier général pour beaucoup d'aide pratique et l'équipe informatique Zaire Dissi et Thierry Besançon.

Enfin mais surtout, je veux remercier ceux qui m'ont supporté même en-dehors des heures passées au laboratoire: Ernst Rasel, Wolf von Klitzing, Iacopo Carusotto, Claudia Isola, Didier Herschkowitz, Alberto Rosso, Raoul Santachiara, Yo pour m'avoir appris la "langue et civilisation" française et Anna Minguzzi pour la "cucina italiana" et pour beaucoup d'autres choses.

Je remercie le "Deutscher Akademischer Austauschdienst (DAAD)". Cette Doktorarbeit wurde mittels eines DAAD Doktorandenstipendiums im Rahmen des gemeinsamen Hochschulsonderprogramms III von Bund und Ländern finanziert.

Introduction

Une transition de phase d'un gaz parfait — comme prédit par Einstein [1] pour un système de bosons en trois dimensions — contredit l'intuition physique : en absence de toute interaction entre des atomes, les corrélations quantiques forcent à elles seules les particules à former un condensat de Bose-Einstein en dessous d'une température critique $T_c > 0$. Ces corrélations quantiques viennent de la statistique bosonique de particules indiscernables. L'objectif de cette thèse est d'étudier quantitativement l'influence des interactions mutuelles sur ce étonnant phénomène à basse température à partir des paramètres microscopiques d'un gaz dilué.

La variation de la température critique T_c avec l'interaction dans un système homogène a une histoire controversée dans la littérature (voir figure 1). Même dans la limite d'un gaz très dilué, des prédictions théoriques différentes abondent [2–11]. Parmi les calculs analytiques les plus récents, le comportement de T_c en fonction du diamètre a des sphères dures varie soit linéairement en $an^{1/3}$ [7, 8] soit en racine carré ($a^{1/2}n^{1/6}$) [6, 11], où n est la densité du gaz. Un calcul numérique de Monte-Carlo quantique pour différentes densités na^3 propose une augmentation de la température critique linéairement avec le diamètre des sphères dures [10].

Avec mon travail de thèse, j'ai contribué à une meilleure compréhension de ce problème en le clarifiant de plusieurs points de vue. D'une part, un développement de la fonction de partition en agrégats — l'approche d'Ursell [I] — et les méthodes de la théorie quantique des champs à température non nulle — l'approche en fonctions de Green [II] — permettent de prédire un comportement linéaire en $an^{1/3}$ de la température critique (chapitre 2). Contrairement aux calculs antérieurs, nous avons considéré la structure générale des corrections au spectre énergétique à tous les ordres en a/λ , où $\lambda \sim n^{-1/3}$ est la longueur d'onde thermique. La linéarité de la variation de la température critique en $an^{1/3}$ représente un résultat non-perturbatif et non-trivial. Nous montrons aussi qu'un calcul de la valeur absolue de T_c pour un gaz dilué repose en général sur des approximations incontrôlables — qui ne peuvent pas être contrôlées par un paramètre arbitrairement petit —, l'origine des prédictions qualitativement et quantitativement différentes dans la littérature.

Une approche complémentaire à ce problème est fournie par la méthode de Monte-Carlo quantique (chapitre 3) qui permet des calculs numériquement exactes pour un système de bosons en interaction. En associant la méthode de Monte-Carlo quantique avec la théorie de perturbation, nous avons optimisé cette approche numérique pour calculer de manière efficace des quantités dans la limite d'un gaz dilué. Contrairement à [10], un calcul direct de la température critique du gaz dilué dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$ a été possible [III]. La linéarité

de $\Delta T_c/T_c$ en $an^{1/3}$ découle de la loi d'échelle ("finite-size scaling"), nécessaire pour extrapoler les propriétés d'un système de taille finie à la limite thermodynamique. Nous déterminons ainsi la température critique dans l'ensemble canonique¹.

Dans la deuxième partie (chapitre 4) de cette thèse, je résume mes calculs de Monte-Carlo quantique concernant des paramètres plus proches des expériences sur la condensation de Bose-Einstein sur les vapeurs des alcalins [14, 15, 16] et sur l'hydrogène [17]. Dans ces systèmes, le potentiel extérieur du piège et le nombre fini des particules jouent un rôle important. Les résultats du système homogène, par exemple la modification de la température critique, ne s'appliquent pas directement. Nous avons mené des calculs de Monte-Carlo quantique avec $N = 10\,000$ bosons dans un piège harmonique et une longueur de diffusion des atomes adaptée aux expériences sur ^{87}Rb [IV,V]. Ces calculs permettent de tester précisément la validité des approximations simples, utilisées fréquemment pour interpréter les résultats expérimentaux, — comme l'approximation de Hartree-Fock et l'approximation de Bogoliubov — avec ce choix des paramètres.

Finalement, j'aborde la question de la détermination rigoureuse du condensat et de la fraction condensée dans un système inhomogène avec des interactions. Contrairement au système homogène, où la fonction d'onde du condensat est connue par raison de symétrie, la forme spatiale du condensat n'est pas *à priori* connue dans un potentiel extérieur. Pour étudier l'ordre non-diagonal à longue portée qui caractérise la présence d'un condensat, l'information sur les éléments non-diagonaux de la matrice densité à un corps est nécessaire. Par un calcul de Monte-Carlo quantique, nous avons déterminé la fonction d'onde du condensat et la fraction condensée dans ce système inhomogène en utilisant uniquement ce concept fondamental. Le calcul permet de tester de manière directe la validité de l'équation de Gross-Pitaevskii pour décrire la fonction d'onde du condensat, mais aussi d'étudier numériquement la relation quantitative entre la condensation de Bose-Einstein et l'apparition des longs cycles d'échanges, observables avec le calcul de Monte-Carlo. La statistique des cycles d'échanges et leur relation avec le phénomène de la condensation de Bose-Einstein sont introduites dans le premier chapitre pour le cas simple du gaz parfait.

En tête de chaque chapitre le lecteur trouvera un résumé plus détaillé. Par ailleurs, un certain nombre de méthodes et techniques utilisées tout au long de cette thèse sont rassemblées dans des "encadrés". L'essentiel de mon travail de thèse est publié dans les articles [I–V] reproduits et annotés à partir de la page 87.

1. Plus récemment une augmentation linéaire en $an^{1/3}$ de la température critique de la transition superfluide dans un système de ^4He -vycor a été mesuré dans [13]. Cependant, le système de vycor est très complexe et il reste à vérifier si l'interprétation par un gaz dilué en trois dimensions — proposé dans cet article — est quantitativement possible pour décrire la température critique.

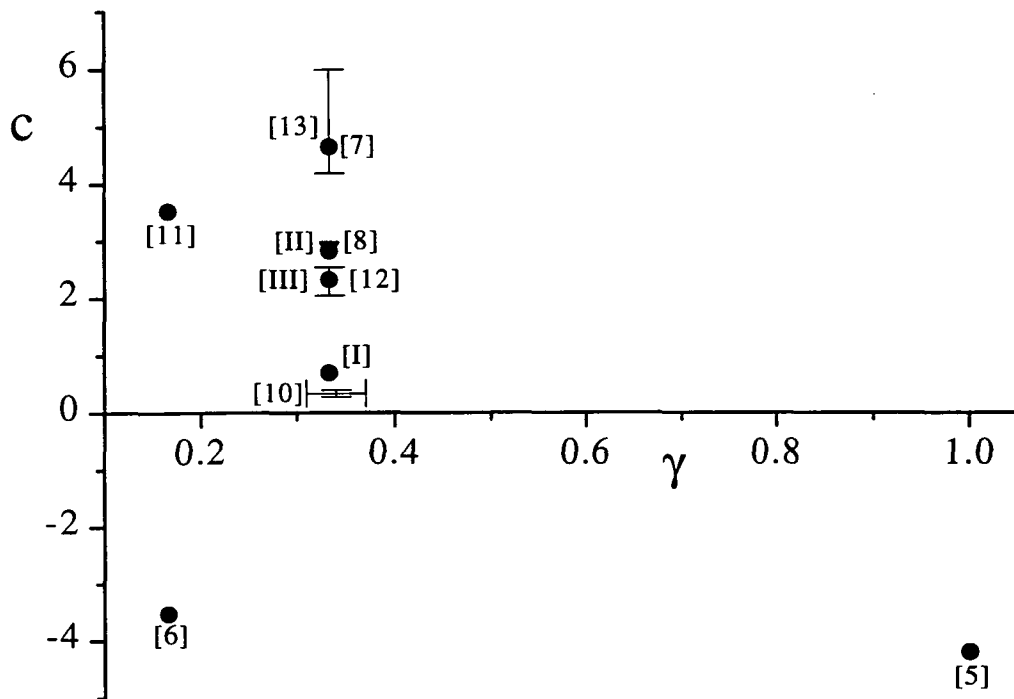


FIG. 1 - Les prédictions théoriques et expérimentales proposées dans la littérature pour la modification de la température critique $\Delta T_c/T_c = c(na^3)^\gamma$ dans la limite d'un gaz dilué $na^3 \rightarrow 0$. Je n'ai tracé que les résultats ou la limite asymptotique était donnée explicitement dans les articles. J'ai aussi inclu les résultats obtenus dans cette thèse [I-III].

Chapitre 1

Le gaz parfait

Pendant plusieurs décennies, la nature de la condensation de Bose-Einstein en présence d'interactions a posé de grands problèmes conceptuels. La compréhension moderne de ce phénomène spectaculaire est fournie par le concept de l'ordre non-diagonal à longue portée, proposé initialement par Penrose et Onsager [18]. Le lien entre la condensation de Bose-Einstein et la superfluidité a été également élucidé [19].

Bien avant ces travaux, Feynman avait proposé que les longs cycles d'échanges, présents dans un gaz quantique, jouaient un rôle crucial pour la description de la condensation de Bose-Einstein [20]. Ces cycles d'échanges apparaissent naturellement en première quantification *via* la symétrisation des états dans la fonction de partition. Cette image, basée sur l'intégrale de chemin, a été beaucoup utilisée par Feynman pour une compréhension intuitive de la transition superfluide dans ^4He liquide [21, 22, 23].

La description de Feynman a été fondamentale pour les approches numériques aux liquides quantiques du type Monte-Carlo quantique qui, au cours des 15 dernières années, ont permis une description quantitative de la transition lambda partant des premiers principes [24].

Dans ce premier chapitre, j'introduis la description de Feynman pour le cas du *gaz parfait*. J'établis ensuite le lien explicite entre la statistique des cycles d'échanges et la description habituelle en termes de nombre d'occupation d'états. Les formules, présentées dans ce chapitre, donnent la description complète du système sans interaction à nombre fini des particules. La connaissance détaillée du gaz parfait est essentielle pour les calculs numériques d'un gaz en interaction au chapitre 3 et au chapitre 4. Le formalisme présente en outre des liens étroits avec la description en opérateurs d'Ursell au chapitre 2.

En particulier, une formule, que nous avons établie dans [III], donne la correspondance précise entre la distribution des longueurs des cycles et la fraction condensée. Dans le chapitre 4 nous étudierons la relation entre la description de Penrose et Onsager et l'image de Feynman en présence des interactions dans un gaz piégé.

Pour un système de N particules décrit par un hamiltonien H , toutes les informations à l'équilibre thermodynamique sont contenues dans la fonction de partition Z . Dans le cas de particules discernables à température $T = 1/\beta$, chaque configuration $\mathbf{R} \equiv (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ doit être pondérée par le facteur de Boltzmann $\exp[-\beta H]$; la probabilité d'avoir une configuration $\mathbf{R}$ sera proportionnelle à l'élément diagonal $\rho_D(\mathbf{R}, \mathbf{R})$ de l'opérateur densité

$$\rho_D(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \langle \mathbf{R}' | e^{-\beta H} | \mathbf{R} \rangle \quad (1.1)$$

La fonction de partition Z_N^D pour des particules de Boltzmann s'obtient à partir des éléments diagonaux de l'opérateur densité $\rho_D(\mathbf{R}, \mathbf{R})$ selon

$$Z_N^D = \frac{1}{N!} \int d^3\mathbf{R} \rho_D(\mathbf{R}, \mathbf{R}) = \frac{1}{N!} \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \} \quad (1.2)$$

Pour des particules quantiques indiscernables, les états du système diffèrent à basse température de ceux de l'ensemble de Boltzmann. Pour les bosons, l'indiscernabilité limite les états accessibles à ceux qui sont symétriques, $|\mathbf{R}\rangle_S \equiv \frac{1}{N!} \sum_{\{P\}} |P(\mathbf{R})\rangle$. On garde explicitement l'action du symétriseur S qui s'exprime dans la somme sur toutes les permutations possibles $\{P\}$. Avec $P(\mathbf{R}) \equiv (\mathbf{r}_{P(1)}, \mathbf{r}_{P(2)}, \dots, \mathbf{r}_{P(N)})$, on obtient

$$\rho_B(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = S \langle \mathbf{R}' | e^{-\beta H} | \mathbf{R} \rangle_S \quad (1.3)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\{P\}} \langle P(\mathbf{R}') | e^{-\beta H} | \mathbf{R} \rangle \quad (1.4)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\{P\}} \rho_D(\mathbf{R}, P(\mathbf{R}')) \quad (1.5)$$

La fonction de partition Z_N du système bosonique s'obtient à partir de la matrice densité $\rho_B(\mathbf{R}, \mathbf{R}')$ par

$$Z_N = \int d\mathbf{R} \rho_B(\mathbf{R}, \mathbf{R}) = \text{Tr} \{ e^{-\beta H} S \} \quad (1.6)$$

Puisque l'hamiltonien commute avec l'opérateur de symétrisation S , il suffit de ne garder ce dernier qu'une seule fois en équation (1.3).

Exception faite de la permutation identité $P(i) = i$ ($i = 1, \dots, N$), la somme sur toutes les permutations $\{P\}$ dans l'expression (1.5) pour $\rho_B(\mathbf{R}, \mathbf{R})$ fait intervenir les éléments non-diagonaux $\rho_D(\mathbf{R}, P(\mathbf{R}))$ de la matrice densité des particules discernables (voir figure 1.1). En représentation "position", les éléments non-diagonaux de la matrice densité décroissent sur une distance de l'ordre de la longueur d'onde de de Broglie $\lambda \sim \hbar(mT)^{-1/2}$. Pour un système avec une densité moyenne $n = N/V$ à haute température, seule l'identité contribue: ainsi les effets d'échange deviennent négligeables. On retrouve dans cette limite le résultat classique pour des particules discernables ($\hbar = 0$). Les effets statistiques quantiques commencent à intervenir dès que la longueur thermique est de l'ordre de la distance moyenne entre les particules $n^{-1/3} \sim \lambda$, d'où on obtient un paramètre sans dimension $n\lambda^3$, qui décrit le degré de dégénérescence quantique du système.

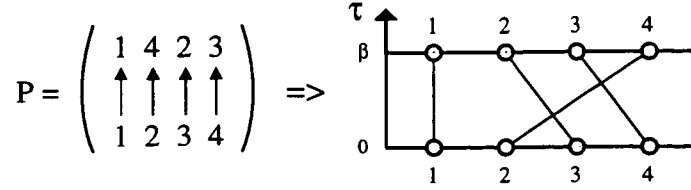


FIG. 1.1 - Les permutations font intervenir en général les éléments non-diagonaux de l'opérateur densité des particules discernables. Le terme correspondant à la permutation P à gauche est graphiquement représenté à droite : après une évolution en "temps imaginaire" $\tau = \beta$ les particules 2, 3, 4 ont échangé leurs rôles. Cette permutation $P = (1)(243)$ peut également être décrite en termes de cycles $\{m_k\}$ par $m_1 = 1$ et $m_3 = 1$ ($m_2 = m_4 = 0$).

Comme l'hamiltonien H est symétrique, de nombreuses permutations ne diffèrent que par l'étiquetage des particules et contribuent avec un poids statistique identique. C'est le cas, à titre d'exemple, de toutes les permutations qui n'échangent le rôle que de deux particules : $P(i) = j, P(j) = i, P(k) = k, i \neq j \neq k$. La contribution de ce sous-ensemble de permutations se réduit au calcul de la matrice densité pour la permutation, $P(1) = 2, P(2) = 1, P(i) = i, i \neq 1, 2$, multipliée par le nombre de ces permutations, à savoir $N!/2(N-2)!$. Ces permutations sont des cycles de longueur 2, où la longueur k d'un cycle est définie par $P^k(i) = i$.

Plus généralement, on peut donc reformuler le comptage en termes de cycles d'échange. Il suffit de connaître le nombre d'occupation m_k d'un cycle de longueur k donné. La somme sur les permutations peut alors être remplacée par une somme sur les distributions $\{m_k\}$. Notons que chaque configuration $\{m_k\}$ vérifie la conservation du nombre total de particules

$$\sum_{k=1}^N k m_k = N \quad (1.7)$$

Pour une distribution $\{m_k\}$ donnée, il y a $N! \prod_k (m_k! k^{m_k})^{-1}$ possibilités de distribuer les indices des particules. Ce facteur de comptage correspond au nombre de permutations différentes, qui conduisent à la même distribution en cycles. On obtient l'expression de la matrice densité pour des bosons :

$$\rho_B(\mathbf{R}, \mathbf{R}) = \sum_{\{m_k\}} \rho_D(\mathbf{R}, P_{\{m_k\}}(\mathbf{R})) \prod_k \frac{1}{m_k! k^{m_k}} \quad (1.8)$$

où $\rho_D(\mathbf{R}, P_{\{m_k\}}(\mathbf{R}))$ est la valeur de la matrice densité des particules discernables pour une permutation $P_{\{m_k\}}$ arbitraire correspondant à cette configuration en cycles $\{m_k\}$.

Appliquons dans un premier temps ce formalisme au cas d'un gaz parfait. L'hamiltonien H_0 correspondant est la somme des hamiltoniens individuels $H_0 = \sum_i h_0(i)$, où $h_0(i) = \mathbf{p}_i^2/2m$ est l'énergie cinétique d'une particule. Il est d'une grande importance que les contributions des particules qui ne sont pas connectées par un cycle d'échange se factorisent dans $\rho_D(\mathbf{R}, P_{\{m_k\}}(\mathbf{R}))$. Regardons par exemple pour $N = 3$ particules le terme correspondant à un cycle de

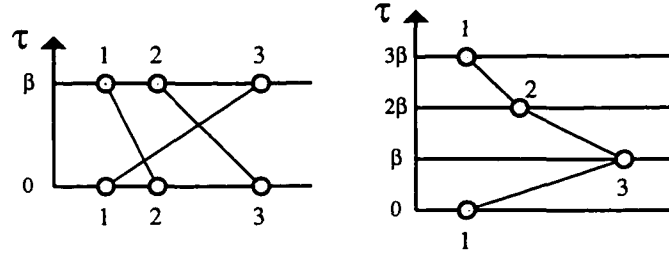


FIG. 1.2 – Un cycle de longueur 3 (à gauche) correspond à une particule qui évolue entre $\tau = 0$ et $\tau = 3\beta$ (à droite).

longueur $k = 3$, $m_3 = 1$ ($P(1) = 2$, $P(2) = 3$, $P(3) = 1$) :

$$\rho_D(\mathbf{R}, P(\mathbf{R})) = \langle \mathbf{r}_1 | e^{-\beta h_0} | \mathbf{r}_2 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | e^{-\beta h_0} | \mathbf{r}_3 \rangle \langle \mathbf{r}_3 | e^{-\beta h_0} | \mathbf{r}_1 \rangle \quad (1.9)$$

L'intégration sur deux particules ($\mathbf{r}_2$, $\mathbf{r}_3$) montre qu'une particule dans un cycle de longueur 3 se comporte en moyenne comme une seule particule à une température 3 fois plus petite. Puisque l'hamiltonien ne dépend pas explicitement de la température (c'est-à-dire du "temps imaginaire" τ), l'évolution en temps imaginaire d'un cycle de longueur k est équivalent à l'évolution d'une seule particule entre $\tau = 0$ et $\tau = k\beta$ (voir figure 1.2 et l'application page 62). Dans la trace de la fonction de partition (1.6), chaque cycle de longueur k contribue avec un poids s_k , qui s'écrit

$$s_k = \text{Tr} \{ e^{-k\beta h_0} \} \quad (1.10)$$

Ainsi, un cycle de longueur k se comporte comme une particule à température $1/(k\beta)$. La fonction de partition s'écrit alors sous la forme, obtenue par Feynman [20],

$$Z_N = \sum_{\{m_k\}} \prod_k \frac{s_k^{m_k}}{m_k! k^{m_k}} \quad (1.11)$$

avec la contrainte $\sum_k k m_k = N$.

Cette dernière contrainte est imposée par l'ensemble canonique. On peut la contourner *via* le formalisme grand-canonique qui, grâce au potentiel chimique μ , ne conserve le nombre de particules qu'en moyenne. La fonction de partition grand-canonique Z_{GC} est reliée à la fonction de partition canonique Z_N par :

$$Z_{GC} = \sum_{N=0}^{\infty} Z_N z^N \quad (1.12)$$

où $z = e^{\beta\mu}$ est la fugacité. On peut ainsi sommer indépendamment sur tous les nombres d'occupation des cycles, soit finalement :

$$Z_{GC} = \exp \left\{ \sum_k \frac{s_k z^k}{k} \right\} \quad (1.13)$$

Cette fonction donne accès à l'expression de la densité moyenne $n = N/V$:

$$n = \frac{z}{V} \frac{\partial \log Z_{GC}}{\partial z} = \frac{1}{V} \sum_k s_k z^k \quad (1.14)$$

Comme les traces s_k sont toujours positives et plus grandes que 1, le potentiel chimique doit rester négatif, pour que la densité reste finie.

Pour un système homogène on obtient à la limite thermodynamique

$$\frac{1}{V}s_k = \frac{1}{k^{3/2}\lambda^3} \quad (1.15)$$

où l'on a introduit la longueur d'onde thermique $\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2\beta/m}$. On obtient alors l'expression de la densité dans l'espace des phases :

$$n\lambda^3 = g_{3/2}(z) = \sum_k \frac{z^k}{k^{3/2}} \quad (1.16)$$

Pour un gaz classique ($\beta\mu = \log(z) \ll 0$), seuls les premiers termes de la somme dans l'équation (1.16) sont importants. Rappelons que k fait référence à une longueur de cycle. Dans la limite classique, on voit que les longs cycles d'échange ne contribuent presque pas à la densité. Mais dès que le potentiel chimique s'approche de l'énergie de l'état fondamental d'une distance de l'ordre de $1/N$, tous les termes deviennent importants. On retrouve l'interprétation de Feynman selon laquelle le phénomène de condensation de Bose-Einstein est intrinsèquement lié à l'occurrence des longs cycles d'échange dans le système. La densité au point de transition est donnée par :

$$n\lambda^3 = g_{3/2}(1) = \zeta(3/2) = 2.612... \quad (1.17)$$

Une formulation plus quantitative de l'interprétation de Feynman peut être obtenue grâce à l'équation (1.11), où la fonction de partition est écrite comme une somme sur tous les nombres d'occupation des cycles $\{m_k\}$. Elle permet également d'explicitier la probabilité $P(\{m_l\})$ de la distribution des nombres d'occupation $\{m_l\}$ dans le système :

$$P(\{m_l\}) = \frac{1}{Z_N} \delta_{\sum_l l m_l, N} \prod_l \frac{s_l^{m_l}}{m_l! l^{m_l}} \quad (1.18)$$

Cette dernière relation permet de déduire l'expression de la valeur moyenne d'occupation m_k d'un cycle de longueur k dans l'ensemble *canonique* [III] :

$$\langle m_k \rangle_N = \sum_{\{m_l\}} m_k P(\{m_l\}) \quad (1.19)$$

$$= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{m_l\}} \frac{m_k s_k^{m_k}}{m_k! k^{m_k}} \prod_{l \neq k} \frac{s_l^{m_l}}{m_l! l^{m_l}} \quad (1.20)$$

$$= \frac{1}{Z_N} \frac{s_k}{k} \sum_{\{m_l, m_k \geq 1\}} \frac{s_k^{m_k-1}}{(m_k-1)! k^{m_k-1}} \prod_{l \neq k} \frac{s_l^{m_l}}{m_l! l^{m_l}} \quad (1.21)$$

La somme sur toutes les partitions $\{m_l, m_k \geq 1\}$ correspond aux deux conditions, $\sum_l l m_l = N$ et la condition que le cycle de longueur k soit au moins occupé une fois, $m_k \geq 1$. Cette somme équivaut à une somme sur toutes les partitions $\{m_l\}$ avec une seule condition $\sum_l l m_l = N - k$.

Encadré 1 : Gaz parfait au voisinage de la transition

Il est instructif de calculer le comportement du paramètre de dégénérescence $n\lambda^3$ au-dessus de la transition de Bose-Einstein pour le gaz parfait en fonction du potentiel chimique :

$$n\lambda^3 = g_{3/2}(e^{\beta\mu}) = \lambda^3 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1}, \quad (\text{B1-1})$$

avec $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$. Puisque la fonction de Bose développe une singularité (infrarouge) à $k = 0$ au point critique ($\mu = 0$), un développement de Taylor en puissances de $\beta\mu$ n'est pas possible près de la transition. Néanmoins, on peut séparer le comportement pour $k \rightarrow 0$ et réécrire l'intégrale (B1-1) de la manière suivante :

$$n = \int_0^\Lambda \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1} - \frac{1}{\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right) + \int_\Lambda^\infty \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1} + \int_0^\Lambda \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta(\varepsilon_k - \mu)}$$

où il a été nécessaire d'introduire une coupure Λ afin de contrôler les divergences ultraviolettes ainsi créées. Dans cette nouvelle expression, seule la dernière intégrale est divergente pour $\beta\mu \rightarrow 0$, les autres intégrales permettent un développement en puissances de $|\beta\mu|$. Prenons l'ordre zéro en $|\beta\mu|$ de ces deux premières intégrales, nous obtenons

$$n \simeq \int_0^\Lambda \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k} - 1} - \frac{1}{\beta\varepsilon_k} \right) + \int_\Lambda^\infty \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k} - 1} + \int_0^\Lambda \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta(\varepsilon_k - \mu)}$$

Nous regroupons alors le premier terme de la première intégrale avec la deuxième intégrale, ce qui donne la contribution

$$\int_0^\infty \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k} - 1} = \zeta(3/2)\lambda^{-3}$$

Pour le second terme, il est regroupé avec la dernière intégrale, et fournit :

$$\int_0^\Lambda \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - \frac{1}{\beta\varepsilon_k} \right] = \beta\mu \int_0^\Lambda \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta^2\varepsilon_k(\varepsilon_k - \mu)}$$

Cette intégrale est finie pour $\Lambda \rightarrow \infty$ et vaut $-\lambda^{-3}\sqrt{4\pi(-\beta\mu)}$. Notons que la dépendance en racine carrée du potentiel chimique peut aussi être obtenue par un simple changement de variable (ou un argument dimensionnel). Regroupons les termes obtenus, nous pouvons alors écrire :

$$n\lambda^3 = \zeta(3/2) - 2\sqrt{\pi(-\beta\mu)} + O(\beta\mu)$$

Pour aller plus loin, il faut regarder les ordres suivants dans le développement de Taylor en $|\beta\mu|$, suivi d'une limite $\Lambda \rightarrow \infty$.

Ce petit calcul montre dans le cas simple du gaz parfait que des singularités infrarouges, liées à une transition de phase, nécessitent en général un regroupement des termes dans l'expression exacte pour obtenir une dépendance non-analytique.

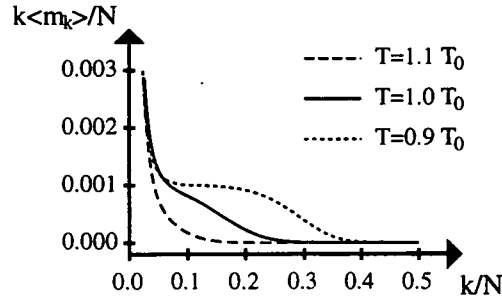


FIG. 1.3 – Le nombre moyen de particules $k\langle m_k \rangle_N$ dans un cycle de longueur k au voisinage de la température critique T_0 pour $N = 1000$ particules dans l'ensemble canonique.

On peut la justifier grâce au changement de variables $m_k - 1 \rightarrow m_k$. On fait ainsi apparaître la fonction de partition canonique relative à $N - k$ particules. D'où l'expression de $\langle m_k \rangle_N$ ou, de manière équivalente, celle du nombre moyen de particules dans un cycle de longueur k donné : $k\langle m_k \rangle_N$

$$k\langle m_k \rangle_N = s_k \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \quad (1.22)$$

La relation de conservation du nombre de particules $\sum_k k\langle m_k \rangle_N = N$, permet de calculer par récurrence Z_N :

$$Z_N = \frac{1}{N} \sum_k s_k Z_{N-k} \quad (1.23)$$

Cette formule est bien utile : elle permet de calculer par récurrence dans l'ensemble canonique la fonction de partition pour toute valeur de N finie [25, 26, 27, 28]. Une nouvelle interprétation de cette formule est à la base de notre algorithme de Monte-Carlo, présenté dans [III].

La figure 1.3 représente le nombre moyen de particules par cycle de longueur k au voisinage de la température critique T_0 . Comme attendu, au-dessus de la température critique, $T > T_0$, $k\langle m_k \rangle_N$ décroît rapidement avec la longueur de cycle. En revanche, en dessous de T_0 , on peut distinguer deux régimes : une décroissance rapide pour les petits cycles k , $k \ll N^{2/3}$, et un plateau pour $k > N^{2/3}$, où $k\langle m_k \rangle_N$ reste pratiquement constant.

Nous avons réussi à relier le nombre d'occupation des cycles avec le nombre d'occupation moyen d'un état ν d'énergie ε_ν . Ce dernier est donné par $\langle n_\nu \rangle_N = -\partial \log Z_N / \partial(\beta \varepsilon_\nu)$ et peut être calculé grâce à l'équation (1.11). On obtient

$$\langle n_\nu \rangle_N = \sum_{k=1}^N e^{-k\beta \varepsilon_\nu} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \quad (1.24)$$

$$= \sum_{k=1}^N \frac{e^{-k\beta \varepsilon_\nu}}{s_k} k\langle m_k \rangle_N \quad (1.25)$$

Or, $e^{-k\beta \varepsilon_\nu} / s_k$ est la moyenne thermique classique du nombre d'occupation de l'état ν pour une température $1/(k\beta)$. Ainsi, les particules d'un cycle de longueur

k se comportent comme des particules classiques à une température k fois plus petite.

On voit aussi, que pour des cycles $k \gg N^{2/3}$, les effets de discrétisation des niveaux d'énergie $\epsilon_\nu = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$ dans la trace $s_k = \text{Tr} \{ \exp[-k\beta h_0] \}$ deviennent non-négligeables: $s_k \simeq 1$ pour $k \propto N$. L'équation (1.25) permet de montrer que les particules des grands cycles $k \gg N^{2/3}$ contribuent exclusivement au nombre de particules condensées ($n_{\nu=0}$). Dans la limite thermodynamique, la fraction condensée sera donnée par la valeur maximale $k_{\max}/N$ des cycles occupés. Dans le chapitre 4, page 77, je compare cette façon d'obtenir la fraction condensée dans une simulation de Monte-Carlo avec un résultat obtenu par calcul des éléments non-diagonaux de la matrice densité dans le cas d'un gaz en *interaction*.

La fonction de distribution $P(n_\nu \geq k)$ — correspondant au cas où au moins k particules sont dans l'état ν — s'exprime sous la forme :

$$P(n_\nu \geq k) = e^{-k\beta\epsilon_\nu} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \quad (1.26)$$

Cette relation fait apparaître la fonction de partition à $N-k$ particules Z_{N-k} ; la contrainte d'avoir au moins k particules dans l'état ν est imposée par le facteur $e^{-k\beta\epsilon_\nu}$. Par sommation sur les états ν , les probabilités $P(n_\nu \geq k)$ peuvent être reliées au nombre moyen $k\langle m_k \rangle_N$ de particules dans un cycle de longueur k :

$$k\langle m_k \rangle_N = \sum_\nu P(n_\nu \geq k) = s_k \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \quad (1.27)$$

La fonction de distribution correspondant à k particules exactement dans l'état ν s'obtient par soustraction: $P(n_\nu = k) = P(n_\nu \geq k) - P(n_\nu \geq k+1)$. On voit que la dérivée discrète de $k\langle m_k \rangle_N$ par rapport à k s'écrit :

$$k\langle m_k \rangle_N - (k+1)\langle m_{k+1} \rangle_N = \sum_\nu P(n_\nu = k) \quad (1.28)$$

et correspond donc à la probabilité d'avoir exactement k particules dans un même état. Cette formule (1.28), que nous avons obtenue dans [III], présente une relation surprenante entre les longueurs des cycles (membre de gauche de l'équation) et la probabilité d'occupation des états (membre de droite).

Pour $T > T_0$, $k\langle m_k \rangle_N$ est une fonction convexe, donc la probabilité d'avoir exactement k particules dans le même état est strictement décroissante en fonction de k . En revanche, en dessous de la température critique T_0 ($T \leq T_0$), la probabilité d'avoir exactement k bosons dans le même état croît de manière significative pour $k \gg 1$. Cet effet est mis en évidence sur la figure 1.4 par la présence d'un pic de plus en plus marqué au fur et à mesure que la température descend en dessous de la température critique. Ce pic décrit la distribution du nombre de particules condensées n_0 . Dans l'ensemble canonique, la largeur de cette distribution $(\Delta n_0)^2 \equiv \langle n_0^2 \rangle - \langle n_0 \rangle^2$ reste proportionnelle à $\langle n_0 \rangle_N$ pour $T < T_0$ [29], d'où :

$$\frac{\Delta n_0}{\langle n_0 \rangle_N} \propto \langle n_0 \rangle_N^{-1/2} \quad (1.29)$$

Ce résultat reflète le fait qu'un cycle de longueur macroscopique ($k \propto N$) ne peut pas être occupé macroscopiquement dans l'ensemble canonique. A cause de

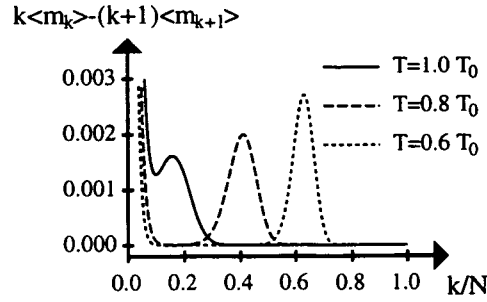


FIG. 1.4 – *Fonction de distribution correspondant à k particules exactement dans le même état $k\langle m_k \rangle_N - (k+1)\langle m_{k+1} \rangle_N$. Calcul réalisé pour $N = 1000$ particules. En dessous de T_0 , le pic décrit la statistique des particules condensées.*

la contrainte d'un nombre fixe de particules, les fluctuations de $k\langle m_k \rangle_N$ restent intensives (sauf au voisinage de la température critique).

Jusqu'ici, la statistique de cycles a été obtenue dans l'ensemble canonique, c'est-à-dire avec un nombre fixé de particules. Dans le formalisme grand-canonique la valeur moyenne $\langle A \rangle_{GC}$ d'une observable A est reliée à sa valeur moyenne $\langle A \rangle_N$ dans le système canonique de la manière suivante :

$$\langle A \rangle_{GC} = \frac{1}{Z_{GC}} \sum_{N=0}^{\infty} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(H-\mu N)} A S \right\} \quad (1.30)$$

$$= \frac{1}{Z_{GC}} \sum_N z^N Z_N \langle A \rangle_N \quad (1.31)$$

Par exemple, la formule pour le nombre moyen de particules dans un cycle de longueur k , équation (1.22),

$$k\langle m_k \rangle_N = s_k \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \quad (1.32)$$

conduit dans l'ensemble grand-canonique à :

$$k\langle m_k \rangle_{GC} = \frac{1}{Z_{GC}} \sum_N z^N Z_N k\langle m_k \rangle_N \quad (1.33)$$

$$= s_k \frac{z^k \sum_N z^{N-k} Z_{N-k}}{Z_{GC}} \quad (1.34)$$

$$= s_k z^k \quad (1.35)$$

De même, les autres formules établies précédemment peuvent se calculer simplement en substituant le rapport Z_{N-k}/Z_N par z^k .

L'équation (1.35) permet de calculer le nombre total de particules dans le système. A la limite thermodynamique on retrouve facilement la formule pour la densité du gaz parfait : équation (1.16). Notons que l'ensemble grand-canonique ne permet pas de décrire le système au-dessus de la densité critique de la transition de Bose-Einstein à la limite thermodynamique. Néanmoins, dans un système fini de N particules, la phase condensée correspond à un potentiel chimique $0 < -\beta\mu \sim N^{-1}$, ceci avant de prendre la limite thermodynamique. Le

bilan du nombre total de particules comprend ensuite deux termes, l'un relatif au nombre de particules condensées et l'autre relatif au nombre de particules dans les états excités :

$$n = \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} + \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \quad (1.36)$$

Pour montrer que cette description du système condensé se distingue qualitativement de la description dans l'ensemble canonique, on peut s'intéresser aux fluctuations du nombre de particules

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = V \left. \frac{\partial n}{\partial(\beta\mu)} \right|_V \quad (1.37)$$

Pour un système de taille finie, les fluctuations dans la phase condensée ($|\beta\mu| \sim N^{-1}$) prennent un caractère poissonien :

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 \simeq (\beta\mu)^{-2} \sim \langle N \rangle^2 \quad (1.38)$$

En conséquence, la description d'un système de la taille finie dans l'ensemble grand-canonique n'est plus équivalente à l'ensemble canonique en dessous de la température critique, $T < T_0$.

Ces fluctuations du nombre des particules reflètent dans une description en termes de cycles le fait que $k\langle m_k \rangle_{GC}$, équation (1.35), reste une fonction convexe, même en dessous de la température critique et que la nombre de particules dans un cycle macroscopique a des fluctuations poissoniennes pour $T < T_0$.

Les différences entre les ensembles statistique pour les bosons libres ont été très étudiées dans une optique de gaz parfait. Dans nos travaux [III,IV,V], elles ont été à la base des calculs portant sur le gaz en interaction.

Notre approche pour relier quantitativement la statistique de cycles à la condensation de Bose, peut également être généralisée au cas d'un gaz piégé par un potentiel extérieur. Dans ce cas, seule l'expression de s_k est modifiée (voir page 75 pour le cas d'un potentiel harmonique). Dans le chapitre 4, j'exposerai le résultat d'un calcul Monte-Carlo quantique pour un gaz en interaction dans un piège harmonique. Je calcule aussi les éléments non-diagonaux de la matrice à un corps pour regarder numériquement les relations entre la statistique de cycles et celle du nombre de particules condensées pour un gaz réel de faible densité (gaz dilué).

Chapitre 2

Gaz en interaction : calculs analytiques

La condensation de Bose-Einstein du gaz parfait est un de ces rares modèles microscopiques possédant une transition de phase, dont la solution est analytiquement connue. La première observation expérimentale de ce phénomène a été la transition superfluide de ^4He à 2.18 K. Même si les interactions dans ce liquide sont loin d'être négligeables, la transition de phase ressemble remarquablement à celle d'un gaz parfait ayant la masse de ^4He , attendue à 3.3 K. L'abaissement de la température critique dans ce système dense a montré que le point de transition du gaz parfait, $n\lambda^3 = \zeta(3/2)$, est en général modifié par l'interaction.

La réalisation expérimentale de la condensation de Bose dans des vapeurs atomiques [14, 15, 16] a déclenché de nouvelles études de la transition de Bose-Einstein dans un gaz dilué, où les interactions entre des atomes sont décrites par un seul paramètre, à savoir la longueur de diffusion a [30].

Dans ce chapitre je présente nos calculs analytiques pour obtenir la modification de la température critique par rapport au résultat du gaz parfait dans un gaz *homogène* et *dilué* ($na^3 \ll 1$) [I,II]. Je montre qu'un développement perturbatif en a conduit à un paramètre de développement de la structure :

$$\frac{a/\lambda}{(\beta\tilde{\mu}_c)^\chi} \quad (2.1)$$

Dans la limite $a \rightarrow 0$, la potentiel chimique (effectif) au point de transition $\tilde{\mu}_c$ s'approche de la valeur du gaz parfait $\tilde{\mu}_c \rightarrow 0$, et le paramètre de développement (2.1) a une valeur finie¹. En conséquence un calcul perturbatif n'est plus possible, c'est-à-dire ne devient plus exact dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$.

Néanmoins, nous avons réussi à montrer dans [II] que la modification de la température critique est linéaire en $an^{1/3}$,

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = \frac{T_c - T_0}{T_0} \propto an^{1/3} \quad (2.2)$$

où T_0 est la température critique du gaz parfait. Dans [I] et [II], nous avons

1. En particulier, dans l'approximation du champ moyen, on trouve $\beta\tilde{\mu}_c = 4a\lambda^2 n$ et $\chi = 1$.

obtenu des estimations explicites pour le préfacteur en utilisant des approximations auto-cohérentes.

Nous avons utilisé deux méthodes conceptuellement différentes pour nos calculs analytiques². L'approche d'Ursell élargit la description en cycles d'échanges (voir chapitre 1) au cas d'un gaz en interaction par un développement en agrégats [31]. L'application de la *théorie des champs quantiques* au problème des bosons en interaction, par contre, est basée sur un développement en puissances du potentiel inter-atomique $v(r)$ [32].

Dans la section 2.3 je calcule explicitement la fonction de partition Z au deuxième ordre en a/λ en utilisant les deux méthodes. En effet, l'expression de $n\lambda^3$ en fonction de μ contient la combinaison $a/(\lambda\beta\mu)$. Même dans la limite $a/\lambda \rightarrow 0$, le développement n'est plus valable pour $\beta\mu \lesssim a/\lambda$ et ne permet pas de s'approcher de la température critique.

Néanmoins, la représentation graphique du développement perturbatif dans l'approche d'Ursell et dans la théorie des champs permet de resommer tous ces termes proportionnels à une puissance du paramètre adimensionnel $a/(\lambda\beta\mu)$. On obtient de nouveau le résultat de l'approximation du champ moyen (section 2.2), qui contient déjà toutes les corrections linéaires en a/λ à μ_c . Notons que l'approximation du champ moyen ne change ni la forme du spectre d'énergie ni la température critique par rapport au cas du gaz parfait. Cependant, ces calculs illustrent l'avantage des méthodes diagrammatiques qui permettent d'étudier facilement la structure des corrections aux ordres élevés, et ils montrent la nécessité de resommer des diagrammes avec le même comportement si $\mu \rightarrow 0$.

Dans l'approche d'Ursell, il est commode de passer d'un calcul perturbatif de $\log Z$ à un calcul de l'opérateur densité à un corps $\rho^{(1)}$. Le développement diagrammatique de $\rho^{(1)}$ permet plus facilement de resommer des diagrammes avec une structure similaire, grâce à des équations non-linéaires (section 2.4). Au-delà de l'approximation du champ moyen, les effets des corrélations donnent en général un changement du spectre de l'énergie et de la température critique. Les détails de ces calculs sont donnés dans l'article [I].

Le passage à l'opérateur densité à un corps dans l'approche d'Ursell est similaire au passage à la fonction de Green (à un corps) dans la théorie des champs. Les développements perturbatifs de ces deux approches se ressemblent³, les contributions dominantes d'un calcul au point critique deviennent identiques dans la limite $a/\lambda \rightarrow 0$. Le formalisme des fréquences de Matsubara dans le calcul de la fonction de Green permet d'étudier la structure générale des corrections au spectre, les énergies propres (section 2.5). Le développement perturbatif pour calculer les corrections par rapport au champ moyen introduit aussi un paramètre de la structure (2.1), soit

$$\frac{a}{\lambda\sqrt{\beta\tilde{\mu}_c}} \quad (2.3)$$

où $\beta\tilde{\mu}_c = 4a\lambda^2n - \beta\mu$ tend vers zero comme a^2/λ^2 . En nous fondant sur ces considérations, nous avons prouvé la linéarité en a/λ de $\Delta T_c/T_c$ dans la limite $a/\lambda \rightarrow 0$ [II].

2. Pour tous nos calculs de T_c , nous avons utilisé la liberté de s'approcher de T_c par une température plus haute, $T \rightarrow T_c + 0$. En conséquence la fraction condensée reste toujours négligeable à la limite thermodynamique, ce qui simplifie les calculs analytiques.

3. Puisque le traitement des interactions est différent dans les deux approches, les approximations pour a fini ne conduisent en général pas à des corrections identiques.

Dans le chapitre suivant, je présente nos résultats d'un calcul de Monte-Carlo quantique de la température critique d'un gaz dilué [III]. Nous donnerons une preuve de la linéarité en a , formule (2.2), complètement indépendante de celle présentée ici. La méthode de Monte-Carlo permet aussi un calcul exact du préfacteur.

2.1 Hamiltonien du modèle

Pour étudier les caractéristiques de la condensation de Bose dans un gaz réel, il est nécessaire de tenir compte des interactions entre atomes. On se restreint au cas le plus simple où l'énergie d'interaction V s'écrit

$$V = \sum_{i < j} v(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$$

En deuxième quantification, l'hamiltonien total est donné par :

$$H' = H'_0 - H_{int} \quad (2.4)$$

$$H'_0 = \int d^3r \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla \Psi^\dagger(r)] [\nabla \Psi(r)] - \mu \Psi^\dagger(r) \Psi(r) \right\} \quad (2.5)$$

$$H_{int} = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \Psi^\dagger(r) \Psi^\dagger(r') v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Psi(r') \Psi(r) \quad (2.6)$$

où $\Psi^\dagger(r)$ ($\Psi(r)$) est l'opérateur champ qui crée (détruit) une particule en r . Pour un système homogène, on peut exprimer l'opérateur $\Psi^\dagger$ sous la forme : $\Psi^\dagger(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}^\dagger$. Cette représentation en impulsion diagonalise la partie sans interactions H'_0 de l'hamiltonien :

$$H'_0 = \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad (2.7)$$

où $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ est l'énergie cinétique d'une particule d'impulsion $\mathbf{k}$. L'opérateur d'interaction conserve l'impulsion totale, d'où :

$$H_{int} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{v}(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \quad (2.8)$$

où $\tilde{v}(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} v(r)$ est la transformée de Fourier du potentiel $v(r)$.

Normalement, le potentiel inter-atomique n'est pas connu avec précision, mais seule la connaissance des propriétés de diffusion binaires est nécessaire pour rendre compte de la physique du gaz dilué. Ces propriétés de diffusion sont caractérisées par les déphasages $\delta_l(k)$ ou de manière équivalente par l'amplitude de diffusion $f(k, k')$. Dans l'approche d'Ursell, la fonction de partition se développe en agrégats ("cluster expansion"), ce qui autorise une description des collisions directement en termes des déphasages [33, 34, 35, 36]. En revanche, dans une approche de type théorie des champs, la fonction de partition est développée en puissances du potentiel, le lien avec les propriétés de diffusion se fait *a posteriori* [32, 37, 5].

Plus précisément, la relation entre le potentiel et l'amplitude de diffusion est donnée par l'équation de Lippman-Schwinger [32, 5] qui est la solution formelle du problème de diffusion de deux particules dans le vide :

$$\frac{4\pi\hbar^2}{m}f(K, K+q) = \tilde{v}(q) + \frac{4\pi\hbar^2}{m} \int \frac{d^3q'}{(2\pi)^3} \frac{\tilde{v}(q-q')f(K, K+q')}{\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{k-q'} - \varepsilon_{p+q'} + i\delta} \quad (2.9)$$

avec $K = (p - k)/2$.

Pour des atomes ultrafroids, la diffusion entre bosons s'effectue dans le régime des ondes s . A une température suffisamment basse, l'amplitude de diffusion est dans la majeure partie des cas indépendante de l'impulsion relative, $f(K, K') \simeq f(0, 0) = a$; les propriétés de diffusion sont alors bien décrites par un seul paramètre microscopique, la longueur de diffusion a .

En général, on ne connaît pas l'expression exacte de v , mais l'amplitude de diffusion f peut faire l'objet de mesures. Il est donc commode de remplacer les dépendances en v par f via l'équation de Lippmann-Schwinger (2.9). A l'ordre le plus bas, $\tilde{v}(q)$ peut être remplacé par la constante de couplage $g = 4\pi\hbar^2 f/m = 4\pi\hbar^2 a/m$. Nous aurons l'occasion de revenir sur ce passage entre v et f lors du développement perturbatif du logarithme de la fonction de partition.

A l'ordre le plus bas, la contribution des interactions dans l'hamiltonien s'écrit :

$$H_{int} = \frac{g}{2V} \sum_{k,p,q} a_k^\dagger a_p^\dagger a_{p+q} a_{k-q} \quad (2.10)$$

Pour $g = 0$ on retrouve le cas du gaz parfait, où la densité moyenne de particules avec impulsion k est donnée par la distribution de Bose-Einstein,

$$f_k = \langle a_k^\dagger a_k \rangle_0 = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1} \quad (2.11)$$

Au point de la transition de Bose-Einstein ($\mu = \varepsilon_0$), la fonction de Bose diverge. En conséquence, la densité critique dépend de façon non-analytique du potentiel chimique. Au voisinage de la transition de phase, la densité dans l'espace de phases est donnée par (voir encadré 1, page 16) :

$$n\lambda^3 = \zeta(3/2) - 2\sqrt{\pi(-\beta\mu)} \quad (2.12)$$

A densité fixée, la température critique du gaz parfait T_0 est donnée par

$$T_0 = \frac{2\pi\hbar}{m} \left(\frac{n}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \quad (2.13)$$

Comment la transition, et en particulier la température critique sera-t-elle affectée par les interactions entre atomes ?

2.2 Approximation du champ moyen

En première approximation, les effets d'interaction peuvent être pris en compte grâce à l'approximation du champ moyen. Cette approche revient à remplacer l'opérateur d'interaction par sa valeur moyenne, et peut se justifier

par une théorie variationnelle (voir encadré 2, page 26). Au-dessus de la transition de phase, l'hamiltonien de champ moyen conserve la forme de celui du gaz parfait, avec une translation du spectre énergétique :

$$H'_{\text{HF}} = \sum_k (\varepsilon_k^{\text{HF}} - \mu) a_k^\dagger a_k \quad (2.14)$$

Les énergies des quasi-particules $\varepsilon_k^{\text{HF}}$ sont déterminées par les équations auto-cohérentes :

$$\varepsilon_k^{\text{HF}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2gn \quad (2.15)$$

$$n = \frac{1}{V} \sum_k \langle a_k^\dagger a_k \rangle = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k^{\text{HF}} - \mu)} - 1} \quad (2.16)$$

Les énergies de tous les états augmentent par la même constante $2gn$ pour un potentiel chimique μ fixé. En conséquence, la valeur critique du potentiel chimique augmente ($\mu_c^{\text{HF}} = \varepsilon_0^{\text{HF}} = 2gn_c$), mais la densité critique *dans l'espace des phases* reste identique à celle du gaz parfait :

$$n\lambda^3 = g_{3/2}(e^{\beta(\mu - 2gn)}) \quad (2.17)$$

$$= \zeta(3/2) - 2\sqrt{\pi\beta(2gn - \mu)} + O(\beta(2gn - \mu)) \quad (2.18)$$

Le résultat du champ moyen (2.17) est le point de départ d'une étude de la température critique dans un gaz dilué. A cause de la dépendance en racine carrée de $\beta(2gn - \mu)$ un développement autour de $g = 0$, conduit à une série en puissances de gn/μ divergente pour $\mu \rightarrow 0$ [I]. Nous verrons que cette série asymptotique se retrouve dans les approches perturbatives qui développent la fonction de partition (ou de la densité) en fonction de a/λ , et un calcul limité à un ordre fini est extrêmement dangereux. Une resommation de tous les graphes avec le même comportement divergeant, une puissance de ($\sim gn/\mu$), est nécessaire pour reconstruire dans ces approches la formule du champ moyen (2.17). Puisque la température critique n'est pas affectuée à cet ordre, nous utiliserons les approches diagrammatiques (Ursell et Green) pour aller au-delà d'une théorie du champ moyen, où nous rencontrerons des structures et difficultés similaires. La compréhension détaillée de cette étude du champ moyen sera fort utile pour la suite de cette thèse.

Il est instructif de développer formellement l'équation (2.17) en puissances de $g \sim a/\lambda$:

$$n\lambda^3 \simeq g_{3/2}(z) - \frac{4a}{\lambda} g_{1/2}(z)g_{3/2}(z) + \frac{8a^2}{\lambda^2} \left\{ 2g_{3/2}(z) [g_{1/2}(z)]^2 + g_{-1/2}(z) [g_{3/2}(z)]^2 \right\} \quad (2.19)$$

avec

$$g_\alpha(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^\alpha} \quad (2.20)$$

Encadré 2 : Approche variationnelle, champ moyen

L'approximation du champ moyen peut se justifier par l'inégalité suivante pour l'énergie libre $F = -k_B T \log Z$:

$$F \leq \frac{1}{\beta} \langle \log \rho_T \rangle_T + \langle H' \rangle_T \quad (\text{B2-1})$$

avec $\langle \cdot \rangle_T \equiv \text{Tr}\{\cdot \rho_T\}$. Cette inégalité est valable pour des opérateurs densité ρ_T arbitraires et peut se démontrer par des principes variationnels [38]. Écrivant $H' = H'_0 + H_1$ et utilisant $\rho_0 = \exp[-\beta H'_0]$ comme opérateur densité d'essai, on peut réécrire l'équation (B2-1) de la manière suivante :

$$F \leq F_0 + \langle H_1 \rangle_0 \quad (\text{B2-2})$$

où F_0 représente l'énergie libre du système d'essai :

$$F_0 = \langle H'_0 \rangle_0 - T S_0 = \langle H'_0 \rangle_0 + k_B T \text{Tr}\{\rho_0 \log \rho_0\} \quad (\text{B2-3})$$

Au-dessus de la transition de Bose-Einstein on choisit l'hamiltonien d'essai suivant

$$H'_0 = \sum_k \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \xi - \mu \right) a_k^\dagger a_k \quad (\text{B2-4})$$

ou ξ est un paramètre variationnel pour minimiser la partie à droite de l'équation (B2-2). Pour une interaction (2.10) on obtient

$$\langle H_1 \rangle_0 = \frac{g}{V} \sum_k \langle a_k^\dagger a_k \rangle_0 \sum_p \langle a_p^\dagger a_p \rangle_0 - \xi \sum_k \langle a_k^\dagger a_k \rangle_0 \quad (\text{B2-5})$$

Avec la densité $n(\xi)$

$$n(\xi) = \frac{1}{V} \sum_k \langle a_k^\dagger a_k \rangle_0 = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial \xi} F_0(\xi) \quad (\text{B2-6})$$

le minimum de la partie droite de l'équation (B2-2) est obtenu pour $\xi = 2gn(\xi)$. En champ moyen, l'énergie des quasi-particules est modifiée de manière auto-cohérente

$$n_{\text{HF}} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k^{\text{HF}} - \mu)} - 1} \quad (\text{B2-7})$$

$$\varepsilon_k^{\text{HF}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2gn_{\text{HF}} \quad (\text{B2-8})$$

Les interactions d'une particule avec les autres se décrivent par un potentiel effectif proportionnel à la densité moyenne n_{HF} . Le facteur 2 provient du fait que dans un modèle avec une constante de couplage g indépendante du transfert d'impulsion, le terme direct (dit de "Hartree") et le terme d'échange (terme de Fock) contribuent de la même façon.

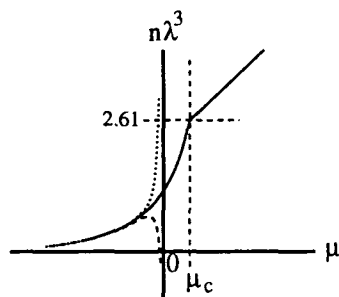


FIG. 2.1 – La théorie du champ moyen (trait plein) prédit la transition de Bose-Einstein pour un potentiel chimique $\mu_c > 0$. La valeur du paramètre de dégénérescence $n\lambda^3$ au point critique reste identique à celui du gaz parfait, $n_c\lambda^3 = 2.61\dots$. La ligne en traits tiretés représente le résultat du développement de (2.17) limité au premier ordre en a/λ , la ligne pointillée comporte en plus la correction au deuxième ordre. On voit directement que le rayon de convergence du développement (2.17) tend vers zéro pour $\mu \rightarrow 0$.

Sur la figure 2.1 j'ai tracé la solution (auto-cohérente) du calcul de champ moyen : ni la densité critique dans l'espace des phases ni la température critique ne sont affectées par l'interaction. En revanche, la valeur critique du potentiel chimique augmente. Notons que le développement au premier ordre (traits tiretés) en a/λ de cette théorie de champ moyen conduit à un maximum de la densité dans l'espace des phases au voisinage de $\mu = 0$. Si on prend en compte le deuxième ordre (traits pointillés) du développement, ce maximum disparaît. Néanmoins, aucun ordre fini de ce développement en a/λ ne permet d'atteindre une valeur positive du potentiel chimique, en effet le résultat du champ moyen est clairement non-perturbatif.

2.3 Développement perturbatif de la fonction de partition

Une méthode naturelle consiste à effectuer le développement perturbatif de la fonction de partition grand-canonique Z afin d'extraire systématiquement les corrections au gaz parfait. Cette méthode que nous exposons ci-après est conceptuellement différente de l'approche variationnelle exposée précédemment.

L'interaction modifie la pression P du gaz par rapport à celle du gaz parfait $P_0(T, V, \mu) = k_B T \lambda^{-3} g_{5/2}(z)$. La pression s'exprime comme

$$\beta P(T, V, \mu) = \beta P_0(T, V, \mu) + \frac{1}{V} \log \left(\frac{Z}{Z_0} \right) \quad (2.21)$$

où Z_0 est la fonction de partition du gaz parfait. A température et volume fixés, la densité est modifiée par l'interaction

$$n = z \frac{\partial}{\partial z} (\beta P) \quad (2.22)$$



FIG. 2.2 - Diagrammes au premier ordre en U_2 . Le diagramme (a) vaut $z^{n(a)} f_{(a)} \Gamma_{(a)} = \frac{1}{2} z^2 \text{Tr}_{1,2} \{U_2(1,2)[1+f(1)][1+f(2)]\}$, le diagramme d'échange (b) vaut $z^{n(b)} f_{(b)} \Gamma_{(b)} = \frac{1}{2} z^2 \text{Tr}_{1,2} \{U_2(1,2)P_{12}[1+f(1)][1+f(2)]\}$. Grâce à la notation $U_2^S = \frac{1}{2} U_2(1+P_{12})$, ces deux diagrammes peuvent également être mis sous la forme : $z^2 \text{Tr}_{1,2} \{U_2^S(1,2)[1+f(1)][1+f(2)]\}$.

Les deux équations (2.21) et (2.22) constituent une représentation paramétrique de l'équation d'état. L'élimination de la fugacité $z = e^{\beta\mu}$ conduit au développement du viriel.

Dans [39] l'équation d'état était obtenue par un calcul perturbatif mené jusqu'au deuxième ordre en a/λ :

$$\lambda^3 \beta(P - P_0) = -\frac{2a}{\lambda} [g_{3/2}(z)]^2 + \frac{8a^2}{\lambda^2} \left\{ g_{1/2}(z) [g_{3/2}(z)]^2 + h(z) \right\} + O\left(\frac{a^3}{\lambda^3}\right) \quad (2.23)$$

avec

$$h(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{l+m+n}}{\sqrt{l m n} (l+m)(l+n)} \quad (2.24)$$

La densité du gaz dilué est alors donnée par :

$$\begin{aligned} n\lambda^3 &= g_{3/2}(z) - \frac{4a}{\lambda} g_{1/2}(z) g_{3/2}(z) \\ &+ \frac{8a^2}{\lambda^2} \left\{ 2g_{3/2}(z) [g_{1/2}(z)]^2 + g_{-1/2}(z) [g_{3/2}(z)]^2 + z \frac{\partial h(z)}{\partial z} \right\} + O\left(\frac{a^3}{\lambda^3}\right) \end{aligned} \quad (2.25)$$

L'équation (2.25) ressemble à celle obtenue précédemment dans l'approche de champ moyen, avec néanmoins un terme supplémentaire au deuxième ordre, $8 \frac{a^2}{\lambda^2} z \frac{\partial h(z)}{\partial z}$. De même que pour la théorie du champ moyen, le rayon de convergence de l'équation (2.25) est limité à $(-\beta\mu) \gg a/\lambda$. Elle n'est donc pas appropriée pour calculer les corrections à la température critique dues aux interactions.

Les méthodes graphiques s'avèrent beaucoup plus efficaces pour effectuer plus systématiquement ces développements perturbatifs. Nous les exploiterons explicitement dans la suite pour retrouver (2.23), et les corrections aux ordres supérieurs. Il sera alors possible de faire le lien avec l'approche du champ moyen.

2.3.1 Calcul de la fonction de partition au deuxième ordre en a/λ

Pour donner des exemples de calculs de $\log Z$ dans l'approche d'Ursell (voir encadré 3, page 29) et de la théorie des champs (voir encadré 4, page 35), je calcule dans ce paragraphe la pression au deuxième ordre en a/λ , équation (2.23), suivant ces deux approches.

Encadré 3 : Développement en opérateurs d'Ursell

La fonction de partition Z d'un système bosonique est donnée en premier quantification par :

$$Z = \sum_N \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(H_N - \mu N)} S_N \right\} \quad (\text{B3-1})$$

avec le symétriseur S_N et l'hamiltonien H_N pour N particules interagissantes :

$$H_N(1, 2, \dots, N) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i < j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (\text{B3-2})$$

Au lieu de développer l'hamiltonien en puissances du potentiel V , on définit une hiérarchie d'opérateur d'Ursell U_q [34], dont les premiers sont :

$$U_1(i) = e^{-\beta H_1(i)} \quad (\text{B3-3})$$

$$U_2(i, j) = e^{-\beta H_2(i, j)} - U_1(i)U_1(j) \quad (\text{B3-4})$$

$$U_3(i, j, k) = e^{-\beta H_3(i, j, k)} - U_2(i, j)U_1(k) - U_2(i, k)U_1(j) - U_2(j, k)U_1(i) - U_1(i)U_1(j)U_1(k) \quad (\text{B3-5})$$

En représentation positions, les éléments de matrice de U_q s'annulent à grande distance entre les particules. Cette propriété permettra des approximations dans un gaz dilué. Maintenant on exprime l'opérateur $e^{-\beta H_N}$ en termes des U_q , et de façon analogue le symétriseur en cycles d'échanges. Dans la trace de la fonction de partition, les contributions qui ne sont ni liées avec des opérateurs U_q pour $q \geq 2$, ni connectées par un cycle d'échange plus long qu'un, se factorisent. Il est commode de représenter ces contributions graphiquement à l'aide de diagrammes dont les éléments sont montrés dans la figure 2.3. Le passage à $\log Z$ ne fait intervenir que des diagrammes connectés [34]

$$\log Z = \log Z_0 + \sum_i z^{n_i} f_i \Gamma_{con}^i \quad (\text{B3-6})$$

avec la fonction de partition Z_0 du gaz parfait. La sommation s'étend sur tous les diagrammes connectés Γ_{con}^i topologiquement différents, qui contiennent n_i particules et au moins un U_q avec $q \geq 2$. Le facteur de symétrie f_i pour éviter le double comptage dépend de la définition choisie pour désigner les diagrammes. Il est facile de resommer des diagrammes qui ne se distinguent que par la longueur des cycles d'échanges (correspondant au nombre des U_1 connecté par un opérateur de permutation) et Γ_{con}^i ne dépend que de U_1 de façon implicite sur

$$1 + f = \sum_{k=0}^{\infty} z^k U_1^k = \frac{1}{1 - zU_1} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(H_1 - \mu)}} \quad (\text{B3-7})$$

Avec la sommation (B3-7) partout dans le développement de $\log(Z/Z_0)$, n_i dans l'équation (B3-6) se réduit au nombre total des particules dans le U_q avec $q \geq 2$ dans le diagramme Γ_{con}^i .

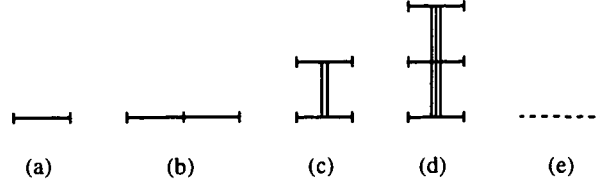


FIG. 2.3 – Les diagrammes de base du développement en opérateurs d’Ursell : (a) représente l’opérateur U_1 , (b) deux opérateurs U_1 , connectés par un cycle d’échange qui donnent $\text{Tr}_{ij}\{U_1(i)P_{ij}U_1(j)\} = \text{Tr}_i\{U_1(i)^2\}$. Les opérateurs U_q ($q \geq 2$) introduisent des traces indépendantes sur de nouvelles particules : par exemple (c) représente l’opérateur U_2 et (d) U_3 . Le diagramme (e) représente une somme sur toutes les longueurs des cycles d’échange connectant des U_1 : il vaut $1 + f = \sum_k z^k U_1^k$. Tous les diagrammes connectés qui peuvent être dessinés avec ces diagrammes de base contribuent à $\log Z$.

Approche de l’opérateur d’Ursell

Pour un développement au deuxième ordre en a/λ , on s’intéresse aux opérateurs U_n , où l’interaction inter-atomique entre à partir de $n \geq 2$. Dans l’annexe 2.6 je montre un calcul perturbatif de U_2 et U_3 dans la représentation d’impulsion, qui montre que U_2 inclut toutes les propriétés au premier ordre en a/λ . U_3 , par contre, est au moins d’ordre a^2/λ^2 . Les U_n avec $n \geq 3$ sont négligeables pour un calcul au deuxième ordre.

Dans [34, 31], les corrections à $\log Z$ étaient obtenues au deuxième ordre en U_2 et au premier ordre en U_3 (voir figures 2.2, 2.4 et 2.5) :

$$\frac{1}{V} \log \left(\frac{Z}{Z_0} \right) = \tilde{\Xi}_{(1 \times U_2)} + \tilde{\Xi}_{(2 \times U_2)} + \tilde{\Xi}_{(1 \times U_3)} \quad (2.26)$$

avec

$$\tilde{\Xi}_{(1 \times U_2)} = \frac{z^2}{V} \text{Tr}_{1,2} \{ U_2^S(1,2)[1+f(1)][1+f(2)] \} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\Xi}_{(2 \times U_2)} = & 2 \frac{z^4}{V} \text{Tr}_{1,2,3} \{ U_2^S(1,2)[1+f(1)][1+f(2)]U_2(1,3)[1+f(1)][1+f(3)] \} \\ & + \frac{z^4}{2V} \text{Tr}_{1,2} \left\{ (U_2^S(1,2)[1+f(1)][1+f(2)])^2 \right\} \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\tilde{\Xi}_{(1 \times U_3)} = \frac{z^3}{V} \text{Tr}_{1,2,3} \{ U_3^S(1,2,3)[1+f(1)][1+f(2)][1+f(3)] \} \quad (2.29)$$

Le développement perturbatif de U_2 et U_3 (voir Annexe 2.6) permet de calculer leurs contributions au deuxième ordre en $a/\lambda \rightarrow 0$.

$$\begin{aligned} \lambda^3 \tilde{\Xi}_{(1 \times U_2)} &= -\frac{2a}{\lambda} [g_{3/2}(z)]^2 + \frac{2a^2}{\lambda^2} R_1 \\ \lambda^3 \tilde{\Xi}_{(2 \times U_2)} &= \frac{8a^2}{\lambda^2} [g_{3/2}(z)]^2 \{g_{1/2}(z) - g_{3/2}(z)\} + \frac{2a^2}{\lambda^2} R_2 \end{aligned}$$

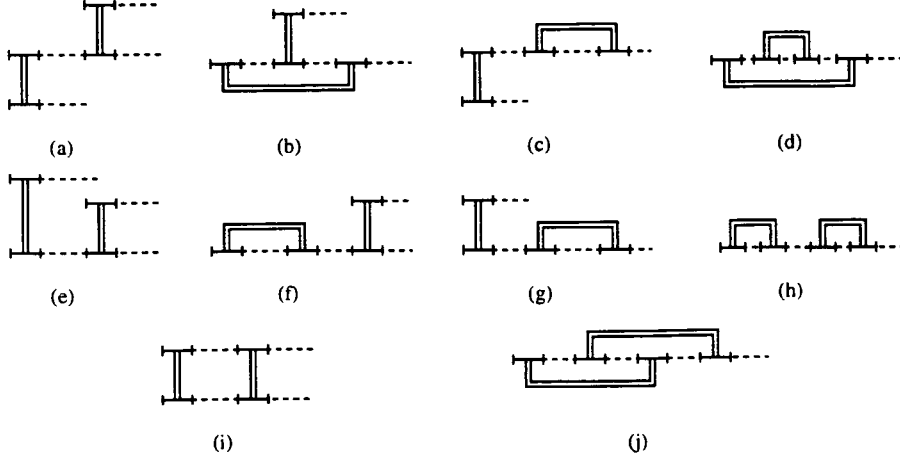


FIG. 2.4 - Diagrammes au deuxième ordre en U_2 . Le facteur combinatoire est $f = 1/4$, en raison des deux choix possibles pour chaque U_2 et un facteur $1/2$ pour le choix de la première particule dans U_2 . (a) vaut $z^{n(a)} f_{(a)} \Gamma_{(a)} = \frac{1}{4} z^4 \text{Tr}_{1,2,3} \{U_2(1,2)[1+f(1)][1+f(2)]U_2(2,3)[1+f(2)][1+f(3)]\}$, (b)-(d) représentent les diagrammes d'échanges possibles. Le diagramme (e) a une contribution identique au (a): $\Gamma_{(e)} = \text{Tr}_{1,2,3} \{U_2(1,2)[1+f(1)][1+f(2)]U_2(1,3)[1+f(1)][1+f(3)]\} = \Gamma_{(a)}$; seul (i) et le diagramme d'échange associé (j) donnent une nouvelle contribution: $\Gamma_{(i)} = \text{Tr}_{1,2} \{U_2(1,2)[1+f(1)][1+f(2)]U_2(1,2)[1+f(1)][1+f(2)]\}$.

$$\lambda^3 \tilde{\Xi}_{(1 \times U_3)} = \frac{8a^2}{\lambda^2} \left\{ [g_{3/2}(z)]^3 + \frac{\lambda^9}{V^3} \sum_{k,p,q} \frac{f_k f_p f_{p+q}}{\beta(\varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q} - \varepsilon_p - \varepsilon_k)} \right\} + \frac{2a^2}{\lambda^2} R_3$$

avec

$$\begin{aligned} R_1 &= 2 \frac{\lambda^9}{V^3} \sum_{k,p,q} f_p f_k \frac{e^{\beta(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})} - 1}{\beta^2(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})^2} \\ R_2 &= \frac{\lambda^9}{V^3} \sum_{k,p,q} f_p f_k f_{p+q} f_{k-q} \frac{(e^{\beta(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})/2} - e^{-\beta(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})/2})^2}{\beta^2(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})^2} \\ R_3 &= 4 \frac{\lambda^9}{V^3} \sum_{k,p,q} f_p f_k f_{p+q} \frac{e^{\beta(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})} - 1}{\beta^2(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})^2} \end{aligned}$$

On peut regrouper $R_1 + R_3$ sous la forme

$$\begin{aligned} R_1 + R_3 &= 2 \frac{\lambda^9}{V^3} \sum_{k,p,q} f_k f_p f_{p+q} f_{k-q} \frac{e^{\beta(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})} - 1}{\beta^2(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})^2} \\ &\quad \times \left[e^{\beta(\varepsilon_{k-q} - \mu)} - e^{\beta(\varepsilon_{p+q} - \mu)} + e^{\beta(\varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q} - 2\mu)} - 1 \right] \\ &= -2 \frac{\lambda^9}{V^3} \sum_{k,p,q} f_k f_p f_{p+q} f_{k-q} \frac{e^{\beta(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})} - 1}{\beta^2(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})^2} \end{aligned}$$

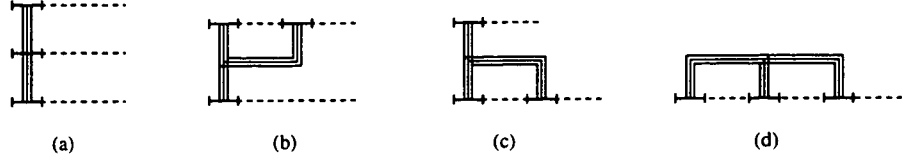


FIG. 2.5 – Diagrammes avec un seul U_3 : dans (a) et (b), il y a trois possibilités pour fixer la première particule et deux pour la seconde, le facteur combinatoire est $f_{(a)} = f_{(b)} = 1/3!$. En revanche, dans (c) et (d), le cycle d'échange fixe la deuxième particule, et le facteur combinatoire est $f_{(c)} = f_{(d)} = 1/3$. Ces poids différents permettent de regrouper les trois contributions dans une seule grâce au symétriseur à trois particules S_3 .

où j'ai exploité les symétries en effectuant des changements de variables du type $k - q \leftrightarrow p + q$ et $k - q, p + q \leftrightarrow k, p$. On obtient finalement :

$$\begin{aligned}
 R_1 + R_2 + R_3 &= \frac{\lambda^9}{V^3} \sum_{k,p,q} \frac{f_k f_p f_{p+q} f_{k-q}}{\beta^2 (\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})^2} \\
 &\quad \times \left[e^{\beta(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})} - e^{-\beta(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})} \right] \\
 &\equiv 0
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

On en déduit l'expression des corrections à la pression par rapport à celle du gaz parfait sous l'effet des interactions :

$$\lambda^3 \beta (P - P_0) = -\frac{2a}{\lambda} [g_{3/2}(z)]^2 + 8 \frac{a^2}{\lambda^2} \left\{ g_{1/2}(z) [g_{3/2}(z)]^2 + h(z) \right\} \tag{2.31}$$

avec

$$h(z) = \frac{\lambda^9}{V^3} \sum_{k,p,q} \frac{f_k f_p f_{p+q}}{\beta (\varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q} - \varepsilon_p - \varepsilon_k)}$$

À la limite thermodynamique, $h(z)$ peut être mis sous la forme de l'équation (2.24) [39].

L'approche d'Ursell permet une interprétation directe en cycles d'échanges (voir chapitre 1). Les fonctions f ,

$$f = \sum_{k=1}^{\infty} U_1^k = \sum_{k=1}^{\infty} e^{-k\beta H_1} \tag{2.32}$$

où $H_1 = p^2/2m$ est l'hamiltonien à une particule, viennent d'une resommation sur toutes les longueurs k d'un cycle (à comparer avec l'équation (1.10), page 14), possible dans l'ensemble grand-canonique. Sur la figure 2.6 j'ai dessiné quelques contributions dans l'image des cycles qui sont incluses dans l'approximation avec un seul U_2 . La partie (a) montre une configuration avec deux cycles sans interaction. Sur la partie (b), deux particules sur un cycle interagissent. Une telle configuration est considérée avec le graphe figure 2.2 (b) dans Ursell. La partie (c) et (d) sur la figure 2.6 montrent encore deux configurations avec une interaction directe en U_2 , à comparer avec la figure 2.2 (a). La difficulté du développement perturbatif vient du fait que la longueur k du cycle devient macroscopique au point de la transition.

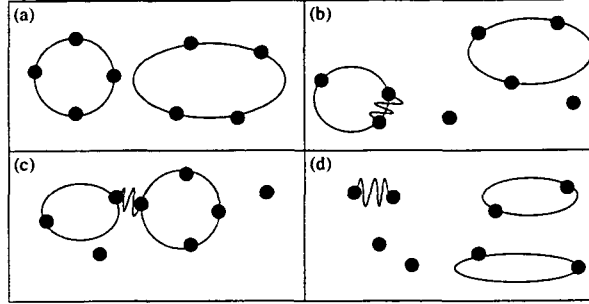


FIG. 2.6 – Diagrammes avec $N = 8$ particules jusqu'au premier ordre en U_2 dans une image de cycles. La partie (a) contient deux cycles d'échange de longueur 4. A droite, la partie (b), contient une interaction entre deux particules sur un cycle de longueur 3. (c) et (d) correspondent à des configurations qui sont incluses dans le graphe d'Ursell sur la figure 2.2 (a).

Formalisme en théorie quantique des champs

La théorie des champs propose un développement de $V^{-1} \log Z$ en puissances du potentiel d'interaction $\tilde{v}(q)$. Pour faciliter les notations, j'utilise l'équation de Lippmann-Schwinger (2.9) afin d'éliminer les dépendances en $\tilde{v}(q)$ au profit de la longueur de diffusion a . L'équation (2.9) peut être considérée comme une équation non-linéaire en $\tilde{v}(q)$, si $f \simeq a$ est connue⁴. On peut donc déduire l'expression de $\tilde{v}(q)$ au deuxième ordre en f , en remplaçant dans le deuxième terme de (2.9) $\tilde{v}(q)$ par son expression au premier ordre en f :

$$\tilde{v}(q) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} f(K, K+q) - \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \int \frac{d^3q'}{(2\pi)^3} \frac{f(K, K+q-q')f(K, K+q')}{\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q'} - \varepsilon_{k-q'} + i\delta} \quad (2.33)$$

avec $K = (p - k)/2$.

Dans la suite, on identifie f à la longueur de diffusion⁵ a , d'où l'expression de v au deuxième ordre en $g = 4\pi\hbar^2 a/m$:

$$\tilde{v}(q) = g - g^2 \int \frac{d^3q'}{(2\pi)^3} \frac{1}{\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q'} - \varepsilon_{k-q'} + i\delta} \quad (2.34)$$

Ensuite, on calcule l'expression du grand potentiel au deuxième ordre en g . Les diagrammes de Hartree et Fock au premier ordre en $\tilde{v}(q)$ contribuent au premier ordre en g (voir figure 2.7(a)) :

$$\Xi_{HF} = -gT \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_n \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \sum_{n'} \frac{1}{i\omega_{n'} - \varepsilon_p + \mu} \quad (2.35)$$

Ces sommes sur les fréquences de Matsubara $\omega_n = 2n\pi T$, ($n = 0, \pm 1, \dots$) se font par prolongement analytique des fonctions correspondantes dans le plan

4. Plus généralement la substitution de $v(q)$ par f peut se faire avec le formalisme de la matrice T [32, 37].

5. Notons que l'expression (2.34) comporte une divergence ultraviolette artificiellement introduite par l'identification entre f et a .

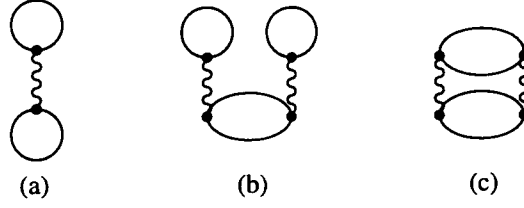


FIG. 2.7 – Diagrammes pour les corrections à $\log Z$ dans le formalisme de la théorie des champs. Le diagramme au premier ordre (a) correspond à celui de la figure 2.2(a), les diagrammes au deuxième ordre (b) et (c) sont équivalents aux diagrammes de l’approche d’Ursell sur la figure 2.4(e) et 2.4(i). Les diagrammes d’échanges ne sont pas montrés.

complexe :

$$T \sum_n h(i\omega_n) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \tilde{f}(z) h(z) \quad (2.36)$$

où le contour C est pris autour des pôles de la fonction $h(z)$, dans le sens positif et $\tilde{f}(z) = (e^{\beta z} - 1)^{-1}$. Dans l’équation (2.35), $h(z) = (z - \varepsilon_k + \mu)^{-1}$, et l’intégrale autour du pôle $z = \varepsilon_k - \mu$ peut être évaluée en utilisant le théorème des résidus :

$$\Xi_{HF} = -g\beta \left[\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} f_k \right]^2 \quad (2.37)$$

$$= -\frac{2a}{\lambda} \lambda^{-3} [g_{3/2}(z)]^2 \quad (2.38)$$

De même, la contribution au deuxième ordre en g , résultant du “contre-term” (deuxième terme de l’équation (2.34)) introduit par la substitution de $\tilde{v}(q)$ par g , est :

$$\Xi_{HF}^c = g^2 \beta \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{f_k f_p}{\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q} + i\delta} \quad (2.39)$$

Dans les diagrammes au deuxième ordre en v on distingue deux contributions différentes. La première est montrée sur la figure 2.7(b), elle s’écrit :

$$\begin{aligned} \Xi_{2,1} &= \frac{1}{2} 4g^2 T^2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \sum_n \frac{1}{(i\omega_n - \varepsilon_k + \mu)^2} \left[\int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \sum_{n'} \frac{1}{i\omega_{n'} - \varepsilon_p + \mu} \right]^2 \\ &= -2g^2 \beta [\lambda^{-3} g_{3/2}(z)]^2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\partial \tilde{f}(z)}{\partial z} \Big|_{z=\varepsilon_k - \mu} \\ &= \frac{8a^2}{\lambda^2} \lambda^{-3} g_{1/2}(z) [g_{3/2}(z)]^2 \end{aligned} \quad (2.40)$$

La deuxième correspond à la figure 2.7(c), elle est donnée par

$$\begin{aligned} \Xi_{2,2} &= \frac{1}{2} g^2 T^2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{1}{i\omega_{n_1} - \varepsilon_k + \mu} \\ &\quad \times \frac{1}{i(\omega_{n_1} - \omega_{n_3}) - \varepsilon_{k-q} + \mu} \frac{1}{i\omega_{n_2} - \varepsilon_p + \mu} \frac{1}{i(\omega_{n_2} + \omega_{n_3}) - \varepsilon_{p+q} + \mu} \end{aligned} \quad (2.41)$$

Encadré 4 : Méthode de la théorie des champs

L'approche de la théorie des champs quantiques est basée sur une solution formelle d'un système de bosons interagissant en utilisant le formalisme de la deuxième quantification [32] :

$$Z = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right\} = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} T_\tau \exp \left\{ - \int_0^\beta \hat{H}_{int}(\tau) d\tau \right\} \right\} \quad (\text{B4-1})$$

où $\hat{H}_{int}(\tau)$ évolue en "temps imaginaire" de manière similaire qu'en représentation d'interaction :

$$\hat{H}_{int}(\tau) = e^{(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})\tau} \hat{H}_{int} e^{-(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})\tau} \quad (\text{B4-2})$$

Dans l'équation (B4-1), T_τ dénote l'ordre chronologique en τ des opérateurs. Pour le logarithme de la fonction de partition, les corrections pour la forme du gaz parfait $\log Z_0$ se simplifient à $V^{-1} \log(Z/Z_0) = \sum_m \Xi_m$, où

$$\Xi_m = \frac{(-1)^m}{m!V} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_m \left\langle T_\tau \left(\hat{H}_{int}(\tau_1) \cdots \hat{H}_{int}(\tau_m) \right) \right\rangle_{con} \quad (\text{B4-3})$$

est la sommation sur tous les diagrammes connectés de l'ordre m , évalués dans le système sans interaction. Ces diagrammes ont la forme de boucles fermées et consistent en $2m$ lignes solides, m lignes courbées et $2m$ vertex, qui sont les points où deux lignes solides et une ligne courbée se touchent. Si on ne regarde que les diagrammes topologiquement différents, il faut ajouter un facteur $1/m$ pour les expressions associées avec les règles de Feynman pour ce diagramme [32].

Règles de Feynman dans l'espace de Fourier

Il est commode de formuler les règles de Feynman dans l'espace des impulsions $\mathbf{k}$ et des fréquences de Matsubara $\omega_n = 2n\pi T$ ($n = 0, \pm 1, \dots$).

1.) Avec chaque ligne on associe des impulsions $\mathbf{p}$ et des fréquences de Matsubara ω_n telles que la somme sur toutes les impulsions (fréquences) entrant dans un vertex est égale à la somme sur toutes les impulsions (fréquences) qui en sortent (voir figure 2.8).

2.) Chaque ligne solide (d'une impulsion $\mathbf{p}$ et d'une fréquence de Matsubara ω_n) correspond à une quantité

$$[i\omega_n - \epsilon_p^0 + \mu]^{-1} \quad (\text{B4-4})$$

et une ligne courbée (d'impulsion $\mathbf{q}$ et de fréquence ω_n) à une quantité indépendante de la fréquence :

$$(-T)\tilde{v}(q) \quad (\text{B4-5})$$

3.) On intègre (avec un facteur $(2\pi)^{-3}$) sur toutes les impulsions indépendantes et somme sur toutes les fréquences de Matsubara indépendantes.

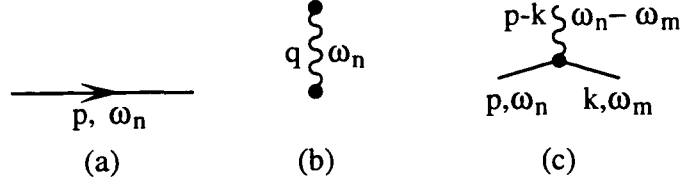


FIG. 2.8 – Les diagrammes de Feynman sont construits avec des lignes solides (a), des lignes courbes pour désigner l'interaction (b), avec deux vertex (c) à chaque bout d'une interaction.

Après les sommations sur les fréquences de Matsubara, on obtient :

$$\Xi_{2,2} = -g^2 \beta \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{(f_k + 1)(f_p + 1)f_{k-q}f_{p+q}}{\varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q} - \varepsilon_p - \varepsilon_k} \quad (2.42)$$

La contribution comportant $f_k f_p f_{k-q} f_{p+q}$ va disparaître à cause de la symétrie de l'intégrand par rapport au changement de variables $p, k \leftrightarrow p + q, k - q$, soit finalement :

$$\begin{aligned} \Xi_{2,2} = & 2g^2 \beta \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{f_p f_k f_{p+q}}{\varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q} - \varepsilon_p - \varepsilon_k} \\ & - g^2 \beta \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{f_p f_k}{\varepsilon_p + \varepsilon_k - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q}} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Le terme divergent est exactement compensé par la contribution (2.39) qui vient de l'équation Lippman-Schwinger

$$\Xi_{2,2} + \Xi_{HF}^c = \frac{8a^2}{\lambda^2} \lambda^{-6} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{f_p f_k f_{p+q}}{\beta(\varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q} - \varepsilon_p - \varepsilon_k)} \quad (2.44)$$

On déduit alors l'expression de la pression P du système

$$\beta P = \frac{1}{V} \log Z = \beta P_0 + \Xi_{HF} + \Xi_{2,1} + \Xi_{2,2} + \Xi_{HF}^c + \mathcal{O}\left(\frac{a^3}{\lambda^3}\right) \quad (2.45)$$

soit le même résultat que dans la section précédente, équation (2.23).

2.3.2 Au-delà du deuxième ordre en a/λ

Les méthodes graphiques permettent aussi de prendre en compte des contributions à des ordres plus élevés. Considérons un diagramme type au n -ième ordre en U_2 , représenté sur la figure 2.9. La contribution de ce diagramme à $V^{-1} \log Z$ est notée $\tilde{\Xi}_n$, soit explicitement

$$\tilde{\Xi}_n = \frac{1}{2nV} z^{2n} \sum_k \left[\sum_{k'} \langle k, k' | U_2 | k', k \rangle [1 + f_{k'}] [1 + f_k] \right]^n \quad (2.46)$$

Les éléments diagonaux de l'opérateur U_2 (voir Annexe 2.6) prennent la forme :

$$\langle k, k' | U_2 | k', k \rangle = -\frac{2a}{\lambda} \frac{\lambda^3}{V} e^{-\beta(\varepsilon_k + \varepsilon_{k'})} \quad (2.47)$$

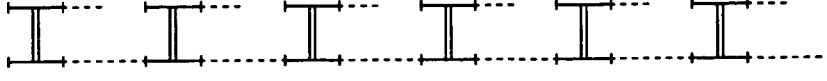


FIG. 2.9 – Diagramme type contribuant au calcul de $\log Z$ dans l'approche d'Ursell. Ce diagramme, qui contient 6 opérateurs U_2 , est déjà inclus dans l'approximation de champ moyen.

D'où l'expression

$$\lambda^3 \Xi_n = \frac{(-2)^n a^n}{2n\lambda^n} \left[\lambda^3 \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} f'_k \right]^n \lambda^3 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} f_k^n \quad (2.48)$$

Pour déterminer le comportement pour $\mu \rightarrow 0$, on prend $f_k^n \simeq \beta^{-n} (\epsilon_k - \mu)^{-n}$ et on déduit pour $n \geq 2$:

$$\lambda^3 \Xi_n \simeq \frac{[-2ag_{3/2}(z)]^n}{2n\lambda^n} \lambda^3 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{\beta(\epsilon_k - \mu)} \right)^n \quad (2.49)$$

En écrivant l'intégrale sous forme adimensionnée, on obtient :

$$\lambda^3 \Xi_n \sim -\frac{\sqrt{-\beta\mu}a}{\lambda} \left(\frac{a}{\lambda\beta\mu} \right)^{n-1} [g_{3/2}(z)]^n \quad (2.50)$$

Dans la limite $\mu \rightarrow 0$, tous les diagrammes contribuent au même ordre.

Pour s'assurer de la validité de la resommation de $n = 1$ à $n = \infty$, il est plus commode de regarder les diagrammes équivalents dans l'approche de théorie des champs, figure 2.10. Dans cette dernière approche, de tels diagrammes à l'ordre n contribuent à la valeur de $V^{-1} \log Z$ avec un poids Ξ_n dont l'expression est explicitée ci-dessous :

$$\Xi_n = \frac{1}{n} \left(-gT \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \sum_{n'} \frac{1}{i\omega_{n'} - k'^2/2m + \mu} \right)^n \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \sum_l \left(\frac{1}{i\omega_l - k^2/2m + \mu} \right)^n \quad (2.51)$$

Les sommations portent également sur toutes les fréquences de Matsubara $\omega_{n'} = 2\pi n'/\beta$ ($n' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), et peuvent être de même évaluées par prolongement analytique dans le plan complexe. Le théorème des résidus donne finalement :

$$\Xi_n = -\frac{1}{n!} \beta \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\partial^{n-1}}{\partial \omega^{n-1}} \tilde{f}(\omega) \Big|_{\omega=k^2/2m-\mu} (g\lambda^{-3} g_{3/2}(z))^n \quad (2.52)$$

$$= \frac{1}{n!} \beta \left[\frac{\partial^{n-1}}{\partial \mu^{n-1}} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} f_k \right] (-g\lambda^{-3} g_{3/2}(z))^n \quad (2.53)$$

$$= \lambda^{-3} \frac{1}{n!} \left[\frac{\partial^n}{\partial \mu^n} g_{5/2}(e^{\beta\mu}) \right] (-g\lambda^{-3} g_{3/2}(z))^n \quad (2.54)$$

On voit que Ξ_n représente le n -ième terme du développement de Taylor de la fonction

$$\lambda^{-3} g_{5/2}(\exp[\beta(\mu - g\lambda^{-3} g_{3/2}(z))])$$

au voisinage de $g = 0$. La resommation sur tous les ordres en n donne une fonction non-analytique en g , qui converge même dans la limite $\mu \rightarrow 0$. Pour

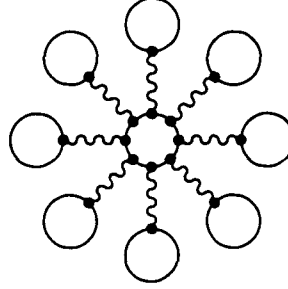


FIG. 2.10 – Diagramme type pour $\log Z$ dans l'approche de la théorie du champs avec $n = 8$, qui est par ailleurs implicitement inclus dans la théorie de champ moyen.

retrouver le résultat du champ moyen, il faudrait aussi prendre en compte les diagrammes d'échanges et les autres diagrammes avec le même comportement divergent pour $\mu \rightarrow 0$. Néanmoins, le préfacteur $1/n$, qui dépend explicitement de l'ordre en g , rend le calcul de $V^{-1} \log Z$ techniquement difficile à mener.

Jusqu'ici j'ai montré que même si on étudie la limite du gaz très dilué, $a/\lambda \rightarrow 0$, au voisinage de la transition de Bose-Einstein $\mu \rightarrow 0$, le rayon de convergence du développement perturbatif tend vers zéro. Nous avons vu après que la resommation d'une série de diagrammes élimine la singularité à $\mu = 0$. Tout calcul de la température critique du gaz en interaction, qui est mené à un ordre fini du développement perturbatif de $\log Z$, comme par exemple dans [11], conduit donc à des prédictions fausses tant sur le plan quantitatif que qualitatif.

Le développement perturbatif est en fait plus pertinent s'il est effectué sur l'opérateur densité ou sur les fonctions de Green.

2.4 Développement de l'opérateur densité à un corps

Dans le formalisme des opérateurs d'Ursell, l'opérateur densité à une particule $\rho^{(1)}$ peut être obtenu par variation fonctionnelle par rapport aux U_q . On introduit les opérateurs d'Ursell réduits $\tilde{U}_n$ définis par

$$U_n(1, \dots, n) = \tilde{U}_n(1, \dots, n) U_1(1) U_1(2) \dots U_1(n). \quad (2.55)$$

Maintenant on varie U_1 à $\tilde{U}_n$ constant de manière suivante :

$$dU_1 = dx U_1 |\phi\rangle \langle \theta| \quad (2.56)$$

Les éléments de matrice de l'opérateur densité à un corps [35] sont donnés par

$$\langle \theta | \rho^{(1)} | \phi \rangle = \frac{d}{dx} \log Z. \quad (2.57)$$

Chaque diagramme Γ_i (voir encadré 2, page 29) dans le développement de $\log Z$ devient un opérateur $\hat{\Gamma}_\rho$ pour l'opérateur densité réduit. Dans [I] nous avons

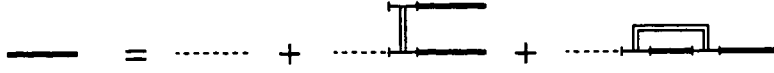


FIG. 2.11 – Equation non-linéaire pour l'opérateur à un corps dans l'approche d'Ursell: la ligne en gras représente l'opérateur $1 + \rho^{(1)}$, et la ligne en pointillés l'opérateur $1 + \hat{f}$, la contribution du gaz parfait. Cette équation graphique correspond aux resommations des séries qui interviennent ordre par ordre dans la théorie des perturbations.

montré que l'opérateur densité à un corps peut être construit par sommation sur tous les diagrammes connectés :

$$\rho^{(1)} = \sum_{\rho \text{ diagrammes}} z^{n_\rho} g_\rho \hat{\Gamma}_\rho \quad (2.58)$$

où g_ρ représente un facteur de dénombrement, qui vaut 1 pour tous les diagrammes qui ne contiennent que des U_n pour $n \leq 2$.

Dans le cas du gaz parfait, on obtient une sommation sur toutes les longueurs des cycles d'échange comportant uniquement des U_1 :

$$\rho^{(1)}(1) = \sum_{n=1}^{\infty} z^n [U_1(1)]^n = \hat{f}(1). \quad (2.59)$$

Dans la représentation d'impulsions, $\rho^{(1)}$ est diagonale dans un système homogène et on obtient la distribution de Bose-Einstein f_k du gaz parfait :

$$\rho_k \equiv \langle k | \rho^{(1)} | k \rangle = f_k = \frac{1}{e^{\beta(\hbar^2 k^2 / 2m - \mu)} - 1} \quad (2.60)$$

Dans le cas d'un gaz en interaction, les termes comportant un U_2 ajoutent une contribution en z^2 :

$$\rho^{(1)}(1) = \hat{f}(1) + 2z^2 [1 + \hat{f}(1)] \text{Tr}_2 \left\{ U_2^S(1, 2) [1 + \hat{f}(2)] [1 + \hat{f}(1)] \right\} \quad (2.61)$$

Cette approximation correspond au résultat du développement de $\log Z$ au premier ordre en a/λ , équation (2.27) (voir figure 2.2). Sur la figure 2.6 j'ai montré quelques configurations dans l'image de cycles, qui sont traités par cette approximation.

L'expression de l'opérateur densité en termes de diagrammes permet de resommer des séries de diagrammes. Par exemple, l'approximation suivante, qui est représentée sur la figure 2.11, généralise (2.61) :

$$\rho^{(1)}(1) = \hat{f}(1) + 2z^2 [1 + \hat{f}(1)] \text{Tr}_2 \left\{ U_2^S(1, 2) [1 + \rho^{(1)}(2)] [1 + \rho^{(1)}(1)] \right\}. \quad (2.62)$$

Regardons cette équation près de la température critique dans un système homogène. En écrivant $\rho_k = f_k(\mu = 0) - (\beta \hbar^2 k^2 / 2m)^{-1} + (\beta \epsilon_k)^{-1}$, nous pouvons évaluer l'équation (2.62) dans la limite $k \rightarrow 0$, où le 1 est négligeable par rapport à $f_k \simeq (\beta \hbar^2 k^2 / 2m - \beta \mu)^{-1}$ et à $\rho_k \simeq (\beta \epsilon_k)^{-1}$. Avec $z^2 \langle k_1, k_2 | U_2 | k_1 + q, k_2 - q \rangle \simeq -2a\lambda^2 / V$ nous obtenons⁶

$$\frac{1}{\beta \epsilon_k} = \frac{1}{\beta \hbar^2 k^2 / 2m - \beta \mu} - 4 \frac{a}{\lambda} n \frac{1}{\beta \hbar^2 k^2 / 2m - \beta \mu} \frac{1}{\beta \epsilon_k}, \quad \text{pour } k \rightarrow 0 \quad (2.63)$$

6. Une étude plus détaillée se trouve dans [I].

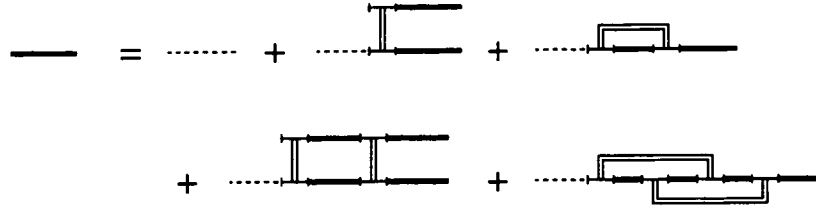


FIG. 2.12 – Equation non-linéaire au deuxième ordre en U_2 pour l'opérateur à un corps dans l'approche d'Ursell. Elle introduit les premières corrélations entre les particules. Ces types de diagrammes permettent de déduire les premières corrections à la température critique d'un gaz de Bose.

avec

$$n = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \rho_k = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(f_k(\mu=0) - \frac{1}{\beta \hbar^2 k^2 / 2m} + \frac{1}{\beta \epsilon_k} \right) \quad (2.64)$$

Le spectre d'énergie dans la limite $k \rightarrow 0$ prend alors la forme de l'approximation du champ moyen

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 4 \frac{a}{\lambda \beta} n \lambda^3 - \mu \quad (2.65)$$

Au point de transition le potentiel chimique devient positif $\beta \mu_c = 4a\lambda^2 n$, mais le spectre $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ est identique à celui du gaz parfait. La température critique n'est alors pas modifiée à cet ordre, c'est le résultat du champ moyen.

Les corrections suivantes sont dessinées sur la figure 2.12 et correspondent à l'équation non-linéaire :

$$\begin{aligned} \rho_1(1) = & \hat{f}(1) + 2z^2 [1 + \hat{f}(1)] \text{Tr}_2 \{ U_2^S(1,2) [1 + \rho_1(2)] [1 + \rho_1(1)] \} \\ & + 2z^4 [1 + \hat{f}(1)] \text{Tr}_2 \left\{ (U_2^S(1,2) [1 + \rho_1(2)] [1 + \rho_1(1)])^2 \right\} \end{aligned} \quad (2.66)$$

De manière analogue, on obtient pour le spectre d'énergie dans la limite $k \rightarrow 0$

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sigma_k + 4 \frac{a}{\lambda \beta} \tilde{n} \lambda^3 - \mu \quad (2.67)$$

avec

$$\sigma_k = -8 \frac{a^2}{\lambda^2 \beta} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \rho_p \rho_{p+q} \rho_{k-q} \quad (2.68)$$

L'équation (2.66) introduit essentiellement des corrélations entre particules, σ_k dépend de l'impulsion des atomes. Pour tenir compte des effets (triviaux) du champ moyen, nous introduisons la longueur de corrélation ξ du champ moyen par

$$\frac{\hbar^2}{2m\xi^2} = 4 \frac{a}{\lambda \beta} n \lambda^3 - \mu \quad (2.69)$$

et le spectre s'écrit

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sigma_k + \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} \quad (2.70)$$

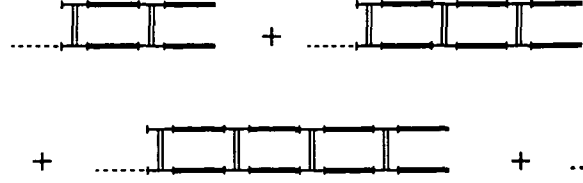


FIG. 2.13 – Une somme sur les diagrammes des échelles ajoute une contribution $2[1 + \hat{f}(1)]\text{Tr}_2 \left\{ \sum_{n=2}^{\infty} (z^2 U_2^S(1, 2)[1 + \rho^{(1)}(1)][1 + \rho^{(1)}(2)]^n \right\}$ à l'équation non-linéaire. Le facteur 2 vient du diagramme d'échange qui n'est pas dessiné sur la figure.

La condensation de Bose-Einstein se produit quand $\epsilon_0 = 0$ (voir section 2.5) ou

$$1 + 2m(\xi_c/\hbar)^2 \sigma_0 = 0 \quad (2.71)$$

Comme première approximation, nous n'avons pas résolu l'équation non-linéaire (2.66) de manière auto-cohérente [I], par contre, nous avons calculé σ_k avec le spectre libre $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m + \hbar^2 / 2m \xi^2$. La longueur de corrélation ξ sert de coupure infrarouge pour le calcul de $\sigma_k = \sigma_k(\xi)$. Elle est adaptée au point critique selon la condition (2.71)

$$\frac{\hbar^2}{2m\xi_c^2} = -\sigma_0(\xi_c) \quad (2.72)$$

Après avoir déterminé le point critique ξ_c , nous avons calculé la modification de la température critique avec le nouveau spectre

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sigma_k(\xi_c) - \sigma_0(\xi_c) \quad (2.73)$$

Ainsi nous avons trouvé une augmentation de la température critique [I]

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = \frac{T_c - T_0}{T_0} \sim \frac{a}{\lambda_T} \sim 0.7 a n^{1/3} \quad (2.74)$$

La linéarité en $a n^{1/3}$ comme le préfacteur 0.7 résultent d'une interpolation des données entre $0.001 \leq a/\lambda \leq 0.01$. Dans la section 2.5.1, nous calculons analytiquement le comportement du spectre pour $k \rightarrow 0$ pour estimer la température critique dans la limite $a n^{1/3} \rightarrow 0$.

Est-il possible de justifier la dépendance linéaire en a/λ ? La prise en compte des corrélations conduit à une modification du spectre à l'ordre a^2/λ^2 , donnée par $\sigma_k - \sigma_0$. Lorsque ces corrélations sont centrées autour de $k = 0$ de largeur petite par rapport au λ^{-1} , ces corrections s'écrivent approximativement sous la forme :

$$\sigma_k - \sigma_0 \propto \begin{cases} 0 & : k = 0 \\ \sigma_0 & : k \neq 0 \end{cases} \quad (2.75)$$

avec $\beta \sigma_0 \propto a^2/\lambda^2$. La densité critique dans ce modèle est donnée par

$$n\lambda^3 = \frac{\lambda^3}{2\pi^2} \int dk k^2 \left(\frac{1}{e^{\beta \hbar^2 k^2 / 2m} - 1} - \frac{1}{\beta \hbar^2 k^2 / 2m} + \frac{1}{\beta (\hbar^2 k^2 / 2m + \sigma_k - \sigma_0)} \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\lambda^3}{2\pi^2} \int dk \frac{k^2}{e^{\beta \hbar^2 k^2 / 2m} - 1} - \frac{2\lambda}{\pi} \int dk \frac{\sigma_0}{\hbar^2 k^2 / 2m + \sigma_0} \\
&= 2.612 - 2\sqrt{\pi\beta\sigma_0}
\end{aligned} \tag{2.76}$$

Etant donné que $\beta\sigma_0 \propto a^2/\lambda^2$, on trouve une augmentation de la température critique par rapport au gaz parfait linéaire en a/λ .

Notre résultat (2.74) pour la modification de la température critique, publié dans [I], n'était donc pas basé sur une solution auto-cohérente de l'équation (2.66) et ne peut être regardé que comme une première estimation des effets d'interactions. En général, les équations auto-cohérentes changent le comportement du spectre ϵ_k par rapport au $\hbar^2 k^2 / 2m$ pour $k \rightarrow 0$ (voir section 2.5.1).

De même nous n'avons pas encore discuté l'influence des diagrammes des ordres élevés. Deux approximations sont faciles à incorporer dans le présent calcul. Une sommation sur des échelles, représentée sur la figure 2.13, donne les corrections⁷ suivantes pour $k \rightarrow 0$

$$\sigma_k = -8 \frac{a^2}{\lambda^2 \beta} \lambda^3 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{A(q)}{1 + 2 \frac{a}{\lambda} A(q)} \rho_{k-q} \tag{2.77}$$

avec

$$A(q) = \lambda^3 \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \rho_p \rho_{p+q} \tag{2.78}$$

La sommation sur les bulles, figure 2.14, se distingue uniquement par un facteur 2 au dénominateur

$$\sigma_k = -8 \frac{a^2}{\lambda^2 \beta} \lambda^3 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{A(q)}{1 + 4 \frac{a}{\lambda} A(q)} \rho_{k-q} \tag{2.79}$$

Notons que les diagrammes ont ajouté une structure de la forme $aA(q)/\lambda$. Avec $\rho_p \simeq (\beta \hbar^2 p^2 / 2m + \hbar^2 / 2m \xi^2)^{-1}$, cette nouvelle structure est d'ordre

$$\frac{a}{\lambda} A(q) \sim \frac{a}{\lambda} \lambda^3 \int \frac{d^3(p\xi)}{(2\pi\xi)^3} \frac{2mT(\xi/\hbar)^2}{p^2 \xi^2 + 1} \frac{2mT(\xi/\hbar)^2}{(p+q)^2 \xi^2 + 1} \sim \frac{a\xi}{\lambda^2} \tag{2.80}$$

Dans la section suivante je montre en détail avec la méthode de la théorie des champs que tous les ordres du développement perturbatif au-delà du champ moyen conduisent à une puissance du paramètre $a\xi/\lambda^2$. Dans la limite $a \rightarrow 0$, la longueur de corrélation du champ moyen diverge, $\xi \rightarrow \infty$, et tous les ordres sont importants. Grâce à une resommation formelle de ces contributions nous montrons que la modification de la température critique est linéaire en a/λ [II]. Ensuite nous discuterons plus en détail les effets d'auto-cohérence et l'influence des approximations.

2.5 Formalisme des fonctions de Green

Au lieu de regarder directement l'opérateur densité à un corps comme dans l'approche d'Ursell, il est plus naturel en théorie des champs de calculer le

7. J'ai utilisé que ρ_p ne peut dépendre que de la valeur absolue de p .

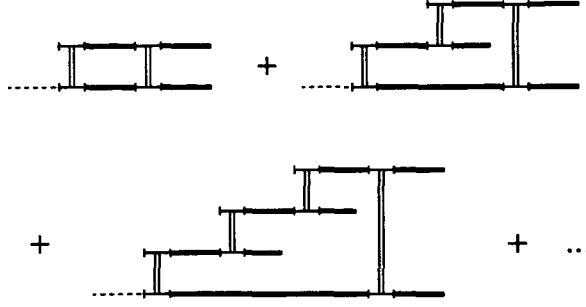


FIG. 2.14 – Ces diagrammes dans l'approche d'Ursell correspondent aux sommations sur les bulles dans le formalisme de la fonction de Green, figure 2.17. Les diagrammes d'échange ne sont pas dessinés.

propagateur, soit la fonction de Green à une particule (voire encadré 5, page 45) :

$$G^{-1}(k, i\omega_n) = i\omega_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \Sigma(k, i\omega_n) + \mu \quad (2.81)$$

avec les fréquences de Matsubara définies par $\omega_n = 2\pi nT$ ($n = 0, \pm 1, \dots$). Le nombre d'occupation ρ_k d'un état d'impulsion $\hbar k$ est donné par une somme sur toutes les fréquences de Matsubara

$$\rho_k = -T \sum_n G(k, i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+} \quad (2.82)$$

Au sens strict, la condensation de Bose-Einstein correspond à une occupation macroscopique de l'état d'impulsion nulle [18, 40]. Cette transition prend place à une température $T_c \neq 0$ grande devant l'écart entre les niveaux d'énergie. Pour $n \rightarrow \infty$, la fonction de Green $G(k, i\omega_n)$ se comporte comme la fonction de Green $G_0(k, i\omega_n)$ du gaz parfait, et la sommation sur les fréquences converge. La divergence attendue à la transition est due à une fréquence particulière qui annule l'équation (2.81). Cette singularité justifie l'occupation macroscopique d'un seul état. Dans la limite où la longueur de diffusion tend vers zéro, $a/\lambda \rightarrow 0$, l'opérateur d'énergie propre (encore appelé opérateur de masse) tend vers zéro $\Sigma(k, i\omega) \rightarrow 0$ et les fréquences de Matsubara non-nulles ($\omega_n \neq 0$) sont séparées de $\omega_0 = 0$ pour $T_c \rightarrow T_0 \gg 0$. Dans la limite d'un gaz dilué, on attend alors une singularité de la fonction de Green pour $\omega_n = 0$. Dans un système homogène et isotrope, la condensation de Bose-Einstein se produit pour l'état d'impulsion nulle $k = 0$, qui donne le critère formel de la condensation de Bose [41] :

$$T = T_c \quad : \quad G^{-1}(0, 0) = 0 \quad (2.83)$$

Par conséquent, la valeur critique du potentiel chimique est donnée par :

$$\mu_c = \Sigma(0, 0) \quad (2.84)$$

Les seuls diagrammes qui donnent une contribution linéaire en g (ou a/λ) à l'opérateur d'énergie propre sont les termes de champ moyen Σ_{mf}

$$\Sigma_{mf}(k, i\omega_n) = 2gn \quad (2.85)$$

qui sont constants à densité fixe. Pour éliminer la contribution du champ moyen au premier ordre en g on écrit :

$$\frac{\hbar^2}{2m\xi^2} = -(\mu - 2gn) \quad (2.86)$$

Dans l'approximation de champ moyen, ξ est la longueur de corrélation, qui diverge au point critique comme (voir équation (2.18), page 25)

$$\xi/\lambda \sim [(T - T_0)/T_0]^{-1} \quad (2.87)$$

En général, ξ reste finie, et peut être assimilée à une coupure infrarouge. Le point de transition est déterminé par la condition (2.84), soit

$$\Sigma_{\xi_c}(0,0) + \frac{\hbar^2}{2m\xi_c^2} = 0 \quad (2.88)$$

L'équation ci-dessus est une équation auto-cohérente en ξ , où nous avons introduit la notation $\Sigma_{\xi}(0,0)$ pour signaler la dépendance en ξ , qui élimine les contributions de type champ moyen.

Dans la suite, on s'intéresse à la structure de Σ_{ξ} obtenue par la théorie des perturbations. A l'ordre le plus bas, le diagramme en a^2/λ^2 est tracé sur la figure 2.16. On obtient pour $\Sigma_{\xi}^{(2)}$:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\xi}^{(2)}(k, i\omega_n) &= 2g^2 T^2 \sum_{n', n''} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{i\omega_{n'} - (\frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m\xi^2})} \\ &\times \frac{1}{i\omega_{n'+n''} - (\frac{\hbar^2(p+q)^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m\xi^2})} \frac{1}{i\omega_{n-n''} - (\frac{\hbar^2(k-q)^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m\xi^2})} \end{aligned} \quad (2.89)$$

Dans la limite $\xi \rightarrow \infty$, $\Sigma_{\xi}^{(2)}(0,0)$ diverge logarithmiquement du côté infrarouge. Dès que ξ reste finie, les intégrales ne contiennent plus de divergences infrarouges, la contribution principale est celle correspondant à $n' = n'' = 0$:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\xi}^{(2)}(k, 0) &\sim -T \frac{a^2}{\lambda^2} \int d^3(\xi p) \int d^3(\xi q) \frac{1}{(\xi p)^2 + 1} \frac{1}{(\xi p + \xi q)^2 + 1} \frac{1}{(\xi k - \xi q)^2 + 1} \\ &\sim T \frac{a^2}{\lambda^2} \end{aligned} \quad (2.90)$$

Les contributions d'ordres plus élevés peuvent s'estimer grâce à un argument dimensionnel. En effet, on passe d'un ordre au suivant par l'introduction d'un nouveau vertex, opération qui revient à multiplier par g et à introduire deux fonctions de Green supplémentaires, le tout étant intégré sur l'espace des impulsions, puis sommé sur les fréquences de Matsubara :

$$gT \sum_{n'} \int d^3 q \frac{1}{i\omega_{n_1+n'} - \frac{\hbar^2(k_1+q)^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m\xi^2}} \frac{1}{i\omega_{n_2-n'} - \frac{\hbar^2(k_2-q)^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m\xi^2}}$$

Si on annule les fréquences de Matsubara dans l'expression précédente, chaque vertex contribue selon :

$$\frac{a\xi}{\lambda^2} \int d^3(\xi q) \frac{1}{(\xi k_1 + \xi q)^2 + 1} \frac{1}{(\xi k_2 - \xi q)^2 + 1} \sim \frac{a\xi}{\lambda^2}$$

Encadré 5 : La fonction de Green à température finie

La fonction de Green $G(\mathbf{r}, \tau)$ à une particule est définie par [32] :

$$G(\mathbf{r}, \tau) = \begin{cases} -\frac{1}{Z} \text{Tr}\{e^{-(\beta-\tau)(\hat{H}-\mu\hat{N})} \psi(\mathbf{r}) e^{-\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})} \psi^\dagger(0)\} & : \tau > 0 \\ -\frac{1}{Z} \text{Tr}\{e^{-(\beta+\tau)(\hat{H}-\mu\hat{N})} \psi^\dagger(0) e^{\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})} \psi(\mathbf{r})\} & : \tau < 0 \end{cases} \quad (\text{B5-1})$$

Dans la théorie de perturbation on introduit l'évolution en "temps imaginaire" :

$$\Psi(\mathbf{r}, \tau) = e^{\tau(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} \psi(\mathbf{r}) e^{-\tau(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} \quad \bar{\Psi}(\mathbf{r}, \tau) = e^{\tau(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} \psi^\dagger(\mathbf{r}) e^{-\tau(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})}$$

pour développer la fonction de Green dans une série de perturbation sur tous les diagrammes connectés, avec deux lignes externes connectées avec les points $(\mathbf{r}' = 0, \tau' = 0)$ et $(\mathbf{r}' = \mathbf{r}, \tau' = \tau)$. La contribution à l'ordre n en $\hat{H}_{int}$ s'écrit :

$$\frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta \dots \int_0^\beta d\tau'_1 \dots d\tau'_n \left\langle T_\tau \left(\Psi(\mathbf{r}, \tau) \bar{\Psi}(0, 0) \hat{H}_{int}(\tau'_1) \dots \hat{H}_{int}(\tau'_n) \right) \right\rangle_{con}$$

Si on se restreint à tous les diagrammes topologiquement différents, i. e. qui ne changent pas avec une permutation de $\hat{H}_{int}$, le facteur $1/n!$ disparaît, ce qui est important pour resommer les séries. Il est commode d'utiliser la périodicité par rapport au τ et de regarder G dans l'espace de Fourier par rapport à la position et au "temps imaginaire" :

$$G(k, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{r} e^{i\omega_n \tau - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} G(\mathbf{r}, \tau) \quad G_0^{-1}(k, i\omega_n) = i\omega_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \mu$$

où G_0^{-1} représentent l'inverse du propagateur sans interaction.

Equation de Dyson

Il est possible de resommer une sous-série des diagrammes :

$$G^{-1}(k, i\omega_n) = G_0^{-1}(k, i\omega_n) - \Sigma(k, i\omega_n)$$

L'énergie propre ("self-energy") ou *opérateur de masse* Σ contient tous les diagrammes irréductibles : ils se distinguent des diagrammes de G par l'absence de deux G_0 -lignes extérieures et on ne peut pas les séparer en deux parties seulement connectées par une ligne G_0 . L'opérateur de masse peut être exprimé avec le vertex exact $\mathcal{T}$, qui contient tous les diagrammes compacts (avec quatre lignes extérieures), ce sont des diagrammes qui ne contiennent eux-mêmes aucune partie avec l'énergie propre. Chaque ligne G_0 dans ces diagrammes doit être remplacée par le propagateur exact G . On obtient [32]

$$\begin{aligned} \Sigma(k, i\omega_k) = & -2T \sum_{\omega_p} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \mathcal{T}^0(k, p; p, k) G(p) \\ & + 2T^2 \sum_{\omega_p, \omega_q} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \mathcal{T}^0(k, p; p+q, k-q) G(p) G(p+q) G(k-q) \mathcal{T}(p+q, k-q; p, k) \end{aligned}$$

où $\mathcal{T}^0$ est le vertex d'interaction. Les deux vertex, $\mathcal{T}^0$ et $\mathcal{T}$, sont symétrisés par rapport aux lignes extérieures.

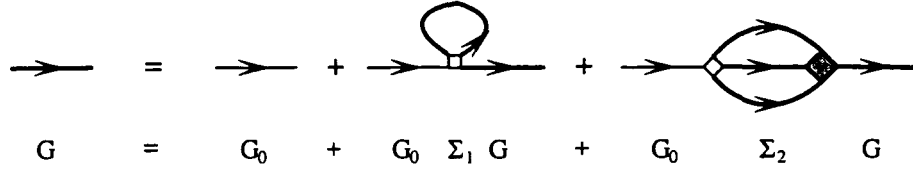


FIG. 2.15 – L'équation de Dyson : La ligne grasse représente le propagateur exact G , l'énergie propre peut être exprimée par $\Sigma = \Sigma_1 + \Sigma_2$, qui dépend elle-même du propagateur exact et du vertex exact $\mathcal{T}$, représenté par le carré gris.

D'où on extrait l'expression de l'opérateur d'énergie propre à l'ordre n valable uniquement dans la domaine des fréquences de Matsubara nulles :

$$\Sigma_{\xi}^{(n)}(0,0) \sim T \frac{a^2}{\lambda^2} \left(\frac{a\xi}{\lambda^2} \right)^{n-2} \quad (2.91)$$

Intéressons-nous désormais au cas particulier où une fréquence de Matsubara n est non-nulle ($n \neq 0$)

$$\frac{1}{i\omega_n - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m\xi^2}} = \frac{4\pi\beta}{i8\pi^2 n - \frac{\lambda^2}{\xi^2}[(\xi q)^2 + 1]}$$

Le dénominateur peut être développé en série géométrique, convergente pour $\lambda < \xi < \infty$

$$\frac{4\pi\beta}{i8\pi^2 n - [1 + (\xi q)^2]} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{[1 + (\xi q)^2][1 - (\lambda/\xi)^2]}{1 + (\xi q)^2 - i8\pi^2 n} \right)^k$$

On voit ainsi que chaque fréquence de Matsubara non-nulle introduit un facteur

$$gT \int d^3q \frac{1}{i\omega_n - \frac{\hbar^2(k_1+q)^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m\xi^2}} \frac{1}{\frac{\hbar^2(k_2-q)^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m\xi^2}} \sim \frac{a}{\xi} \quad n \neq 0$$

Le cas particulier où une fréquence de Matsubara n est non-nulle apporte une contribution à $\Sigma_{\xi}^{(2)}(0, i\omega_{n'})$ avec $n' \neq 0$, qui sera d'ordre :

$$\Sigma_{\xi}^{(2)}(0, i\omega_{n'}) \sim T \frac{a^2}{\xi^2} \quad n' \neq 0 \quad (2.92)$$

Le couplage de $\Sigma_{\xi}^{(2)}(0,0)$ avec le domaine de fréquence de Matsubara non-nul contribue aussi au moins le facteur $a^2 \hbar^2 / (2m\xi^4)$. La structure générale des termes dominants pour $\xi \rightarrow \infty$ sera alors donnée par le secteur de fréquence de Matsubara nul :

$$\Sigma_{\xi}^{(n)}(0,0) \sim T \frac{a^2}{\lambda^2} \left(\frac{a\xi}{\lambda^2} \right)^{n-2} \quad (2.93)$$

On voit que la solution auto-cohérente de l'équation (2.88) au point de transition

$$\Sigma_{\xi_c}(0,0) + \frac{\hbar^2}{2m\xi_c^2} = 0$$

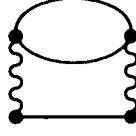


FIG. 2.16 – Le diagramme au deuxième ordre sans diagramme d'échange.

impose dans la limite $a/\lambda \rightarrow 0$:

$$\xi_c \sim \frac{\lambda^2}{a} \quad (2.94)$$

Même dans cette limite $a \rightarrow 0$, l'équation (2.93) montre que tous les ordres en théorie de perturbations sont importants. Néanmoins, les domaines de fréquences de Matsubara nuls se séparent complètement à cet ordre des autres domaines de fréquences de Matsubara d'ordre a^2/λ^2 plus petit.

Regardons aussi l'influence des interactions sur l'expression de la densité :

$$\begin{aligned} n &= -T \sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} G(k, i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+} \\ &= T \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{1}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + [\Sigma_\xi(k, 0) - \Sigma_\xi(0, 0)] + [\frac{\hbar^2}{2m\xi^2} + \Sigma_\xi(0, 0)]} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{n \neq 0} \frac{e^{i\omega_n 0^+}}{i\omega_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - [\Sigma_\xi(k, i\omega_n) - \Sigma_\xi(0, 0)] - [\frac{\hbar^2}{2m\xi^2} + \Sigma_\xi(0, 0)]} \right\} \end{aligned} \quad (2.95)$$

A cause des fréquences de Matsubara non-nulles, le comportement infrarouge de l'intégrale sur les termes $n \neq 0$ est régulier, ce qui permet un développement autour de la théorie libre avec des corrections d'ordre $\beta \Sigma_\xi(0, 0) = \beta \hbar^2 / (2m\xi^2) \sim (a/\lambda)^2$ au point critique, $\xi = \xi_c \sim \lambda^2/a$. Les premières corrections à la densité critique s'écrivent donc :

$$n_c - n_c^0 = T_c \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{1}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + [\Sigma(k, 0) - \Sigma(0, 0)]} - \frac{1}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \right\} \quad (2.97)$$

A densité fixée, l'équation (2.97) correspond à un décalage de la température critique ΔT_c par rapport à celle du gaz parfait

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} \equiv \frac{T_c - T_0}{T_0} = -\frac{2}{3} \frac{n_c \lambda^3 - n_c^0 \lambda^3}{n_c^0 \lambda^3} \quad (2.98)$$

d'où on obtient

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = \frac{T_c - T_0}{T_0} = \frac{4\lambda}{3\pi\zeta(3/2)} \int dk \frac{2m\Sigma(k, 0)/\hbar^2 + \xi_c^{-2}}{k^2 + 2m\Sigma(k, 0)/\hbar^2 + \xi_c^{-2}} \quad (2.99)$$

En exploitant le fait que $\xi_c \sim \lambda^2/a$ et l'analyse perturbative, les équations (2.91) et (2.5) dans la limite $a/\lambda \rightarrow 0$ permettent de montrer que l'opérateur d'énergie propre $2m\xi_c^2 \Sigma_{\xi_c}(k, 0)$ ne dépend que de $k\xi_c$, et est donc indépendant de a/λ .

Si nous réexprimons l'intégrale précédente sous forme adimensionnée, nous en extrayons une dépendance linéaire en a/λ pour la modification de la température critique sous l'effet des interactions [II]:

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} \sim \frac{\lambda}{\xi_c} \sim \frac{a}{\lambda} \quad (2.100)$$

Nous avons montré que pour obtenir les premières corrections en a/λ , tant pour l'opérateur d'énergie propre que pour la température critique, le problème se réduit à une théorie dans le domaine des fréquences de Matsubara nulles, équivalente à une théorie en termes de champs classiques. Cette théorie est normalement utilisée pour une description des phénomènes critiques dans ^4He [42, 43]. Bien que cette théorie classique paraisse plus simple, elle comporte des divergences ultraviolettes. Il est donc nécessaire d'introduire une coupure ultraviolette Λ . J'ai déjà eu l'occasion de traiter (voir encadré 1, page 16) ce type de divergence pour l'expression de la densité critique en fonction du potentiel chimique μ dans le cas simple du gaz parfait.

Dans [II], nous avons montré la dépendance linéaire en a/λ de la température critique, équation (2.100), en utilisant la théorie des champs classiques. Pour évaluer la sensibilité en Λ , la coupure de la théorie classique, une simple analyse dimensionnelle est suffisante. Seul le diagramme au deuxième ordre introduit une divergence en Λ :

$$\beta \Sigma^{(2)}(0) \sim \frac{a^2}{\lambda^2} \int^\Lambda \frac{d^6 k}{k^6} \sim \frac{a^2}{\lambda^2} \log(\Lambda)$$

Les ordres supérieurs n'introduisent pas de divergences supplémentaires car la contribution d'un vertex supplémentaire converge comme $(a/\lambda) \int^\Lambda (d^3 k)/k^4 \sim 1/\Lambda$. Donc, la divergence en Λ est uniquement présente dans le diagramme du deuxième ordre et on peut exploiter le fait qu'une simple renormalisation de ξ suffit pour rendre la théorie indépendante de la coupure. La formulation auto-cohérente de l'équation de Dyson (voir encadré 5, page 45) montre que la théorie complète ne dépend que de $\Sigma(0,0) + \hbar^2/(2m\xi^2)$. La divergence de $\Sigma(0,0)$ peut alors être absorbée par une redéfinition de ξ , la théorie ϕ^4 des champs classiques est superrenormalisable [45]. Ainsi, nous avons montré que le résultat obtenu pour l'expression de la température critique (2.100) ne dépend plus de la coupure nécessaire dans la théorie classique.

2.5.1 Théorie auto-cohérente pour calculer $\Delta T_c/T_c$

Nous avons montré que le déplacement de la température critique est linéaire en a/λ , et que la valeur elle-même ne peut pas être obtenue par un calcul perturbatif. Néanmoins, les équations auto-cohérentes - similaires aux équations du champ moyen - permettent d'obtenir des résultats non-perturbatifs. Dans [II] nous avons estimé l'effet des interactions sur la température critique avec un modèle simple.

Les deux approches présentées précédemment, *i.e* la théorie des champs quantique et le formalisme d'Ursell, se résument à une théorie des champs classiques à l'ordre le plus bas pour le calcul du déplacement de la température critique. Le spectre énergétique de cette théorie des champs classiques s'écrit à la température critique :

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Sigma(k,0) - \Sigma(0,0) \quad (2.101)$$

L'énergie propre $\Sigma(k, 0)$ est calculée avec le spectre ε_k de manière auto-cohérente

$$\Sigma(k, 0) - \Sigma(0, 0) = -2g^2T \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} B(q) \left[\frac{1}{\varepsilon_{k-q}} - \frac{1}{\varepsilon_q} \right] \quad (2.102)$$

où

$$B(q) = T \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\varepsilon_p \varepsilon_{p+q}} \quad (2.103)$$

Dans l'approche d'Ursell ce système des équations non-linéaires est obtenu à partir des équations (2.73) et (2.68).

L'intégrale (2.102) n'est pas toujours convergente, elle présente par exemple une divergence logarithmique pour un spectre libre. Dans le cas qui nous intéresse, nous devons considérer la dépendance en k du terme d'énergie propre. Si par exemple, $\Sigma(k, 0) - \Sigma(0, 0) \sim k^\alpha$ avec $\alpha < 2$ pour $k \rightarrow 0$, on peut négliger le terme d'énergie cinétique $\hbar^2 k^2 / 2m$ et l'intégrand de (2.102) varie comme $\sim q^{6-3\alpha}$. L'auto-cohérence du spectre pour $k \rightarrow 0$ permet d'établir la valeur de α [44]:

$$\alpha = 6 - 3\alpha$$

ou (*modulo* des corrections logarithmiques):

$$\varepsilon_k \sim k^{3/2} \quad k \rightarrow 0 \quad (2.104)$$

L'ansatz le plus simple pour le spectre auto-cohérent s'écrit [II]:

$$\varepsilon_k = \frac{\sqrt{\hbar k_c} (\hbar k)^{3/2}}{2m} \Theta(k_c - k) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Theta(k - k_c). \quad (2.105)$$

En réinjectant cette forme de spectre dans (2.102), il est possible d'extraire analytiquement par auto-cohérence la valeur de k_c :

$$k_c \lambda \simeq 20.7 \frac{a}{\lambda} \quad (2.106)$$

Pour obtenir ce résultat (2.106), nous avons calculé $B(q)$ dans la limite $q \rightarrow 0$:

$$B(q) = B_{3/2}(q) + B_2(q) \quad (2.107)$$

avec

$$B_{3/2}(q) = \frac{m^2 T}{\pi^2 k_c \hbar^4} \int_0^{k_c} dp \int_{-1}^1 d \cos \Theta \frac{p^{1/2}}{(p^2 + q^2 + 2pq \cos \Theta)^{3/4}} \quad (2.108)$$

$$= \frac{4m}{\pi \hbar^2 k_c \lambda^2} \left[\log \frac{k_c}{q} + 1 - \frac{\pi}{2} + 2 \log 2 + \mathcal{O} \left(\frac{q^2}{k_c^2} \right) \right] \quad (2.109)$$

et

$$B_2(q) = \frac{m^2 T}{\pi^2 \hbar^4} \int_{k_c}^{\infty} dp \int_{-1}^1 d \cos \Theta \frac{1}{p^2 + q^2 + 2pq \cos \Theta} \quad (2.110)$$

$$= \frac{4m}{\pi \hbar^2 \lambda^2 k_c} \left[1 + \mathcal{O} \left(\frac{q}{k_c} \right) \right] \quad (2.111)$$

Ensuite nous avons calculé l'énergie propre dans la limite $k \rightarrow 0$

$$\Sigma(k, 0) - \Sigma(0, 0) = -2g^2 T \int_0^{k_c} \frac{dq}{(2\pi)^2} \int_{-1}^1 d\cos\Theta \left\{ \frac{2m(q/\hbar)^2 B(q)}{k_c^{1/2} (k^2 + q^2 - 2kq \cos\Theta)^{3/4}} - \frac{2m(q/\hbar)^2 B(q)}{k_c^{1/2} q^{3/2}} \right\} \quad (2.112)$$

$$= \frac{k^{3/2}}{k_c^{3/2}} \frac{2^8 \hbar^2 a^2}{m \lambda^4} \int_0^{k_c/k} dx x^{3/2} \log x \left\{ \left[1 + \frac{1}{x} \right]^{1/2} - \left| 1 - \frac{1}{x} \right|^{1/2} - \frac{1}{x} \right\} \quad (2.113)$$

Apart des corrections logarithmique on obtient dans la limite $k \ll k_c$:

$$\Sigma(k, 0) - \Sigma(0, 0) \simeq \frac{\sqrt{\hbar k_c} (\hbar k)^{3/2}}{2m} \frac{2^{11} \pi a^2}{15 k_c^2 \lambda^4} \quad (2.114)$$

La condition d'auto-cohérence (2.101) et (2.105) s'écrit

$$\Sigma(k, 0) - \Sigma(0, 0) = \frac{\sqrt{\hbar k_c} (\hbar k)^{3/2}}{2m} \quad (2.115)$$

d'où on obtient l'équation (2.106), $k_c \lambda = 2^5 \sqrt{2\pi/15} a/\lambda$.

Notre ansatz pour le spectre (2.105) a permis de déterminer analytiquement le comportement du spectre pour $k \rightarrow 0$: $\varepsilon_k = (\hbar k_c)^{1/2} (\hbar k)^{3/2} / 2m + \hbar^2 k^2 / 2m \rightarrow (\hbar k_c)^{1/2} (\hbar k)^{3/2} / 2m$. Pour tenir compte que $\Sigma(k, 0) \rightarrow 0$ pour $k \rightarrow \infty$ et par conséquence $\Sigma(k, 0) - \Sigma(0, 0) \rightarrow -\Sigma(0, 0) \approx \hbar^2 k_c^2 / 2m$, nous avons suggéré l'interpolation suivante pour le spectre (2.101) qui tient compte des deux comportements limites $k \rightarrow 0$ et $k \rightarrow \infty$:

$$\Sigma(k, 0) - \Sigma(0, 0) = \frac{\sqrt{\hbar k_c} (\hbar k)^{3/2}}{2m} \frac{1}{1 + (k/k_c)^{3/2}} \quad (2.116)$$

Il est possible de déduire le déplacement de la température critique lié à cet interpolation :

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} \simeq 2.9 a n^{1/3} \quad (2.117)$$

Le spectre en $k^{3/2}$ semble résoudre les divergences infrarouges des contributions à tous les ordres dans $\Sigma(k, 0)$. Néanmoins, chaque nouveau vertex ajoute un terme dont la structure est la suivante :

$$gT \int d^3 q \frac{1}{\varepsilon_{k+q} \varepsilon_{k'-q}} \sim \frac{a}{k_c \lambda^2} \int d^3 q \frac{1}{|k+q|^{3/2} |k'-q|^{3/2}} \sim \frac{a}{k_c \lambda^2}$$

Une simple analyse dimensionnelle dans le même esprit que celle menée dans la section précédente nous fait réaliser que chaque nouveau vertex contribue au même ordre car $k_c \lambda \sim a/\lambda$. Même si l'ordre de grandeur de la correction à la température critique évaluée par ce modèle semble raisonnable, nous ne sommes pas en mesure d'évaluer l'incertitude qui entache ce résultat dans la mesure où la contribution des ordres plus élevés n'a pas été prise en compte.

L'analyse dimensionnelle suggère aussi que le comportement infrarouge du spectre est stable en $k^{3/2}$ [44]. En revanche, cette approche simpliste ne permet pas d'évaluer la contribution des termes logarithmiquement divergents,

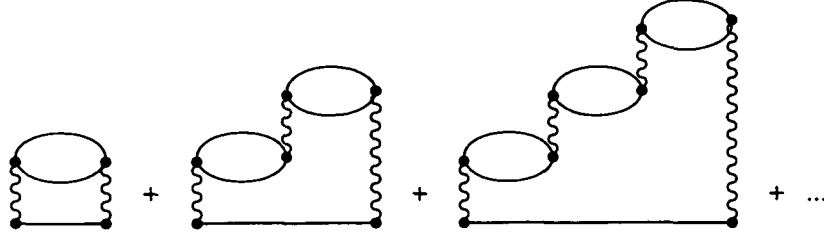


FIG. 2.17 – Les diagrammes des bulles sont une structure qui permet une re-sommation (voir figure 2.14 dans l'approche d'Ursell).

dont le rôle peut modifier l'exposant du spectre: $1 + \omega \log k = 1 + \log(k^\omega) \simeq \exp[\log(k^\omega)] = k^\omega$.

Si on prend en compte la sommation sur les bulles (voir figure 2.17), on obtient la formule suivante pour le vertex exact $\mathcal{T}(k, p; p+q, k-q)$

$$\mathcal{T}(k, p; p+q, k-q) = \mathcal{T}(q) = g \left[1 + [-2gB(q)] + [-2gB(q)]^2 + \dots \right] = \frac{g}{1 + 2gB(q)} \quad (2.118)$$

La formule (2.102) pour l'énergie propre est formellement identique, il suffit de remplacer $gB(q)$ par $B(q)\mathcal{T}(q)$ conformément à l'équation de Dyson pour les fonctions de Green exactes. Avec un spectre en $k^{3/2}$ (équation (2.105)), on a

$$1 + 2gB(q) = 1 + \frac{32a}{k_c \lambda^2} \left[\log \frac{k_c}{q} + c \right] \simeq \left(1 + \frac{32ca}{k_c \lambda} \right)^{-1} \frac{k_c^\omega}{q^\omega} \quad q \rightarrow 0 \quad (2.119)$$

avec $c \simeq 2 + 2 \log 2 - \pi/2 \simeq 1.816$ et

$$\omega = \left(c + \frac{k_c \lambda^2}{32a} \right)^{-1} \simeq 0.41$$

et le comportement infrarouge du vertex exact est du type $\mathcal{T}(q) \sim q^\omega$. L'équation de Dyson (voire encadré 5, page 45) suggère par analyse dimensionnelle un nouveau spectre de la forme $\varepsilon_k \sim k^{2-\eta}$, où :

$$k^{2-\eta} \sim -2gT \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} B(q) \mathcal{T}(q) \left[\frac{1}{\varepsilon_{k-q}} - \frac{1}{\varepsilon_q} \right] \sim \frac{k^6 k^\omega}{(k^{3/2})^3}$$

On en déduit la valeur de l'exposant critique η :

$$\eta = \frac{1}{2} - \omega \simeq 0.09$$

A cet égard, notons que dans l'article [II] notre estimation $\eta \sim 0.36$ n'est pas correcte.

Une analyse exploitant le groupe de renormalisation⁸ prédit $\eta = \epsilon^2/54$, par ailleurs un développement⁹ en $1/N$ donne $\eta = 8/(3\pi^2 N)$ [45]. Notre approche suggère également que le spectre exact est plus proche du spectre libre.

8. reposant sur un développement en dimension $\epsilon = 4 - D$ ($\eta \simeq 0.018$).

9. $N = 2$ pour le champ complexe dans notre cas ($\eta \simeq 0.14$).

Il me semble intéressant de rappeler l'expression du déplacement de la température critique dans le cas d'une théorie des champs quantiques portant sur des champs d'un nombre de composants N arbitrairement grand avec une interaction en $|\phi|^4$. Le développement en $1/N$ permet un calcul systématique au point critique. Dans la limite N grand, le déplacement de la température critique a récemment été établi de manière analytique [12] :

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = 2.33 an^{1/3} \quad (2.120)$$

Il est remarquable que ce résultat est indépendant de N à l'ordre N^{-1} du calcul. Les corrections au résultat (2.120) sont d'ordre N^{-2} . Dans notre cas d'un champ complexe N vaut 2.

Dans le prochain chapitre, je vais exposer la méthode Monte-Carlo quantique qui permet de calculer numériquement les propriétés d'un système de Bosons sans approximation. Nous avons exploité cette méthode pour calculer le déplacement de la température critique dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$. Il nous sera alors possible de comparer nos calculs analytiques avec le calcul numérique.

2.6 Annexe

2.6.1 Calcul de U_2 en théorie de perturbation

Pour un système de deux particules en interaction

$$H_2(1, 2) = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \hat{V}(1, 2) \quad (2.121)$$

Développons $\exp[-\beta H_2]$ en puissances des opérateurs d'interaction $\hat{V}(1, 2)$

$$\hat{V}(1, 2) = \frac{1}{V} \sum_{k, p, q} \tilde{v}(q) |1 : k - q, 2 : p + q\rangle \langle 1 : k, 2 : p| \quad (2.122)$$

autour de l'hamiltonien libre $H_0(1, 2) = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m}$ [20] :

$$\begin{aligned} e^{-\beta H_2} &= e^{-\beta H_0} - \int_0^\beta d\beta' e^{-(\beta - \beta')H_0} \hat{V} e^{-\beta' H_0} \\ &+ \int_0^\beta d\beta' \int_0^{\beta'} d\beta'' e^{-(\beta - \beta')H_0} \hat{V} e^{-(\beta' - \beta'')H_0} \hat{V} e^{-\beta'' H_0} - \dots \end{aligned} \quad (2.123)$$

Seuls les éléments de matrice de U_2 , qui conservent l'impulsion totale des deux particules, sont non nuls :

$$\begin{aligned} \langle k - q, p + q | U_2 | k, p \rangle &= -\beta e^{-\beta(E_i + E_f)/2} \left[\frac{\tilde{v}(q)}{V} + \frac{1}{V^2} \sum_{q'} \frac{\tilde{v}(q - q') \tilde{v}(q')}{E_i - E'} \right] \frac{\sinh[\beta(E_f - E_i)/2]}{\beta(E_f - E_i)/2} \\ &+ \frac{1}{V^2} \sum_{q'} \frac{\tilde{v}(q - q') \tilde{v}(q')}{(E_i - E')(E_f - E')} (e^{-\beta E'} - e^{-\beta E_f}) \end{aligned} \quad (2.124)$$

avec

$$E_i = \varepsilon_k + \varepsilon_p, \quad E_f = \varepsilon_{k-q} + \varepsilon_{p+q}, \quad E' = \varepsilon_{k-q'} + \varepsilon_{p+q'} \quad (2.125)$$

On voit que les termes entre crochets dans l'équation (2.124) représentent les termes du premier et du deuxième ordre d'un développement en puissances du potentiel v de l'équation de Lippmann-Schwinger (2.9) pour l'amplitude de diffusion $f(K, K+q)$ entre deux atomes ($K = p - k$).

A basse température seule la diffusion en onde s est importante. A suffisamment basse température, on introduit la longueur de diffusion a par $f(k, k') \sim a$. Dans ce régime isotrope, cet unique scalaire a permet de caractériser les interactions entre particules. Pour des sphères dures a est également le diamètre des sphères et cette approximation est valide tant que $(a/\lambda)^3$ est petit.

Les éléments de matrice non nuls de U_2 s'écrivent

$$\begin{aligned} \langle k-q, p+q | U_2 | k, p \rangle = & -\frac{2a}{\lambda} \frac{\lambda^3}{V} e^{-\beta(E_i+E_f)/2} \frac{\sinh[\beta(E_f - E_i)/2]}{\beta(E_f - E_i)/2} \\ & + \left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 \frac{\lambda^6}{V^2} \sum_{q'} \frac{e^{-\beta E'} - e^{-\beta E_f}}{\beta(E_i - E')\beta(E_f - E')} + \mathcal{O}\left(\frac{a^3}{\lambda^3}\right) \end{aligned} \quad (2.126)$$

Par isotropie de la diffusion en onde s , $U_2(1, 2)$ et $U_2^S(1, 2) = U_2(1, 2)(1 + P_{12})/2$ ont les mêmes éléments de matrice.

2.6.2 Calcul de U_3 en théorie de perturbation

De même, on calcule U_3 pour un système de trois particules en ne prenant en compte que les interactions à deux corps :

$$H_3(1, 2, 3) = \sum_{i=1}^3 \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \hat{V}(1, 2) + \hat{V}(2, 3) + \hat{V}(1, 3) \quad (2.127)$$

Il vient:

$$\begin{aligned} U_3(1, 2, 3) = & e^{\beta H_3} - U_2(1, 2)U_1(3) - U_2(1, 3)U_1(2) - U_2(2, 3)U_1(1) - U_1(1)U_1(2)U_1(3) \\ = & \sum_{(i,j) \neq (k,l)} \int_0^\beta d\beta' \int_0^{\beta'} d\beta'' e^{-(\beta-\beta')H_0} \hat{V}(i, j) e^{-(\beta'-\beta'')H_0} \hat{V}(k, l) e^{-\beta''H_0} \end{aligned} \quad (2.128)$$

où $(i, j), (k, l) \in \{(1, 2), (1, 3), (2, 3)\}$. Considérons l'un des 6 termes de la sommation, par exemple

$$\begin{aligned} \langle k_1+q+q', k_2-q, k_3-q' | \int_0^\beta d\beta' \int_0^{\beta'} d\beta'' e^{-(\beta-\beta')H_0} \hat{V}(1, 2) e^{-(\beta'-\beta'')H_0} \hat{V}(1, 3) e^{-\beta''H_0} | k_1, k_2, k_3 \rangle \\ = \frac{4a^2}{\lambda^2} \frac{\lambda^6}{V^2} \left\{ \frac{e^{-\beta(E_i+E_f)/2} \sinh[\beta(E_f - E_i)/2]}{\beta(E' - E_i) \beta(E_f - E_i)/2} + \frac{e^{-\beta E'} - e^{-\beta E_f}}{\beta(E_i - E')\beta(E_f - E')} \right\} \end{aligned} \quad (2.129)$$

avec

$$E_i = \varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2} + \varepsilon_{k_3}, \quad E_f = \varepsilon_{k_1+q+q'} + \varepsilon_{k_2-q} + \varepsilon_{k_3-q'}, \quad E' = \varepsilon_{k_1+q'} + \varepsilon_{k_2} + \varepsilon_{k_3-q'}$$

Les autres termes de la sommation peuvent être traités de la même manière. Si on prend la trace de U_3 , ils ont tous la même contribution.

Enfin, le symétriseur à trois particules

$$S_3 = \frac{1}{3!}(1 + P_{12} + P_{13} + P_{23} + P_{12}P_{13} + P_{13}P_{12})$$

ne commute plus avec U_3 dans cette approximation.

Grâce à (2.129), on peut calculer les éléments diagonaux de $U_3^S = U_3 S_3$, qui contiennent des termes du type

$$\begin{aligned} \langle k_1, k_2, k_3 | \int_0^\beta d\beta' \int_0^{\beta'} d\beta'' e^{-(\beta-\beta')H_0} \hat{V}(1,2) e^{-(\beta'-\beta'')H_0} \hat{V}(1,3) e^{-\beta''H_0} S_3 | k_1, k_2, k_3 \rangle \\ = \frac{1}{3!} \frac{8a^2}{\lambda^2} \frac{\lambda^6}{V^2} \left\{ e^{-\beta E} + \frac{e^{-\beta E}}{\beta(E' - E)} + \frac{e^{-\beta E'} - e^{-\beta E}}{\beta^2(E - E')^2} \right\} \end{aligned} \quad (2.130)$$

avec

$$E = \varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2} + \varepsilon_{k_3}, \quad E' = \varepsilon_{k_1+k_3-k_2} + 2\varepsilon_{k_2}$$

Si les trois particules sont traitées de la même manière, les autres termes donnent la même contribution à U_3 et le facteur $1/3!$ est compensé.

Le même développement perturbatif montre aussi que les U_n avec $n \geq 4$ sont au moins d'ordre a^3/λ^3 .

Chapitre 3

Calcul de Monte-Carlo quantique

La méthode de Monte-Carlo quantique est un outil numérique très puissant pour obtenir des informations sur les systèmes de bosons à l'équilibre. Ce type de calcul permet de déterminer des quantités macroscopiques à partir des paramètres microscopiques sans approximations incontrôlées.

Cette méthode repose sur l'approche de l'intégrale de chemin de Feynman. Les interactions entre atomes peuvent être prises en compte grâce à la discrétisation des chemins en "temps imaginaire", ce qui permet d'utiliser des approximations à haute température. On doit à Pollock et Ceperley la formule de réponse linéaire qui permet de calculer la fraction superfluide n_s/n en exploitant la topologie des chemins de bosons dans un système de taille finie [46].

Dans le paragraphe 3.1 je présente des considérations générales d'un calcul de Monte-Carlo quantique établies dans la littérature (voir [24]). Les calculs dans le chapitre suivant utiliseront directement ces méthodes pour étudier les effets d'interaction sur des bosons confinés dans un potentiel extérieur. Le choix de paramètres, dans ce cas une sphère dure de diamètre a comme potentiel d'interaction, est adapté au cas des expériences dans les vapeurs atomiques, et permet en même temps une comparaison simple avec des théories du type champ moyen [IV,V].

Contrairement au but recherché dans [IV] et [V] — la description d'un gaz pour des paramètres d'intérêt expérimental — notre étude [III], rapportée dans la section 3.2, cherche à établir le comportement de la température critique d'un gaz homogène directement dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$. En utilisant des résultats analytiques, la description en intégrales de chemins se simplifie remarquablement dans cette limite d'un gaz dilué, où le diamètre a de la sphère peut également être interprété comme longueur de diffusion d'un potentiel arbitraire. Grâce à cette description, nous avons été capables d'obtenir le comportement de la température critique $\Delta T_c/T_c \sim an^{1/3}$ dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$, en n'utilisant que des arguments de loi d'échelle ("finite-size scaling") [III]. Ce résultat rejoint celui donné dans le chapitre précédent. Par calcul numérique nous avons ensuite obtenu la valeur du préfacteur grâce à la méthode de l'échantillonnage corrélé à partir d'un ensemble de bosons sans interaction.

Avec notre nouvelle approche, nous avons obtenu la modification de la

température critique dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$ [III]

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = (2.3 \pm 0.25) an^{1/3} \quad (3.1)$$

dont nous n'avons pas calculé précisément la région de validité pour a fini. Ce résultat se compare directement avec celui des calculs analytiques dans le chapitre précédent.

3.1 Méthode générale de Monte-Carlo quantique

La méthode de Monte-Carlo quantique utilise la description en termes de cycles d'échange présentée dans le premier chapitre pour calculer la matrice densité à N bosons ($\mathbf{R} \equiv (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$) :

$$\rho_B(\mathbf{R}; \mathbf{R}'; \beta) = \langle \mathbf{R}' | e^{-\beta H_N} | \mathbf{R} \rangle_S \quad (3.2)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\{P\}} \langle P(\mathbf{R}') | e^{-\beta H_N} | \mathbf{R} \rangle \quad (3.3)$$

Chaque terme de la somme sur toutes les permutations $\{P\}$ nécessite le calcul d'un élément de la matrice densité à N particules *discernables*

$$\rho_D(\mathbf{R}; \mathbf{R}', \beta) = \langle \mathbf{R}' | e^{-\beta H_N} | \mathbf{R} \rangle \quad (3.4)$$

En général, pour un système de N particules en interaction, ρ_D n'est connue que dans la limite des hautes températures $\beta \rightarrow 0$.

Dans notre cas, nous nous sommes intéressés à un régime différent, où les effets de la statistique des particules se manifestent. Grâce à la propriété de convolution, on peut écrire

$$\rho_D(\mathbf{R}; \mathbf{R}', \beta) = \int d\mathbf{R}^2 \dots \int d\mathbf{R}^M \langle P(\mathbf{R}') | e^{-\frac{\beta}{M} H_N} | \mathbf{R}^M \rangle \dots \langle \mathbf{R}^2 | e^{-\frac{\beta}{M} H_N} | \mathbf{R} \rangle \quad (3.5)$$

L'intégrand peut être vu comme une discrétisation des chemins de N particules discernables entre les "temps imaginaires" $\tau = 0$ et $\tau = \beta$. L'intérêt d'introduire les M intégrales supplémentaires est que nous avons ainsi besoin de connaître uniquement l'opérateur densité pour un système de particules discernables à une température inverse $\tau = \beta/M$ arbitrairement petite ($\tau \ll \beta$). Il en ressort qu'on peut utiliser une approximation de haute température et que le calcul devient exact dans la limite $\tau = \beta/M \rightarrow 0$ [47, 48].

Pour un gaz dilué et des interactions à courte portée, $\rho_D(\tau)$ peut utilement être exprimée par un produit de paires ("pair-product approximation") [24] :

$$\rho_D(\mathbf{R}; \mathbf{R}', \tau) \simeq \prod_{n=1}^N \varrho_1(\mathbf{r}_n; \mathbf{r}'_n, \tau) \prod_{i < j} g_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{r}'_i, \mathbf{r}'_j, \tau). \quad (3.6)$$

Dans cette approximation, ϱ_1 est la matrice densité à une particule sans interaction

$$\varrho_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \tau) = \langle \mathbf{r}' | e^{-\tau H_1} | \mathbf{r} \rangle \quad (3.7)$$

et g_2 est la solution du problème à deux corps

$$g_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{r}'_i, \mathbf{r}'_j, \tau) = \frac{\langle \mathbf{r}'_i, \mathbf{r}'_j | e^{-\tau H_2(i,j)} | \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j \rangle}{\varrho_1(\mathbf{r}_i; \mathbf{r}'_i, \tau) \varrho_1(\mathbf{r}_j; \mathbf{r}'_j, \tau)} \quad (3.8)$$

L'approximation par produit de paires a une interprétation simple : toutes les collisions binaires des N particules qui ont lieu au cours du temps imaginaire τ sont traitées de manière exacte dans l'équation (3.6).

Dans l'annexe je présenterai un calcul analytique de g_2 pour le cas de sphères dures avec un diamètre a (page 68). Il montre qu'à basse température, $g_2 - 1$ est dominé par les collisions en onde s . A l'ordre le plus bas, a correspond aussi à la longueur de diffusion.

La formule de convolution (3.5) permet de calculer la matrice densité à température $T = 1/\beta$ pour un système de N particules discernables. Dans le cas du gaz dilué ($na^3 \ll 1$), l'approximation par produit de paires est plutôt une approximation à faible densité dans l'espace des phases qu'une approximation à haute température (page 70). Pour sa validité il faut choisir un $\tau = \beta/M$ avec

$$M \gg a\hbar^2 \beta n / m \sim an^{1/3} \frac{T_0}{T} \quad (3.9)$$

où T_0 est la température critique du gaz parfait.

Une fois les éléments de $\rho_D(\beta)$ calculés, on obtient l'opérateur densité d'un système de N bosons par symétrisation, équation (3.3). Le grand nombre de sommes dans l'espace des permutations ainsi que les intégrations multiples dans l'espace des positions sont évaluées par la méthode de Monte-Carlo [49].

La moyenne d'un opérateur $\mathcal{O}$ - décrit dans la représentation position $\mathcal{O}(\mathbf{R}; \mathbf{R}')$ - peut se calculer par :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}' \rho_B(\mathbf{R}; \mathbf{R}', \beta) \mathcal{O}(\mathbf{R}; \mathbf{R}')}{\int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}' \rho_B(\mathbf{R}; \mathbf{R}', \beta) \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \quad (3.10)$$

Un calcul des éléments non-diagonaux de l'opérateur densité $\rho_B(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta)$ exige un investissement considérable. Notamment le calcul du facteur de normalisation $Z = \int d\mathbf{R} \rho_B(\mathbf{R}; \mathbf{R}, \beta)$ dans le dénominateur de (3.10) présente une difficulté sévère pour déterminer $\langle \mathcal{O} \rangle$ avec le bon poids statistique¹ (voir chapitre 4 page 79), absent dans un simple calcul des éléments diagonaux $\rho_B(\mathbf{R}; \mathbf{R}, \beta)/Z$.

Dans un système inhomogène les éléments diagonaux donnent directement la densité spatiale, ce qui permet la comparaison avec des expériences et des théories simples (voir chapitre 4, page 76).

Dans un système homogène, la densité spatiale reste trivialement constante. Néanmoins les éléments diagonaux de l'opérateur densité satisfont à des conditions aux limites (voir encadré 6, page 58). Les conditions aux limites conditionnent la topologie des chemins des particules, qui est directement reliée à la superfluidité du système.

La topologie d'une configuration (figure 3.1) est quantifiée par le nombre d'enroulement ("winding number") $\mathbf{W}$:

$$\mathbf{W} = \sum_i \int_0^\beta \frac{d\tau}{L} \frac{d\mathbf{r}_i(\tau)}{d\tau} \quad (3.11)$$

1. Le calcul de Monte-Carlo détermine $\rho_B(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta)$ avec la normalisation $Z' = \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}' \rho_B(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta)$ et le calcul du rapport Z'/Z souffre énormément du bruit statistique.

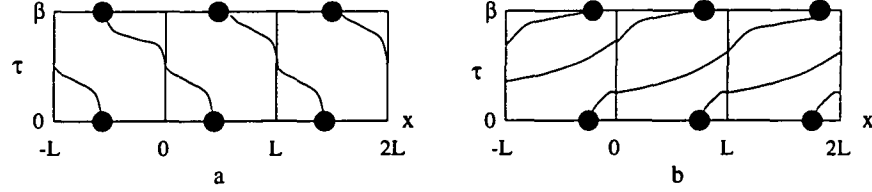


FIG. 3.1 – La configuration à une particule à gauche (a) a un nombre d'enroulement $w_x = -1$ dans la direction de l'axe x , celui à droite (b) a $w_x = 2$. La somme sur tous les w_x doit être considérée pour calculer ρ pour un système de taille L finie à partir de la solution ρ_∞ d'un système infini.

Encadré 6 : Conditions aux limites

Naturellement un calcul Monte-Carlo quantique se fait dans l'ensemble canonique avec un nombre de particules N et une longueur de boîte L fixés. Pour éliminer les effets de surface il est préférable d'utiliser des conditions aux limites périodiques :

$$\rho(\mathbf{R}; \mathbf{R}' + \mathcal{W}L, \beta) = \rho(\mathbf{R}; \mathbf{R}', \beta)$$

où $\mathcal{W}$ correspond à un vecteur à $3N$ dimensions $\mathcal{W} = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_N)$ où chaque composante est un nombre entier arbitraire. La notation $\mathbf{R}' + \mathcal{W}L$ symbolise donc le vecteur $(\mathbf{r}'_1 + \mathbf{w}_1 L, \dots, \mathbf{r}'_N + \mathbf{w}_N L)$, qui déplace le vecteur $\mathbf{R}'$ périodiquement. Habituellement il est plus simple de construire une solution $\rho_\infty(\mathbf{R}; \mathbf{R}', \beta)$ avec les conditions aux limites pour un système avec $L \rightarrow \infty$ (figure 3.1). Par exemple, en utilisant l'approximation du produit des paires, l'équation (3.6), ϱ_1 et g_2 sont analytiquement connues pour un système infini (voir annexe 3.3). A partir de cette solution l'opérateur densité du système fini avec des conditions aux limites périodiques est construit par superposition (figure 3.2) :

$$\rho(\mathbf{R}; \mathbf{R}', \beta) = \sum_{\mathcal{W}} \rho_\infty(\mathbf{R}; \mathbf{R}' + \mathcal{W}L, \beta) \quad (\text{B6-1})$$

Pour les éléments diagonaux $\rho(\mathbf{R}; \mathbf{R}, \beta)$, le vecteur $\mathcal{W}$ contient les informations sur la topologie de chemins, par exemple $\mathbf{W} = \sum_i \mathbf{w}_i$ mesure le flux des chemins à travers les bords de la boîte, le nombre d'enroulement ("winding number") d'une configuration.

A partir du nombre d'enroulement, la fraction superfluide n_s/n est déterminée à l'aide d'une formule de réponse linéaire [46] :

$$\frac{n_s}{n} = \frac{m}{\hbar^2} \frac{\langle W^2 \rangle L^2}{3\beta N} \quad (3.12)$$

La fraction condensée n_0/n par contre, n'est reliée qu'aux éléments non-diagonaux de la matrice densité à un corps $\rho^{(1)}$

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{Z} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}' \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'_i) \rho_B(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) \quad (3.13)$$

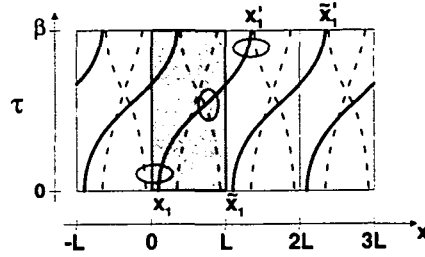


FIG. 3.2 – Il est commode de travailler avec des coordonnées non-périodiques $0 \leq x_1(\tau=0) < L$ et $-\infty < x'_1(\tau=\beta) = x_1(\tau=\beta) + w_x L < \infty$, où w_x est le nombre d'enroulement dans la direction de l'axe x . Tous les chemins sont déplacés périodiquement, à titre d'exemple $\tilde{x}_1(\tau) = x_1(\tau) + L$. Pour évaluer le poids statistique des interactions il faut maintenant prendre en compte toutes les collisions binaires dans la boîte d'origine entre $0 \leq x_1(\tau) < L$.

La condensation de Bose-Einstein introduit un ordre non-diagonal à longue distance (“off-diagonal long range order”) [18, 40]

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n_0 \quad (3.14)$$

Dans un système inhomogène, $\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ doit explicitement être diagonalisée pour obtenir la fraction condensée (voir chapitre 4, page 77).

Pour le cas du gaz parfait, j'ai montré dans le premier chapitre (voir page 17) le lien entre la statistique des cycles d'échange et la fraction condensée. Dans un calcul de Monte-Carlo quantique cette statistique de cycles est observable, ce qui permet de déterminer n_0 sans utiliser les éléments non-diagonaux de ρ_B . Nous avons retrouvé numériquement ce lien pour le cas d'un gaz dilué dans le chapitre suivant.

3.2 Approche dans la limite du gaz dilué

Pour déterminer la température critique de la condensation de Bose dans un gaz dilué, un calcul de Monte-Carlo quantique présente *a priori* plusieurs difficultés fondamentales :

Dans la limite $na^3 \rightarrow 0$, les effets des interactions entre atomes deviennent plus faibles que l'incertitude du calcul due au bruit statistique inhérent au calcul Monte-Carlo. De même, dans l'extrapolation à la limite thermodynamique, une simple loi d'échelle ne peut plus être satisfaisante car les effets des corrections à la loi d'échelle (voir encadré 7, page 64) sont susceptibles de dépasser largement les effets de l'interaction sur la température critique.

En revanche, les propriétés physiques d'un gaz dilué sont plus claires : l'interaction est bien décrite par des collisions binaires, qui sont caractérisées par un seul paramètre, la longueur de diffusion a . En outre, le poids statistique d'une configuration de N particules doit être très proche de celui du gaz parfait.

Dans notre approche [III], nous avons résolu ces difficultés tout en tenant compte des propriétés physiques d'un gaz dilué, qui se reflètent directement dans notre algorithme du calcul Monte-Carlo.

Dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$, le traitement des interactions dans ce calcul se simplifie : le poids statistique peut être calculé par l'ansatz avec un produit des paires sans tranches intermédiaires entre $\tau = 0$ et $\tau = \beta$. Une discrétisation du chemin est donc inutile. De manière analogue aux calculs analytiques, la forme du potentiel inter-atomique n'intervient plus dans cette approche numérique et le seul paramètre microscopique des collisions est la longueur de diffusion a . Puisque le système est très proche de celui du gaz parfait, un échantillonnage corrélé à partir d'un système sans interactions est possible.

Grâce à l'échantillonnage corrélé nous avons éliminé les problèmes de bruit statistique en regardant la modification d'une quantité induite par des interactions plutôt que de calculer sa valeur absolue. Cet échantillonnage corrélé permet en plus d'utiliser toutes les informations accessibles pour le gaz parfait (voir chapitre 1). En utilisant les résultats du gaz parfait à N fini, nous avons aussi trouvé une façon d'extrapoler à la limite thermodynamique en évitant tout ansatz *ad hoc* sur la forme analytique de la loi d'échelle et des corrections à la loi d'échelle (voir encadré 7, page 64). Notre construction, rapportée dans [III], inclut toutes les corrections à la loi d'échelle.

3.2.1 Action exacte

La décomposition de $e^{-\beta H}$ en opérateurs d'Ursell U_q (voir encadré 3, page 29) montre que les collisions binaires déterminent le poids statistique d'interaction à l'ordre le plus bas en a : le terme proportionnel à U_2 qui contient la solution de diffusion de deux particules, est seul à donner des corrections linéaires en a au cas sans interaction (voir annexe page 52 pour le calcul de U_2 et U_3).

Le lien entre U_2 de l'approche Ursell et g_2 , défini dans (3.8), qui entre dans l'ansatz par produit des paires, est donné par

$$U_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{r}'_i, \mathbf{r}'_j; \beta) = [g_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{r}'_i, \mathbf{r}'_j; \beta) - 1] \varrho_1(\mathbf{r}_i; \mathbf{r}'_i, \beta) \varrho_1(\mathbf{r}_j; \mathbf{r}'_j, \beta) \quad (3.15)$$

Les réflexions dans l'annexe 3.3.3 montrent qu'à l'ordre a^2/λ^2 l'approximation par produit des paires, équation (3.6), est exacte sans tranches intermédiaires ($M = 1$ ou $\tau = \beta$). Nous pouvons alors calculer le poids statistique d'une configuration selon :

$$\rho_D(\mathbf{R}; \mathbf{R}', \beta) = \prod_{n=1}^N \varrho_1(\mathbf{r}_n; \mathbf{r}'_n, \beta) \prod_{i < j} g_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{r}'_i, \mathbf{r}'_j, \beta). \quad (3.16)$$

Nous n'avons plus besoin de discrétiser les chemins des particules, qui évoluent entre le "temps imaginaire" $\tau = 0$ à $\tau = \beta$, l'action correspondant au poids statistique du gaz dilué est exacte dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$.

3.2.2 Longueur de diffusion

Toutes les propriétés de diffusion binaire sont comprises dans un calcul exact de g_2 (ou équivalent U_2) pour un potentiel d'interaction donné. Le calcul de g_2 pour le cas d'une sphère dure, présenté dans l'annexe 3.3, montre qu'à basse température, $T \ll \hbar^2/ma^2$, seules les collisions en onde s sont importantes. Dans la limite d'un gaz dilué, le résultat (3.47), page 69, permet un développement en

a/λ , dont le premier ordre donne exactement un résultat identique pour tout potentiel décrit par un longueur de diffusion² a . En particulier, un calcul explicite de g_2 avec un pseudo-potentiel $V(r) \propto \delta(r)$ donne le même résultat au premier ordre en a/λ . Notons aussi que le calcul de U_2 en représentation d'impulsion dans l'annexe 2.6 montre que le premier ordre de perturbation dépend uniquement des amplitudes de diffusion (voir l'équation de Lippman-Schwinger, page 24). A basse température, l'amplitude de diffusion est en général indépendante des impulsions et les éléments de matrice de l'opérateur U_2 sont proportionnels à a .

Dans le poids statistique d'une configuration (3.16), g_2 prend alors la forme

$$g_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{r}'_i, \mathbf{r}'_j, \beta) = 1 - a c_{ij} \quad (3.17)$$

où c_{ij} est indépendant de a dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$ (à comparer avec les équations (13) et (14) dans [III]).

3.2.3 Influence des interactions sur la fraction superfluide

Regardons le poids statistique donné par les équations (3.16) et (3.17). Ecrivons $\langle \dots \rangle_a$ pour la moyenne avec le poids statistique du gaz en interaction et $\langle \dots \rangle_0$ la moyenne dans le système sans interaction $a = 0$, on obtient comme valeur moyenne du carré du nombre d'enroulement W^2

$$\langle W^2 \rangle_a = \frac{\langle [1 - a \sum_{i < j} c_{ij}] W^2 \rangle_0}{\langle 1 - a \sum_{i < j} c_{ij} \rangle_0} \quad (3.18)$$

Avec $C = \sum_{i < j} c_{ij}$, on obtient une formule de réponse linéaire au premier ordre en a :

$$\langle W^2 \rangle_a - \langle W^2 \rangle_0 = -a [\langle CW^2 \rangle_0 - \langle C \rangle_0 \langle W^2 \rangle_0] \quad (3.19)$$

Grâce à la formule (3.12), qui connecte le nombre d'enroulement avec la fraction superfluide, il est alors possible de calculer la variation de la fraction superfluide $\delta n_s = n_s(a) - n_s(a = 0)$ pour un système de N particules par un échantillonnage corrélé, c'est-à-dire la longueur de diffusion a entre uniquement comme paramètre dans le calcul. Nous obtenons (avec $\hbar = m = 1$ ici)

$$\frac{\delta n_s}{n} = -\frac{X_N}{\beta N^{1/3}} an^{1/3} \quad (3.20)$$

où X_N est une fonction de corrélation pour des bosons libres entre le nombre d'enroulement au carré et l'énergie d'interaction (voir figure 3.3)

$$X_N = \frac{\langle CW^2 \rangle_0 - \langle C \rangle_0 \langle W^2 \rangle_0}{3n} \quad (3.21)$$

Notons qu'elle est indépendante de $an^{1/3}$ dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$. Nous n'avons qu'à générer les configurations $(\mathbf{R}, \mathcal{W})$ avec le poids du gaz parfait.

2. La portée effective du potentiel doit rester négligeable par rapport à la longueur de diffusion.

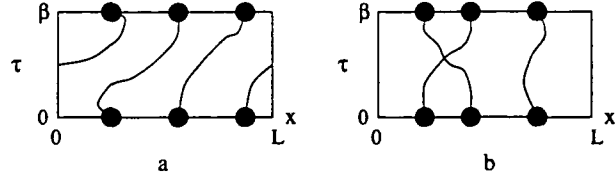


FIG. 3.3 – Deux configurations du gaz parfait dans un système de taille L finie. Dans la direction d'axe x , la configuration a est caractérisée par un nombre d'enroulement $W_x = 1$ et la configuration b par $W_x = 0$. Le poids statistique de ces deux configurations sera en général modifié de manière différente par l'interaction. Puisque la fraction superfluide est proportionnelle à la valeur moyenne de W^2 , δn_s sera donnée par une fonction de corrélation.

3.2.4 Algorithme de génération des configurations du gaz parfait

Nous avons présenté un nouvel algorithme qui produit une configuration dans l'espace des positions ($\mathbf{R} \equiv (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$) de N bosons dans une boîte de longueur L avec un vecteur de conditions limites $\mathcal{W}$, ($\mathcal{W} \equiv (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_N)$, $\mathbf{R}' \equiv \mathbf{R} + \mathcal{W}L$), relié au nombre d'enroulement $\mathbf{W}$ du système ($\mathbf{W} = \sum \mathbf{w}_i$). Cette configuration est créée avec le poids d'un gaz sans interactions et est complètement indépendante de la configuration précédente. Nous utilisons les informations obtenues pour le gaz parfait dans le premier chapitre.

La formule de récurrence (1.23) page 17 ne permet pas seulement de calculer la fonction de partition Z_N pour N particules à une température $T = 1/\beta$, mais donne aussi la probabilité $p_c^N(k)$ d'avoir un cycle de longueur k dans un système de N particules :

$$p_c^N(k) = \frac{s_k Z_{N-k}}{N Z_N} \quad (3.22)$$

Dans un système de taille L avec des conditions aux limites périodiques, le poids s_k d'un cycle de longueur k s'écrit ($\hbar = m = 1$)

$$s_k = \text{Tr } e^{-k\beta H_0} = \left(\frac{L}{\sqrt{2\pi k\beta}} \sum_{w_x=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{w_x^2 L^2}{2k\beta}} \right)^3 \quad (3.23)$$

L'équation (3.22) donne alors aussi la probabilité de *séparer un cycle de longueur k* du système de N particules. Il est donc possible de retrancher un cycle de longueur k de la configuration avec N particules, avec la probabilité $p_c^N(k)$, pour toute valeur de k . Il reste $N - k$ particules dans le système, dont l'on peut séparer de nouveau un cycle de longueur k' , avec la probabilité $p_c^{N-k}(k')$. On continue jusqu'au moment où il ne reste plus de particules dans le système. Une répartition en cycles, $\{m_k\}$, est ainsi réalisée avec les poids du gaz parfait.

Considérons un cycle de longueur k ainsi généré. Les k particules de ce cycle, numérotées $1, 2, \dots, k$, se comportent comme une particule à une température plus basse $1/k\beta$ (voir figure 1.2 page 14). De l'équation (3.23) on obtient une probabilité proportionnelle à $\exp[-w_x^2 L^2 / 2k\beta]$ que le chemin de cette "particule" sorte effectivement w_x fois de la boîte de longueur L sur la direction d'axe x au cours du "temps" $k\beta$. Généralisé à trois dimensions, $\mathbf{w} = \mathbf{w}_1 + \mathbf{w}_2 + \dots + \mathbf{w}_k$ donne une contrainte aux vecteurs des conditions aux limites de ces k particules.

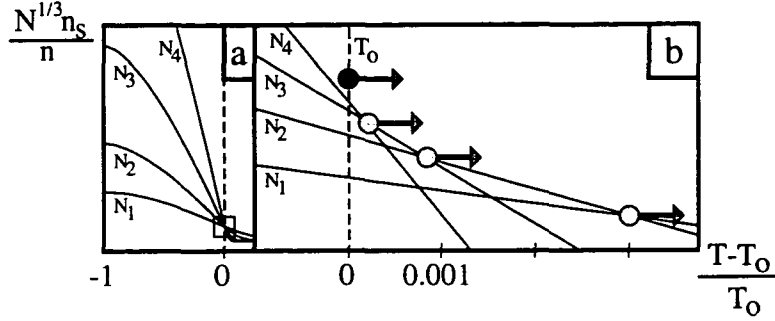


FIG. 3.4 – Fraction superfluide mise à échelle $N_i^{1/3} n_s / n$ pour un gaz idéal pour différents nombres de particules ($N_{i+1} = 8N_i$). A gauche (a) on voit que le point de croisement détermine la température critique du système à la limite thermodynamique. A droite (b) la partie autour de $t = (T - T_0) / T_0$ est agrandie. Il faut extrapoler les points de croisements dans la limite $N_i \rightarrow \infty$ à cause des corrections aux lois d'échelles. Les flèches montrent schématiquement comment les interactions déplacent les points d'intersections dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$.

Maintenant, nous pouvons calculer les positions de ces k particules sur ce cycle. On commence par $\mathbf{r}_1$ de la première particule, qui est uniformément distribué entre 0 et L dans les trois dimensions. Les positions des $k - 1$ particules suivantes sont choisies récursivement par la construction de Lévy [50], qui est basée sur :

$$\langle \mathbf{r}_1 | e^{-\beta k H_0} | \mathbf{r}_1 + \mathbf{w}L \rangle = \int d^3 r_2 \langle \mathbf{r}_1 | e^{-\beta H_0} | \mathbf{r}_2 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | e^{-(k-1)\beta H_0} | \mathbf{r}_1 + \mathbf{w}L \rangle \quad (3.24)$$

L'intégrand peut s'interpréter comme la distribution de la position de la deuxième particule sur le cycle. Dans un système homogène comme dans un piège harmonique, cette probabilité pour $\mathbf{r}_2$ est gaussienne. Les autres particules $\mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_{k-1}$ sont distribuées de la même façon récursivement. Les contributions aux vecteurs de conditions limites $\mathcal{W}$ de k particules sur le cycle sont par suite données par : $\mathbf{w}_i L = \mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i$ pour $i = 1, 2, \dots, k - 1$ et $\mathbf{w}_k L = \mathbf{w}L + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_k$.

Nous avons ainsi construit une configuration à N particules dans une boîte de taille L avec le poids du gaz parfait *sans utiliser les chaînes de Markov*. Le nombre d'enroulement $\mathbf{W} = \sum_{i=1}^N \mathbf{w}_i$ détermine la fraction superfluide de cette configuration par la formule de réponse linéaire, équation (3.12) et la corrélation entre cette fraction superfluide et les interactions, X_N , permet de déterminer les corrections δn_s dans un système fini directement dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$.

Nous avons alors calculé numériquement X_N pour des systèmes de tailles différentes. Grâce à notre algorithme permettant de créer des configurations du gaz parfait et notre connaissance détaillée du système sans interaction³ nous avons été capables de mener notre calcul jusqu'à $N \sim 20\,000$ particules.

3. Il est possible de calculer directement la fonction de distribution du nombre d'enroulement du gaz parfait, qui entre dans X_N , en utilisant les résultats du premier chapitre.

Encadré 7 : Loi d'échelle ("finite-size scaling")

De nombreux calculs sur les systèmes finis sont extrapolés à la limite thermodynamique à l'aide d'hypothèses de loi d'échelle [51] : le rapport entre une quantité physique dans un système de longueur L finie avec celle pour un système infini est une fonction qui ne dépend que du rapport L/ξ_∞ [52]. ξ_∞ est la longueur de corrélation à la limite thermodynamique, $\xi_\infty(t) \sim t^{-\nu}$ pour $t \equiv (T - T_c)/T_c \rightarrow 0$.

Regardons le rapport entre la fraction superfluide du système fini (L) et sa valeur à la limite thermodynamique (∞) :

$$\frac{n_s^L(t)}{n_s^\infty(t)} = f\left(\frac{L}{\xi_\infty(t)}\right) \quad (\text{B7-1})$$

Deux limites de la fonction $f(x)$ sont *a priori* connues [53] :

(i) La limite thermodynamique, $\xi_\infty(t) \ll L \rightarrow \infty$ pour t fixé :

$$n_s^L(t) \rightarrow n_s^\infty(t) \quad \text{ou} \quad \lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 1$$

(ii) En fixant la taille L du système, $n_s^L(t)$ reste toujours une fonction *analytique*, même au point critique du système infini $t = 0$, où $L \ll \xi_\infty(t) \rightarrow \infty$. Car $n_s^L(t=0)$ doit rester analytique, $f(L/\xi_\infty(t)) = f(Lt^\nu) \sim Lt^\nu$ doit compenser le comportement non-analytique de $n_s^\infty(t) \sim t^\nu$ pour $t \rightarrow 0$. La fonction $f(x)$ se comporte donc comme $f(x) \sim x^{-\nu/\nu}$ pour $x \rightarrow 0$. En exigeant que toutes les dérivées doivent aussi rester finies pour un *système fini*, le comportement de n_s^L/n peut s'écrire sous la forme

$$\frac{n_s^L(t)}{n} = L^{-\nu/\nu} Q(tL^{1/\nu}), \quad t \rightarrow 0 \quad (\text{B7-2})$$

où $Q(0)$ est une constante.

Le rapport ν/ν obtenu dans les études expérimentales, par calcul de Monte-Carlo ou *via* le groupe de renormalisation est en accord avec la relation de Josephon $\nu = (D - 2)\nu$ [54] et suggère

$$Ln_s/n \sim N^{1/3} n_s/n \quad (\text{B7-3})$$

comme "quantité mise à échelle" à trois dimensions. Les courbes représentant la fraction superfluide mise à échelle $N^{1/3} n_s/n$ en fonction de t pour des systèmes de tailles différentes, se croisent en un point précis. Ce point détermine la température critique du système à la limite thermodynamique.

Corrections à la loi d'échelle

La loi d'échelle repose sur l'hypothèse qu'au voisinage de la température critique la longueur de corrélation ξ_∞ devient la seule longueur pertinente. Mais en général, pour un système fini, plusieurs échelles de longueurs interviennent si bien que la forme la plus générale pour n_s/n s'écrit :

$$L^{\nu/\nu} \frac{n_s}{n} = Q_2(L^{1/\nu} t, \zeta_1 L^{-\Delta_1/\nu}, \zeta_2 L^{-\Delta_2/\nu}, \dots) \quad (\text{B7-4})$$

Ces corrections à la loi d'échelle font en sorte que la fraction superfluide mise à échelle ne se croise au même point que dans la limite $L \rightarrow \infty$ (voir figure 3.4).

3.2.5 Taille finie et résultat de $\Delta T_c/T_c$

Dans un système de taille finie, il faut distinguer deux régimes (voir encadré 7, page 64). Si la longueur $L = (N/n)^{1/3}$ du système est supérieure à la longueur de corrélation ξ_∞ du système de taille infinie ($L \gg \xi_\infty$), le système se comporte comme dans la limite thermodynamique. La transition de phase se montre très précisément et la température critique peut être mesurée directement.

En revanche, dans la limite $L \ll \xi_\infty$, le système ne se comporte pas encore comme un système macroscopique. A cause des effets de taille finie, la température critique n'est pas définie précisément et il est inévitable d'utiliser la loi d'échelle pour l'extraire.

Les calculs du chapitre précédent permettent d'estimer la longueur de corrélation ξ_∞ dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$: le domaine critique dans l'espace des impulsions est déterminée par $k_c \sim a/\lambda^2$ [II]. Dans la région critique $k \ll k_c$, les interactions modifient le spectre au point de transition $G^{-1}(k, 0) \simeq -k_c^\eta k^{2-\eta}/2m$ avec $\eta > 0$ [55], ce qui introduit des dépendances non-analytiques. Ce comportement critique ne peut se développer que si $L \gg 2\pi/k_c \sim \lambda^2/a$. Pour $L \gg \lambda^2/a$ le système se comporte alors macroscopiquement.

Grâce à l'échantillonnage corrélé, nous pouvons mener le calcul de Monte-Carlo directement dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$, où la taille L du système reste toujours très petite devant la longueur de corrélation $\xi_\infty \propto \lambda^2/a$. Dans un régime $L \ll \xi_\infty$, toutes les fonctions thermodynamiques sont analytiques et par conséquent développables [45]. En revanche il est nécessaire d'utiliser la loi d'échelle pour déterminer la température critique.

Grâce à notre connaissance détaillée du gaz parfait, nous avons déterminé précisément le point T_s d'intersection de $N_i^{1/3} n_s/n$ pour deux systèmes du gaz parfait, mais avec des tailles différentes $N_2 = 8N_1$ (les points gris sur la figure 3.4b). Ensuite, nous avons calculé pour chaque système le coefficient X_{N_i} , qui donne le changement de la fraction superfluide δn_s dans la limite $an^{1/3}$. Les changements $N_i^{1/3} \delta n_s/n$ pour N_1 et N_2 peuvent être quantitativement reliés à un changement ΔT_s de la température du point d'intersection (indiqué schématiquement par des flèches sur la figure 3.4). Comme δn_s , la modification ΔT_s sera aussi linéaire en $an^{1/3}$.

Dans la limite $N_1 \rightarrow \infty$, $\Delta T_s/T_s$ extrapole le changement de température critique $(T_c - T_0)/T_0$ par rapport au gaz parfait. Toutes les corrections à la loi d'échelle sont prises en compte par cette construction.

Indépendamment du chapitre précédent, nous retrouvons la linéarité en $an^{1/3}$ de $\Delta T_c/T_c$ uniquement comme conséquence de la loi d'échelle, sans avoir mené de calcul numérique.

Grâce au calcul numérique du préfacteur $\Delta T_s/(T_s an^{1/3})$, réporté sur la figure 3.5 pour des systèmes de tailles N_1 différentes, nous avons montré numériquement, que celui-ci est fini et non nul.

Contrairement à un calcul antérieur [10], nous avons obtenu [III]

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = (2.3 \pm 0.25) an^{1/3} \quad (3.25)$$

comme modification de la température critique dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$.

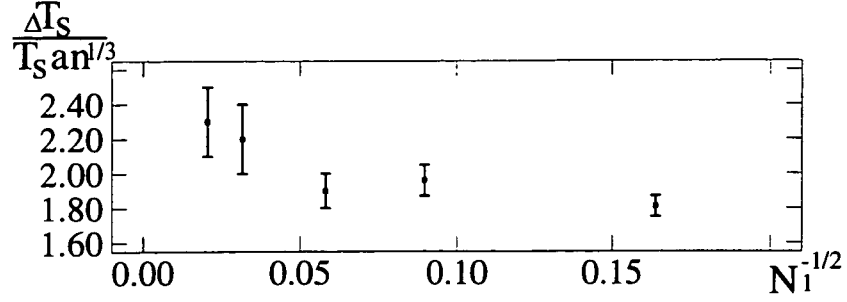


FIG. 3.5 – Préfacteur de la modification de la température des points d'intersection $\Delta T_s/T_s$ linéaire en $an^{1/3}$ pour des systèmes de tailles $(N_1, N_2) = (37, 296), (125, 1000), (296, 2368), (1000, 8000), (2368, 18944)$ (de droite à gauche). Sur la figure 3.4 les points gris correspondent aux points d'intersection $(T_s, N_i^{1/3} n_s/n)$ du gaz parfait et les flèches grises aux directions de la modification $(\Delta T_s/T_s, N_i^{1/3} \delta n_s/n)$. Dans la limite $N_1 \rightarrow \infty$, $\Delta T_s/(T_s an^{1/3})$ donne la pente en $an^{1/3}$ de la modification de la température critique $\Delta T_c/T_c$, indiquée par le point et la flèche noirs sur la figure 3.4.

3.3 Annexe

3.3.1 Calcul de g_2 avec l'approximation primitive

Pour calculer g_2 on cherche une solution exacte du problème à deux particules discernables

$$\varrho_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2; \beta) = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | e^{-\beta H_2} | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2 \rangle \quad (3.26)$$

avec l'hamiltonien à deux corps :

$$H_2 = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V(r_{12}) \quad (3.27)$$

Si le potentiel d'interaction $V(r_{12})$ ne dépend que de la distance relative entre les particules, $r_{12} \equiv |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, le problème peut être séparé en mouvement du centre de masse $\mathbf{R}_{cm} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ et en coordonnée relative $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Par suite on n'étudie que la partie non-triviale du mouvement relatif

$$H_2^{rel} = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \quad (3.28)$$

où $\mu = m/2$ est la masse réduite. Ce problème peut être résolu en utilisant la formule de convolution

$$\varrho_2^{rel}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta) = \int d\mathbf{r}^2 \dots \int d\mathbf{r}^M \varrho_2^{rel}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}^M, \tau) \dots \varrho_2^{rel}(\mathbf{r}^2; \mathbf{r}, \tau) \quad (3.29)$$

Pour $\tau = \beta/M \rightarrow 0$ on peut chercher une approximation à haute température pour $\varrho_2^{rel}(\mathbf{r}^{n+1}; \mathbf{r}^n, \tau)$. L'approximation primitive ("primitive approximation") néglige l'effet du commutateur entre l'énergie cinétique $K = p^2/2\mu$ et le potentiel $V(r)$:

$$e^{-\tau(K+V)+\frac{\tau^2}{2}[K, V]} \simeq e^{-\tau K} e^{-\tau V} \quad (3.30)$$

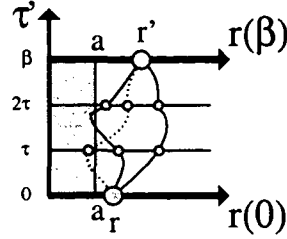


FIG. 3.6 – Le problème de sphères dures en coordonnée relative. Tous les chemins qui entrent dans la région de la sphère ($r(\tau') \leq a$) sont interdits. Par discrétisation des chemins avec un pas τ , seulement le chemin en pointillés sera exclu dans l'approximation primitive. L'effet des interactions est donc sous-estimé.

on peut écrire dans la limite $\tau \rightarrow 0$

$$\varrho_2^{rel}(\mathbf{r}^{n+1}, \mathbf{r}^n; \tau) \simeq \langle \mathbf{r}^{n+1} | e^{-\tau \frac{p^2}{2\mu}} e^{-\tau V(r)} | \mathbf{r}^n \rangle \propto e^{-\frac{(\mathbf{r}^{n+1} - \mathbf{r}^n)^2}{2\hbar^2 \tau / \mu} - \tau V(r^n)} \quad (3.31)$$

avec $\mathbf{r}^1 \equiv \mathbf{r}$ et $\mathbf{r}^{M+1} \equiv \mathbf{r}'$.

Dans la suite on se restreint au cas d'un potentiel de sphères dures avec un diamètre a :

$$V(r) = \begin{cases} \infty & : r \leq a \\ 0 & : r > a \end{cases} \quad (3.32)$$

Pour le mouvement relatif, $V(r)$ présente un mur infini en $r = a$. Tous les chemins de la particule de masse réduite entrant dans le région $r \leq a$ sont exclus (le poids statistique est zéro), le poids statistique des autres chemins n'est pas affecté et est identique au poids statistique d'une particule libre.

En utilisant (3.29) on choisit des configurations $(\mathbf{r}^2, \dots, \mathbf{r}^M)$ pour $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$ donnés, correspondant à une discrétisation du chemin entre $\mathbf{r}$ à $\tau' = 0$ et $\mathbf{r}'$ à $\tau' = \beta$. Le pas de discrétisation est $\tau = \beta/M$. L'approximation primitive (3.31) élimine tous les chemins ayant au moins un point de discrétisation $\mathbf{r}^n$ dans la région interdite ($r^n \leq a$). Si τ est choisi trop grand, beaucoup de chemins, qui entrent dans la région interdite, ne seront pas éliminés parce que les points de discrétisation $\mathbf{r}^n$ restent au-dehors de cette région: l'effet des interactions va être largement sous-estimé (voire figure 3.6). Les fluctuations du chemin entre deux points de discrétisation $\delta r^2 \equiv \langle (\mathbf{r}^{n+1} - \mathbf{r}^n)^2 \rangle$ correspondent aux fluctuations thermiques $\delta r^2 \sim \hbar^2 \tau / m$. Pour la validité de l'approximation primitive il faut exiger $\delta r^2 \ll a^2$, soit

$$\tau \ll \frac{ma^2}{\hbar^2} \quad (3.33)$$

Dans un gaz dilué on est typiquement intéressé par un calcul autour de la température critique de la condensation de Bose-Einstein $n\lambda^3 \sim 1$ ou $\beta \sim mn^{-2/3}/\hbar^2$. Avec $\tau = \beta/M$, l'équation (3.33) donne une estimation pour le nombre de discrétisation M nécessaire pour la validité de l'approximation primitive

$$M \gg (na^3)^{-2/3} = (an^{1/3})^{-2} \quad (3.34)$$

Pour des valeurs correspondant aux expériences sur les alcalins, $an^{1/3} \lesssim 0.01$ et l'ordre de grandeur $M \sim 10^4$ est typique pour un calcul pour un gaz dilué. Par conséquent un calcul pour plusieurs particules N , qui utilise directement l'approximation primitive est impraticable et sous-estime largement les effets des interactions [56].

Néanmoins on peut utiliser l'approximation primitive pour calculer numériquement la matrice densité à deux corps à une température τ . Il suffit de la calculer une fois pour faire un tableau de la fonction de corrélation de deux particules, $g_2(\tau)$, équation (3.8),

$$g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2; \tau) = \frac{\varrho_2^{rel}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2, \tau)}{\varrho_1^{rel}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1; \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2; \tau)} \quad (3.35)$$

où ϱ_1^{rel} correspond à l'opérateur densité pour le hamiltonien relatif (3.27) avec $V = 0$. Le problème à N corps sera ensuite traité dans l'approximation en produit de paires (3.6).

3.3.2 Calcul analytique de g_2

Pour un problème à deux corps on peut aussi développer la matrice densité en fonctions propres de l'hamiltonien (3.28) connues pour le potentiel de sphère dure [57, 58, 36]. Puisque le moment cinétique est conservé, ϱ_2^{rel} s'écrit en fonction des moments angulaires $Y_{lm}(\theta, \phi)$

$$\varrho_2^{rel}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=+l} \rho_l(r; r', \beta) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (3.36)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \rho_l(r; r', \beta) P_l(\cos \theta) \quad (3.37)$$

Pour obtenir ρ_l , on cherche les solutions de l'équation de Schrödinger pour des énergies $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ (pour des sphères dures il n'existe pas d'état lié) :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_{kl}(r) = E(k) R_{kl}(r) \quad (3.38)$$

Elles peuvent être construites avec les fonctions propres pour $V = 0$

$$R_{kl}(r) \propto j_l(kr) + \alpha_{kl} n_l(kr)$$

où $j_l(x)$ [$n_l(x)$] correspond au fonction de Bessel [Neumann] sphériques. Le potentiel de sphère dure entre comme condition aux limites $R_{kl}(r = a) \equiv 0$, qui détermine α_l . Bien entendu, $R_{kl}(r \leq a) \equiv 0$ à l'intérieur de la sphère dure ($r \leq a$).

On obtient en dehors du potentiel

$$R_{kl}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k \cos \delta_l * [j_l(kr) + \tan \delta_l n_l(kr)], \quad r \geq a \quad (3.39)$$

avec les déphasages

$$\tan \delta_l(k) = -\frac{j_l(ka)}{n_l(ka)} \quad (3.40)$$

La contribution en onde l à la matrice densité à deux corps s'écrit :

$$\rho_l(r, r'; \beta) = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dk e^{-\beta E(k)} R_{kl}(r) R_{kl}(r') \quad (3.41)$$

On continue le calcul analytique pour la contribution en onde s ($l = 0$), où le produit des fonctions propres se simplifie

$$R_{k0}(r) R_{k0}(r') = \frac{2}{\pi r r'} \sin[k(r - a)] \sin[k(r' - a)] \quad (3.42)$$

Après intégration sur k on obtient :

$$\rho_0(r, r', \beta) = \frac{1}{8\pi^{3/2}} \left(\frac{\hbar^2 \beta}{2\mu} \right)^{-1/2} \frac{1}{r r'} \left\{ \exp \left[-\frac{(r - r')^2}{2\hbar^2 \beta / \mu} \right] - \exp \left[-\frac{(r + r' - 2a)^2}{2\hbar^2 \beta / \mu} \right] \right\} \quad (3.43)$$

Pour les températures basses $T \ll \hbar^2 / ma^2$, les ondes supérieures ($l > 0$) sont négligeables au dehors du potentiel ($r, r' > a$). On obtient donc :

$$\varrho_2^{rel}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta) = \rho_0(r, r'; \beta) - \rho_0^{a=0}(r, r'; \beta) + \sum_{l=0}^{\infty} \rho_l^{a=0}(r, r'; \beta) P_l(\cos \theta) \quad (3.44)$$

où $\rho_l^{a=0}$ correspond à ρ_l avec $a = 0$. La sommation sur tous les moments angulaires du problème libre reconstruira la matrice densité à un corps

$$\begin{aligned} \varrho_1^{rel}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) &= \sum_l \rho_l^{a=0}(r, r'; \beta) P_l(\cos \theta) \\ &= \left(\frac{\mu}{2\pi \hbar^2 \beta} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta}{2\hbar^2 \beta / \mu} \right] \end{aligned} \quad (3.45)$$

On obtient ainsi g_2 pour $r, r' > a$ (sinon c'est 0) :

$$g_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta) = \frac{\rho_0(r, r'; \beta) - \rho_0^{a=0}(r, r'; \beta)}{\varrho_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta)} + 1 \quad (3.46)$$

ou

$$g_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta) = 1 + \frac{\hbar^2 \beta}{m} \frac{1}{r r'} \left\{ 1 - e^{-\frac{a^2 - a(r+r')}{\hbar^2 \beta / m}} \right\} e^{-\frac{r r' (1 + \cos \theta)}{2\hbar^2 \beta / m}} \quad (3.47)$$

Le développement de ce résultat (3.47) au deuxième ordre en a/λ correspond également à une solution pour une interaction locale ($V(r) \propto \delta(r)$) où a est la longueur du diffusion.

Numériquement, on peut inclure les solutions des ondes supérieures ($l > 0$), qui contribuent au moins à l'ordre $(a/\lambda)^{2l+1}$. Puisque $g_2 \rightarrow 1$ pour $r, r' \rightarrow \infty$, il convient aussi de calculer $\rho_l - \rho_l^{a=0}$ pour améliorer la convergence à longue distance ($r, r' \rightarrow \infty$).

Notons que le calcul analytique de g_2 dans l'approximation des ondes s , représente aussi un calcul de l'opérateur d'Ursell U_2 dans l'espace des positions (voir équation (3.15)). Après une transformation de Fourier le développement en a/λ donne le résultat de la théorie des perturbations (voir annexe 2.6) dans le cas d'un spectre continu ($L \rightarrow \infty$).

3.3.3 Validité de l'approximation en produit de paires

Pour un système classique avec un potentiel d'interactions à deux corps, l'approximation en produit de paires, équation (3.6), est déjà exacte. Les corrections sont liées uniquement aux effets quantiques. Ces effets deviennent négligeables pour une densité dans l'espace des phases très petite, $n\lambda^3 \ll 1$. Cette approximation est donc valide pour un nombre de discrétisations M qui dilue suffisamment le système dans l'espace des phases $n(\lambda M^{-1/2})^3 \ll 1$, soit

$$M \gg T_0/T$$

Regardons l'approximation en produit de paires quantitativement pour un système à trois particules discernables :

$$\rho_D(\mathbf{R}; \mathbf{R}', \tau) = \prod_{i=1}^3 \varrho_1(\mathbf{r}_i; \mathbf{r}'_i, \tau) \prod_{j < k} g_2(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k; \mathbf{r}'_j, \mathbf{r}'_k, \tau) \quad (3.48)$$

Pour les sphères dures, les chemins qui entrent dans une hyper-sphère $r_{12}(\tau') \leq a$, $r_{13}(\tau') \leq a$, $r_{23}(\tau') \leq a$ pour $0 \leq \tau' \leq \tau$ donnent les premières corrections à l'équation (3.48). Mais ces chemins deviennent très improbables pour un gaz dilué ($an^{1/3} \ll 1$), si la température est assez élevée pour que les chemins fluctuent moins que la distance moyenne entre deux particules $n^{-1/3}$:

$$\delta r^2 \sim \hbar^2 \tau / m \ll n^{-2/3} \quad (3.49)$$

soit

$$M \gg \frac{\hbar^2 \beta n^{2/3}}{m} \sim \frac{T_0}{T} \quad (3.50)$$

L'approche d'Ursell dans le chapitre précédent, permet d'estimer plus précisément la validité de l'approximation en produit de paires. Les corrections à l'ansatz (3.48) pour le problème à trois corps sont uniquement dans le calcul de l'opérateur U_3 (voire encadré 3, page 29).

En théorie de perturbations (page 53), on peut estimer son ordre de grandeur à $a^2 \hbar^4 \tau^2 / m^2 V^2$. Pour la valeur moyenne d'un opérateur à un corps, les corrections dans le système de N particules seront alors d'ordre

$$(N-1)(N-2)a^2 \hbar^4 \tau^2 / m^2 V^2 \sim a^2 \lambda^4 n^2 / M^2$$

Dans le cas d'un gaz dilué on obtient alors pour le nombre des tranches une formule plus précise que (3.50), soit

$$M \gg a \lambda^2 n \sim an^{1/3} \frac{T_0}{T} \quad (3.51)$$

Effectivement, le calcul présenté dans le chapitre suivant sur des sphères dures bosoniques dans un piège harmonique [IV] a montré le comportement en τ^2 dans l'extrapolation numérique de la fraction condensée à $\tau \rightarrow 0$, en utilisant l'approximation en produit des paires.

Pour un système dilué ($na^3 \ll 1$), l'approximation en produit de paires remplace alors l'approximation à haute température (comme l'approximation primitive) avec une approximation à faible densité dans l'espace des phases.

Chapitre 4

Calcul dans un piège harmonique

L'observation de la condensation de Bose-Einstein dans les vapeurs atomiques [14, 15, 16] a été la démonstration expérimentale la plus proche de la prédiction théorique d'Einstein 1925 pour un gaz parfait [1]. La description quantitative de ces expériences, à partir des paramètres microscopiques, a relevé un défi pour la théorie à N corps quantique et a suscité un intérêt général (pour une revue récente voir [30]).

Dans ce chapitre, je présente mes travaux *antérieurs* à ceux des chapitres précédents. Ceux-ci sont plus tournés vers la situation expérimental concrète : le potentiel extérieur du piège, le nombre fini des particules et les effets des interactions dans une description de champ moyen jouent un rôle majeur dans ces systèmes. Nous avons mené des calculs de Monte-Carlo quantique pour extraire les effets des interactions au-delà d'une description de champ moyen [IV]. Un deuxième intérêt de ces calculs a été d'étayer les interprétations de données expérimentales avec un calcul *a priori* exact, à titre d'exemple la détermination de la température avec la densité spatiale du nuage de particules dans le piège [IV], ou l'interprétation de la mesure de l'énergie d'interaction comme mesure de la fonction de corrélation à deux corps [V]. Partant des premiers principes je m'adresse aussi à la question du condensat et de "l'ordre non-diagonal à longue portée" dans un système inhomogène et fini (voir [59] pour une démonstration expérimentale).

Le potentiel du piège $V_{\text{ext}}(r)$ est en général bien décrit par un potentiel harmonique¹ de fréquence ω

$$V_{\text{ext}}(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad (4.1)$$

La largeur de l'état fondamental de l'oscillateur

$$a_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \quad (4.2)$$

1. Pour simplifier je considère un potentiel harmonique isotrope et néglige donc les effets d'anisotropie du piège.

est une nouvelle échelle de longueur caractéristique de l'influence de l'inhomogénéité. Le système ne peut être considéré comme localement homogène que si toutes les autres longueurs caractéristiques (par exemple la longueur d'onde thermique λ) sont petites devant a_0 .

Nous nous sommes intéressés aux effets des interactions sur la transition de Bose-Einstein. La transition de phase dans ce système inhomogène se produit (en première approximation) quand la densité maximale $n_{max}\lambda^3$ atteint la valeur critique du gaz homogène. Puisque la densité est maximale au centre du piège, les résultats des chapitres précédents prédisent au point critique la valeur

$$n_c(r=0)\lambda^3 = \zeta(3/2) \left(1 - \frac{3c}{2} a[n_c(r=0)]^{(1/3)} \right) \quad (4.3)$$

avec $c = 2.3 \pm 0.25$. Dans les conditions expérimentales on trouve $a[n_c(r=0)]^{1/3} \lesssim 0.02$ [30]. On s'attend à une déviation relative par rapport au cas du gaz parfait de $[\zeta(3/2) - n_c(r=0)\lambda^3]/\zeta(3/2) \lesssim 10\%$. Des mesures de la densité au centre du piège et de la température avec une telle précision n'ont pas encore été réalisées.

Enfin, dans les expériences, qui sont menées avec $N \sim 10^3 - 10^7$ particules, il faut aussi considérer les effets de taille finie. Ces derniers induisent des déviations par rapport à une approximation de densité locale², parce que les fluctuations de la densité ne sont pas négligeables.

Au lieu de regarder la densité au centre dans le gaz piégé, il est plus commode de s'intéresser à des quantités thermodynamiques à N (nombre des particules) et ω (fréquence du piège) fixés. Pour regarder les effets des interactions sur la fraction condensée autour de la température critique, nous avons procédé à des calculs de Monte-Carlo quantique [IV]. On a été capable de mener ce calcul directement avec des paramètres expérimentaux, $N = 10\,000$ particules en interaction dans un piège harmonique [60]. Le premier effet des interactions est un abaissement de la fraction condensée par rapport à la prédiction du gaz parfait à température fixée. Cet effet peut être expliqué par un calcul de champ moyen [61]. Le calcul Monte-Carlo quantique a permis de tester très précisément les prédictions de l'approximation de Hartree-Fock et de regarder les effets des interactions, qui sont au dessus d'une théorie de champs moyen, rapportée dans [IV]. Ces corrections augmentent la fraction condensée, ce qui est qualitativement en accord avec les prédictions dans un système homogène.

Dans l'article [V] nous avons aussi regardé la fonction de corrélation de la densité dans un gaz piégé. Autour de la température critique de condensation $T \sim T_c$, la fonction de corrélation est bien décrite par la théorie de Hartree-Fock. A $T = 0$, la théorie de Bogoliubov prédit un comportement différent pour des corrélations de paires à longues distances, dues aux contributions des modes collectifs [62]. Nous avons généralisé ce résultat aux températures finies. Nous avons obtenu un bon accord quantitatif entre des résultats de Monte-Carlo et la théorie de Bogoliubov à basse température $T \lesssim 0.25 T_c$. Je ne reviendrai pas sur ce calcul, qui est présenté dans [V].

A la fin de ce chapitre, j'aborderai la question d'un condensat et de la fraction condensée dans un système inhomogène avec des interactions. Dans les expériences, la fraction condensée est habituellement déterminée avec la forme de la densité spatiale des atomes. En dessous de la température critique la

2. L'approximation de densité locale devient juste dans la limite thermodynamique.

densité se décompose en deux parties. On est obligé d'utiliser des résultats théoriques pour séparer la partie "plate" correspondant aux atomes thermiques (avec une distribution thermique) et la partie dense au centre du piège, qui est décrite par l'équation de Gross-Pitaevskii pour le condensat. On ne mesure donc pas directement la fraction condensée.

Sur un plan théorique, on utilise les cohérences atomiques pour distinguer le condensat de la partie thermique [18, 40]. On regarde la matrice densité à un corps et on la décompose sur ses fonctions propres ψ_{nlm} :

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) = \sum_{k,l,m} n_{klm} \psi_{klm}^*(\mathbf{r}') \psi_{klm}(\mathbf{r}) \quad (4.4)$$

En dessous de la transition de Bose-Einstein, la valeur propre n_{000} devient macroscopique et la fonction d'onde du condensat est donnée par Ψ_{000} .

Dans un système homogène, on connaît les fonctions propres de $\rho^{(1)}$, qu'on identifie aux états propres de l'opérateur d'impulsion³. La fraction condensée correspond au nombre d'occupation de l'état d'impulsion nulle.

En revanche, dans un système inhomogène, les fonctions propres de $\rho^{(1)}$ ne sont en général pas connues. Pour déterminer la fraction condensée il faut alors diagonaliser explicitement la matrice densité à un corps. La plus grande valeur propre donne ensuite le nombre des particules condensées et la fonction d'onde du condensat.

Je présenterai un calcul de Monte-Carlo quantique avec des paramètres expérimentaux pour déterminer ces éléments non-diagonaux. Grâce à l'invariance par rotation dans un piège isotrope, il suffit de regarder une matrice continue à une dimension $\rho^{(1)}(|\mathbf{r}|; |\mathbf{r}'|) \propto \int d\Omega \int d\Omega' \rho^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ au lieu d'une matrice continue à trois dimensions $\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. La fraction condensée et la fonction d'onde du condensat sont ensuite obtenues par diagonalisation. Etant donné la précision du calcul, le nombre de particules condensées se distingue clairement du résultat du gaz parfait en accord avec les prédictions de Hartree-Fock.

On a trouvé que le nombre de particules condensées correspond aussi au plus long cycle d'échange occupé au cours de la simulation. Ce résultat peut être considéré comme une démonstration numérique : pour un gaz dilué on retrouve la relation entre cycles d'échanges et nombre des particules condensées du gaz parfait (voir chapitre 1, page 18). Pour un calcul de Monte-Carlo quantique, cette relation est particulièrement intéressante, puisqu'elle permet d'obtenir la fraction condensée sans calculer les éléments non-diagonaux de la matrice densité. La fonction d'onde du condensat est de même obtenue par diagonalisation de $\rho^{(1)}$. Elle est bien décrite par l'équation Gross-Pitaevskii.

4.1 Gaz parfait

Pour des particules classiques, la densité $n(r)$ du gaz parfait est une distribution gaussienne :

$$n(r) \propto e^{-\beta V_{\text{ext}}(r)} \quad (4.5)$$

Cette distribution de Boltzmann donne un rayon typique de l'extension du gaz thermique

$$R = \sqrt{\frac{T}{m\omega^2}} \quad (4.6)$$

3. Invariance par translation

A température fixée, on trouve une extension $R \propto \omega^{-1}$. Dans la “limite thermodynamique”, on augmente le nombre des particules $N \rightarrow \infty$ et en même temps on ouvre le piège $\omega \rightarrow 0$ de telle sorte que la densité moyenne $N\omega^3 \propto N/R^3$ reste constante [63]. Dans cette limite, l’influence de la discrétisation des niveaux d’énergie disparaît : $\beta\hbar\omega \sim N^{-1/3} \rightarrow 0$. La densité du gaz parfait prend alors la forme semi-classique qui correspond à l’approximation de densité locale :

$$n(r)\lambda^3 = g_{3/2} \left(e^{-\beta[V_{\text{ext}}(r)-\mu]} \right) \quad (4.7)$$

Au-dessus de la transition, le gaz piégé se comporte localement comme dans un système homogène [64]. Au centre du piège ($r = 0$) la densité est maximale, et la condensation de Bose se produit à $\mu = 0$ pour une densité centrale :

$$n_c(r=0)\lambda^3 = \zeta(3/2) \quad (4.8)$$

La température critique est identique à celle du système homogène, dont la densité est égale à la densité centrale du piège $n(r=0)$.

Regardons encore l’approximation semi-classique : la longueur de l’oscillateur harmonique $a_0 = (\hbar/m\omega)^{1/2}$ caractérise l’influence de l’inhomogénéité. Le système peut alors être regardé comme localement homogène si $\lambda \ll a_0$. Pour un système fini avec N particules les corrections à l’approximation de densité locale, équation (4.7), et en particulier à la densité critique (4.8) varient en $\lambda/a_0 \sim N^{-1/6}$.

Néanmoins, la densité centrale n’est pas un paramètre très commode dans les expériences d’atomes froids. Il est plus naturel de regarder le nombre total de particules dans le piège :

$$N = \int d^3r n(r) = \left(\frac{T}{\hbar\omega} \right)^3 g_3(z) \quad (4.9)$$

A nombre de particules N et fréquence de piège ω fixés, la température critique T_0 prend la forme suivante [65] :

$$T_0|_{\omega, N} = \hbar\omega \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3} \quad (4.10)$$

avec $\zeta(3) \simeq 1.202$.

En dessous de la température critique ($T < T_0$), l’état fondamental du piège est macroscopiquement occupé, la densité développe un pic autour de $r = 0$. Pour un gaz piégé, le phénomène de condensation se produit dans l’espace des positions au lieu de l’espace des impulsions pour le cas du système homogène.

Dans les expériences avec des alcalins, on a $N \sim 10^3 - 10^7$, et les effets de taille finie sont en général non négligeables. Les propriétés du gaz parfait dans un piège dans des ensembles différents sont largement discutés dans la littérature récente [66, 67, 68].

Notons ici que toutes les propriétés dans les ensembles grand-canoniques et canoniques peuvent être calculées avec les résultats du premier chapitre. Les valeurs propres de l’hamiltonien H_0

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{ext}}(r) \quad (4.11)$$

à trois dimensions s'écrivent $E_{n_x, n_y, n_z} = (n_x + n_y + n_z + 3/2) \hbar\omega$ avec $n_i = 0, 1, 2, \dots$. Le poids s_k d'un cycle de longueur k (voir équation (1.10) page 14) est alors donné par

$$s_k = \text{Tr} \{ e^{-k\beta H_0} \} = \frac{e^{-3\beta\hbar\omega/2}}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega})^3} \quad (4.12)$$

L'équation (1.13) (page 14) et l'équation (1.23) (page 17) permettent de calculer directement la fonction de partition dans les ensembles grand-canonique Z_{GC} et canonique Z_N .

4.2 Gaz piégé en interaction

Pour tenir compte des interactions dans de tels systèmes, les approches de type champ moyen ont eu un succès extraordinaire pour beaucoup de propriétés statiques et dynamiques des gaz piégés [30].

À $T = 0$, la fonction d'onde du condensat $\Psi_0(r)$ est déterminée par l'équation de Gross-Pitaevskii [69, 70] :

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(r) + gN_0 |\Psi_0(r)|^2 \right) \Psi_0 = \mu \Psi_0 \quad (4.13)$$

où le potentiel chimique μ détermine le nombre de particules dans le condensat N_0 et Ψ_0 est normalisée par $\int d^3r |\Psi_0(r)|^2 = 1$. La constante de couplage $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ fait intervenir la longueur de diffusion $a/a_0 \sim 10^{-3} - 10^{-2}$. Au voisinage de $T = 0$ on peut généraliser la théorie de Bogoliubov [71] pour un système inhomogène. Cette théorie inclut des excitations collectives aux énergies très basses. Pour des excitations à haute énergie, elle se réduit à la théorie de Hartree-Fock [72].

Autour de la température critique, les contributions des modes collectifs deviennent négligeables pour les propriétés thermodynamiques, et l'approximation de Hartree-Fock est alors bien adaptée [73]. Dans cette théorie, la fonction d'onde du condensat est donnée par une équation légèrement modifiée par rapport à l'équation (4.13) :

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(r) + g[n_0(r) + 2n_T(r)] \right) \Psi_0 = \mu \Psi_0 \quad (4.14)$$

La densité du condensat $n_0(r) = N_0 |\Psi_0(r)|^2$ et la densité des particules excitées $n_T(r)$ créent un potentiel effectif pour le condensat à cause des interactions. La partie thermique $n_T(r)$ s'écrit dans l'approximation semi-classique :

$$n_T(r) \lambda^3 = g_{3/2} \left(e^{-\beta[V_{\text{ext}}(r) + 2gn(r) - \mu_T]} \right) \quad (4.15)$$

avec la densité total $n(r) = n_0(r) + n_T(r)$. Le facteur 2 dans les équations (4.14) et (4.15) montre des effets d'échanges.

Les équations de Hartree-Fock, (4.14) et (4.15), décrivent un système auto-cohérent pour $\mu = \mu_0 = \mu_T$ avec la contrainte d'un nombre de particules total $N = \int d^3r n(r)$ fixé.

Discutons leur effet sur la température critique. Pour $T > T_c$, $n_0(r) = 0$ et l'équation (4.15) doit être résolue de manière auto-cohérente, $n(r) = n_T(r)$. À la "limite thermodynamique" ($N \rightarrow \infty$, $\omega \sim N^{1/3} \rightarrow 0$), le point de transition est donné par $\mu = 2gn(r=0)$. Les équations de Hartree-Fock ne changent pas le paramètre de dégénérescence au centre du piège :

$$n_c(r=0)\lambda^3 = 2.61... \quad (4.16)$$

Par rapport au gaz parfait avec la même densité centrale $n(r=0)$, la théorie de Hartree-Fock ne prédit pas de modification de la température critique d'un gaz piégé, comme dans le cas d'un système homogène.

En revanche, à nombre de particules N et fréquence ω fixés, la température critique diminue dans la théorie de champ moyen par rapport à celle du gaz parfait [61]

$$\left. \frac{T_c - T_0}{T_0} \right|_{\omega, N = \text{const}} \simeq -1.33 \frac{a}{a_0} N^{1/6} \simeq -3.4 \frac{a}{\lambda} \quad (4.17)$$

Ce résultat reflète le fait que, pour N , ω et T fixés, un gaz avec des interactions répulsives augmente son extension spatiale par rapport à celle d'un gaz parfait. Par conséquent, la densité centrale est réduite à cause des interactions ; il faut donc diminuer la température pour arriver au même paramètre de dégénérescence au centre du piège que pour un gaz sans interactions.

Notons aussi que les équations de Hartree-Fock incluent correctement la première correction de taille finie, qui est identique à celle du gaz parfait [61].

Pour mesurer les effets de corrélations dans un gaz de Bose piégé, il paraît plus simple de comparer au point critique la valeur du paramètre de dégénérescence $n_c(r=0)\lambda^3$ au centre du piège avec la valeur du gaz parfait $\zeta(3/2)$. Néanmoins, par les effets de taille finie, le paramètre de dégénérescence ne peut pas être déterminé précisément sans utiliser la loi d'échelle. Nous avons alors proposé une méthode différente pour déterminer l'influence des corrélations.

Dans notre approche, nous avons fait un calcul de Monte-Carlo quantique avec des paramètres correspondants aux expériences faites sur du ^{87}Rb pour $N = 10\,000$ atomes dans un piège isotrope de fréquence ω et une longueur de diffusion $a = 0.0043 a_0$ ($a_0 = (\hbar/m\omega)^{1/2}$). La température critique du gaz parfait pour ces paramètres est $T_0 \simeq 20.25 \hbar\omega$. Nous avons calculé la densité spatiale et la fraction condensée et nous avons comparé *quantitativement* ces résultats avec les prédictions de la théorie de Hartree-Fock. Notre travail [IV] a montré que l'approximation de Hartree-Fock, équations (4.14) et (4.15), donne une description précise des propriétés statiques autour de la température critique ($0.7 \lesssim T/T_0$) dans ce système. Les corrections au profil de densité montrent une petite augmentation du nombre de particules condensées par rapport à la solution de Hartree-Fock. Cette augmentation de la fraction condensée est montrée sur la figure 4.1 et s'interprète par une augmentation de la température critique. Les corrections à la théorie de champ moyen ne sont pas loin de la limite de la résolution du calcul de Monte-Carlo.

Dans ce calcul, la fraction condensée est déterminée par un ajustement de la densité spatiale avec les équations (4.14) et (4.15). Le potentiel chimique du condensat μ_0 et le potentiel chimique des particules excitées μ_T sont différents. Ce nouveau paramètre a été fixé par minimisation de la différence entre les données Monte-Carlo et la fonction d'ajustement. Cette procédure a permis d'obtenir très précisément la fraction condensée.

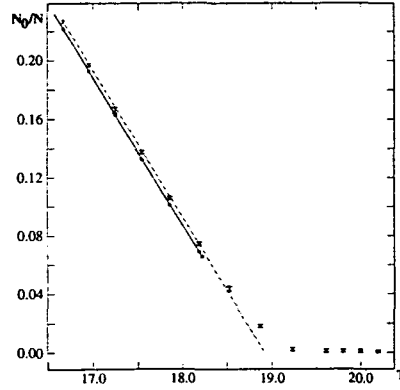


FIG. 4.1 – Fraction condensée N_0/N au voisinage de la température critique du gaz parfait $T_0 \simeq 20.25 \hbar\omega$ pour $N = 10\,000$ bosons dans un piège harmonique de fréquence ω . La longueur de diffusion est $a = 0.0043 a_0$, ($a_0 = (\hbar/m\omega)^{1/2}$), adaptée pour les expériences sur le ^{87}Rb . Le courbe la plus haute correspond à la solution d'un calcul Monte-Carlo quantique, la courbe la plus basse à l'approximation Hartree-Fock. Les effets des corrélations augmentent la température critique par rapport à la théorie du champ moyen.

Ensuite je montrerai un calcul des éléments non-diagonaux de l'opérateur densité à un corps, qui permet de calculer directement la fraction condensée. Les résultats sont cohérents avec notre ajustement, mais sont fortement limités par des erreurs statistiques beaucoup plus grandes que la précision de l'ajustement.

4.3 Fraction condensée et fonction d'onde du condensat

La condensation de Bose-Einstein dans un gaz réel est caractérisée par une valeur propre de l'opérateur densité à un corps, qui devient extensive [18]. Dans un système homogène, les fonctions propres de la matrice densité à un corps sont connues en utilisant leur invariance par translation. Le nombre de particules dans le condensat est donné par la valeur propre qui correspond à la fonction propre d'impulsion nulle.

Dans un système inhomogène, ces fonctions propres de la matrice densité à un corps ne sont en général pas connues. La matrice densité doit alors être diagonalisée. Dans un système isotrope on peut toujours utiliser l'invariance par rotation, la matrice densité s'écrit sous la forme suivante :

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) = \sum_{k,l,m} n_{klm} \psi_{klm}^*(\mathbf{r}') \psi_{klm}(\mathbf{r}) \quad (4.18)$$

Les fonctions propres $\psi_{klm}(\mathbf{r}) = R_k(r) Y_{lm}(\Omega)$ se factorisent en une composante radiale et une angulaire. Pour préserver les symétries de rotation, la fonction d'onde du condensat a très probablement un moment cinétique nul ($l = m = 0$).

$T/\hbar\omega$	fraction condensée N_0/N		
	valeur propre	QMC	Hartree-Fock
20.0	$(1.2 \pm 0.1) \times 10^{-3}$		-
16.7	0.23 ± 0.02		0.22
10.0	0.78 ± 0.03		0.77

TAB. 4.1 – Comparaison de la fraction condensée N_0/N pour $N = 10\,000$ bosons dans un piège harmonique avec une longueur de diffusion $a = 0.0043 a_0$. Dans le calcul Monte-Carlo quantique (“QMC”), nous avons comparé deux méthodes différentes. Grâce à la diagonalisation de la matrice densité à un corps, nous avons déterminé la plus grande valeur propre, qui donne directement N_0 (“valeur propre”). D’autre part, en exploitant la relation entre les longueurs de cycles d’échanges et les nombres de particules condensées, N_0 peut être estimé différemment (“cycle”). Nous avons trouvé un bon accord avec le méthode de diagonalisation. A titre de comparaison j’ai aussi donné les solutions de l’approximation de Hartree-Fock (“Hartree-Fock”).

Si on projette cette fonction sur le sous espace⁴ $l = m = 0$, on obtient

$$\int_0^{4\pi} d\Omega \int_0^{4\pi} d\Omega' Y_{00}(\Omega) \rho^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) Y_{00}(\Omega') = 4\pi \sum_k n_{k00} R_k(r') R_k(r) \quad (4.19)$$

Y_{00} étant constant, il suffit de diagonaliser la matrice suivante :

$$\sigma(r; r', \beta) = \int_0^{4\pi} d\Omega \int_0^{4\pi} d\Omega' \rho^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) \quad (4.20)$$

avec la normalisation des fonctions radiales :

$$\int_0^\infty dr r^2 |R_k(r)|^2 = 1 \quad (4.21)$$

J’ai calculé les éléments non-diagonaux de la matrice densité à un corps $\rho_{QMC}^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta)$ avec la simulation Monte-Carlo quantique dans un piège harmonique avec les mêmes paramètres ($N = 10\,000$, $a = 0.0043 a_0$). Dans ce calcul il faut faire attention au fait que $\rho_{QMC}^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta)$ est normalisée de la façon suivante :

$$\int d^3r \int d^3r' \rho_{QMC}^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) = 1 \quad (4.22)$$

Pour obtenir la bonne normalisation, il faut pondérer le résultat avec la fonction de partition Z , donnée par :

$$Z = \int d^3r \rho_{QMC}^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}, \beta) = \int d^3r \int d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_{QMC}^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) \quad (4.23)$$

La matrice densité à un corps $\rho^{(1)}$ s’écrit alors :

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) = \frac{\rho_{QMC}^{(1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta)}{Z} \quad (4.24)$$

4. L’idée est d’Ignacio Cirac après une discussion à Santa Barbara.

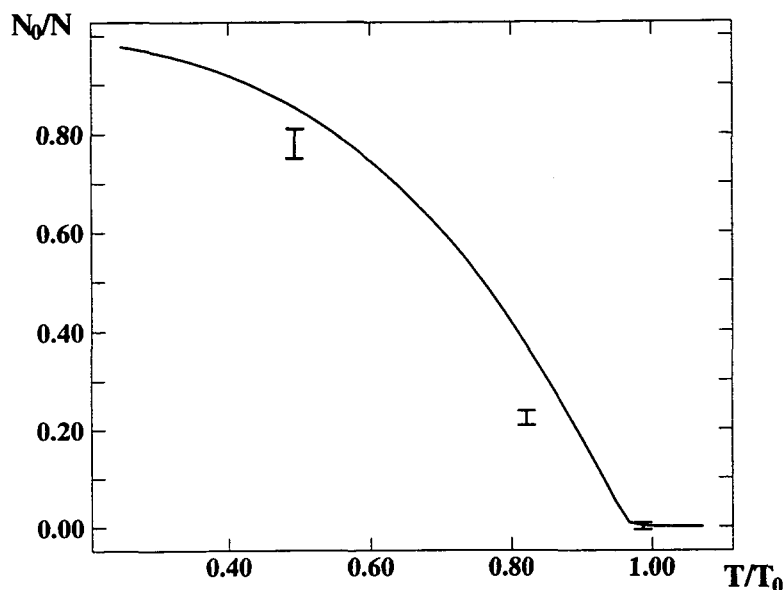


FIG. 4.2 – Fraction condensée de $N = 10\,000$ bosons dans un piège harmonique avec une longueur de diffusion $a = 0.0043 a_0$, obtenue par diagonalisation de la matrice densité à un corps. La courbe continue montre le résultat du gaz parfait pour le même nombre de particules. Le nombre de particules dans le condensat diminue à cause des interactions.

L'incertitude du calcul de Z limite le calcul des valeurs propres de la matrice densité à un corps $\rho^{(1)}$. Pour améliorer l'incertitude de notre calcul, nous avons adapté notre algorithme en échantillonnant préférentiellement la région des petites distances $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll \lambda$.

J'ai calculé la fraction condensée pour trois valeurs de la température : $T = 20.0 \hbar\omega$ ($T/T_0 \simeq 1.0$), $T = 16.67 \hbar\omega$ ($T/T_0 \simeq 0.82$) et $T = 10 \hbar\omega$ ($T/T_0 \simeq 0.49$). Sur la figure 4.2 on peut voir que la fraction condensée est diminuée par rapport au cas du gaz parfait à température fixée.

Rappelons que l'analyse de la statistique de cycles d'échange (voir discussion après l'équation (1.25), page 17) permet d'extraire la fraction condensée sans diagonalisation de l'opérateur densité pour le gaz parfait. Le nombre de particules condensées coïncide dans ce cas avec la plus grande longueur d'un cycle d'échange, qui est encore occupé. Dans [60] cette relation a été aussi utilisée pour déterminer la fraction condensée dans le gaz réel. Sur le tableau 4.1 je compare les différentes valeurs de la fraction condensée, obtenue de façon "stricte" par diagonalisation de $\rho^{(1)}$ avec l'information des cycles d'échanges. Les domaines d'incertitudes des deux méthodes se recouvrent. Puisque les résultats diffèrent clairement des prédictions du gaz parfait, ils montrent que la relation entre la fraction condensée et les longueurs des cycles n'est pas affectée au premier ordre par les interactions. Effectivement le raisonnement qui conduit à cette relation pour le gaz parfait se généralise sur un modèle, où on tient compte des interactions dans l'approximation de Hartree-Fock.

Mais la diagonalisation de la matrice densité donne aussi accès aux formes

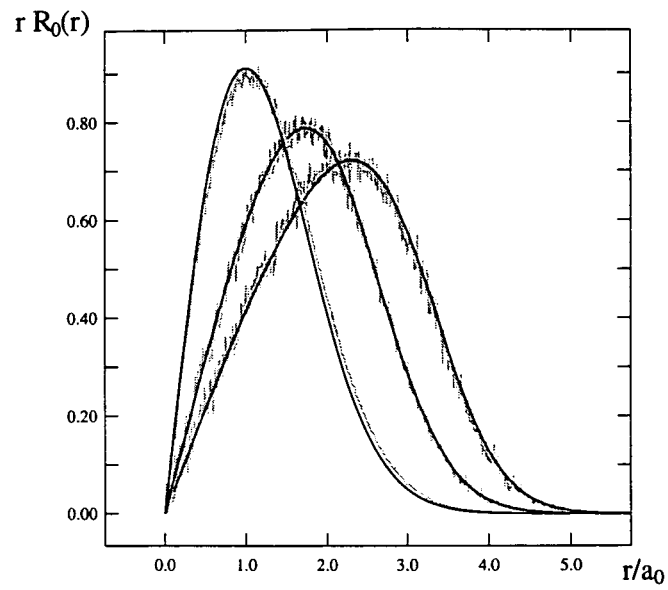


FIG. 4.3 – Fonction d'onde de condensat $r R_0(r)$ ($[a_0^{-1/2}]$) pour trois valeurs de la température (de gauche à droite) : $T/T_0 \simeq 1.0$, $T/T_0 \simeq 0.8$ et $T/T_0 \simeq 0.5$. La courbe grise donne le résultat du calcul Monte-Carlo, obtenu par diagonalisation de la matrice densité. La courbe noire donne la solution du calcul Hartree-Fock pour $T/T_0 \simeq 0.8$ et $T/T_0 \simeq 0.5$, où la fonction d'onde du condensat est décrite par une équation du type Gross-Pitaevskii. Pour $T/T_0 \simeq 1.0$ le système n'est pas encore condensé et j'ai tracé l'état fondamental de l'oscillateur harmonique pour comparer (courbe noire à gauche).

spatiales de la fonction d'onde du condensat $R_0(r)$, la fonction propre avec la plus grande valeur propre. Sur la figure 4.3, je trace $rR_0(r)$. Pour comparer, j'ai aussi donné la solution $(4\pi)^{1/2}r\Psi_0$ de l'approximation de Hartree-Fock, équations (4.14) et (4.15), pour $T/T_0 \simeq 0.8$ et $T/T_0 \simeq 0.5$. Car pour $T/T_0 \simeq 1.0$ le gaz n'est pas encore condensé, j'ai tracé la solution de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. Comme attendu, l'accord entre la "vraie" fonction d'onde du condensat et la solution de l'équation de Gross-Pitaevskii est excellent. Dans [60] il est montré numériquement, que la densité des particules sur les longs cycles d'échanges est donnée par l'équation de Gross-Pitaevskii, qui permet de dire que dans un gaz dilué à trois dimensions les particules sur les longs cycles d'échange peuvent être identifiées aux particules condensées.

Bibliographie

- [1] A. Einstein, Preussische Akademie de Wissenschaften, Phys. Math. Klasse, Sitzungsberichte, 3 (1925).
- [2] T.D. Lee and C.N. Yang, Phys. Rev. **112**, 1419 (1957).
- [3] M. Luban, Phys. Rev. **128**, 965 (1962).
- [4] K. Huang, in Studies in Statistical Mechanics, edited by J. de Boer and G.E. Uhlenbeck (North-Holland Publishers, Amsterdam, 1964), Vol. II, p. 1.
- [5] A.L. Fetter and J.D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems*, (Mc Graw Hill 1971).
- [6] T. Toyoda, Ann. Phys. (N.Y.) **141**, 154 (1982).
- [7] H.T.C. Stoof, Phys. Rev. A **45**, 8398 (1992).
- [8] A.M.J. Schakel, Int. J. Mod. Phys. B **8**, 2021 (1994).
- [9] M. Bijlsma and H.T.C. Stoof, Phys Rev. A **54**, 5085 (1996).
- [10] P. Grüter, D.M. Ceperley, and F. Laloë, Phys. Rev. Lett. **79**, 3549 (1997).
- [11] K. Huang, Phys. Rev. Lett. **83**, 3770 (1999).
- [12] G. Baym, J.-P. Blaizot, and J. Zinn-Justin, Europhys. Lett. **49**, 150 (2000).
- [13] J. Reppy, B. Crooker, B. Hebral, A. Corwin, J. He, and G. Zassanhaus, Phys. Rev. Lett. **84**, 2060 (2000).
- [14] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
- [15] K.B. Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [16] C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tolett, and R.G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995); C.C. Bradley, C.A. Sackett, and R.G. Hulet, *ibid.* **78**, 985 (1997).
- [17] D.G. Fried, T.C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S.C. Moss, D. Kleppner, and T.J. Greytak, Phys. Rev. Lett. **81**, 3811 (1998).
- [18] O. Penrose and L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).

- [19] A.J. Leggett, *Physica Fennica* **8**, 125 (1973).
- [20] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin/Cummings, Reading, (MA, 1972).
- [21] R.P. Feynman, *Phys. Rev.* **90**, 1116 (1953).
- [22] R.P. Feynman, *Phys. Rev.* **94**, 262 (1954).
- [23] R.P. Feynman, *Prog. Low. Temp. Phys.* **1**, 17 (1955).
- [24] D.M. Ceperley, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 1601 (1995).
- [25] P. Borrmann and G. Franke, *J. Chem. Phys.* **98**, 2484 (1993).
- [26] B. Eckhardt, in *Emerging Applications of Number Theory*, D. Hejhal et al., ed, (Springer, New York, 1997).
- [27] S. Grossmann and M. Holthaus, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 3557 (1997).
- [28] M. Wilkens and C. Weiss, *Journ. of Mod. Optics* **44**, 1801 (1997).
- [29] H.D. Politzer, *Phys. Rev. A* **54**, 5048 (1996).
- [30] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
- [31] P. Grüter, Thèse, Paris (1996).
- [32] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dialoshinski, *Methods of quantum field theory in statistical physics*, (Dover Publications, 1963).
- [33] F. Laloë, dans *Bose-Einstein condensation*, A. Griffin, D. Snoke, S. Stringari, ed, (Cambridge University Press, 1993).
- [34] P. Grüter and F. Laloë, *Journ. de Phys. I* **5**, 181 (1995).
- [35] P. Grüter and F. Laloë, *Journ. de Phys. I* **5**, 1255 (1995).
- [36] P. Grüter, F. Laloë, A. E. Meyerovich, and W. Mullin, *Journ. de Phys. I* **7**, 485 (1997).
- [37] L.P. Kadanoff and G. Baym, *Quantum statistical mechanics*, (Benjamin, 1962).
- [38] J.-P. Blaizot and G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems*, The MIT Press, (Cambridge 1986).
- [39] K. Huang and C.N Yang and J.M. Luttinger, *Phys Rev.* **105**, 776 (1957).
- [40] C.N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962).
- [41] A.Z. Patashinskii and V.L. Pokrovskii, *Fluctuation theory of phase transitions*, (Pergamon Press, 1979).
- [42] V.G. Vaks and A.I. Larkin, *J. Ekptl. Theoret. Phys. (USSR)* **49**, 975 (1965); *Soviet. Phys. JETP* **22**, 678 (1966).

- [43] V. Elser, *Topics in Statistical Mechanics*, PhD thesis (1984).
- [44] A. Z. Patashinskii and V. L. Pokrovskii, J. Exptl. Theoret. Phys. (USSR) **46**, 994 (1964); Soviet. Phys. JETP **19**, 677 (1964).
- [45] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1996).
- [46] E.L. Pollock and D.M. Ceperley, Phys. Rev. B **36**, 8343 (1987).
- [47] J.A. Barker, J. Chem. Phys. **70**, 2914 (1979).
- [48] E.L. Pollock and D.M. Ceperley, Phys. Rev. B **30**, 2555 (1984).
- [49] D.M. Ceperley and E.L. Pollock, Phys. Rev. Lett. **56**, 351 (1986).
- [50] P. Lévy, Compositio Math. **7**, 283 (1939).
- [51] *Finite-Size Scaling*, J.L. Cardy ed. (North-Holland, New York, 1988).
- [52] M.E. Fisher and M.N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
- [53] E. Brézin, Journal de Physique **43**, 15 (1982).
- [54] E.L. Pollock and K.J. Runge, Phys. Rev. B **46**, 3535 (1992).
- [55] B.D. Josephson, Phys. Rev. Lett. **21**, 608 (1966).
- [56] W. Krauth, *Comment on "Critical temperature of trapped hard-sphere Bose gases"*, cond-mat/9812328 (1998)
- [57] S.Y. Larson, J. Chem. Phys. **48**, 1701 (1968).
- [58] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics*, Pergamon Press, Oxford (1972).
- [59] I. Bloch, T.W. Hänsch, and T. Esslinger, Nature **403**, 166 (2000).
- [60] W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **77**, 3695 (1996).
- [61] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, Phys. Rev. A **54**, R4633 (1996).
- [62] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley (1963).
- [63] R. Masut and W.J. Mullin, Am. J. Phys. **47**, 493 (1979).
- [64] K. Damle, T. Senthil, S.N. Majumdar, and S. Sachdev, Europhys. Lett. **36**, 7 (1996).
- [65] V. Bagnato, D.E. Pritchard, and D. Kleppner, Phys. Rev. A **35**, 4354 (1987).
- [66] S. Grossmann and M. Holthaus, Zeit. f. Naturforsch. **50a**, 921 (1995); Phys. Lett. A **208**, 188 (1995).
- [67] W. Ketterle and N.J. van Druten, Phys. Rev. A **54**, 656 (1996).
- [68] K. Kirsten and D.J. Toms, Phys. Rev. A **54**, 4188 (1996).
- [69] E.P. Gross, Nuovo Cimento **20**, 454 (1961).

- [70] L.P. Pitaevskii, Zh. Éksp. Teor. Fiz. **40**, 646 (1961) [Sov. Phys. JETP **13**, 451 (1961)].
- [71] N.N. Bogoliubov, J. Phys. (Moscow) **11**, 23 (1947).
- [72] F. Dalfovo, S. Giorgini, M. Guilleumas, L. Pitaevskii, and S. Stringari, Phys. Rev. A **56**, 3840 (1997).
- [73] V.V. Goldman, I.F. Silvera, and A.J. Leggett, Phys. Rev B **24**, 2870 (1981).

Publications Commentées

Publication I

M. Holzmann, P. Grüter, and F. Laloë
Bose-Einstein condensation in interacting gases
Eur. Phys. J. B **10**, 739 (1999)

Dans cet article nous regardons le phénomène de condensation de Bose-Einstein dans un gaz homogène. Les influences des interactions entre les atomes sont étudiées dans le formalisme des opérateurs d'Ursell. Nous utilisons un développement diagrammatique de l'opérateur densité à un corps en terme des opérateurs d'Ursell U_q (section 2 "Ursell expansion of the one-body density operator"). Ce développement permet de resommer facilement des classes de diagrammes grâce à des équations non-linéaires (section 3 "Integral equations").

Une resommation d'un type de diagramme donne une équation simple correspondant à l'approximation du champ moyen (section 4 "A mean-field like approximation"). Elle permet d'obtenir des valeurs positives pour le potentiel chimique, mais ne donne aucune variation de la température critique par rapport au gaz parfait.

Nous discutons ensuite des équations non-linéaires plus élaborées qui influencent le profil d'énergie juste au-dessus de la transition (section 5 "Beyond mean-field: velocity dependent effects"). La solution auto-cohérente change les populations $\rho_k \sim k^{-(2-\eta)}$ des états d'impulsion k dans la limite $k \rightarrow 0$ par rapport au cas du gaz parfait ($\eta = 0$). Un argument de comptage des puissances prédit $\eta = 1/2$ ou $\rho_k \sim k^{-3/2}$ (voir [44]). Néanmoins cette approche ne tient pas compte des corrections logarithmiques qui ramènent η plus près de $\eta = 0$ (voir [41] et [II]).

Cette modification du spectre ($\epsilon_k \sim k^{2-\eta}$ pour $k \rightarrow 0$) conduit à une augmentation de la température critique de la condensation de Bose-Einstein. Pour estimer l'ordre de grandeur de cet effet, nous avons résolu les équations non-linéaires de façon approximative, c'est-à-dire que nous n'avons pas calculé le spectre complet de manière auto-cohérente. Notre approximation correspond à introduire une coupure infrarouge $\propto \delta\mu_0$ et à déterminer la modification $-(\delta\mu_k - \delta\mu_0)$ du spectre ($\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m - (\delta\mu_k - \delta\mu_0)$ au point critique) en utilisant un spectre $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m + \delta\mu_0$. Au point de transition, ce calcul est auto-cohérent en $\delta\mu_0$. Pour des valeurs de la longueur de diffusion a comprise entre $0.001 \leq a/\lambda \leq 0.01$, nous avons trouvé numériquement une augmentation de la température critique par rapport au résultat du gaz parfait selon:

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} \simeq 0.7 a n^{1/3}$$

Ce travail était le point de départ de mes études sur la transition de Bose-Einstein d'un gaz dilué dans un système homogène.

Pour faire la connection avec l'article suivant [II], je donne ici des simplifications possibles dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$ (voir section 2.4, page 38).

- Au point de transition, la physique des grandes échelles ($k \rightarrow 0$) devient la plus importante :

$$\rho_k \gg 1 \quad \text{ou} \quad 1 + \rho_k \simeq \rho_k \simeq (\beta \epsilon_k)^{-1}$$

- Dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$ les influences de U_n deviennent négligeables pour $n \geq 3$ et les corrections par rapport au gaz parfait se limitent à un développement diagramatique uniquement avec les opérateurs U_1 et U_2 .
- Les éléments de la matrice $\langle k, k' | U_2 | k + q, k' - q \rangle$ deviennent indépendants des impulsions.
- La condition d'auto-cohérence s'écrit :

$$\epsilon_k = k^2/2m - (\delta\mu_k - \delta\mu_0)$$

Ainsi, dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$, nous obtenons des équations équivalentes à la théorie classique de champs, discutées dans la publication suivante [II] en utilisant l'approche des fonctions de Green.

Bose-Einstein condensation in interacting gases

M. Holzmann^{1,2}, P. Grüter^{1,a}, and F. Laloe^{1,2,b}¹ LKB^c and LPS^d, Département de Physique de l'ENS, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France² Institute of Theoretical Physics, UCSB, Santa Barbara, CA 93106, USA

Received 13 November 1998

Abstract. We study the occurrence of a Bose-Einstein transition in a dilute gas with repulsive interactions, starting from temperatures above the transition temperature. The formalism, based on the use of Ursell operators, allows us to evaluate the one-particle density operator with more flexibility than in mean-field theories, since it does not necessarily coincide with that of an ideal gas with adjustable parameters (chemical potential, etc.). In a first step, a simple approximation is used (Ursell-Dyson approximation), which allow us to recover results which are similar to those of the usual mean-field theories. In a second step, a more precise treatment of the correlations and velocity dependence of the populations in the system is elaborated. This introduces new physical effects, such as a change of the velocity profile just above the transition: the proportion of atoms with low velocities is higher than in an ideal gas. A consequence of this distortion is an increase of the critical temperature (at constant density) of the Bose gas, in agreement with those of recent path integral Monte-Carlo calculations for hard spheres.

PACS. 05.30.Jp Boson systems – 05.30.-d Quantum statistical mechanics – 03.75.Fi Phase coherent atomic ensembles; quantum condensation phenomena

1 Introduction

The notion of Bose-Einstein condensation is not new: it was introduced by Einstein in 1925 [1]; Bose himself played an important role in the introduction of Bose-Einstein statistics, but his work was focussed on radiation (photons) – he did not generalize it to massive particles and therefore played no role in the discovery of the phase transition [2,3]. It is well-known that, for many years, the so called “Einstein phenomenon” [4] was considered more as a mathematical artifact of the formalism than a physical reality – this was for instance the case of Uhlenbeck himself [5–7]. Indeed, this reaction is perfectly natural: the notion of accumulating particles into one single quantum state – with no limit on the accuracy of the definition of their momentum, except the size of the macroscopic container – looks rather paradoxical at first sight. For an ideal gas, it certainly introduces unphysical properties: density profiles which depend critically

on the boundary conditions of the wave functions on the walls, in violation of extensivity [8], or anomalous fluctuations of particle numbers, which become ensemble dependent [9–11]. It is now well understood that these pathological features disappear as soon as some repulsive interaction between the particles is added; but then, by naive analogy, one could ask why the occupancy of a single quantum state does not disappear as well? After all, it would also seem perfectly natural to assume that, in an interacting system, some finite momentum band is highly populated¹. How can we show, from *ab initio* arguments, that the accumulation of a finite proportion of particles into a single quantum state is indeed a robust property against the presence of interactions?

Curiously, in view of the importance of the phenomenon, the literature contains relatively little discussion of this question and of the possibility of what has sometimes be called “fractionned” or “smeared” boson condensates; in particular, following London’s historical intuition [12], most textbooks prefer to simply assume that one single state is populated macroscopically, and then proceed to study the interesting consequences of this Ansatz. At zero temperature, a general argument was

^a Present address: McKinsey and Company, Kurfürstendamm 185, 10707 Berlin, Germany.

^b e-mail: laloe@ens.fr

^c The Laboratoire Kastler Brossel is Unité Associée au CNRS (UA 18) et à l’Université Pierre et Marie Curie.

^d The Laboratoire de Physique Statistique de l’ENS is Unité Associée au CNRS (UA 1306) et aux Universités Paris 6 et Paris 7.

¹ An elementary idea, for instance, would be to suggest that the width of the band is related by some inverse Fourier relation to the mean-free-path in the gas.

nevertheless given by Penrose and Onsager² in 1956 [13]; other famous references are the work of Beliaev [14], Yang [15], Gavoret *et al.* [16] and of Fröhlich [17]; in 1962, Girardeau [18] discussed in detail the possibility of what he called a “generalized condensation, where no one single-particle state is macroscopically occupied”; a more recent discussion was given by Nozières [19], who concluded from a Hartree-Fock calculation at zero temperature that repulsive interactions tend to stabilize the single state occupancy. At finite temperatures, “smeared condensation” was discussed explicitly in an article by Luban in 1962 [20] and, more recently and in a mean field context, by Van den Berg *et al.* [21]. There is also a large amount of beautiful numerical work on the subject [22], which leads to an impressive agreement with experimental data, in particular in liquid helium four; but one should keep in mind that numerical methods are subject to limitations due to finite size effects in the evaluation of narrow peaks in occupation numbers. For a critical discussion of experimental evidence for a condensate in superfluid helium four, see for instance Sokol [23].

Two general remarks may come to mind at this stage. The first is that it is known, from very general considerations, that the Bose-Einstein statistics plays no role whatsoever at zero temperature (Boltzmann and Bose Einstein systems have exactly the same ground state); zero temperature arguments therefore do not directly address the question of how the statistics is able to stabilize the single state occupancy against finite temperature excitations. The second is that mean-field (Hartree-Fock) arguments are based on an approximation where the system is considered as equivalent to a gas of independent particles with modified parameters, which automatically preserves the main properties of the ideal gas (for which the occurrence of Bose-Einstein condensation depends only on the density of states at the origin); they do not really address the question of the robustness of single state occupancy against all kinds of correlation that can be created in a system by interactions, but rather assume it. A theoretical study where the property in question would not be an ingredient, but a consequence of the results of the calculations, could therefore be useful.

There are also other issues which are not completely settled, such as the effects of the interactions on the transition temperature itself. For instance one may ask if repulsive hard cores with short range will tend to increase or to decrease the critical temperature (at constant density³). In 1957, the method of pseudopotentials [25, 26]

² Penrose and Onsager were the first to define the phenomenon of Bose-Einstein condensation in an interacting system in terms of the eigenvalues of the one particle reduced density operator; in addition, from a variational argument concerning the ground state wave function, they give an estimation of the condensed fraction in superfluid helium four.

³ Here, we discuss only homogeneous systems (a gas in a box), where translation invariance ensures that the number

was applied by Huang and coll. to the study of the properties of the phase transition in Bose hard spheres. The result is that the critical temperature should be slightly increased (by an amount proportional to $a^{3/2}$, where a is the diameter of the spheres); see also reference [27]. The physical interpretation given by the authors is that, by a Heisenberg type relation, “a spatial repulsion gives rise to a momentum space attraction”, therefore facilitating the appearance of a condensate. But, since then, other methods of approach to the problem have been proposed, in particular a Hartree-Fock type approximation [28]. It turns out that this method provides the opposite result: a purely repulsive potential is predicted to lower the transition temperature! More precisely, it predicts that the change in T_c depends essentially on the range of the potential (it vanishes for a contact potential) and that, for most of repulsive potentials with finite range (a “top hat potential” for instance) the exchange interaction tends to increase the effective mass of the particles and therefore to lower T_c . Of course, this does not necessarily mean that the two results are contradictory: each of them might be correct in a different domain⁴. Later,

density n remains constant. When this symmetry is not fulfilled, as is the case in atomic traps, repulsive interactions have important secondary effects, in particular, the spatial density of the system is changed [24], with a significant decrease of the number density n of the atoms at the center of the trap (at constant total number of atoms); this reduces the degeneracy parameter $n\lambda^3$ at the center of the trap and, obviously, the transition temperature as well. Mean-field theories can be used to account qualitatively for the changes of spatial distributions of atomic gases in traps and, by the same token, for this change of critical temperature.

By contrast, the effects we are interested in in the present article are of a different nature; they originate from the microscopic correlations introduced between the particles by the interactions, so that they remain essentially beyond the scope of mean-field approaches. While the latter always predict that the transition occurs when $n\lambda^3$ is equal to 2.612... at the point of maximum density (center of the trap), exactly as for an ideal gas, the purpose of our study is precisely to study the changes of this number under the effects of interactions; in other words, we are interested in changes of the critical value of the degeneracy parameter $n\lambda^3$, not in changes in n . Under these conditions, it is more convenient to assume that the gas is contained in a box, since then n automatically remains constant, so that the pure correlations effects are seen with no background due to density changes.

⁴ One would expect the Hartree-Fock calculation to be better for dense systems, as all mean-field theories; in these systems each atom interacts simultaneously with many others, so that it can average most of its short range correlations with its neighbours, and experience only a mean field from them. Indeed, in a dense system such as superfluid helium 4, the basic prediction is the Hartree Fock calculation is borne out by experiments, since the critical temperature is found to be a decreasing function of pressure.

Nevertheless the domains of validity of the two methods should overlap at least partially (for a potential which would be at the same time weak and with short range) so that the prediction of what should happen in this case remains unclear.

a renormalization group calculation was given by Toyoda [29], which also predicted a decrease of the critical temperature; but subsequent more refined calculations by Stoof and coll. led to a prediction of an increase of the temperature [30,31]. The most recent result was obtained by a numerical calculation based on the path integral quantum Monte-Carlo method [32], and actually predicts the existence of a crossover between two regimes, at low and high densities; at low densities the critical temperature is indeed increased – but even in this region the results do not really agree with any of the analytical calculations mentioned above – see also reference [33] for another discussion of the low density regime. One can summarize the situation by saying that there is no known consensus on what is the expression of the second virial correction to the Bose-Einstein transition temperature in a dilute gas.

More generally, one can be interested in a better understanding of the correlation that are implied by superfluidity in a gas: on a microscopic scale, what kind of organization in both momentum and ordinary space is responsible for the occurrence of superfluidity? It is often considered that superfluidity is an inherently different physical phenomenon from Bose-Einstein condensation; but what is exactly the difference between the microscopic mechanisms that lead to each of these transitions, and to what extent should they always appear at the same time? Another related question is how the macroscopic wave function and its non-linear evolution [34,35] build up from individual correlated particles, in a dilute gas where atoms are free most of the time, collisions are binary and short, so that mean-field methods are not necessarily well suited? The hope is that the study of Bose-Einstein condensation in dilute gases, where more precise *ab initio* calculations should be feasible than in dense systems, will allow a better understanding of the original phenomena observed in superfluid systems, including the stability against dissipation, vortices, various modes of oscillation (second sound), etc.; for a general review of the many recent theoretical contributions in the subject, see reference [36].

In this article, we will focus ourselves on the study of the effects of binary interactions on the transition temperature, in an approach of the problem where the populations of various individual states are kept free to vary in any way; they may adapt to the interactions and become more and more different from a Bose-Einstein distribution when the temperature of a gas is progressively cooled down. For this purpose, we will use the method of Ursell operators, already discussed in previous articles [37], which is well adapted to a detailed treatment of binary short range correlations between particles due for instance to hard cores; for a preliminary report of the method, see [39]. Here, instead of calculating the partition function of the system as in previous work, we will find it more convenient to directly evaluate the one-particle density operator; it turns out that this is not only more direct physically, but also mathematically more convenient, mostly because the weights of the diagrams are much simpler than those in the partition function [40].

It is well-known [41–43] – and this was already emphasized in [39] in the context of Ursell operators – that, near the transition point, larger and larger exchange cycles of identical atoms become more and more important: infinite summations over many sizes of diagrams are therefore necessary. This task can be performed by using implicit integral equations; in a first step, we will use the simplest form for this equation, which is reminiscent of the Dyson equation, and this will lead us to a first form of the Ursell theory that is very similar to a mean-field theory. Not surprisingly then, we will find at this stage that the critical degeneracy parameter $n\lambda^3$ is unchanged, keeping exactly the same value as for an ideal gas; moreover, the velocity distribution of atoms will also remain the same as for an ideal gas, with of course some change of the effective chemical potential introduced by the interactions. This first step is to be seen mostly as a starting base where known results are recovered. The second step will involve a slightly more elaborate integral equation for the density operator, which fortunately is not much more complicated than the Ursell-Dyson equation so that it can be solved by a similar method. The major new feature introduced is a velocity dependence that is no longer that of an ideal gas: it includes a distortion of the velocity profile, especially at low velocities, a feature which is essentially beyond mean-field approximations. We will interpret this result as due to a spatial re-arrangement of atoms with low velocities, which allows them to minimize repulsion and, so to say, come closer to Bose-Einstein condensation than the other atoms. Consequently, the system has stronger tendency to populate lower states than it would have in the absence of interactions, which favors even more the ground state, so that it is still true that a single quantum state tends to be macroscopically populated; in a way, our reasoning can be seen as a more elaborate version of the argument concerning the role of interactions developed earlier by Nozières [19], as we discuss in more detail below. An important consequence of this effect is that the critical degeneracy parameter is reduced (still assuming repulsive interactions), by an amount which is compatible with the numerical Monte-Carlo results of reference [32]. More generally, this study provides a microscopic mechanism for the approach to Bose-Einstein condensation in a dilute gas.

Section 2 below is the most technical part of this article, with diagrams, counting, etc.; it can be skipped by the reader who is prepared to accept without justification the integral equations proposed in Section 3 for the one-particle density operator.

2 Ursell expansion of the one-body density operator

In [37] we have shown how a finite truncation of the Ursell operator series of the grand potential can provide virial corrections for quantum gases, even if they are partially degenerate; in [38] the same technique provided simple expressions for the one and two particle density operator.

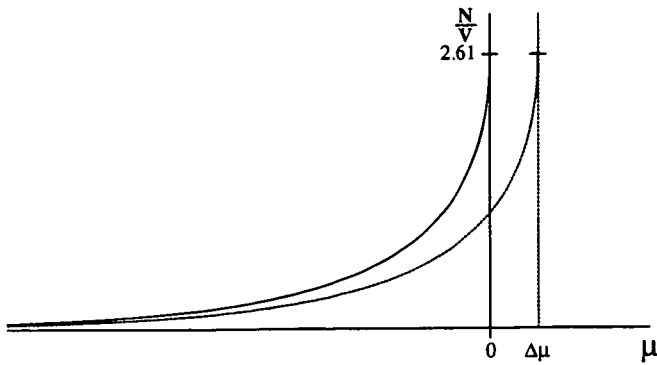


Fig. 1. Density of an ideal gas as a function of the chemical potential μ . If the effect of the interactions was simply to shift the critical value of μ by an amount $\Delta\mu$ (broken lines), a first order theory would provide a correction which diverges when μ tends to zero.

Nevertheless, in this article, we can not limit ourselves to these results, since they do not remain valid close to the Bose-Einstein condensation point. In fact any finite truncated expression, if taken seriously, would not give an acceptable description of the phase transition; in some cases, as discussed in Section 3.3 of reference [39], the transition would be replaced by a sharp but continuous crossover phenomenon, occurring over a finite range of parameters (which is independent of the size of the system but becomes narrower and narrower when the density of the gas decreases). But this conclusion arises from an incorrect simplification: it is clear that the validity of any truncation always ends up breaking down at some point when the system comes sufficiently close to Bose-Einstein condensation. Mathematically, the reason is that higher order terms in the series of perturbations, if they have smaller coefficients in a dilute system, also contain more denominators which diverge when the chemical potential tends to zero⁵; this implies stronger divergences near the transition point, so that higher order terms always become dominant at some point. Physically, the reason of this behavior is a divergence of the sizes of typical exchange cycles at the transition point [41, 42].

Of course, observing divergences in perturbation series at a phase transition point is very common in physics. In the case of Bose-Einstein transition, nevertheless, an unusual feature is that the transition already exists in the ideal gas, and moreover already contains a strong singularity: the slope of the curve giving the density as a function of the chemical potential μ becomes infinite at the Bose Einstein critical point $\mu = 0$ (see Fig. 1).

This makes the problem more complicated. To see why, assume for a moment that the effect of the interactions is just to change this critical value by a small amount $\Delta\mu$, positive if the interactions are repulsive, negative if they

are attractive. In this case, the behavior of the density near the critical value of μ would be given by:

$$n \simeq c_1 - c_2 \sqrt{-(\mu + \Delta\mu)}. \quad (1)$$

This function can be expanded in a Taylor series of powers of $\Delta\mu$, and the result is a series where the term in $(\Delta\mu)^n$ is proportional to $1/|\mu|^{n-1/2}$ which, if μ tends towards zero (by negative values), diverges more and more strongly when its order increases; clearly the validity of the expansion breaks down at the transition point. This is a consequence of the non-analyticity of the unperturbed function at the origin (an square root with an infinite derivative) while, despite of this mathematical problem, the physical nature of the transition would remain completely unaffected by the presence of a small correction $\Delta\mu$. This example illustrates the dangers of using finite perturbation series near a transition point⁶; this is why we have to go beyond the expressions written in [38] and to use a method where series are summed up to an infinite order.

2.1 Operatorial derivative

The Ursell diagrams that we will use in this article are similar to, but slightly different from those used in reference [37]: instead of the grand potential, what will be expanded here is the expression of the one-particle density operator. In any case, the two sorts of diagrams are closely related, since reduced density operators can be derived from the grand canonical partition function [38]. But, instead of first introducing the diagrams and then taking derivatives, it turns out to be more convenient to start again the calculation from the beginning, mostly because this avoids introducing weights that, in a second step, will be cancelled in many cases.

We use the same notation as in [37, 38]; the P_α 's are all the $N!$ permutations of the N particles, which will be expressed as products of permutation cycles; the U_n 's are the Ursell operators. The first Ursell operator U_1 is defined as function of the one particle Hamiltonian H_1 (kinetic energy for a gas in a box) as:

$$U_1(1) = \exp[-\beta H_1(1)] \quad (2)$$

while the second operator U_2 is defined as a function of the two-particle Hamiltonian H_2 (including interactions between the two particles) by:

$$U_2(1, 2) = \exp[-\beta H_2(1, 2)] - \exp[-\beta H_1(1)] \exp[-\beta H_1(2)] \quad (3)$$

(similar expressions can be written for the higher rank Ursell operators). Equation (9) of reference [37] provides

⁵ In Ursell diagrams, every horizontal line introduces, after a summation over the size of the cycles, a factor $(1+f_1)$ (where f_1 is the one particle distribution of the ideal gas) which diverges when $\mu \rightarrow 0$. Therefore, the more lines the diagram contains, the more divergent it is.

⁶ It is not necessarily realistic: in fact we will see in this article that the effects of interactions are more interesting than a simple shift of the value of the chemical potential. It is nevertheless interesting to note that several of the properties that we will find in our more elaborate study depend critically on the singularity of the curve giving the density of an ideal gas.

the following expression of the N particle partition function:

$$Z_N = \frac{1}{N!} \sum_{\{P_\alpha\}} \sum_{\{U\}} \prod_{\text{clusters}} \Gamma_{\text{cluster}}(i, j, k \dots) \quad (4)$$

where each of the $\sum$ in equation (4) is actually a simplified notation for two different summations; the sum over $\{U\}$ is meant to contain a sum over all possible ways to write products of U_n 's containing altogether N particles⁷, as well as another sum over all possible non-equivalent ways to put numbered particles into these U 's – see equation (4) of [37]; similarly, the sum over $\{P_\alpha\}$ is meant to contain all possible ways to write products of cycles for N particles⁸ as well as all non-equivalent ways to distribute numbered particles in them – see Section 2 of [37] for more details. The $\Gamma(i, j, k \dots)$ are the “explicit” expressions of the clusters, in fact traces involving numbered particles ($i, j, k \dots$) which are grouped together into the same cluster by either Ursell operators or permutation cycles.

To obtain the one-particle density operator, it is convenient to set (for $n \geq 2$):

$$U_n(1, 2, \dots, n) = \bar{U}_n(1, 2, \dots, n) \times U_1(1) \times U_1(2) \times \dots \times U_1(n) \quad (5)$$

where all the $\bar{U}_n$ will be kept constant, while the operators U_1 's will be varied according to:

$$dU_1 = dx \times U_1 |\varphi\rangle \langle \theta|. \quad (6)$$

Here the kets $|\varphi\rangle$ and $|\theta\rangle$ are any kets in the one-particle state space. As shown in [38], the one-particle density operator $\rho_1^{(N)}$ in the canonical ensemble is then given by:

$$\langle \theta | \rho_1^{(N)} | \varphi \rangle = \frac{1}{Z_N} \frac{d}{dx} Z_N. \quad (7)$$

In each term of the double sum in (4), one has to take the derivatives of all Γ 's with respect to x in succession, which amounts to taking the derivative with respect to the U_1 operator of every numbered particle. The diagram which contains the particle in question then becomes an operator $\hat{\Gamma}_{\text{cluster}}(i, j, k)$, so that we obtain the expression:

$$\rho_1^{(N)} = \frac{1}{N! Z_N} \sum_{i=1}^N \sum_{\{P_\alpha\}} \sum_{\{U\}} \hat{\Gamma}_{\text{cluster}}(i, j, k) \times \prod_{\text{rest}} \Gamma_{\text{cluster}}(m, p, q \dots) \quad (8)$$

where $\prod_{\text{rest}}$ symbolizes the product over all remaining Γ_{cluster} 's which have not be modified by the derivative; sometimes, we will call this expression “the triple sum”.

⁷ This summation corresponds to the sum over the m_i 's in equation (4) of [37].

⁸ This summation corresponds to the sum over the m_i 's in equation (7) of [37].

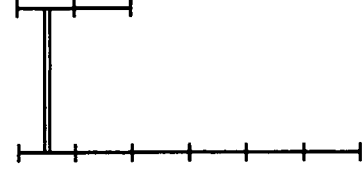


Fig. 2. An example of an $U - C$ term in the expansion of the partition function Z .

2.2 An example

As an example, let us for instance take the following cluster, corresponding to the diagram shown in Figure 2:

$$\Gamma(1, 2, \dots, 8) = \text{Tr}_{1,2,\dots,8} \{ \bar{U}_2(1, 7) U_1(1) U_1(2) \dots U_1(7) U_1(8) C_6(1, \dots, 6) C_2(7, 8) \} \quad (9)$$

where the C 's are the permutation cycles - $C_6(1, \dots, 6)$ is the operator which creates a circular permutation of particles 1, 2, ..., 6 while $C_2(7, 8)$ is merely the exchange operator for particles (7) and (8). Assume for instance that we take the derivative with respect of particle $i = 4$; we then have to evaluate the following expression:

$$\text{Tr}_{1,2,\dots,8} \{ \bar{U}_2(1, 7) U_1(1) U_1(2) \dots \tilde{U}_1(4) U_1(5) \dots U_1(7) U_1(8) C_6(1, \dots, 6) C_2(7, 8) \} \quad (10)$$

with the notation:

$$\tilde{U}_1 = U_1 |\varphi\rangle \langle \theta|. \quad (11)$$

Expression (10) is nothing but the matrix element:

$$\langle \theta | \hat{\Gamma}_{\text{cluster}}(1, 2, \dots, 8) | \varphi \rangle \quad (12)$$

which can be obtained calculated by the same method of calculation as in [37], with the introduction of a sufficient number of closure relations $\sum_n |u_n\rangle \langle u_n|$ in one-particle spaces. In this way, one gets the expression:

$$\sum_{n_1, \dots, n_8} \langle 1 : u_{n_1} | \langle 2 : u_{n_2} | \dots \dots \langle 8 : u_{n_8} | \bar{U}_2(1, 7) U_1(1) U_1(2) \times \dots \dots \tilde{U}_1(4) \times U_1(5) \dots U_1(7) U_1(8) | 1 : u_{n_2} \rangle | 2 : u_{n_3} \rangle \dots | 5 : u_{n_6} \rangle | 6 : u_{n_1} \rangle | 7 : u_{n_8} \rangle | 8 : u_{n_7} \rangle. \quad (13)$$

Considering first particles 1, we see that the circular permutation of indices in the kets at then end of the expression, together with the summation over indices $n_2, n_3, \dots, n_6$, introduce the product of operators:

$$\bar{U}_2(1, 7) [U_1(1)]^3 \tilde{U}_1(1) [U_1(1)]^2 \quad (14)$$

while the summation over n_1 introduces a trace over particle 1; similarly, the summation over n_8 introduces the product of two additional operators $U_1(7)$. Finally we get:

$$\text{Tr}_{1,7} \{ \bar{U}_2(1, 7) [U_1(1)]^3 \tilde{U}_1(1) [U_1(1)]^2 [U_1(7)]^2 \}, \quad (15)$$

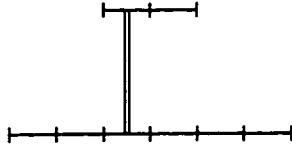


Fig. 3. An example of an $U - C$ term in the expansion of the one-particle density-operator ρ_1 .

which is nothing but the matrix element (the dummy index (7) is renamed into (2)):

$$\langle 1 : \theta | \text{Tr}_2 \left\{ [U_1(1)]^2 \times [U_1(2)]^2 \bar{U}_2(1, 2) [U_1(1)]^3 U_1(1) \right\} | 1 : \varphi \rangle. \quad (16)$$

Finally we obtain:

$$\hat{\Gamma}_{\text{cluster}}(1, 2, \dots, 8) = \text{Tr}_2 \left\{ [U_1(1)]^2 \bar{U}_2(1, 2) [U_1(1)]^4 [U_1(2)]^2 \right\} = [U_1(1)]^2 \text{Tr}_2 \{ U_2(1, 2) U_1(2) \} [U_1(1)]^3. \quad (17)$$

This is, of course, an operator – no longer a number as was the initial Γ ; but it can also be represented by a diagram, such as that shown in Figure 3. In this new diagram, the lowest horizontal line no longer corresponds to a trace but to a product of operators $U_1(1)$ – as many as there are segments in this line (two in this particular case) – interrupted at some point by a $U_2(1, 2)$, and then followed by another horizontal line symbolizing again the product of U_1 's (three in this case). On the other hand, the upper horizontal line still corresponds to a trace over particle 2; it also contains operators $U_1(2)$, but here they all remain after the operator $U_2(1, 2)$.

2.3 Diagrams; weights

More generally, all operators $\hat{\Gamma}$ in the triple sum (8) can be represented by diagrams where the lowest horizontal line represents a product of operators, beginning by either a chain of U_1 's, or a single U_1 , or actually any U_n ; this is the main difference with diagrams contained in Z (or $\log Z$), where the initial operator was always that of highest rank. All the other horizontal lines correspond to traces, and begin necessarily with an operator of rank at least $n = 2$; in fact, these lines behave exactly as those in $\log Z$. In other words the new diagrams are, so to say, obtained by “cutting”, or “opening” the old diagrams at some arbitrary point, taken in some exchange cycle⁹, which then no longer corresponds to a trace but to a product of operators – see the two examples shown in Figure 4.

As in [37], we need a rule to decide precisely how the diagrams should be drawn; this is necessary in order to avoid ambiguities and double counting. Fortunately, the fact that the derivative has “tagged” one particle – adding one summation to the two which already exist in (4) –

⁹ This cycle may of course be of length one, corresponding to no exchange at all.

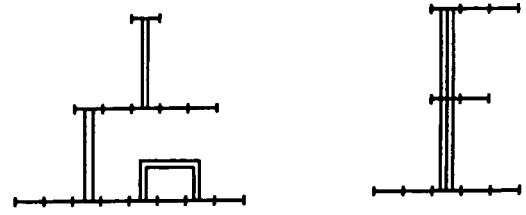


Fig. 4. Two examples of diagrams occurring in the expansion of ρ_1 ; the diagram on the left has a weight 1, but that on the right has a weight $1/2$.

makes the problem much simpler. The tagged particle determines the first operator of the lowest exchange cycle; it provides a well defined starting point, a “root” from which one can propagate horizontally along exchange cycles and vertically along U_2 's or operators of higher rank. Actually, when only U_2 operators are present in the diagram, no ambiguity ever occurs: the simple propagation from the root into the branches is sufficient to assign a well defined structure to each term – see for instance the first example of Figure 4. Only when operators U_n of rank n equal to 3 (or more) occur, as in the second example of this figure, can some ambiguity occur: which is cycle is in the middle, which one in the upper position? By similarity with what was done in [37], we take the following convention: beyond the first particle, which is determined by propagation along a previous cycle, all the other particles in U_n 's of rank equal to 3 (or more) appear in order of increasing numbering; in other words, in the vertical lines, particles appear with an upward increasing numbering, except of course for the lowest particle which is either the tagged particle, or is determined from it by propagation along previous cycles and U_n 's. With this rule combined with those of [37], each contribution to $\rho_1^{(N)}$ appearing in the triple sum (8) corresponds to a perfectly well defined series of diagrams, starting with an operator $\hat{\Gamma}_\rho$, and followed by a product of numbers Γ_{diag} .

Conversely, if we did not specify any numbering in the diagrams, it is clear that the same series of diagrams corresponds to many different terms in the triple sum (8)¹⁰; in order to get a one-to-one correspondence, we have to specify particle numbers at each location inside the diagrams, in other words to consider “numbered diagrams” where each “site” in the diagrams gets a number. This can be done precisely by the rules mentioned in the preceding paragraph: starting from the tagged particle in $\hat{\Gamma}_\rho$, one adds horizontally the particles it exchanges with (in the order of the cyclic permutation), and then progresses vertically along higher order rank U_n 's: this provides a unique distribution of all relevant particles – as for the Γ_{diag} 's, they are of course treated exactly as in [37]. We can

¹⁰ In fact, a given Γ_ρ may even originate from several different Γ_{diag} 's; but this is no longer true as soon as it contains numbered sites (the lowest of all numbers in the U_n of highest rank will determine the root of the Γ_ρ).

then write:

$$\rho_1^{(N)} = \frac{1}{N! Z_N} \sum_{\text{diag. distrib.}} \sum \hat{\Gamma}_\rho(\cdot, \cdot, \cdot) \prod_{\text{rest}} \Gamma_{\text{diag.}}(\cdot, \cdot, \cdot) \quad (18)$$

where $\sum_{\text{diag.}}$ stands for all the possible ways to write series of diagrams, one Γ_ρ and one arbitrary number of $\Gamma_{\text{diag.}}$'s, for a total number of particles equal to N ; in addition, $\sum_{\text{distrib.}}$ introduces a summation over all correct ways to distribute numbered particles into the series. One should keep in mind that any random distribution of numberings in a diagram $\hat{\Gamma}_\rho$ is not necessarily acceptable: in general; in fact, only a proportion g_ρ is correct (similarly, only a proportion $f_{\text{diag.}}$ is acceptable for diagrams $\Gamma_{\text{diag.}}$, as discussed in [37]). We call this proportion the weight of the diagram; for instance, if a diagram contains one U_3 , the value of g_ρ is $1/2$; if it contains p operators U_3 's its value is $1/2^p$; if it contains q operators U_4 , its value is $1/6^q$, etc.

2.4 Counting diagrams

It is now possible to get rid of particle numbering which, of course, does not affect the contribution to ρ_1 of any particular term. Let us choose one given (non-numbered) diagram Γ_ρ , call n_ρ the number of particles it contains, and calculate the total coefficient that it gets from the summations of (18):

$$\frac{1}{N!} \sum_{\text{distrib.}} \hat{\Gamma}_\rho(\cdot, \cdot, \cdot) \sum_{\text{diag. rest}} \prod \Gamma_{\text{diag.}}(\cdot, \cdot, \cdot). \quad (19)$$

This can be done in two steps: first calculate the contribution of the term $\Gamma_\rho(i, j, k)$ when the particles (i, j, k) are a given sub-ensemble of the N particles; then sum over all the ways to select this sub-ensemble. The first step can be made by remarking that, for the $N - n_\rho$ remaining particles, the $\sum_{\text{distrib.}}$ can be moved to the right of Γ_ρ , which introduces the same expression as in [37]; therefore the summation of the products of $\Gamma_{\text{diag.}}$'s merely reconstructs the partition function Z_{N-n_ρ} of $N - n_\rho$ particles, multiplied by $(N - n_\rho)!$. As for the n_ρ particles, one has to take into account the number of correct distributions of the n_ρ particles in the first diagram, which is $(n_\rho)! g_\rho$. For the second step, we first have to multiply the result by the number of ways to distribute n_ρ particles among N , which is:

$$\frac{N!}{(N - n_\rho)!(n_\rho)!}. \quad (20)$$

Taking all these factors into account, we obtain the following result:

$$\frac{1}{N! Z_N} \frac{N!}{(N - n_\rho)!(n_\rho)!} (n_\rho)! g_\rho \times (N - n_\rho)! Z_{N-n_\rho} \times \hat{\Gamma}_\rho \quad (21)$$

so that our final expression for the canonical ensemble is:

$$\rho_1^{(N)} = \sum_{\rho \text{ diagrams}} \frac{Z_{N-n_\rho}}{Z_N} g_\rho \hat{\Gamma}_\rho. \quad (22)$$

At this point, it becomes convenient to introduce the grand canonical ensemble and its partition function:

$$Z_{\text{g.c.}} = \sum_N z^N Z_N \quad (23)$$

where $z = e^{\beta\mu}$ is, with usual notation, the fugacity; the corresponding one-particle density operator ρ_1 (to simplify the notation, we now give up the index g.c.):

$$\begin{aligned} \langle \theta | \rho_1 | \varphi \rangle &= \frac{1}{Z_{\text{g.c.}}} \frac{d}{dx} Z_{\text{g.c.}} \\ &= \frac{1}{Z_{\text{g.c.}}} \sum_N z^N Z_N \langle \theta | \rho_1^{(N)} | \varphi \rangle. \end{aligned} \quad (24)$$

We then get:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \frac{1}{Z_{\text{g.c.}}} \sum_N z^N Z_N \sum_{\rho \text{ diagrams}} g_\rho \frac{Z_{N-n_\rho}}{Z_N} \hat{\Gamma}_\rho \\ &= \frac{1}{Z_{\text{g.c.}}} \sum_{\rho \text{ diagrams}} z^{n_\rho} g_\rho \hat{\Gamma}_\rho \sum_{N=n_\rho} z^{N-n_\rho} Z_{N-n_\rho}. \end{aligned} \quad (25)$$

But the second summation reconstructs is just another expression of the grand canonical partition function, so that we finally obtain:

$$\rho_1 = \sum_{\rho \text{ diagrams}} z^{n_\rho} g_\rho \hat{\Gamma}_\rho. \quad (26)$$

This expression shows that the one-particle density operator is merely the sum of all diagrams $\hat{\Gamma}_\rho$, with coefficients which are the product of the weight g_ρ by the fugacity raised to a power which is the number of particles contained in the diagram.

The simplest case is, of course, the ideal gas, for which the only diagrams are horizontal lines; we immediately get:

$$\rho_1 = \sum_{n=1}^{\infty} z^n [U_1]^n = f_1 \quad (27)$$

where f_1 is defined as usual by:

$$f_1 = \frac{z U_1}{1 - z U_1}. \quad (28)$$

Actually, even for interacting gases, this operator plays a role in the diagrams, or more precisely the sum:

$$\sum_{n=0}^{\infty} z^n [U_1]^n = 1 + f_1 \quad (29)$$

which can be connected for instance after any operator U_2 . We take the same convention as in [37]: dashed horizontal lines symbolize this operator; the operator f_1 itself

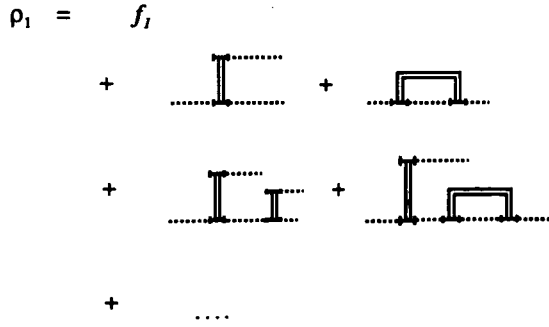


Fig. 5. The lowest order terms in the U-C expansion of the one-particle density-operator ρ .

is then represented by a dashed line connected to a one-case horizontal line ($f_1 = zU_1 + [1 + f_1]$). The first terms in the Ursell expansion of ρ_1 are shown in Figure 5; those explicitly shown in the first and second line correspond to the “generalized Beth-Uhlenbeck approximation discussed in this reference, which in terms of ρ_1 would lead to the expression:

$$\rho_1 = f_1 + 2z^2 [1 + f_1(1)] \times \text{Tr}_2 \{U_2^S(1, 2) [1 + f_1(2)]\} [1 + f_1(1)]. \quad (30)$$

A diagram where the same U_2 re-connects to the same cycle corresponds to an exchange term, where U_2 is replaced by its product by the exchange operator P_{ex} , as discussed in [37]; for instance, in the second line of Figure 5, the second diagram is merely the exchange term of the first.

3 Integral equations

The largest eigenvalue of U_1 corresponds to the ground state of the one-particle Hamiltonian H_1 . When the chemical potential reaches the energy of this state (zero for a gas in a box with periodic boundary conditions), the action of each operator zU_1 leaves the ground state unchanged; then, the series of this operator which is contained in f_1 (sum of all of its powers) diverges. This is not surprising since, as already mentioned, Bose-Einstein condensation corresponds to a situation where the size of typical exchange cycles is no longer limited to a few units, but increases to infinity. For an interacting system, the phenomenon is not limited to chains of U_1 's only: when very long exchange cycles become important, it is expected that typical diagrams will also contain an arbitrary large number of operators U_2 (or higher rank Ursell operators) connecting these cycles. In practice, this means that it is not possible to limit the calculations to a few diagrams, those shown explicitly in Figure 5 for instance; a summation over large categories of diagrams is indispensable.

This is what is done in the two sections below, first within a simplified approach which is useful as a preliminary step (it will lead us to a mean-field like theory), second within a more elaborate treatment.

3.1 A first approach: Dyson-Ursell equation

For simplicity, we limit ourselves for the moment to terms which contain Ursell operators of rank 1 and 2, while a generalization to higher ranks is possible in a similar way. The symmetrized version of U_2 is:

$$U_2^S = \frac{1}{2} [1 + P_{\text{ex}}] U_2 = \frac{1}{2} U_2 [1 + P_{\text{ex}}] \quad (31)$$

where P_{ex} is the exchange operator of the two particles contained in U_2 (we only study bosons here); the factor $1/2$ in front of this definition is introduced for the first part of the formula to be a projector (if necessary, one can put projectors on each side of U_2 without changing the result).

Let us now write the following implicit equation:

$$\rho_1(1) = f_1(1) + 2z^2 [1 + f_1(1)] \times \text{Tr}_2 \{U_2^S(1, 2) [1 + \rho_1(1)] [1 + \rho_1(2)]\} \quad (32)$$

and investigate which diagrams are contained in it. The zero order term in U_2 is merely f_1 ; the first order terms in U_2 are simply the second and the third diagram of Figure 5 – in [37] we showed how terms introduced by the exchange operator correspond to diagrams where the same U_2 touches twice the same horizontal exchange cycle. More generally, it is easy to see that the term $\rho_1^{(n)}$ of order n in U_2 is obtained as a function of terms of lower order by the relation¹¹:

$$\rho_1^{(n)} = 2z^2 [1 + f_1(1)] \text{Tr}_2 \left\{ U_2^S [1 + f_1(1)] \rho_1^{(n-1)}(2) + U_2^S \rho_1^{(1)}(1) \rho_1^{(n-2)}(2) + \dots + U_2^S \rho_1^{(n-1)}(1) [1 + f_1(2)] \right\}. \quad (33)$$

In the right hand side, let us first consider the direct term, where U_2^S is replaced by U_2 : diagrammatically, in the two horizontal lines which follow U_2 , one gets in succession all possible combinations of lower order “branches”. For instance, two second order terms ($n = 2$) are shown in the third line of Figure 5; two others should follow with an additional U_2 connected in two different ways to the upper cycle. As for the exchange term, it gives a diagram where the first U_2 reconnects to the initial exchange cycle, so that this time it is the line between the two contact points and the line after the second point which play the role of the two lines after the U_2 ; nevertheless the situation remains essentially the same with a different topology (taking again the example of second order terms, one would get 4 more diagrams where the first U_2 is folded over the same initial cycle). We then see that, when the iteration is continued to infinity, it provides once, and once only, all possible “branched” diagrams with an arbitrary number of U_2 's: indeed, equation (33) provides a convenient way

¹¹ The equation is written for the case where $n > 1$; if $n = 1$, the curly bracket of (33) is simply equal to $\{U_2^S [1 + f_1(1)] [1 + f_1(2)]\}$. A more precise discussion is given in Appendix A.



Fig. 6. Diagrams containing loops which are not included in the Ursell-Dyson approximation, but will be in the more elaborate integral equation of Section 3.2; the second diagram corresponds to the exchange term of the first.

to perform a summation containing an infinite number of diagrams and cycles with infinite length. Nevertheless one should keep in mind that this is not exact either: more complicated diagrams, which are not simply “branched”, are still not included, for instance those containing loops such as those of Figure 6.

Remark: equation (32) is a simple generalization of (30), but one could think of other simple iteration equations¹², for instance:

$$\rho_1(1) = f_1(1) + 2z^2 [1 + \rho_1(1)] \times \text{Tr}_2 \left\{ U_2^{S,A}(1,2) [1 + \rho_1(1)] [1 + \rho_1(2)] \right\} \quad (34)$$

(the only difference with (32) is that one f_1 has been replaced by one ρ_1). Nevertheless, one can easily convince oneself that this equation is not satisfactory since it just introduces redundancy, actually already at second order in U_2 .

3.2 A more elaborate integral equation

The approximation made in the preceding section can be completed by adding terms where U_2 operators connect twice the same pair of cycles so that they introduce loops. In fact, to include them, it is sufficient to add the following term to the right hand side of (32):

$$z^4 [1 + f_1(1)] \times \text{Tr}_2 \left\{ [U_2(1,2) [1 + \rho_1(1)] [1 + \rho_1(2)]]^2 [1 + P_{\text{ex.}}] \right\} = 2z^4 [1 + f_1(1)] \text{Tr}_2 \left\{ [U_2^S(1,2) [1 + \rho_1(1)] [1 + \rho_1(2)]]^2 \right\} \quad (35)$$

(the second line is easily obtained by introducing the symmetrizer $[1 + P_{\text{ex.}}]/2$, which is a projector and can therefore be raised to any power, and using the commutation between this operator and U_2). When this is done, diagrams with an arbitrary number of pairs of U_2 's touching twice the same two cycles are included, as illustrated by the example shown in Figure 7. Note that, since the right hand side of equation (33) now contains the sum of two terms, any combination remains possible: some cycles may be connected only once by a U_2 , others twice. We note in passing that, in these new diagrams, every U_2 does not

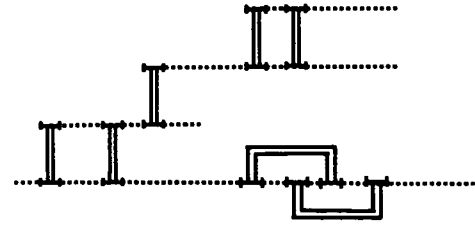


Fig. 7. A typical diagram containing several loops, which is included in equation (37).

necessarily introduce a trace over a new particle, as opposed to the situation in branched diagrams.

There is no special difficulty in including now terms with an arbitrary number q of operators U_2 's forming a ladder between the same two cycles; one now has to add the following term to the right hand side of (33):

$$z^{2q} [1 + f_1(1)] \times \text{Tr}_2 \left\{ [U_2(1,2) [1 + \rho_1(1)] [1 + \rho_1(2)]]^q [1 + P_{\text{ex.}}] \right\} = 2z^{2q} [1 + f_1(1)] \text{Tr}_2 \left\{ [U_2^S(1,2) [1 + \rho_1(1)] [1 + \rho_1(2)]]^q \right\}. \quad (36)$$

The summation of all these contributions, from $q = 1$ as in Section 3.1 up to infinity, is possible and provides the following generalization of (32):

$$\rho_1(1) = f_1(1) + 2z^2 [1 + f_1(1)] \times \text{Tr}_2 \left\{ \frac{U_2^S(1,2) [1 + \rho_1(1)] [1 + \rho_1(2)]}{1 - z^2 U_2^S(1,2) [1 + \rho_1(1)] [1 + \rho_1(2)]} \right\}. \quad (37)$$

At this level of approximation, diagrams similar to that of Figure 7 with a completely arbitrary number of vertical lines connecting the same two cycles are generated. It is interesting to note that the summation of diagrams introduces into the trace an operator which can be seen as a two body generalization of the one particle distribution function of the ideal gas; one can easily see that more complex terms would introduce three particle terms, etc.

3.3 Discussion

Clearly, the fact that almost all weights are eliminated from the diagrams for the density operator (if no other operator than U_1 and U_2 is considered) is the source of great simplification in all calculations; similar calculations for the expansion of $\log Z$ would have been much more difficult. If necessary, one could readily include in the integral equation more complicated terms, such as for instance that corresponding to the diagrams of Figure 8, or the second diagram of Figure 4, chained an arbitrary number of times. We will see, nevertheless, that in dilute gases only a limited ensemble of diagrams play a role in the determination of the critical temperature.

¹² Another remark is that the 1's are indispensable in (32); otherwise diagrams where U_2 is not directly followed with U_1 's would be excluded.



Fig. 8. Examples of diagrams that are not included in equation (37).

4 A mean-field like approximation

We first study equation (32) and calculate the value of the diagonal elements $\rho_{\mathbf{k}}$ of the one-particle density operator; translational invariance in a box with periodic boundary conditions ensures that the plane waves $|\mathbf{k}\rangle$ are the eigenstates of ρ_1 . These diagonal elements are then:

$$\rho_{\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k} | \rho_1 | \mathbf{k} \rangle \quad (38)$$

while, for the ideal gas, they have the value:

$$f_{\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k} | f_1 | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{-\beta \tilde{e}_{\mathbf{k}}}}{1 - e^{-\beta \tilde{e}_{\mathbf{k}}}} = \frac{1}{e^{\beta \tilde{e}_{\mathbf{k}}} - 1} \quad (39)$$

where f_1 has been defined in (28) and $\tilde{e}_{\mathbf{k}}$ is the difference between the energy and the chemical potential:

$$\tilde{e}_{\mathbf{k}} = e_{\mathbf{k}} - \mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \quad (40)$$

and m the mass of the bosons. We will also replace the value of the diagonal matrix elements of U_2^S by their expression as a function of the (symmetrized) Ursell length $a_U^S(k)$, which is given in equations (17, 4) of [45]:

$$z^2 \langle \mathbf{k}, \mathbf{k}' | U_2^S | \mathbf{k}, \mathbf{k}' \rangle = -\frac{\lambda_T^2}{\mathcal{V}} e^{-\beta[\tilde{e}_{\mathbf{k}} + \tilde{e}_{\mathbf{k}'}]} \times a_U^S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \quad (41)$$

where λ_T is the thermal wavelength:

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \quad (42)$$

(with usual notation) and $\mathcal{V}$ the volume of the container. But, as shown in this reference, the symmetric Ursell length is almost constant at low energies and equal to twice¹³ the scattering length a (if interactions occur *via* hard cores, a is merely their diameter). We therefore write:

$$z^2 \langle \mathbf{k}, \mathbf{k}' | U_2^S | \mathbf{k}, \mathbf{k}' \rangle = -2 \frac{\lambda_T^2}{\mathcal{V}} e^{-\beta[\tilde{e}_{\mathbf{k}} + \tilde{e}_{\mathbf{k}'}]} \times a \quad (43)$$

which is a very good approximation for low temperature gases (except, of course, if accidental collision resonances occur at very low energies); moreover we will assume in all the rest of this article that a is positive (repulsive interactions).

¹³ This factor two corresponds to the well-known statistical increase of the interaction between two identical bosons.

4.1 A set of non-linear coupled equations

Projecting (32) over the plane waves provides the relation:

$$\rho_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} [1 + f_{\mathbf{k}'}] \left[-\frac{4a\lambda_T^2}{\mathcal{V}} \right] \times e^{-\beta[\tilde{e}_{\mathbf{k}} + \tilde{e}_{\mathbf{k}'}]} [1 + \rho_{\mathbf{k}}] [1 + \rho_{\mathbf{k}'}]. \quad (44)$$

It is convenient to introduce the variables:

$$X_{\mathbf{k}} = e^{-\beta \tilde{e}_{\mathbf{k}}} [1 + \rho_{\mathbf{k}}] \quad (45)$$

as well as the dimensionless coupling constant:

$$\alpha = 4 \frac{\lambda_T^2}{\mathcal{V}} a. \quad (46)$$

Dividing both sides of equation (44) by the same factor $[1 + f_{\mathbf{k}}]$ then provides the simpler equation:

$$\alpha \sum_{\mathbf{k}'} X_{\mathbf{k}'} X_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} - 1 = 0 \quad (47)$$

with the notation:

$$\xi_{\mathbf{k}} = 1 - e^{\beta \tilde{e}_{\mathbf{k}}}. \quad (48)$$

These equations can be obtained by stationarity conditions applied to a function Φ ; see Appendix B.

If all variables $X_{\mathbf{k}'}$ except $X_{\mathbf{k}}$ are considered as given, $X_{\mathbf{k}}$ is the solution of a simple quadratic equation:

$$\alpha (X_{\mathbf{k}})^2 - \xi'_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} - 1 = 0 \quad (49)$$

with:

$$\xi'_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}} - \Delta \bar{\xi}_{\mathbf{k}} \quad (50)$$

and¹⁴:

$$\Delta \bar{\xi}_{\mathbf{k}} = \alpha \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} X_{\mathbf{k}'}. \quad (51)$$

The solution is straightforward:

$$X_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2\alpha} \left[\xi'_{\mathbf{k}} + \sqrt{(\xi'_{\mathbf{k}})^2 + 4\alpha} \right] \quad (52)$$

but one should keep in mind that this is an implicit solution: $X_{\mathbf{k}}$ depends on all the other $X_{\mathbf{k}'}$ through $\Delta \bar{\xi}_{\mathbf{k}}$ (which accounts for the mean repulsion exerted by all the other levels), while in turn these variables depend on $X_{\mathbf{k}}$ through their own $\Delta \bar{\xi}_{\mathbf{k}'}$. The corresponding system of coupled equations will be solved graphically in the next section; for the moment, we assume for simplicity that all $X_{\mathbf{k}'}$'s are kept constant and study the variations of $X_{\mathbf{k}}$.

¹⁴ The bar in $\Delta \bar{\xi}$ is used to emphasize the mean-field character of this correction; in the next section we will include in $\xi'_{\mathbf{k}}$ additional terms arising from correlations.

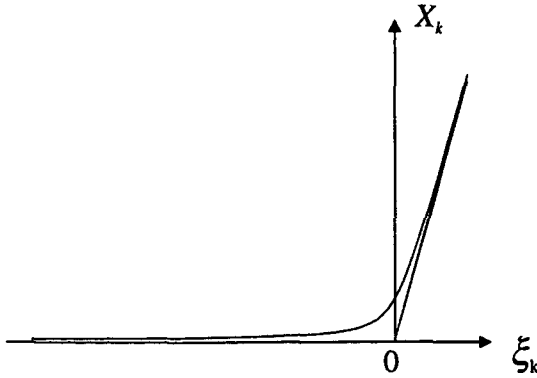


Fig. 9. Variations of X_k as a function of ξ_k ; when ξ_k is positive, X_k reaches a regime where it becomes proportional to the volume of the system.

Figure 9 shows this variations as a function of ξ'_k . We can distinguish between two different regimes; first, when ξ'_k is negative, one gets from (52):

$$X_k \simeq -\frac{1}{\xi'_k} = \frac{1}{e^{\beta \tilde{e}_k} - 1 + \Delta \bar{\xi}_k} \quad (53)$$

and:

$$\rho_k = e^{\beta \tilde{e}_k} X_k - 1 = \frac{1 - \Delta \bar{\xi}_k}{e^{\beta \tilde{e}_k} - 1 + \Delta \bar{\xi}_k} \quad (54)$$

which is very reminiscent of the equations for the ideal gas; for instance, if $\beta \tilde{e}_k \ll -1$, the population of the level in question is given by a Boltzmann exponential. Actually, the effect of the "mean repulsion" $\Delta \bar{\xi}_k$ can be expressed in terms of a positive correction to the chemical potential:

$$\Delta \bar{\mu}_k = -\beta^{-1} \log(1 - \Delta \bar{\xi}_k) \quad (55)$$

so that, with this notation, (54) becomes:

$$\rho_k = \frac{1}{e^{\beta \tilde{e}_k + \Delta \bar{\mu}_k} - 1} = f_1(k; \mu - \Delta \bar{\mu}_k). \quad (56)$$

The second regime occurs when ξ'_k crosses zero and becomes positive: in this process, the population does not diverge, in contrast to what would happen for the ideal gas, but reaches a new regime where its value depends explicitly of the coupling constant:

$$X_k \simeq \frac{\xi'_k}{\alpha}. \quad (57)$$

Actually, since α is inversely proportional to the volume, the population in question becomes extensive, as expected for the ground state when it undergoes Bose-Einstein condensation.

Equations (51, 53) provide the system of coupled equations to be solved: each X_k depends on the value of its associated $\Delta \bar{\xi}_k$, which in turn depends on all the other $X_{k'}$'s; in general, the solution is complicated. Fortunately, in the thermodynamic limit, it becomes simpler since the

contribution of each single $X_{k'}$ to $\Delta \bar{\xi}_k$ becomes negligible, so that the sum in (51) can be extended to include $k' = k$ and become independent of k . This is because, as shown by definition (46), the coupling constant α tends to zero when the volume becomes infinite, while the correction $\Delta \bar{\xi}_k$ remains finite (in the same limit, the discrete sum becomes an integral which contains a density of states which is proportional to the volume). In fact, for the contribution of a single $X_{k'}$ to remain significant, the level in question has to get a population which is proportional to the volume (extensive).

In what follows we will therefore replace all the $\Delta \bar{\xi}_k$'s by the same value $\Delta \bar{\xi}$ defined by:

$$\Delta \bar{\xi} = \alpha \sum_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} = \frac{\alpha \mathcal{V}}{8\pi^3} \int d^3 \mathbf{k} X(\mathbf{k}). \quad (58)$$

This is possible as long as the system is not Bose condensed; but, if one level k_0 were condensed, one would have to add its contribution αX_{k_0} to this integral.

4.2 Graphical solution

We can solve the coupled equations by a self-consistent procedure: first we consider $\Delta \bar{\xi}$ as given, then use its value to calculate the $X_{\mathbf{k}}$'s, from which we can obtain the sum (we assume that the system is not condensed):

$$\frac{\alpha \mathcal{V}}{8\pi^3} \int d^3 \mathbf{k} X(\mathbf{k}) = 4 \frac{a}{\lambda_T} J(\Delta \bar{\xi}) \quad (59)$$

where J is the dimensionless integral:

$$J = \left(\frac{\lambda_T}{2\pi} \right)^3 \int d^3 \mathbf{k} X(\mathbf{k}). \quad (60)$$

Finally, we close the system by writing that the integral (59) is nothing but $\Delta \bar{\xi}$, which is equivalent to writing the relation:

$$J(\Delta \bar{\xi}) = \frac{\lambda_T}{4a} \Delta \bar{\xi} \quad (61)$$

and leads to a graphical solution of the self-consistent equations.

Depending on the context, it will be convenient to express $\Delta \bar{\xi}$ either in terms of a change $\Delta \bar{\mu}$ of the chemical potential:

$$\Delta \bar{\mu} = -\beta^{-1} \log(1 - \Delta \bar{\xi}) \quad (62)$$

or of a change of the fugacity Δz defined by:

$$\Delta \bar{z} = z [e^{-\beta \Delta \bar{\mu}} - 1] = -z \Delta \bar{\xi} \quad (63)$$

but, needless to say, these three quantities remain essentially the same parameter. For an uncondensed level, (53) then provides:

$$X_k = \frac{1}{e^{\beta \tilde{e}_k} - 1 + \Delta \bar{\xi}} = \frac{1}{1 - \Delta \bar{\xi}} \frac{1}{e^{\beta(\tilde{e}_k + \Delta \bar{\mu})} - 1}. \quad (64)$$

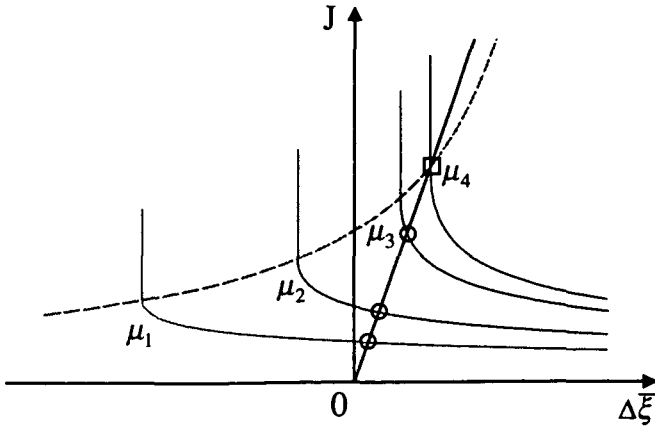


Fig. 10. Plots of the function $J(\mu, \Delta\bar{\xi})$ as a function of $\Delta\bar{\xi}$ for various values of the chemical potential μ ($\mu_1 < \mu_2 < \mu_3 < \mu_4$); for each value of the chemical potential, the solution of the coupled equations is given by the intersection point with the straight line $J = \Delta\bar{\xi}\lambda_T/4a$ (point shown with a circle in the figure). The dotted line corresponds to the hyperbolic trajectory of the singular point; the critical point ($\mu = \mu_4$) is obtained by intersecting this hyperbola with the same straight line (point shown with a square in the figure).

From (64, 60) we now get:

$$J = \frac{1}{1 - \Delta\bar{\xi}} \times g_{3/2} [z(1 - \Delta\bar{\xi})] \quad (65)$$

where $g_{3/2}(z)$ is defined as usual by:

$$g_{3/2}(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^{3/2}}. \quad (66)$$

This function is defined only for values of z ranging from 0 to 1. Therefore, when the value of μ is fixed, the integral J is defined only for values of $\Delta\bar{\xi}$ ranging from the minimum initial value ($1 - e^{-\beta\mu}$) up to one. When $\Delta\bar{\xi}$ takes this minimum value, the value of J goes to its maximum:

$$J_{\max} = \frac{g_{3/2}(1)}{1 - \Delta\bar{\xi}} = \frac{2.61..}{1 - \Delta\bar{\xi}} \quad (67)$$

but, if one added the discrete contribution of the condensed ground state to the integral, the sum could take any value beyond $J_{\max}$. for this particular value of $\Delta\bar{\xi}$, the difference being proportional to the ground state population. Figure 10 shows plots of J as a function of $\Delta\bar{\xi}$, the chemical potential μ being considered as a parameter; when μ varies, according to (67), the point of coordinates $(\Delta\bar{\xi}, J_{\max})$ moves on a hyperbola (shown with a broken line).

For any given value of μ , equation (61) indicates that the value of $\Delta\bar{\xi}$ is obtained by intersecting the curve corresponding to J with a straight line going through the origin with slope $\lambda_T/4a$; the intersection point is shown by a circle in the figure. The construction shows that, as long as μ is very negative (classical region), $\Delta\bar{\xi}$ remains only a small correction; but the situation changes when

μ approaches zero, and more and more significant corrections are introduced, provided of course the dilution parameter a/λ_T is not too small. At some critical positive value $\bar{\mu}_{cr.}$, the value of $\Delta\bar{\xi}$ reaches its limit, and the system undergoes Bose-Einstein condensation¹⁵; this value is merely obtained by intersecting the hyperbola with the straight line, which provides:

$$\Delta\bar{\xi}_{cr.} = \frac{4a}{\lambda_T} \frac{2.61..}{1 - \Delta\bar{\xi}_{cr.}} \simeq 2.61.. \frac{4a}{\lambda_T}. \quad (68)$$

Since at the transition point $\mu - \Delta\bar{\mu} = 0$, this corresponds to the following value for the chemical potential:

$$\mu = \bar{\mu}_{cr.} = \Delta\bar{\mu}_{cr.} \simeq \frac{10.44..}{\beta} \frac{a}{\lambda_T}. \quad (69)$$

Finally, equation (56) shows that the number of particles as a function of μ is given by:

$$N = \frac{\mathcal{V}}{8\pi^3} \int d^3\mathbf{k} \rho_{\mathbf{k}} = \frac{\mathcal{V}}{8\pi^3} \int d^3\mathbf{k} f_1(k; \mu - \Delta\bar{\mu}). \quad (70)$$

At the critical value of the chemical potential, $\mu = \Delta\bar{\mu}$, and the degeneracy parameter $n\lambda_T^3$ is thus predicted to have exactly the same value 2.61... as for the ideal gas. Therefore, what we find within this Ursell-Dyson approximation is a relatively straightforward result: the only effect of the repulsive interactions is to change the effective value of the chemical potential, which allows positive values of μ to be reached; otherwise no change (velocity distribution, critical degeneracy parameter) is introduced.

5 Beyond mean-field: velocity dependent effects

We will now go beyond the Ursell-Dyson approximation and study which new effects are introduced by this more accurate treatment of the problem; we will see that qualitatively new effects are indeed introduced, which are strongly velocity-dependent.

5.1 A new set of equations

When (35) is added to the right hand side of (32), a new feature immediately appears: in (35), a momentum transfer $\mathbf{q}$ can now take place, introducing off-diagonal matrix

¹⁵ The geometrical construction implies that this transition point can be reached only the value of the dilution parameter a/λ_T is sufficiently small; a simple calculation shows that this parameter should be smaller than $4g_{3/2}(1)^{-1}$ (which is close to 10%). If a/λ_T was larger, the trajectory of the point with coordinates $(\Delta\bar{\xi}_{min.}, J_{\max})$ would pass above the straight line without ever crossing it; but a/λ_T is also the parameter which determines the validity of the low energy approximation that we have made in the treatment of binary interactions, so that this situation would simply be beyond the domain of validity of the calculation.

elements¹⁶ of U_2 . In order to simplify the calculations, we will nevertheless ignore their dependence on $\mathbf{q}$ and merely assume that:

$$z^2 \langle \mathbf{k}, \mathbf{k}' | U_2^S | \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}' - \mathbf{q} \rangle = -2 \frac{\lambda_T^2}{V} e^{-\frac{\beta}{2}} \bar{e}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \bar{e}_{\mathbf{k}'} + \bar{e}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \bar{e}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \times a. \quad (71)$$

In Appendix C we discuss these off-diagonal matrix elements and show that this is a reasonable approximation; but it is not essential. Equation (47) is then replaced by:

$$\alpha \sum_{\mathbf{k}'} X_{\mathbf{k}'} \left[1 - \frac{\alpha}{2} \sum_{\mathbf{q}} X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} X_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \right] X_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} - 1 = 0 \quad (72)$$

while the generalization to the more complete equation (37) would lead to:

$$\alpha \sum_{\mathbf{k}'} X_{\mathbf{k}'} \left[1 + \frac{\alpha}{2} \sum_{\mathbf{q}} X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} X_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \right]^{-1} X_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} - 1 = 0. \quad (73)$$

We note in passing that, at each "scale of the ladder" contained in the diagrams, momentum conservation takes place, which is why the new sum extends over one index $\mathbf{q}$ only.

In the absence of condensation, the new term becomes an integral with a factor (density of states) proportional to the volume V , which cancels the V^{-1} contained in α ; the result is then independent of the volume, exactly as in the Ursell-Dyson approximation. On the other hand, it contains an extra factor a/λ_T (dilution parameter), which ensures that the additional correction is smaller than that considered in the first approximation. Now, if the ground state is condensed, X_0 becomes proportional to the volume; if $\mathbf{k} + \mathbf{k}' \neq 0$, the two indices $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ and $\mathbf{k}' - \mathbf{q}$ never vanish for the same value of $\mathbf{q}$ so that X_0 now adds two constants to the integral; if $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = 0$, the two indices vanish simultaneously when $\mathbf{q} = -\mathbf{k}$, so that one gets a contribution proportional to the volume. In the latter case, the sum diverges in the thermodynamic limit, a situation which never occurred in the Ursell-Dyson approximation; this is a first indication of a special coupling between opposite values of the momentum in the presence of condensation.

If only one $X_{\mathbf{k}}$ varies, while all the other are kept constant, the value of $X_{\mathbf{k}}$ is obtained as the solution of an algebraic equation; to write it explicitly, it is convenient to expand (72) term by term; when $\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}$, we obtain:

$$\alpha X_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} X_{\mathbf{k}'} \left[1 - \alpha X_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}'} - \frac{\alpha}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} X_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \right] \quad (74)$$

while, if $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$, the result is changed into:

$$\alpha (X_{\mathbf{k}})^2 \left[1 - \frac{\alpha}{2} (X_{\mathbf{k}})^2 - \frac{\alpha}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right]. \quad (75)$$

Adding these contributions provides the equation:

$$-\frac{\alpha^2}{2} (X_{\mathbf{k}})^4 + \alpha (X_{\mathbf{k}})^2 \left[1 - \frac{\alpha}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \alpha \sum_{\mathbf{k}'} (X_{\mathbf{k}'}^2) \right] - \xi'_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} - 1 = 0 \quad (76)$$

where $\xi'_{\mathbf{k}}$ is now defined by:

$$\xi'_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}} - \alpha \sum_{\mathbf{k}'} X_{\mathbf{k}'} + \frac{\alpha^2}{2} \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} X_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} X_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}. \quad (77)$$

These results generalize (49, 50, 51); they are no longer second degree equations, since they contain higher degree terms. Nevertheless, all these terms contain one extra power of α , which is inversely proportional to the volume, so that in the thermodynamic limit they remain negligible as long as $X_{\mathbf{k}}$ is not proportional (at least) to the square root of the volume – actually, exactly as was already the case for the quadratic term in (49). Under these conditions, the situation remains essentially similar to that discussed in the preceding section, and $X_{\mathbf{k}}$ is determined by the linear terms only:

$$X_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\xi'_{\mathbf{k}}}. \quad (78)$$

The only difference is that $\xi'_{\mathbf{k}}$ is now given by (77), which contains a correction proportional to α^2 .

If we change sums into integrals, we get:

$$\xi'_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}} - \Delta \bar{\xi} + \delta \xi_{\mathbf{k}} \quad (79)$$

where $\Delta \bar{\xi}$ is defined as above by:

$$\Delta \bar{\xi} = 4 \frac{a}{\lambda_T} \left(\frac{\lambda_T}{2\pi} \right)^3 \int d^3 \mathbf{k}' X(\mathbf{k}') \quad (80)$$

while the additional (second order) correction $\delta \xi_{\mathbf{k}}$ is given by:

$$\delta \xi_{\mathbf{k}} = 8 \left(\frac{a}{\lambda_T} \right)^2 \left(\frac{\lambda_T}{2\pi} \right)^6 \int d^3 \mathbf{k}' X(\mathbf{k}') \times \int d^3 \mathbf{q} X(\mathbf{k} + \mathbf{q}) X(\mathbf{k}' - \mathbf{q}). \quad (81)$$

A new feature which appears in this correction is a dependence on $\mathbf{k}$, which will introduce velocity-dependent

¹⁶ The matrix elements of U_2 obey a momentum selection rule, but none for energy conservation – see for instance Appendix B.

effects; this can be seen better by rewriting the second integral in the form:

$$\int d^3q' X\left(\frac{\mathbf{k} + \mathbf{k}'}{2} + \mathbf{q}'\right) X\left(\frac{\mathbf{k} + \mathbf{k}'}{2} - \mathbf{q}'\right) \quad (82)$$

which appears as a convolution integral of the momentum distribution with itself, with a maximum when $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = 0$. As a consequence, while $X_{\mathbf{k}}$ is coupled through $\delta\xi_{\mathbf{k}}$ to all other $X_{\mathbf{k}'}$'s, the maximum coupling takes place with $X_{-\mathbf{k}}$, which then implies that $\delta\xi_{\mathbf{k}}$ is a larger correction near the center of the velocity distribution (because the preferred coupling occurs with $X_{\mathbf{k}'}$'s which are large) than in its wings (where velocity classes are preferentially coupled to smaller $X_{\mathbf{k}'}$'s).

5.2 A shift in the transition parameter

As in Section 4, we have to solve equations consistently since the $X_{\mathbf{k}}$'s depend on the corrections $\Delta\bar{\xi}$ and $\delta\xi_{\mathbf{k}}$ which, in turn, depend on the $X_{\mathbf{k}}$'s, a complicated problem in general. Nevertheless, we can already get a general idea of the changes introduced by the new corrections by assuming for a moment that they are known, or at least just the correction $\delta\xi_0$ for the ground state. Figure 11 then summarizes the comparison between the Ursell-Dyson approximation and the theory including $\delta\xi_0$. The full line shows the variations of $\Delta\bar{\mu}$ as a function of μ , which at $\mu = \bar{\mu}_{cr.}$ reaches tangentially the straight line corresponding to the condensation condition $\mu + \Delta\bar{\mu} = 0$; we note that, when $\mu \rightarrow \bar{\mu}_{cr.}$ (by lower values), $\Delta\bar{\mu}$ remains a function of the chemical potential which keeps a continuous derivative¹⁷. The broken line illustrates the changes to this construction introduced by $\delta\xi_0$, or equivalently by the correction $\delta\mu_0$ defined by analogy with (62) (and for any value of $\mathbf{k}$) as:

$$\delta\mu_{\mathbf{k}} - \Delta\bar{\mu} = \beta^{-1} \log(1 - \Delta\bar{\xi} + \delta\xi_{\mathbf{k}}). \quad (83)$$

The new transition point occurs when the total effective chemical potential of the ground state vanishes:

$$\mu - \Delta\bar{\mu} + \delta\mu_0 = 0 \quad (84)$$

which corresponds to a lower value $\mu_{cr.}$ of the chemical potential, and no longer to a tangential contact. An interesting feature is that the square root behavior of $\Delta\bar{\mu} - \mu$ near $\mu = \bar{\mu}_{cr.}$ may introduce a non-analytical behavior of the solution; in Appendix D we write down in more detail the local expansion of $\Delta\bar{\mu}$ and show, for instance, why the correction to $\mu_{cr.}$ is second order in a , despite this square root behavior. Qualitatively, we can already guess that the critical value of the degeneracy parameter will be lowered in the process; this is because the excited levels get a correction $\delta\xi_{\mathbf{k}}$ which is smaller than $\delta\xi_0$, and therefore

¹⁷ Figure 10 shows that the slope of the curve giving the variations of J as a function of $\Delta\bar{\xi}$ becomes infinite when the curve connects to the vertical straight line – no discontinuity takes place in the derivative of $\Delta\bar{\xi}$ as a function of μ .

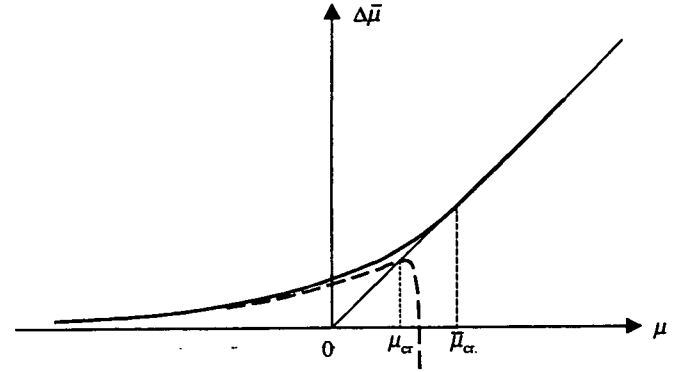


Fig. 11. Variations as a function of μ of the mean-field correction $\Delta\bar{\mu}$ to the chemical potential (full line); the corresponding critical value is $\bar{\mu}_{cr.}$. A more detailed treatment includes the extra correction $-\delta\mu_0$ (broken line) and reduces the critical value to a new value $\mu_{cr.}$.

experience at the new transition point an effective chemical potential which is more negative than it was in the Ursell-Dyson approach (a differential effect); but we now evaluate this correction more qualitatively.

A graphical solution of the consistent equations would be more complicated than in the preceding section, mostly because one single parameter $\Delta\bar{\xi}$ is no longer sufficient to characterize the effect of the interactions on all velocity classes. We can nevertheless resort to a “first $\delta\xi$ iteration”, namely calculate the $\delta\xi_{\mathbf{k}}$'s from (81) by assuming that the $X_{\mathbf{k}}$ still have the values that they had in the Ursell-Dyson approximation, and then use this correction to calculate new $X_{\mathbf{k}}$'s as well as new populations. Of course, in theory, this should be only the initial step of an iteration procedure, which should be repeated until convergence is obtained, but for the moment we limit ourselves to this first approximation.

Under these conditions, (81) becomes:

$$\delta\xi_{\mathbf{k}} \simeq 4 \left(\frac{a}{\lambda_T} \right) \left(\frac{\lambda_T}{2\pi} \right)^3 e^{\beta\Delta\bar{\mu}} \times \int d^3k' f_1(\mathbf{k}'; \mu - \Delta\bar{\mu}) J(\mathbf{k} + \mathbf{k}'; \mu - \Delta\bar{\mu}) \quad (85)$$

where the integral J is defined by:

$$J(\mathbf{K}; \mu - \Delta\bar{\mu}) = 2 \left(\frac{a}{\lambda_T} \right) \left(\frac{\lambda_T}{2\pi} \right)^3 e^{2\beta\Delta\bar{\mu}} \times \int d^3q f_1\left(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{q}; \mu - \Delta\bar{\mu}\right) f_1\left(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{q}; \mu - \Delta\bar{\mu}\right). \quad (86)$$

These two integrals can be calculated by expanding f_1 in series as in equation (27); integrating the Gaussian functions provides:

$$J(\mathbf{K}; \mu - \Delta\bar{\mu}) = 2 \left(\frac{a}{\lambda_T} \right) e^{2\beta\Delta\bar{\mu}} \sum_{l,m} (l+n)^{-3/2} \times \exp \left\{ -\frac{\ln}{l+n} \frac{\lambda_T^2}{4\pi} K^2 + \beta(l+n)(\mu - \Delta\bar{\mu}) \right\} \quad (87)$$

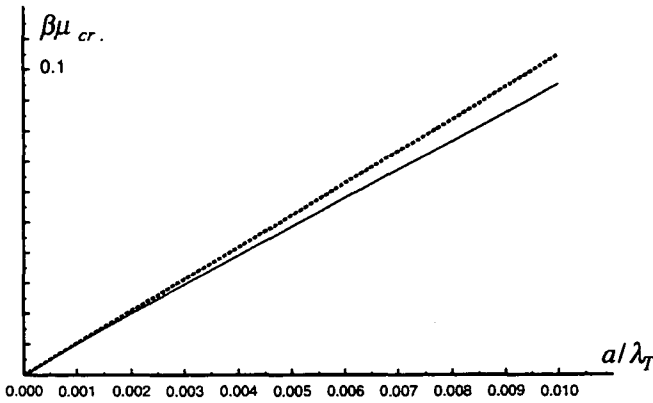


Fig. 12. Variations of the critical value of the chemical potential as a function of the dimensionless interaction parameter a/λ_T of the gas. The dotted upper straight line corresponds to the prediction of the Ursell-Dyson (mean-field) approach, equation (69); the lower line includes the velocity dependent effects, treated within the first iteration corresponding to equation (88).

and:

$$\delta\xi_k \simeq 8 \left(\frac{a}{\lambda_T} \right)^2 e^{3\beta\Delta\bar{\mu}} \sum_{l,n,p} [(l+n)p + ln]^{-3/2} \times \exp \left\{ -\frac{lnp}{(l+n)p + ln} \frac{\lambda_T^2}{4\pi} k^2 + \beta(l+n+p)(\mu - \Delta\bar{\mu}) \right\}. \quad (88)$$

The procedure is therefore the following: we start from an arbitrary value of μ and use the above expressions (as well as those of Sect. 4.2 for the mean-field values) to calculate the effective chemical potential (83) for each velocity class; as long as this function remains negative for all values of k , the population ρ_k of each level is given by the direct generalization of (56):

$$\rho_k = f_1(k; \mu - \Delta\bar{\mu} + \delta\mu_k). \quad (89)$$

Now, when μ increases, at some point condition (84) is met – see Figure 11 – and condensation takes place. Figure 12 shows a plot of the variations of this critical value of μ as a function of the dimensionless parameter a/λ_T , with, as a point of comparison, the dotted straight line obtained from the mean-field value (69); we see that the mean-field theory gives a good approximation of the value of the chemical potential.

For this critical value of μ , and for three values of the parameter a/λ_T , Figure 13 then shows the variations of $\delta\xi_k \simeq \beta\delta\mu_k$ as a function of k , in units λ_T^{-1} where the width of the thermal velocity distribution $k^2 f_1(k, 0)$ is about 4. An obvious feature in the figure is that the correction $\delta\mu_k$ is neither constant (which would lead to an unchanged critical degeneracy parameter) nor a simple quadratic function of k (which would lead to an effective mass effect). In fact it has a structure within the thermal velocity distribution, which resembles a Gaussian function, and which is narrower, but not by a large factor (2

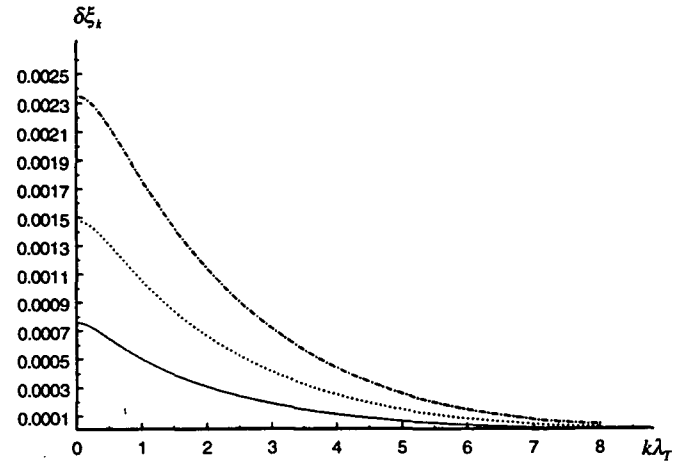


Fig. 13. Variations of the correction to the energy of the atoms as a function of their momentum, in dimensionless units $k\lambda_T$ (the half-height width of the thermal distribution is then about 4); the results are obtained by a first iteration of the non-linear equations and the value of the chemical potential is adjusted to its critical value within this approximation. The lowest curve corresponds to $a/\lambda_T = 0.002$ and its width is 1.55; the middle curve to $a/\lambda_T = 0.003$, and its width is 1.75; the upper curve is for $a/\lambda_T = 0.004$ and its width is 1.95. This shows that the velocity-dependent corrections remain localized at the center of the velocity profile.

or 3 in this case); this creates an intermediate physical situation so that quantitative predictions require a somewhat more detailed study of the perturbations within the velocity profile. According to (84), the expression of the critical density can be obtained by the following summation over velocities:

$$n_{cr.} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k f_1(k, \mu = \delta\mu_0 - \delta\mu_k). \quad (90)$$

This expression was used to calculate numerically the values of the critical degeneracy parameter $n\lambda_T^3$ as a function of the dilution parameter a/λ_T (also equal to $1.38 \dots \times n^{1/3}a$ near the transition temperature); the results are shown in Figure 14, expressed in terms of the difference between this critical value and the value 2.612... for the ideal gas. We see that the integration over velocities gives rise to a correction which turns out to be, at least approximately, linear in a/λ_T . As a point of comparison, we also show (lowest line) the results of a recent path integral quantum Monte-Carlo calculation [32]; the agreement is satisfactory but not perfect; below we discuss possible improvements.

At this point, it becomes possible to discuss in more detail the physical origin of these results. Mathematically, the key role in the mechanism is played by $\delta\xi_k$, a correction which tends to increase effective chemical potential of a velocity class k , while $\Delta\xi$ had just the opposite effect. In other words, the mean-field approximation tends to overestimate the repulsion between the velocity classes, so that a correction with the opposite sign is introduced by $\delta\xi_k$; the correction is more important for low velocity classes than for rapid particles. Physically, it is indeed natural

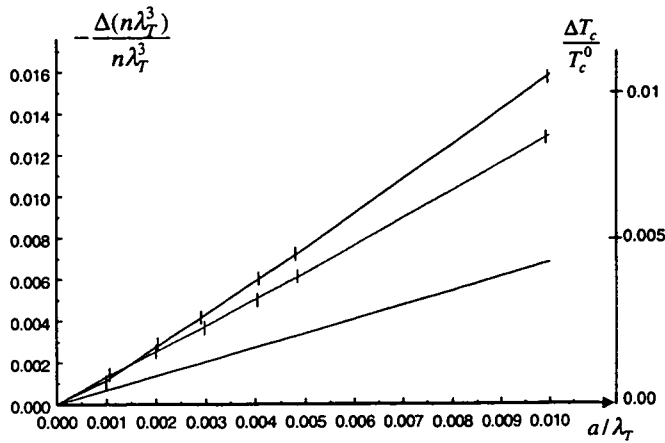


Fig. 14. Relative changes of the degeneracy parameter $n\lambda_T^3$ as a function of the ratio a/λ ; the left vertical axis gives the opposite of this (negative) change, while the right vertical axis corresponds to the equivalent (positive) change of the critical temperature at constant density. The lower line shows the results of the quantum Monte-Carlo calculations of reference [32]; the upper curve corresponds to the results of our calculation within the first iteration of Section 5.2; the middle curve to the more elaborate calculation discussed at the end of Section 5.3, where a denominator $1 + J(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$ is added within the integral giving $\delta\xi_k$ (but still with only one iteration of the non linear equations).

to expect that slow particles should be more sensitive to interactions than fast particles: they can more easily rearrange themselves spatially in order to minimize their repulsive interactions. By contrast, fast particles have too much kinetic energy to have the same sensitivity to small perturbations; the rearrangement does not take place, so that they experience the full mean repulsion $\Delta\bar{\xi}$ (as for uncorrelated particles). The velocity dependence of the correction shown in Figure 13; at the critical temperature, the populations of the low k levels are almost those of the ideal gas, with only a mass renormalization effect introduced by the curvature of the curve at the origin; but those of higher velocities levels get almost no correction $\delta\xi_k$, so that they remain smaller than those of the ideal gas with chemical potential $\mu - \Delta\bar{\mu}$. Since the calculation of the change of the degeneracy parameter $n\lambda_T^3$ requires an integration over all velocities – not only low velocities – we see that the effect can not be understood within an effective mass description only; indeed, a more precise description of the change of the spectrum at all values of k is necessary.

Our results go in the same direction than the views expressed by Nozières [19] concerning the effects of repulsive interactions in a Bose gas, which were found to stabilize the gas against smeared condensation (fractionned condensate): Figure 12 predicts that the populations of the low excited levels are indeed lower than they would be in an ideal gas (assuming a bare mass for the particles), which is an indication or a stronger tendency to populate the ground state exclusively. The physical origin of the effect is nevertheless rather different: reference [19] is

based on the use of a mean-field calculation, where no rearrangement (or change of the velocity profile) can take place; here we find that the changes originate from a differential effect which is essentially beyond mean-field theory. Also, [19] treats a system which is already condensed, while we approach the transition from the non-condensed phase, so that the physics may well be different in both cases. We finally note that the effective mass effect at the center of Figure 11 is of different nature than that calculated in [28]; in particular, it does not require the potential to have a finite range to occur (also, it has the opposite sign: we find a smaller effective mass than the bare mass).

5.3 Discussion; a change in the dispersion relation

The calculations that we have developed are not exact, for two reasons:

(i) we have not solved the coupled equations between the $\delta\xi_k$'s and the X_k , but only a "first $\delta\xi$ iteration" of these equations;

(ii) the initial equation (72) is not exact; (73) is a better approximation, but not exact either, and can be completed with a larger class of diagrams.

When approximation (i) is not made, equations (85–90) are replaced by a system containing, first, the equations providing the X_k 's:

$$X_k = \frac{f_1[k, z(1 - \Delta\bar{\xi} + \delta\xi_k)]}{1 - \Delta\bar{\xi} + \delta\xi_k} \quad (91)$$

and, second, the equations providing the $\delta\xi_k$'s (the mean repulsion $\Delta\bar{\xi}$ keeps the same expression as in the mean-field theory):

$$\delta\xi_k = 4 \left(\frac{a}{\lambda_T} \right) \left(\frac{\lambda_T}{2\pi} \right)^3 \int d^3\mathbf{k}' X_{\mathbf{k}'} \times J(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \quad (92)$$

with:

$$J(\mathbf{K}) = 2 \left(\frac{a}{\lambda_T} \right) \left(\frac{\lambda_T}{2\pi} \right)^3 \int d^3\mathbf{q} X_{\mathbf{q}+\mathbf{K}/2} \times X_{-\mathbf{q}+\mathbf{K}/2}. \quad (93)$$

We do not intend to solve these coupled equations in detail here, but just to discuss in general terms what kind of new physical effects they introduce, as compared to those of the preceding section. A first indication can be obtained by studying what would have been obtained in a "second $\delta\xi$ iteration". Instead of the expressions (85, 86) containing ordinary Bose-Einstein distributions, we would have inside the integrals perturbed distributions, with already a relatively narrow enhancement near the center due to the first iteration. The narrowing effect of the auto-convolution integral, which occurred in the first step, would take place again, so that we would get a still more localized perturbation at the center of the velocity profile. Now, when more and more iterations are added, narrower and narrower perturbations are expected to be introduced at the center, so that at the end there

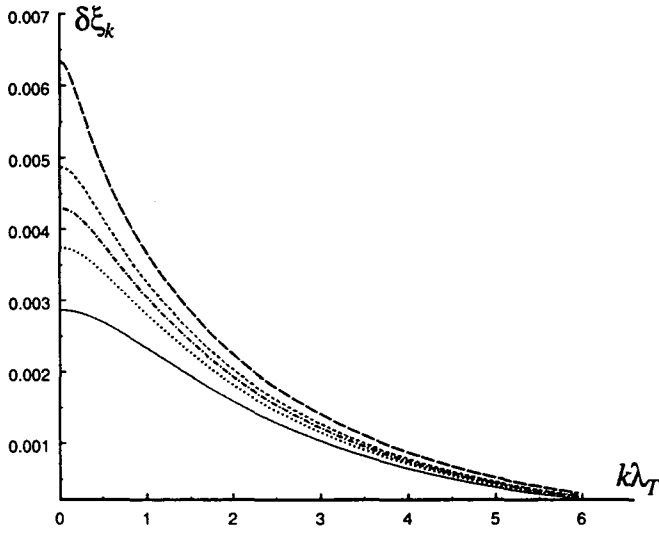


Fig. 15. When more and more iterations are performed in the calculation of the corrections to the energy of the particles, a sharper and sharper localized perturbation occurs at low velocities, so that eventually the spectrum no longer remains quadratic at the origin, but acquires a dependence in $k^{-3/2}$.

is no reason why the correction to the energy should remain quadratic at the origin. The situation is shown in Figure 15.

Actually, this can also be seen from the fact that (92) gives a divergent integral¹⁸ at the critical value of the chemical potential if the X_k 's diverge at the origin as k^{-2} ; such a divergence would be incompatible with the relation $\mu - \Delta\bar{\mu} + \delta\xi_0 = 0$ at the transition point, as visible for instance in Figure 11. In other words, the integral giving $\delta\xi_0$ plays the role of a restoring force in the problem, and the solution has to adapt to keep it finite. Assume then that, at the condensation point, the variations $\delta\xi_k$ for small values of k correspond to a spectrum with a power α of the momentum:

$$\delta\xi_0 - \delta\xi_k \simeq k^\alpha. \quad (94)$$

Then, for small velocities, the populations are proportional to:

$$X_k \simeq k^{-\alpha}. \quad (95)$$

Now insert these expression into expressions (92, 93); since $\delta\xi_k$ is given by a 6 dimension integral of three quantities which vary as $k^{-\alpha}$, we get the relation:

$$k^{6-3\alpha} = k^\alpha \quad (96)$$

or:

$$\alpha = \frac{3}{2}. \quad (97)$$

¹⁸ The first iteration (85) of (92) already diverges, as the logarithm of $|\mu - \Delta\bar{\mu}|$ [46]; this divergence is taken into account in Figure 10.

In the above reasoning, we have implicitly assumed that the behavior of $\delta\xi_k$ for small values of k depends only on the domain of integration close to the origin; our result is then consistent since a function in $k^{3/2}$ will dominate over a quadratic function as long as k is sufficiently small. We recover in this way the modified spectrum already obtained in a different context by Patashinskii and Pokrovskii [47].

As far as the second approximation is concerned, the simplest possibility to go beyond it is to include more diagrams and to use (73) instead of (72), which amounts to adding a denominator $1 + J(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$ under $J(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$ inside the integral (92). The analytical algebra then becomes even more complicated, but we have performed some of the corresponding numerical calculations. The results are shown in the middle line in Figure 14: indeed, they are in better agreement with the quantum Monte-Carlo results than the more crude approximation made before. One could therefore hope that a really good agreement would be attainable by including a larger class of diagrams in our calculations. It is also interesting to note that our conclusion concerning the exponent $\alpha = 3/2$ remains valid in this case, as actually also when a broader class of diagrams is added in the integral equation for ρ_1 ; this is because more and more diagrams can be generated in a process where one U_2 is added, bringing with it two X 's, but also one momentum integration, a process in which the low k dependence of $\delta\xi_0 - \delta\xi_k$ is multiplied by $k^{3-2\alpha}$, a constant if $\alpha = 3/2$. Nevertheless, the exponent is not that expected from the universality class of the transition, which would be closer to the value $\alpha = 2$; this might indicate that, very close to the transition point, logarithmic terms that we have not included in our evaluation of the power counting become important.

6 Conclusion

Our study show that the effect of repulsive interactions is to shift the degeneracy parameter by an amount:

$$\frac{\Delta(n\lambda_T)_{cr.}}{(n\lambda_T)_{cr.}} \simeq -1.3 \frac{a}{\lambda_T} \simeq -(na^3)^{1/3} \quad (98)$$

or, in terms of a shift of critical temperature of the gas at constant density:

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} \simeq \frac{a}{\lambda_T} \simeq 0.7(na^3)^{1/3} \quad (99)$$

where a is the scattering length (assumed to be positive) of the interaction potential and λ_T the thermal wavelength of the atoms. In the case of hard cores, these results are about 80% larger than those resulting from the numerical calculations of [32], which provides a reasonable agreement in view of the approximations that we have made when solving the final non-linear equations; in fact, it is possible that more extensive calculations would lead to a closer agreement. A striking feature of the results of [32] is the presence of two regimes, due to the increase of T_c at low

densities introduced by the repulsive interactions, followed by a decrease at higher densities. This is not an obvious phenomenon: usually interactions tend to mask quantum effects and not to enhance them, so that one could naturally expect a constant decrease of the transition temperature as a function of density. Our approach explains this feature naturally, in terms of a microscopic re-arrangement mechanism which, in essence, automatically leads to an increase of this temperature (for repulsive interactions); the re-arrangement produces an enhancement of the velocity distribution at its center, which develops just above the transition temperature as a precursor, and allow the gas to reach the transition point before its density (integrated over all velocities) reaches the critical density of the ideal gas. In this picture, the mechanism for superfluidity is inherently different from Bose-Einstein condensation in an ideal gas: in a sense one could say that superfluidity triggers condensation, and that this phenomenon takes place at a lower density (or higher temperature) than in a mean field picture. At the transition point, the distortion of the velocity distribution bears some similarity with the results of a Bogolubov transformation (where significant changes of the populations are also introduced for low energy levels); the corresponding spectrum is not linear, but contains an exponent $3/2$, which can be seen as an intermediate value between the high temperature and low temperature regimes, as already pointed out in [47]. In a future article, we intend to extend our theory to lower temperatures and condensed gases in order to make a more precise contact with this transformation. One can also remark that the singular behavior of the mean-field theory near the transition point introduces non-analyticities in the results, mixing up together various orders in the natural expansion parameter a/λ_T ; the presence of a square root in the calculations makes it necessary to push the calculation to higher orders than one would naively expect. This suggests that theories using pseudopotentials may quickly reach their limit, since they are based on expressions of the matrix elements which are valid up to the second power of the potential range; from third order, the behavior of wave functions inside the interaction potential (particles in the middle of a collision) becomes relevant, so that an Ursell approach would be safer.

Concerning the high density regime, it remains for the moment beyond the domain of validity of our calculations: in denser systems, a treatment in terms of Ursell operators or rank exceeding 2 would become necessary. Doing so, one could then hope to see how a mean attractive field develops in order to stabilize a liquid, even before Bose-Einstein condensation is reached – in other words, develop a more complete theory predicting the existence of two transitions (ordinary liquefaction and superfluid transition, as in helium four). But denser systems do not only differ from gases because of the presence of an attractive mean field; the atomic motions are also hindered by the interactions for lack of space, so that the spatial rearrangement which can easily take place in a gas is no longer possible. The physics of the effects of the interactions on exchange and

on the critical temperature of Bose-Einstein transition is therefore significantly different. In a similar perspective, we note that several of the integrals that have been introduced in the treatment beyond the Ursell-Dyson approximation are mathematically different from those of a mean-field treatment: higher dimensions integrals, etc. In other words, the dimensional properties of the transition may be significantly altered by the interactions; this is another possibility that should be explored.

Another approximation which could be released is ignoring the changes as a function of the relative momentum of the Ursell length (or the scattering length), which we have treated as exactly constant; moreover, we have not included the energy dependence of the off-diagonal matrix elements of U_2 . A better treatment could for instance include a quadratic dependence on the relative momentum; one could then reasonably expect to recover the effective mass effect predicted in [28], since it is precisely due to a k dependence of the matrix elements; in other words one should get a better approximation to the full density variations predicted in [32], hopefully including a maximum in the critical temperature. Finally, it could also be interesting to explore the effects of resonant changes of the cross sections at very low energies on the transition temperature, since they seem to be now accessible [48–50]. One could imagine situations where sharp variations of the cross section could completely change the character of the Bose-Einstein transition, maybe even to a point where condensation would not involve a single level but, for instance, all levels on the surface of a sphere corresponding to a given length of k ; this would be another kind of realization of the smeared condensation mentioned in the introduction.

The preliminary stages of this work were initiated during visits to the Kamerlingh Onnes Laboratorium in Leiden and the Blackett Laboratory at Imperial College (London). The hospitality of Profs. G. Frossati, J.P. Connerade, H. Hutchinson and N. Rivier played an essential role in making these visits fruitful. Discussions with Philippe Nozières, Sandro Stringari, Alex Meyerovich, Antony Leggett and Edouard Brézin were especially useful. The final part of this work was made during a very stimulating visit at the Institute of Theoretical Physics at the University of California at Santa Barbara.

This research was supported in part by the National Foundation under Grant No. PHY94-07194.

Note added in proof

It has been pointed out to us by G. Baym that our results can also be obtained in the language of Green functions and self energies; this generalization will be the object of a future publication in collaboration [51].

Appendix A: Expansion of the solution of an integral equation

In this appendix, we study the solution of equation obtained by adding (36) to the right hand side of (33):

$$\rho_1(1) = f_1(1) + 2xz^2 [1 + f_1(1)] \times \text{Tr}_2 \left\{ W(1, 2) + [W(1, 2)]^2 \right\} \quad (\text{A.1})$$

(for convenience, a variable x has been introduced in front of the trace but, at the end of the calculation, we can set $x = 1$) where:

$$W(1, 2) = U_2^S(1, 2) [1 + \rho_1(1)] [1 + \rho_1(2)]. \quad (\text{A.2})$$

We show, by a series expansion in powers of x , that this integral equation gives correct weights (in fact, weights equal to one) to all diagrams that it introduces; a similar proof could be made for the more general equation (37). If we expand the solution of (A.1) in powers of x :

$$\rho_1(1) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \rho_1^{(n)}(1) \quad (\text{A.3})$$

we get from (A.1) the following recurrence relation:

$$\begin{aligned} \rho_1^{(n)}(1) = & 2z^2 [1 + f_1(1)] \text{Tr}_2 \left\{ U_2^S(1, 2) \right. \\ & \times \sum_{q=0} \left[\delta_{q,0} + \rho_1^{(q)}(1) \right] \left[\delta_{n-q,0} + \rho_1^{(n-q-1)}(2) \right] + U_2^S(1, 2) \\ & \times \sum_{q+q'+q''+q'''=n-1} \left[\delta_{q,0} + \rho_1^{(q)}(1) \right] \left[\delta_{q',0} + \rho_1^{(q')}(2) \right] \\ & \left. \times U_2^S(1, 2) \left[\delta_{q'',0} + \rho_1^{(q'')}(1) \right] \left[\delta_{q''',0} + \rho_1^{(q''')}(2) \right] \right\} \quad (\text{A.4}) \end{aligned}$$

for $n \neq 0$; for $n = 0$ we get:

$$\rho_1^{(0)}(1) = f_1(1). \quad (\text{A.5})$$

Although equation (A.4) looks complicated, its content is actually simple; it describes how the structure of the diagrams contained in $\rho_1^{(n)}(1)$ is built from the “root” of the diagram, progressing along the lowest horizontal cycle/line, and adding branches made of lower orders. For example, let us first discuss direct terms, those for which U_2^S can be merely replaced by U_2 . When the first U_2 operator occurs along the lowest horizontal line, two cases are possible: either this operator introduces a new horizontal line (cycle) which is not connected anymore to the root line by any other U_2 , and this case corresponds to the first line in the right hand side of (A.4); or it introduces a new horizontal line which is connected again by another U_2 to the root line, corresponding to the second and third line in (A.4). In the first case, two sub-diagrams are branched after this first U_2 , as shown by the arrows in the first diagram of Figure 16; they can occur in n possible

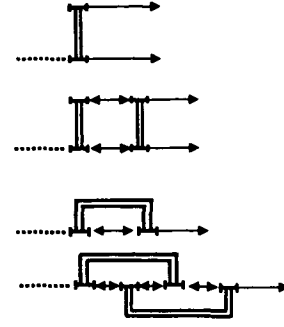


Fig. 16. Diagrams summarizing the construction of $\rho_1^{(n)}$ as a function of $\rho_1^{(n-1)}$.

ways (this corresponds to the summation over q), combining all possible lower orders to get a sum of orders equal to $n - 1$; first, the lower connection is replaced by a dotted line symbolizing $1 + f_1(1)$ (the sum of $U_1(1)$ to all powers ranging from 1 to infinity) while the upper line contains the diagrams contained in $\rho_1^{(n-1)}$; second, the lower connection gets $\rho_1^{(1)}$ while the upper connection gets $\rho_1^{(n-2)}$, etc. In the second case, the basic idea is the same, except that now the lower orders $\rho_1^{(q)}$ are plugged in at four different places, as symbolized in the second diagram of Figure 16.

As for the exchange terms, where U_2^S is replaced by $U_2^S P_{\text{ex}}$, they are very similar, except that the first U_2 reconnects to the root cycle, as shown in the third and fourth diagrams in Figure 16. Finally, direct and exchange connections can be combined in any way so that, eventually, all diagrams corresponding to the class considered are generated. By recurrence we see that, if any direct Ursell diagram was contained once and only once in $\rho_1^{(n-1)}$, it will also be contained once and only once at order n in $\rho_1^{(n)}$. The integral equation therefore ascribes weights to all diagrams which are 1, as expected. It therefore gives an appropriate description of the approximation considered, where two cycles are never connected more than twice.

The generalization to any number of connections is the purpose of equation (37); it can be checked in the same way that it corresponds to appropriate weights for all the diagrams.

Appendix B: A potential minimization solution of the non linear equations

Define the potential:

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} X_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}'} - \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} + \log X_{\mathbf{k}}). \quad (\text{B.1})$$

It is stationary under the conditions:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial X_{\mathbf{k}}} = \sum_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} X_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}} - \frac{1}{X_{\mathbf{k}}} = 0, \quad (\text{B.2})$$

which, assuming $X_k \neq 0$, is equivalent to (47) (actually to a more general version of these equations where all $\alpha_{k,k'}$ are not necessarily equal). The solution of the non-linear equations of the Ursell-Dyson approximation can therefore be obtained by a potential minimization of the function Φ .

Assume for instance that all X_k 's except two, X_0 and X_1 , are kept constant. We set:

$$\begin{aligned} S &= X_0 + X_1 \\ D &= X_0 - X_1 \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

and:

$$\begin{aligned} \xi'_0 &= \xi + \lambda \\ \xi'_1 &= \xi + \lambda \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

so that the potential function becomes, within terms which do not depend on X_0 and X_1 (from now on we assume that all α 's are equal):

$$\Phi = \frac{\alpha}{2} S^2 - \xi S - \lambda D - \log [S^2 - D^2] + \dots \quad (\text{B.5})$$

We now write:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial S} &= \alpha S - \xi - \frac{2S}{S^2 - D^2} \\ \frac{\partial \Phi}{\partial D} &= -\lambda + \frac{2S}{S^2 - D^2} \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

The second equation provides a quadratic equation in D with the solution:

$$D = \frac{1}{\lambda} \left[-1 \pm \sqrt{1 + \lambda^2 S^2} \right] \quad (\text{B.7})$$

but it is easy to see that only the root with the + sign in front of the radical is acceptable: in (45), the X_k 's are defined as positive quantities, and the other solution would lead to $D < S$. For a system contained in a box of size L , the energy difference between the ground state and the first excited level is proportional to L^{-2} , so that the same is true for λ ; now, if we assume that the sum of the populations S is macroscopic, we have $S \sim L^3$ and $\lambda S \gg 1$. Then:

$$D \simeq \frac{1}{\lambda} \left[\lambda S \left(1 + \frac{1}{2(\lambda S)^2} \right) - 1 \right] = S - \frac{1}{\lambda} \quad (\text{B.8})$$

which is, as S , proportional to L^3 . We see that:

$$\begin{aligned} X_1 &= (S - D)/2 \sim L^2 \\ X_0 &= (S + D)/2 \sim L^3 \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

which is similar to the situation for the ideal gas. Finally, S is given by the first equation (B.6):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial S} = 0 = \alpha S - \xi - \frac{2S}{2D/\lambda} = \alpha S - \xi - \lambda \quad (\text{B.10})$$

which provides:

$$S \simeq \frac{\xi'_1}{\alpha} \sim \nu. \quad (\text{B.11})$$

The advantage of the potential method is that it allows one to go beyond the continuous (integral) approximation of $\Delta \xi$ and to study what happens to each discrete level; it would be interesting to generalize the method to equations (72, 73) in order to check the quality of the conjectures made in Section 5.3 concerning the linear character of the velocity profile near the center.

Appendix C: Matrix elements of U_2

In this appendix we give a perturbative calculation of the matrix elements of U_2 ; for a strong potential of range b , replacing the real potential by a pseudopotential [25,26], the calculation remains valid up to second order in b . The first order value of the part of U_2 which acts in the space of relative motion of the two particles is:

$$U_2^{\text{rel.}} = - \int_0^\beta d\beta' e^{-(\beta-\beta')H_0} V_2 e^{-\beta' H_0} + \dots \quad (\text{C.1})$$

where H_0 is the kinetic energy Hamiltonian. From this we get, still in the space of the relative motion:

$$\langle \kappa | U_2^{\text{rel.}} | \kappa' \rangle = \bar{V}_2(\kappa' - \kappa) \frac{e^{-\beta\epsilon(\kappa')} - e^{-\beta\epsilon(\kappa)}}{\epsilon(\kappa') - \epsilon(\kappa)} + \dots \quad (\text{C.2})$$

where:

$$\epsilon(\kappa) = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} \quad (\text{C.3})$$

is the kinetic energy and $\bar{V}_2(\mathbf{k})$ the Fourier transform of the interaction potential $V_2(\mathbf{r})$. Coming back to the full space of two interacting particles, we set:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \frac{\mathbf{K}}{2} + \kappa \mathbf{k}'_1 = \frac{\mathbf{K}}{2} + \kappa' \\ \mathbf{k}_2 &= \frac{\mathbf{K}}{2} - \kappa \mathbf{k}'_2 = \frac{\mathbf{K}}{2} - \kappa' \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

(if $\kappa \neq \kappa'$, the kinetic energy is not conserved for the relative motion, while it is always for the center of mass motion; in the same way, the total momentum is always conserved). We then have:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | U_2(1,2) | \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 \rangle = \\ e^{-\beta E_K} \bar{V}_2(\mathbf{q}) \frac{e^{-\beta\epsilon(\kappa')} - e^{-\beta\epsilon(\kappa)}}{\epsilon(\kappa') - \epsilon(\kappa)} + \dots \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

where E_K is the kinetic energy of the center of mass:

$$E_K = \frac{\hbar^2 K^2}{4m} \quad (\text{C.6})$$

and $\mathbf{q}$ is the transferred momentum:

$$\mathbf{q} = \kappa - \kappa'. \quad (\text{C.7})$$

With this result, if we set:

$$z^2 \langle \mathbf{k}, \mathbf{k}' | U_2^S | \mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}' - \mathbf{q} \rangle = -4 \frac{\lambda_T^2}{V} e^{-\frac{\beta}{2} \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}} \times a(\text{non-diagonal}) \quad (\text{C.8})$$

we get:

$$a(\text{non-diagonal}) = \bar{V}_2(\mathbf{q}) \frac{\sinh \beta [\bar{\epsilon}(\mathbf{k}') - \bar{\epsilon}(\mathbf{k})]}{\beta [\bar{\epsilon}(\mathbf{k}') - \bar{\epsilon}(\mathbf{k})]} \quad (\text{C.9})$$

which shows that the off diagonal matrix elements remain comparable to the diagonal elements within the thermal profile, with a factor of approximately 2.

Appendix D: Calculating the correction to the chemical potential introduced by velocity-dependent effects

Equations (61, 65), together with the definition (62) of $\Delta\bar{\mu}$, provide the relation:

$$\Delta\bar{\xi} = \frac{4a}{\lambda_T} \frac{1}{1 - \Delta\bar{\xi}} g_{3/2} [z(1 - \Delta\bar{\xi})] \quad (\text{D.1})$$

which can also be written as:

$$e^{-\beta\Delta\bar{\mu}} - e^{-2\beta\Delta\bar{\mu}} = \frac{4a}{\lambda_T} g_{3/2} [e^{\beta(\mu - \Delta\bar{\mu})}] \quad (\text{D.2})$$

Writing the same relation for the particular value of μ :

$$\mu = \bar{\mu}_{\text{cr.}} = \Delta\bar{\mu}_{\text{cr.}} \quad (\text{D.3})$$

provides:

$$e^{-\beta\Delta\bar{\mu}_c} - e^{-2\beta\Delta\bar{\mu}_c} = \frac{4a}{\lambda_T} g_{\text{max.}} \quad (\text{D.4})$$

where:

$$g_{\text{max.}} = g_{3/2}(1) = 2.612... \quad (\text{D.5})$$

Now, by difference, we obtain:

$$\begin{aligned} e^{-\beta\Delta\bar{\mu}} - e^{-\beta\Delta\bar{\mu}_c} - e^{-2\beta\Delta\bar{\mu}} + e^{-2\beta\Delta\bar{\mu}_c} \\ = \frac{4a}{\lambda_T} [g_{3/2} [e^{\beta(\mu - \Delta\bar{\mu})}] - g_{\text{max.}}] \\ \simeq -\frac{4a}{\lambda_T} c \sqrt{\beta(\mu - \Delta\bar{\mu})} \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

where the numerical coefficient c is given by (see [44] or exercise 12.3 of [25]):

$$c = 3.544.. \quad (\text{D.7})$$

From this we obtain:

$$\beta(\mu - \Delta\bar{\mu}) = \left(\frac{\lambda_T}{4a} \right)^2 c^{-2} [e^{-\beta\Delta\bar{\mu}} - e^{-\beta\Delta\bar{\mu}_c} - e^{-2\beta\Delta\bar{\mu}} + e^{-2\beta\Delta\bar{\mu}_c}]^2 \quad (\text{D.8})$$

or:

$$\beta(\mu - \Delta\bar{\mu}) = \left(\frac{\lambda_T}{4a} \right)^2 c^{-2} [\beta(\Delta\bar{\mu} - \Delta\bar{\mu}_c)]^2 + ... \quad (\text{D.9})$$

But, to this order, we can replace $\Delta\bar{\mu}$ by μ in the right hand side:

$$\beta(\mu - \Delta\bar{\mu}) = \left(\frac{\lambda_T}{4a} \right)^2 c^{-2} [\beta(\mu - \Delta\bar{\mu}_c)]^2 + ... \quad (\text{D.10})$$

At the critical point, $\mu + \delta\mu_0 - \Delta\bar{\mu} = 0$ so that this relation becomes:

$$\beta\delta\mu_0 \simeq \left(\frac{\lambda_T}{4a} \right)^2 c^{-2} [\beta(\mu - \Delta\bar{\mu}_c)]^2 + ... \quad (\text{D.11})$$

or:

$$\beta(\bar{\mu}_c - \mu_c) \simeq \frac{4a}{\lambda_T} c \sqrt{\beta\delta\mu_0} \quad (\text{D.12})$$

which is second order in a/λ_T (since $\delta\mu_0$ is second order in this quantity).

References

1. A. Einstein, Preussische Akademie der Wissenschaften, Phys. Math. Klasse, Sitzungsberichte, 3 (1925).
2. W.A. Blanpied, Am. J. Phys. **40**, 1212 (1972).
3. O. Theimer, Budth Ram, Am. J. Phys. **45**, 242 (1977).
4. W.E. Lamb, Phys. Rev. **59**, 677 (1941).
5. A. Pais, *The Science and Life of Albert Einstein* (Oxford University Press, 1982), Chapter 23; see in particular section 23d. (3).
6. Albert Einstein, *Oeuvres Choisies*, Vol. 1 Quanta (Seuil CNRS Paris, 1989), Chapter 12.
7. G.E. Uhlenbeck, *Some reminiscences about Einstein's visit to Leiden*, epilogue in Proceedings Einstein Centennial Symposium 1979 *Some strangeness in the proportion* (H. Woolf dir.) (Reading (Mass.), Addison Wesley, 1980).
8. R. Balian, *From microphysics to macrophysics* (Springer Verlag, 1992), Vol. II, Section 12.3.1.
9. T.J. Greytak, D. Kleppner, *Lectures on spin polarized hydrogen*, in *Tendances actuelles en physique atomique*, edited by G. Grynberg, R. Stora (Elsevier, 1984).
10. R. Balian, Loc. Cit., exercices 12.b and 12.c.
11. H.D. Politzer, Phys. Rev. A **54**, 5048 (1996).
12. F. London, Nat. **141**, 643 (1938); Phys. Rev. **54**, 947 (1938).
13. O. Penrose, L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).
14. S.T. Beliaev, J. Ekptl. Theoret. Phys. **34**, 417 (1958); Soviet Physics JETP **34**, 289 (1958).
15. C.N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34**, 694 (1962).
16. J. Gavoret, P. Nozières, Ann. Phys. **28**, 349 (1964).

17. H. Fröhlich, *Phys. Kond. Materie* **9**, 350 (1969) and references contained.
18. M. Girardeau, *Phys. Fluids* **5**, 1468 (1962); see also J. Math. Phys. **11**, 684 (1970), especially Section 9.
19. P. Nozières, in *Bose-Einstein condensation*, edited by A. Griffin, D.W. Snoke, S. Stringari (Cambridge University Press, 1995).
20. M. Luban, *Phys. Rev.* **128**, 965 (1962); see in particular Chapter I: "To our knowledge there exists no treatment which obtains (the Einstein condensation) as a derived result, in contrast to an assumption made at the outset, in a nonideal boson gas. Instead, one obtains a posteriori inference that such is fact".
21. van der Berg, J.T. Levis, P. de Smedt, *J. Stat. Phys.* **37**, 697 (1984).
22. D.M. Ceperley, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 279 (1995).
23. P.E. Sokol, in *Bose-Einstein condensation*, edited by A. Griffin, D.W. Snoke, S. Stringari (Cambridge University Press, 1995).
24. V.V. Goldman, I.F. Silvera, A.J. Leggett, *Phys. Rev. B* **24**, 2870 (1981).
25. K. Huang, *Statistical Mechanics* (Wiley, 1963), Section 13.3; 2nd edn. (1987), Section 10.5.
26. K. Huang, C.N. Yang, *Phys. Rev.* **105**, 767 (1957); K. Huang, C.N. Yang, J.M. Luttinger, *Phys. Rev.* **105**, 776 (1956); T.D. Lee, K. Huang, C.N. Yang, *Phys. Rev.* **106**, 1135 (1957).
27. K. Huang, *Imperfect Bose gas*, in *Studies in Statistical Mechanics Vol. II*, edited by J. de Boer, G.E. Uhlenbeck (North Holland, 1964); see in particular Chapter 5 (where Fig. 5.5 is incorrectly drawn since it shows a reduced critical temperature).
28. A. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems* (Mc Graw Hill, 1971), see Chapter 28.
29. T. Toyoda, *Ann. Phys. (N.Y.)* **141**, 154 (1982).
30. H.T.C. Stoof, *Phys. Rev. A* **45**, 8398 (1992).
31. M. Bijlsma, H.T.C. Stoof, *Phys. Rev. A* **54**, 5085 (1996).
32. P. Grüter, D. Ceperley, F. Laloë, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3549 (1997).
33. M. Holzmann, W. Krauth, M. Narachewskii, *Phys. Rev. A* **59**, 2956 (1999).
34. E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, Landau, Lifshitz, *Course of Theor. Phys. Vol. 9, Statistical Physics* (Pergamon Press, 1980), Chapter III.
35. E.P. Gross, *Journ. Math. Phys.* **4**, 195 (1963).
36. F. Dafolvo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
37. P. Grüter, F. Laloë, *J. Phys. I France* **5**, 181 (1995).
38. P. Grüter, F. Laloë, *J. Phys. I France* **5**, 1255 (1995).
39. F. Laloë, in *Bose-Einstein condensation*, edited by A. Griffin, D. Snoke, S. Stringari (Cambridge University Press, 1993).
40. A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, I.E. Dzialoshinski, *Methods of quantum field theory in statistical physics* (Dover Publications, 1963).
41. R.P. Feynman, *Statistical mechanics, a set of lectures* (Frontiers in Physics, Benjamin, 1972).
42. Veit Elser, Ph.D. Thesis, *Topics in Statistical Mechanics*, 1984.
43. W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3695 (1997).
44. J.E. Robinson, *Phys. Rev.* **83**, 678 (1951).
45. P. Grüter, F. Laloë, A.E. Meyerovich, W. Mullin, *J. Phys. I France* **7**, 485 (1997).
46. R. Spector (private communication).
47. A.Z. Patashinskii, V.L. Pokrovskii, *J. Exptl. Theoret. Phys. (USSR)* **46**, 994 (1964); *Soviet Phys. JETP* **19**, 677 (1964).
48. Ph. Courteille, R.S. Freeland, D.J. Heinzen, F.A. Abeelen, B.J. Verhaar, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 69 (1998).
49. L. You, *Contribution to the BEC conference at the ITP* (University of California, Santa Barbara, 1998); M. Marinescu, L. You (preprint).
50. S. Inouye, M.R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D.M. Stamper-Kurn, W. Ketterle, *Nat.* **392**, 151 (1998).
51. G. Baym, D. Vautherin, J.P. Blaizot, M. Holzmann, F. Laloë, *Phys. Rev. Lett.* (to be published).

Publication II

Gordon Baym , Jean-Paul Blaizot, Markus Holzmann, Franck Laloë, and
Dominique Vautherin

The Transition Temperature of the Dilute Interacting Bose Gas
Phys. Rev. Lett. **83**, 1703 (1999)

Dans cet article nous étudions la condensation de Bose-Einstein avec la technique de la théorie quantique des champs. Nous montrons que le développement perturbatif de la fonction de Green

$$G^{-1}(k, z) = z + \mu - \frac{k^2}{2m} - \Sigma(k, z)$$

est dominé par les contributions avec une fréquence de Matsubara nulle ($z = 0$) à cause des divergences infrarouges. A l'ordre a^n ($n \geq 2$), au-delà de l'approximation du champ moyen, l'énergie propre Σ_n s'écrit

$$\Sigma_n \sim T \left(\frac{a}{\lambda} \right)^2 \left(\frac{a\xi}{\lambda^2} \right)^{n-2}$$

Au point de transition, la longueur de corrélation diverge comme $\xi \rightarrow \lambda^2/a$ et un simple calcul perturbatif ne permet pas de calculer le spectre ou la température critique du gaz dilué, même (ou en particulier) dans la limite $a/\lambda \rightarrow 0$.

Néanmoins, pour obtenir la correction dominante de la température critique par rapport au gaz parfait, il est suffisant de se restreindre à la théorie classique des champs, c'est-à-dire de ne tenir compte que des corrections $\Sigma(k, 0)$ avec une fréquence de Matsubara nulle. Ainsi nous prouvons la linéarité de $\Delta T_c/T_c$ en $an^{1/3}$.

Nous estimons le préfacteur de cette modification par un calcul auto-cohérent à deux bulles dans la limite $a/\lambda \rightarrow 0$. A cet ordre, le spectre d'énergie $\varepsilon_k = k^2/2m + \Sigma(k, 0) - \Sigma(0, 0)$ est modifié. Un ansatz avec $\varepsilon_k = k_c^{1/2} k^{3/2}/2m$ pour $k \rightarrow 0$ (la puissance 3/2 est obtenue par un argument de comptage des puissances) permet de calculer analytiquement la largeur $k_c \sim a/\lambda^2$ de la région critique dans l'espace des impulsions. Dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$ nous obtenons $k_c \lambda \sim 20 a/\lambda$, ce qui permet une estimation de la température critique du gaz dilué

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} \simeq 2.9 an^{1/3}$$

En tenant compte d'une sommation sur toutes les bulles, les contributions logarithmiques modifient encore le spectre de $k^{3/2}$ à $k^{2-\eta}$ avec $\eta = 0.09$. L'estimation de η dans cet article n'est pas correcte (voir section 2.5.1, page 51).

Quoique la restriction à une théorie classique des champs soit plus élégante dans l'approche des fonctions de Green (à cause de la dépendance explicite en fréquences de Matsubara), les mêmes résultats — en particulier $\Delta T_c/T_c$ et η — peuvent être obtenus dans l'approche d'Ursell (voir section 2.4, page 38).

PHYSICAL REVIEW LETTERS

VOLUME 83

30 AUGUST 1999

NUMBER 9

The Transition Temperature of the Dilute Interacting Bose Gas

Gordon Baym,^{1,2,3} Jean-Paul Blaizot,² Markus Holzmann,³ Franck Laloë,³ and Dominique Vautherin⁴

¹*University of Illinois at Urbana-Champaign, 1110 West Green Street, Urbana, Illinois 61801*

²*Service de Physique Théorique, CE-Saclay, Orme des Merisiers, 91191 Gif-sur-Yvette, France*

³*LKB and LPS, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France*

⁴*LPNHE, Case 200, Universités Paris 6/7, 4 Place Jussieu, 75005 Paris, France*

(Received 1 June 1999)

We show that the critical temperature of a uniform dilute Bose gas increases linearly with the s -wave scattering length describing the repulsion between the particles. Because of infrared divergences, the magnitude of the shift cannot be obtained from perturbation theory, even in the weak coupling regime; rather, it is proportional to the size of the critical region in momentum space. By means of a self-consistent calculation of the quasiparticle spectrum at low momenta at the transition, we find an estimate of the effect in reasonable agreement with numerical simulations.

PACS numbers: 03.75.Fi

Determination of the effect of repulsive interactions on the transition temperature of a homogeneous dilute Bose gas at fixed density has had a long and controversial history [1–5]. While [1] predicted that the first change in the transition temperature, T_c , is of order the scattering length a for the interaction between the particles, neither the sign of the effect nor its dependence on a has been obvious. Recent renormalization group studies [4] predict an increase of the critical temperature. Numerical calculations by Grüter, Ceperley, and Laloë [6], and more recently by Holzmann and Krauth [7], of the effect of interactions on the Bose-Einstein condensation transition in a uniform gas of hard sphere bosons, and approximate analytic calculations by Holzmann, Grüter, and Laloë of the dilute limit [8], have shown that the transition temperature, T_c , initially *risks linearly* with a . The effect arises physically from the change in the energy of low momentum particles near T_c [8]. Here we analyze the leading order behavior of diagrammatic perturbation theory, and argue that T_c increases linearly with a . We then construct an approximate self-consistent solution of the single particle spectrum at T_c which demonstrates the change in the low momentum spectrum, and which enables us to calculate the change in T_c quantitatively.

We consider a uniform system of identical bosons of mass m , at temperature T close to T_c and use finite tem-

perature quantum many-body perturbation theory. We assume that the range of the two-body potential is small compared to the interparticle distance $n^{-1/3}$, so that the potential can be taken to act locally and be characterized entirely by the s -wave scattering length a . Thus we work in the limit $a \ll \lambda$, where $\lambda = (2\pi\hbar^2/mk_B T)^{1/2}$ is the thermal wavelength. (We generally use units $\hbar = k_B = 1$.)

To compute the effects of the interactions on T_c , we write the density n as a sum over Matsubara frequencies $\omega_\nu = 2\pi i\nu T$ ($\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) of the single particle Green's function, $G(k, z)$:

$$n = -T \sum_\nu \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} G(k, \omega_\nu), \quad (1)$$

where

$$G^{-1}(k, z) = z + \mu - \frac{k^2}{2m} - \Sigma(k, z), \quad (2)$$

with μ the chemical potential. The Bose-Einstein condensation transition is determined by the point where $G^{-1}(0, 0) = 0$, i.e., where $\Sigma(0, 0) = \mu$.

The first effect of interactions on Σ is a mean field term $\Sigma_{mf} = 2gn$, where $g = 4\pi\hbar^2 a/m$; the factor of 2 comes from including the exchange term. Such a contribution, independent of k and z , has no effect on the transition temperature, as it can be simply absorbed in a redefinition

of the chemical potential. To avoid carrying along such trivial contributions we define:

$$\frac{\hbar^2}{2m\zeta^2} = -(\mu - 2gn). \quad (3)$$

The quantity ζ may be interpreted as the mean field correlation length. In the mean field approximation, ζ becomes infinite at T_c ; however, in general, it remains finite, and functions here as an infrared cutoff.

Because the effects of interactions are weak, one could imagine calculating the change in T_c in perturbation theory. However, such calculations are plagued by infrared divergences. Power counting arguments reveal that the leading contribution to the self-energy, $\Sigma(k \ll \zeta^{-1}, 0)$, of a diagram of order a^n has the form:

$$\Sigma_n \sim T \left(\frac{a}{\lambda} \right)^2 \left(\frac{a\zeta}{\lambda^2} \right)^{n-2}. \quad (4)$$

In perturbation theory about the mean field, with the mean field criterion for the phase transition, $\zeta \rightarrow \infty$ at T_c , all Σ_n diverge, starting with a logarithmic divergence at $n = 2$. More generally, the approach of ζ towards λ^2/a in magnitude signals, according to the Ginsburg criterion, the onset of the critical region. Beyond, perturbation theory breaks down, since all Σ_n in Eq. (4) are of the same order of magnitude.

Even though the theory is infrared divergent, we can isolate the leading correction to the change in T_c , which, as we show, is of order a . Since the infrared divergences occur only in terms with zero Matsubara frequencies we separate, in Eq. (1), the contribution of the $\nu = 0$ terms, writing

$$n(a, T) = -T \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} [G_{\nu=0}(k) + G_{\nu \neq 0}(k)], \quad (5)$$

where $G_{\nu \neq 0}(k)$ is the sum of terms with $\nu \neq 0$. Similarly, the density of a noninteracting system with condensation temperature T is given by

$$\begin{aligned} n^0(T) &= -T \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} [G_{\nu=0}^0(k) + G_{\nu \neq 0}^0(k)] \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{k^2/2mT} - 1} = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda^3}, \end{aligned} \quad (6)$$

where $\zeta(3/2) = 2.612$. Since the nonzero Matsubara frequencies regularize the infrared behavior of the momentum integrals, the dependence of the $\nu \neq 0$ terms in Eq. (5) on a is nonsingular at T_c . These terms, of order a^2 at least, can be neglected. Thus to order a ,

$$n(a, T_c) - n^0(T_c) = -T_c \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} [G_0(k) - G_0^0(k)]. \quad (7)$$

To calculate the change in T_c at fixed density we equate $n(a, T_c)$ at T_c with $n^0(T_c^0)$ at the free particle transition temperature T_c^0 and observe that $n^0(T_c) = (T_c/T_c^0)^{3/2} n^0(T_c^0)$; thus in lowest order the change in

transition temperature $\Delta T_c = T_c - T_c^0$ is given by

$$\frac{3}{2} \frac{\Delta T_c}{T_c} n^0(T_c^0) = T_c \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} [G_{\nu=0}(k) - G_{\nu=0}^0(k)], \quad (8)$$

where $\Delta T_c = T_c - T_c^0$. Thus

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = \frac{4\lambda}{3\pi\zeta(3/2)} \int_0^\infty dk \frac{U(k)}{k^2 + U(k)}, \quad (9)$$

where $U(k) \equiv 2m[\Sigma_{\nu=0}(k) - \mu]$.

Equation (9) for the leading correction to the critical temperature is crucial. The criterion for spatially uniform condensation is that $U(0) = 0$; above the transition, $U(0) > 0$. At the transition, $k^2 + U(k) > 0$ for $k > 0$. At large wave numbers, $U \rightarrow 1/\zeta^2 > 0$, and in the critical region, as we discuss below, U is also positive. Although we have not proved it rigorously, numerical simulations indicate that U is generally positive for $k > 0$, which implies that the integral in Eq. (9) and hence ΔT_c is positive.

In the critical region, $k < k_c$, where k_c defines the scale of the critical region in momentum space, $G_{\nu=0}$ has the scaling form [9] $G_{\nu=0}^{-1}(k) = -k^{2-\eta} k_c^\eta F(k\xi)$; ξ is the coherence length which diverges at T_c as $|T - T_c|^{-\nu}$, and F is a dimensionless function, with $F(\infty) \sim 1$. The critical index, η , is given to leading order in the $\epsilon = 4 - d$ expansion by $\epsilon^2/54$ [10]. At T_c , $G_{\nu=0}^{-1}(k) \sim -k^{2-\eta} k_c^\eta$, and thus $U \sim +k^{2-\eta}$. Both terms in Eq. (8) give a contribution of order k_c , so that $\Delta T_c/T_c \sim k_c$. As we shall see, $k_c \sim a/\lambda^2$, and hence $\Delta T_c/T_c \sim a/\lambda$.

To study the leading behavior in a quantitatively, we need concentrate only on the $\nu = 0$ sector where the full finite temperature theory reduces to a classical field theory [10] defined by the action:

$$\begin{aligned} S\{\phi(r)\} &= \frac{1}{2mT} \int d^3r \left[\nabla \phi^*(r) \cdot \nabla \phi(r) + \frac{1}{\zeta^2} |\phi(r)|^2 \right. \\ &\quad \left. + 4\pi a (|\phi(r)|^2 - \langle |\phi(r)|^2 \rangle) \right]; \end{aligned} \quad (10)$$

the probability of a given field configuration entering the computation of expectation values is proportional to $e^{-S\{\phi(r)\}}$.

The classical theory is ultraviolet divergent, but super-renormalizable. The divergences appear only in the two-loop self-energy, $\Sigma_{\nu=0}^{(2)}$ —effectively the second order self-energy written in terms of the full $G_{\nu=0}$ rather than the zeroth order Green's functions—and can be removed by simple renormalization of the mean field coherence length, ζ . Since, henceforth, we calculate only in the classical theory, we drop the subscript $\nu = 0$. The second order self-energy is

$$\Sigma(k) = -2g^2 \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} B(q) \frac{T}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}, \quad (11)$$

where $\epsilon_{\mathbf{k}} = (k^2 + \zeta^{-2})/2m$, and the $(\nu = 0)$ particle-hole bubble,

$$B(q) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{T}{\epsilon_p \epsilon_{p+q}}, \quad (12)$$

is given by

$$B(q) = \frac{2\pi^2 \zeta}{T \lambda^4} b(\zeta q); \quad (13)$$

$b(x) \rightarrow 1/x$ for $x \gg 1$ and $b(0) = 1/\pi$.

The integral in Eq. (11) is logarithmically divergent in the ultraviolet. But in the full theory the momentum integrals are cut off by distribution functions, $f = (e^{k^2/2mT} - 1)^{-1}$, and the ultraviolet behavior is regular. To control this divergence we introduce an ultraviolet momentum cut-off, Λ , in the classical theory, recognizing that it is in fact effectively determined in the full theory. Then

$$2m\Sigma(k) = -32\pi^2 \frac{a^2}{\lambda^4} \int_0^{\Lambda\zeta} dx x b(x) L(k\zeta, x), \quad (14)$$

where

$$L(k\zeta, x) = \frac{1}{k\zeta} \ln \left[\frac{(x + k\zeta)^2 + 1}{(x - k\zeta)^2 + 1} \right]. \quad (15)$$

The divergent part of the integral comes from the large x tail of $b(x)$, and contributes $-128(a/\lambda^2)^2 \ln(\Lambda\zeta)$ to $2m\Sigma$.

More generally we carry out a diagrammatic expansion of Σ in terms of the *self-consistent* $\nu = 0$ Green's function, defined by $2mG^{-1}(k) = -k^2 + \zeta^{-2} + 2m\Sigma(k, a, G, \Lambda)$. Note that the dependence of Σ on ζ enters only through the dependence of Σ on G . We define a *renormalized* mean field coherence length by

$$\frac{1}{\zeta_R^2} = \frac{1}{\zeta^2} - 128 \left(\frac{a}{\lambda^2} \right)^2 \ln(\Lambda\zeta_R). \quad (16)$$

Then $G^{-1}(k)$ is given by

$$-2mG^{-1}(k) = k^2 + \zeta_R^{-2} + 2m\Sigma_F(k, a, G), \quad (17)$$

where

$$\Sigma_F(k, a, G) = \Sigma(k, a, G, \Lambda) + 128 \left(\frac{a}{\lambda^2} \right)^2 \ln(\Lambda\zeta_R) \quad (18)$$

is independent of Λ . As a function of ζ_R , the Green's function is independent of the cutoff.

In fact, a simple power counting argument shows that the finite part of the self-energy has the form

$$\Sigma_F(k, a, G) = \frac{1}{2m\zeta_R^2} \sigma(k\zeta_R, J), \quad (19)$$

where

$$J = a\zeta_R/\lambda^2. \quad (20)$$

To see this structure we note that a term in the self-energy of order a^n is the product of a dimensionless function of $k\zeta_R$ times the Σ_n of Eq. (4), with ζ replaced by ζ_R [11].

The criterion for condensation, $\zeta_R^{-2} + 2m\Sigma_F(0, a, G) = 0$, implies that

$$1 + \sigma(0, J) = 0. \quad (21)$$

Since $\sigma(0)$ is a well-behaved function of only the parameter J , Eq. (21) determines the critical value of $J = J^*$ for condensation, a dimensionless number independent of the parameters of the original problem. At condensation, the renormalized mean field coherence length ζ_R tends to infinity as $a \rightarrow 0$, with the product $a\zeta_R$ fixed, thus preventing a perturbative expansion in a .

At condensation $U(k) = [\sigma(k\zeta_R, J^*) + 1]/\zeta_R^2$, and Eq. (9) implies the change in T_c

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = \frac{a}{\lambda} \left[\frac{4}{3\pi\zeta(3/2)} \frac{1}{J^*} \int_0^\infty dx \frac{\sigma(x, J^*) + 1}{x^2 + \sigma(x, J^*) + 1} \right]. \quad (22)$$

Since J^* is determined by the condition (21), the result for $\Delta T_c/T_c$ is linear and expected to be positive in a/λ .

We turn now to calculating ΔT_c explicitly within a simple self-consistent model based on taking only the zero frequency component of the leading two-loop approximation self-energy, given by Eq. (11). We construct the ϵ_p as self-consistent quasiparticle energies at the transition, i.e., solutions of the equation:

$$G^{-1}(k, \epsilon_k) = 0 = \epsilon_k - \frac{k^2}{2m} - [\Sigma(k) - \Sigma(0)]. \quad (23)$$

The low momentum behavior of ϵ_k is determined by a familiar argument [12]. In order that the integral (11) converge in the infrared limit, ϵ_k must behave, modulo possible logarithmic corrections, as $\sim k^\alpha$, where $\alpha < 2$. In this case, the term $k^2/2m$ in (23) can be neglected at small k . We then expand $\Sigma(k)$ about $k = 0$. For $1 \leq \alpha < 4/3$ the self-energy is sufficiently convergent that $\Sigma(k) - \Sigma(0) \sim k^2$ at small k , and thus cannot be the correct self-consistent solution. For α with $4/3 < \alpha < 2$ one has $\Sigma(k) - \Sigma(0) \sim +k^{6-3\alpha}$, so we find self-consistency, $\Sigma(k) - \Sigma(0) \sim k^\alpha$, for $\alpha = 3/2$. We write the small k part of the spectrum as

$$\epsilon_k = k_c^{1/2} k^{3/2} / 2m. \quad (24)$$

Here k_c is the wave vector around which the $k^{3/2}$ at low k crosses over to the $k^2/2m$ free-particle behavior.

To extract the low momentum structure, below the scale k_c , we evaluate the most divergent terms of

$$\Sigma(k) - \Sigma(0) = -2g^2 T \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} B(q) \left(\frac{1}{\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}}} - \frac{1}{\epsilon_q} \right); \quad (25)$$

at small k . Since the $k^{3/2}$ structure arises from the small q behavior of the integral; we evaluate the bubble $B(q)$, Eq. (12), at small q with the spectrum (24) for $k < k_c$ and $k^2/2m$ for $k > k_c$. Then

$$B(q) = \frac{4m}{\pi \lambda^2 k_c} [\ln(k_c/q) + c], \quad (26)$$

with $c \approx 2 + 2 \ln 2 - \pi/2 = 1.816$. Thus,

$$\Sigma(k) - \Sigma(0) = \frac{1024\pi}{15m} \left(\frac{a}{\lambda^2}\right)^2 \left(\frac{k}{k_c}\right)^{3/2}. \quad (27)$$

Identifying the right side of Eq. (27) with $k_c^{1/2} k^{3/2}/2m$, we derive

$$k_c = 32 \left(\frac{2\pi}{15}\right)^{1/2} \frac{a}{\lambda^2} \approx 20.7 \frac{a}{\lambda^2}. \quad (28)$$

As expected, the scale of the unusual low momentum structure is a/λ^2 .

Let us, for a first quantitative estimate, assume a spectrum at T_c of the form $\epsilon_k = k_c^{1/2} k^{3/2}/2m$ for $k \ll k_c$, and $(k^2 + k_c^2)/2m$ for $k \gg k_c$. We smoothly interpolate between these limits, writing $U(k) = k_c^{1/2} k^{3/2}/[1 + (k/k_c)^{3/2}]$. Thus $\int dk U/(k^2 + U) \approx 1.2k_c$, so that with Eq. (28),

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} \approx 2.9 a n^{1/3}. \quad (29)$$

By comparison, Grüter, Ceperley, and Laloë [6] find $\Delta T_c/T_c \approx 0.34 a n^{1/3}$, while the more recent calculation of Holzmann and Krauth yields $\Delta T_c/T_c \approx (2.2 \pm 0.2) a n^{1/3}$. The agreement of the numerical coefficient, given the simplicity of the approximations in evaluating the effect of interactions on the transition temperature, is satisfying. As will be reported in a fuller paper [14], this estimate agrees with that derived from the numerical self-consistent solution of Eq. (23).

The lowest two-loop calculation does not account fully for the modification of the transition temperature; indeed, at the critical point, all diagrams become comparable [13,14]. Consider, for example, summing the bubbles describing the repeated scattering of the particle-hole pair in B [15], thus replacing B in Eq. (11) by

$$B_{\text{eff}}(q) = \frac{B(q)}{1 + 2gB(q)}, \quad (30)$$

where the two accounts for the exchange terms. The denominator at small q , from Eq. (26), is given by

$$1 + 2gB(q) = 1 + \frac{32a}{\lambda^2 k_c} [\ln(k_c/q) + c]. \quad (31)$$

Since $k_c \sim a/\lambda^2$, the correction is of order unity, and serves to modify the spectrum, recalculated from Eq. (25) with (31), from $k^{3/2}$ to $k^{2-\eta}$, with [14] $\eta \approx (1/2) - 1/(2c + k_c \lambda^2/16a) \approx 0.36$.

To estimate J^* , we calculate $\Sigma(0)$ from Eq. (11) with the $3/2$ spectrum and the leading log in $B(q)$, Eq. (26), and neglect the contribution for $q > k_c$. Then $\Sigma(0) \approx -\kappa^2 a^2/2m\lambda^4$, and $\sigma(0, J) \approx -\kappa^2 J^2$, so that at T_c , $J^* \approx 1/\kappa = 3/(32\sqrt{2} + 3c)$. The self-consistent solution of Eq. (23) yields [14] $J^* \approx 0.07$.

The modification at T_c of the spectrum of particles at low momenta should have direct experimental consequences in

trapped Bose condensates. While a $k^2/2m$ particle spectrum yields a flat distribution $v^2 dn/dv$ of velocities, a more rapidly rising spectrum, e.g., the $k^{3/2}$ discussed here, depletes the number of low momentum particles. These effects become more pronounced with a larger number of particles and flatter traps, as the level spacing ceases to control the low-energy behavior.

This work was facilitated by the cooperative agreement between the University of Illinois at Urbana-Champaign and the Centre National de la Recherche Scientifique, and also supported in part by National Science Foundation Grants No. PHY94-21309 and No. PHY98-00978, and the Deutscher Akademischer Austauschdienst. L. K. B. and L. P. S. are Unités Associées au CNRS UMR 8552 and UMR 8551.

-
- [1] T. D. Lee and C. N. Yang, Phys. Rev. **112**, 1419 (1957).
 - [2] K. Huang, in *Studies in Statistical Mechanics*, edited by J. de Boer and G. E. Uhlenbeck (North-Holland Publishers, Amsterdam, 1964), Vol. II, p. 1.
 - [3] T. Toyoda, Ann. Phys. (N.Y.) **141**, 154 (1982).
 - [4] H. T. C. Stoof, Phys. Rev. A **45**, 8398 (1992); M. Bijlsma and H. T. C. Stoof, Phys. Rev. A **54**, 5085 (1996); J. O. Andersen and M. Strickland, Phys. Rev. A (to be published).
 - [5] K. Huang, cond-mat/9904027.
 - [6] P. Grüter, D. Ceperley, and F. Laloë, Phys. Rev. Lett. **79**, 3549 (1997).
 - [7] M. Holzmann and W. Krauth, cond-mat/9905198 [Phys. Rev. Lett. (to be published)].
 - [8] M. Holzmann, P. Grüter, and F. Laloë, cond-mat/9809356 [Euro. Phys. J. B (to be published)].
 - [9] B. D. Josephson, Phys. Lett. **21**, 608 (1966).
 - [10] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Oxford University Press, New York, 1989).
 - [11] Were the classical theory not to contain an ultraviolet divergence, we could have deduced the structure of Eq. (19) by making a trivial scaling in the effective action (10) of lengths by $r = \zeta x$, and the field by $\phi(r) = \theta(x)/\lambda \zeta^{1/2}$, where x and θ are dimensionless. This scaling implies that in the absence of the ultraviolet divergence the classical theory would be a function only of the dimensionless parameter $a\zeta/\lambda^2$. After renormalizing ζ we find instead that the theory depends only on the parameter $J = a\zeta_R/\lambda^2$.
 - [12] A. Z. Patashinskii and V. L. Pokrovskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **46**, 994 (1964) [Sov. Phys. JETP **19**, 677 (1964)].
 - [13] A. Z. Patashinskii and V. L. Pokrovskii, *Fluctuation Theory of Phase Transitions* (Pergamon Press, Oxford, 1979).
 - [14] G. Baym, J.-P. Blaizot, M. Holzmann, F. Laloë, and D. Vautherin (to be published).
 - [15] The current theory is an $O(N)$ model with $N = 2$. In the limit of large N , the leading terms are given by the bubble sum in the self-energy, and the modification of T_c can be fully computed analytically. G. Baym, J.-P. Blaizot, and J. Zinn-Justin, cond-mat/9907241 [Europhys. Lett. (to be published)].

Publication III

Markus Holzmann and Werner Krauth

Transition Temperature of the Homogeneous, Weakly Interacting Bose Gas
Phys. Rev. Lett. **83**, 2687 (1999)

Nous avons adapté et optimisé la méthode de Monte-Carlo quantique pour obtenir la variation de la température critique $\Delta T_c/T_c$ en fonction de l'interaction directement dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = (2.3 \pm 0.25) an^{1/3}$$

Pour obtenir ce résultat, nous avons choisi une nouvelle stratégie de calcul. Nous montrons que la fraction superfluide d'un système de N particules en interaction est accessible à partir des configurations des bosons d'un gaz parfait. Dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$, la variation de la fraction superfluide par rapport au gaz parfait est déterminée par une fonction de corrélation. Cette fonction peut être évalué dans un système de bosons *sans interaction*. Nous évitons ainsi de simuler directement des systèmes en faible interaction qui diffèrent peu du cas libre et qui créeraient un problème sérieux de signal/bruit dans un calcul direct.

Cette technique d'échantillonnage corrélé permet d'obtenir les corrections d'interaction à la fraction superfluide du gaz parfait. Nous pouvons alors utiliser nos connaissances détaillées du système sans interaction pour relier la variation de la fraction superfluide à une variation de la température critique du système. Grâce à la loi d'échelle ("finite size scaling"), nous pouvons extrapoler nos calculs des tailles finies à la limite thermodynamique. Notre méthode d'extrapolation separe complètement la partie du gaz parfait des modifications dues à l'interaction et tient compte de toutes les corrections aux lois d'échelle. Elle montre aussi que ces mêmes corrections deviennent prépondérantes dans la limite d'un gaz dilué, ce qui n'avait pas été suffisamment considéré dans un travail antérieur [10].

Avec ces considérations, la linéarité de $\Delta T_c/T_c$ en $an^{1/3}$ est une conséquence de la loi d'échelle, obtenue sans avoir mené des calculs numériques. Indépendamment de [II], cette approche prédit aussi la forme fonctionnelle de la température critique dans la limite $an^{1/3} \rightarrow 0$.

Pour mener le calcul numérique du préfacteur, nous décrivons un nouvel algorithme qui permet d'engendrer des configurations de bosons libres de manière directe, sans utiliser les chaînes de Markov. De cette manière nous réussissons à simuler jusqu'à 20 000 particules. Dans la description de Monte-Carlo quantique (basée sur les intégrales des chemins de Feynman) nous retrouvons les propriétés physiques d'un gaz dilué : l'interaction se réduit à des collisions binaires qui sont caractérisées par la longueur de diffusion a . Notre stratégie de calcul profite fortement du fait que le poids statistique du système dilué est très proche de celui du gaz parfait, lorsque $a \rightarrow 0$.

PHYSICAL REVIEW LETTERS

VOLUME 83

4 OCTOBER 1999

NUMBER 14

Transition Temperature of the Homogeneous, Weakly Interacting Bose Gas

Markus Holzmann^{1,2,*} and Werner Krauth^{1,†}

¹*CNRS-Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France*

²*Laboratoire Kastler-Brossel, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France[‡]*

(Received 18 May 1999; revised manuscript received 27 July 1999)

We present a Monte Carlo calculation for up to $N \sim 20\,000$ bosons in 3D to determine the shift of the transition temperature due to small interactions a . We generate independent configurations of the ideal gas. At finite N , the superfluid density changes by a certain correlation function in the limit $a \rightarrow 0$; the $N \rightarrow \infty$ limit is taken afterwards. We argue that our result is independent of the order of limits. Detailed knowledge of the noninteracting system for finite N allows us to avoid finite-size scaling assumptions.

PACS numbers: 03.75.Fi, 02.70.Lq, 05.30.Jp

Feynman [1] has provided us with a classic formula for the partition function of the canonical noninteracting Bose gas. It represents a “path integral without paths,” as they have been integrated out. What remains is the memory of the cyclic structure of the permutations that were needed to satisfy bosonic statistics,

$$Z_N = \sum_{\{m_k\}} \mathcal{P}(\{m_k\}); \quad \text{with } \mathcal{P}(\{m_k\}) = \prod_{k=1}^N \frac{\rho_k^{m_k}}{m_k! k^{m_k}}. \quad (1)$$

The partitions $\{m_k\}$ in Eq. (1) decompose permutations of the N particles into exchange cycles (m_i cycles of length i for all $1 \leq i \leq N$ with $\sum_k k m_k = N$). ρ_k is a system-dependent weight for cycles of length k .

In this paper we present an explicit Monte Carlo calculation for up to $\sim 20\,000$ bosons in three dimensions, starting from Eq. (1). The calculation allows us to determine unambiguously the shift in the transition temperature T_c for *weakly interacting* bosons in the thermodynamic limit for an infinitesimal s -wave scattering length a . This fundamental question has lead to quite a number of different and contradictory theoretical as well as computational answers (cf., e.g., [2–4]).

We will first use Eq. (1) and its generalizations to determine very detailed properties of the finite- N canonical Bose gas in a box with periodic boundary conditions. We then point out that *all* information on the shift of T_c for weakly interacting gases is already contained in the nonin-

teracting system. In the linear response regime (infinitesimal interaction), it is a certain correlation function of the noninteracting system which determines the shift in T_c . This correlation is much too complicated to be calculated directly, but we can *sample* it, even for very large N . To do so, we generate independent bosonic configurations in the canonical ensemble. We have found a solution [based on Feynman’s formula Eq. (1)] which avoids Markov chain Monte Carlo methods. In our two-step procedure, a partition $\{m_k\}$ is generated with the correct probability $\mathcal{P}(\{m_k\})$. Then, a random boson configuration is constructed for the given partition.

We stress that all our calculations are done very close to T_c , so that the correlation length ξ of any macroscopic sample is much larger than the actual system size L of the simulation. This condition $L \ll \xi$ allows us to invoke the standard finite-size scaling hypothesis [5], but also to take the $N \rightarrow \infty$ limit after the limit $a \rightarrow 0$.

A key concept in the path integral representation of bosons is that of a *winding number*. Consider first the density matrix $\rho(r, r', \beta)$ of a single particle [$r = (x, y, z)$] at inverse temperature $\beta = 1/T$. In a three-dimensional cubic box of length L with periodic boundary conditions, $\rho(r, r', \beta) = \rho(x, x', \beta) \times \rho(y, y', \beta) \times \rho(z, z', \beta)$ with, e.g.,

$$\rho(x, x', \beta) = \sum_{w_x=-\infty}^{\infty} \frac{\exp[(x - (x' + Lw_x))^2/2\beta]}{\sqrt{2\pi\beta}}. \quad (2)$$

In Eq. (2), x and x' are to be taken within the periodic box ($0 < x, x' < L$).

It is more convenient to adopt nonperiodic coordinates ($-\infty < x, x' < \infty$), as we will do from here on. In Fig. 1, the path drawn with a thick line can equivalently be tagged by (x_1, x'_1) or by $(\tilde{x}_1, \tilde{x}'_1)$. This notation allows one to keep track of the topology of paths without introducing intermediate time steps τ , even for very small systems. With this convention, the winding number of a configuration, $W = (W_x, W_y, W_z)$, is defined as

$$W = \sum (r'_i - r_i)/L. \quad (3)$$

The winding number W in Eq. (3) is the sum of the (integer) winding numbers for each of the statistically uncorrelated cycles which comprise the configuration. The complete statistical weight ρ_k of a cycle of length k [cf. Eq. (1)] is given by the sum of the weights $\rho_{k,w}$ for all winding numbers w ,

$$\rho_k = \left[\sum_{w=-\infty}^{\infty} \rho_{k,w} \right]^3; \quad (4)$$

$$\rho_{k,w} = \frac{L}{\sqrt{2\pi k\beta}} \exp\left(-\frac{L^2 w^2}{2k\beta}\right).$$

Pollock and Ceperley [6] have obtained the result

$$\rho_s/\rho = \frac{\langle W^2 \rangle L^2}{3\beta N}, \quad (5)$$

which connects the system's superfluid density ρ_s/ρ to the winding number in a rigorous fashion.

It is possible to determine the mean square winding number $\langle W^2 \rangle$ from Eq. (1). We first compute $\langle W^2 \rangle$ for a given partition $\{m_k\}$

$$\langle w^2 \rangle_{\{m_k\}} = \sum m_k \langle w^2 \rangle_k. \quad (6)$$

Here, $\langle w^2 \rangle_k$ is the mean with respect to cycles of length k , $\langle w^2 \rangle_k = 3[\sum_w \rho_{k,w} w^2][\sum_w \rho_{k,w}]^2/\rho_k$. This yields, by summation over partitions

$$\langle W^2 \rangle = \sum \frac{\rho_k}{k} \langle w^2 \rangle_k Z_{N-k}/Z_N. \quad (7)$$

We have also determined the probability distribution of W_x .

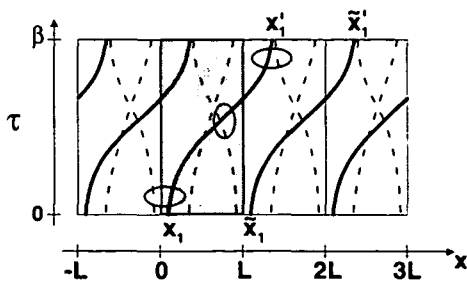


FIG. 1. A one-dimensional periodic simulation box with three bosons. Particles move in imaginary time $0 < \tau < \beta$ and in periodic space $0 < x < L$. We use nonperiodic coordinates.

An analogous calculation formally replaces $\langle w^2 \rangle_k \rightarrow k$ in Eq. (6), which becomes $\sum_k k m_k = N$ [cf. Eq. (1)]. Equation (7) is transformed into

$$Z_N = \sum \rho_k Z_{N-k}/N. \quad (8)$$

Equation (8) allows the recursive calculation of the partition function Z_N if $Z_1, \dots, Z_{N-1}$ are known [7].

The same relation Eq. (8) allows us to identify

$$k \langle m_k \rangle = \rho_k Z_{N-k}/Z_N \quad (9)$$

as the mean number of particles in a cycle of length k .

From a different point of view, the quantity $\sum_k k m_k e^{-\beta k \epsilon_i}/\rho_k$ determines the occupation number of single-particle energy levels ϵ_i for a given partition $\{m_k\}$. This allows us to compute the average number $\langle N_i \rangle$ of particles occupying state ϵ_i in the bosonic system,

$$\langle N_i \rangle = \sum_{k=1}^N \left\{ e^{-\beta k \epsilon_i} \frac{Z_{N-k}}{Z_N} \right\}. \quad (10)$$

Equation (10) is of crucial importance: We find that N_0/N , the condensate fraction, is different from the superfluid fraction, as determined from Eqs. (5) and (7) in a finite noninteracting system.

The term $\{ \}$ in Eq. (10) can be regarded as the probability $P(n_i \geq k)$ of having at least k particles in state ϵ_i . Taking the sum over all states i , with the use of Eq. (9), we can connect cycle statistics with the usual occupation number representation,

$$k \langle m_k \rangle = \sum_i P(n_i \geq k). \quad (11)$$

This curious result, which is of practical use in inhomogeneous systems [8], tells us that the discrete derivative of the mean cycle numbers with respect to their length is given by the probability of having k particles in the same single-particle energy level.

Rescaled superfluid densities $N_i^{1/3} \rho_s/\rho$ [from Eqs. (5) and (7)] are plotted in Fig. 2a for $N_1 = 37$, $N_2 = 296$, $N_3 = 2368$, and $N_4 = 18944$ as a function of the rescaled temperature $t = (T - T_c^\infty)/T_c^\infty$, where T_c^∞ is the critical temperature for $N \rightarrow \infty$.

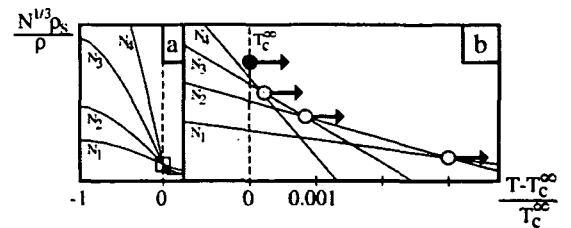


FIG. 2. Rescaled superfluid density of an ideal Bose gas. The curves for different N with $N_{i+1} = 8N_i$ intersect approximately at T_c^∞ , as shown in (a). The close-up view (b) reveals important differences. We determine the shift of the intersection points as a function of the interaction (light arrows). The dark arrow shows schematically the extrapolated shift in the thermodynamic limit.

A finite-size scaling ansatz, which was used in previous Monte Carlo work on the problem [3], assumes that the curves of $N_i^{1/3} \rho_s / \rho$ for a weakly interacting Bose gas should intersect at the transition temperature, as they do approximately. However, the small-scale Fig. 2b clearly shows the importance of corrections to scaling (cf. [9]) already for the noninteracting gas. By continuity, the corrections to scaling for the weakly interacting Bose gas must be important, especially if the temperature shift due to interactions becomes small.

Our strategy greatly benefits from the solution Eq. (7) for the ideal gas. We compute the intersection point $(N_i^{1/3} \rho_s / \rho, t)$ for two finite systems with N_1 and $N_2 = 8N_1$ particles and determine how this point is shifted under the influence of interactions (cf. Fig. 2b). Our arbitrary but fixed ratio $N_2/N_1 = 8$ facilitates the direct extrapolation in N_1 to $N_1 \rightarrow \infty$.

To generate a random partition, we interpret the term $\rho_k Z_{N-k}/Z_N$ in Eq. (8) as the probability to *split off* a cycle of length k from a configuration of N bosons, and to be left with a system of $N - k$ bosons. We can pick k with probability $\sim \rho_k Z_{N-k}$ with a simple "tower of probabilities" strategy [10]. Recursively, we can thus generate an independent random partition $\{m_k\}$ with great speed. The recursion stops as soon as we have split off a cycle of length j from a system with j particles.

To go from a random partition to a random *configuration*, we may treat each cycle separately. For a cycle of length k , we select a winding number w_x with probability ρ_{k,w_x} [cf. Eq. (4)], and analogously for w_y and w_z . Towers of probabilities are again used. The cycle starts at a random position $r = (x, y, z)$ with $0 < x, y, z < L$, and ends at $r' = (x + w_x L, y + w_y L, z + w_z L)$. Intermediate points are filled in with the appropriate Lévy construction [6]. We have tested our algorithm successfully against the known results (cf. Fig. 2).

We thus generate independent free boson path-integral configurations by a method very different from what is usually done in path-integral (Markov-chain) quantum Monte Carlo calculations, but with an equivalent outcome: Any appropriate operator is sampled with the probability

$$\langle \mathcal{O} \rangle_0 = \frac{\sum_P \int dR [\prod_i \rho(r_i, r'_i)] \mathcal{O}}{\sum_P \int dR [\prod_i \rho(r_i, r'_i)]}. \quad (12)$$

Here, $\sum_P$ indicates the summation over all permutations P , and r'_i is the position of the particle $P(i)$. In the presence of interactions, the statistical weight of each configuration is no longer given by the product of the one-particle density matrices $\pi_0 = [\prod_i \rho(r_i, r'_i)]$. To lowest order in the interaction, the density matrix is exclusively modified by s -wave scattering. Likewise, only binary collisions need to be kept. This means that the correct statistical weight is given by

$$\pi_a(r_1, \dots, r_N; r'_1, \dots, r'_N) = \pi_0 \prod_{i < j} g_{ij}(r_i, r_j, r'_i, r'_j). \quad (13)$$

The contribution of collisions is to lowest order in a

$$\prod_{i < j} g_{ij} = 1 - a \sum_{i < j} c_{ij} \quad (14)$$

with

$$c_{ij} = (|r_{ij}|^{-1} + |r'_{ij}|^{-1}) \times \exp[|r_{ij}| |r'_{ij}| (1 + \cos \gamma_{ij}) / 2\beta].$$

Here, $r_{ij} = r_i - r_j$ and γ_{ij} is the angle between r_{ij} and r'_{ij} . Equation (13) corresponds to the popular path-integral Monte Carlo "action" with the following important modifications: (i) no interior time slices are needed, (ii) the interaction may be treated on the s -wave level, and (iii) the interaction may be expanded in a . For a consistent evaluation of the interaction with periodic boundary conditions, as schematically represented in Fig. 1, it is best to sum over *all* pairs $i < j$ shown, with the condition that r_i be in the original simulation box (shaded in gray). As indicated by the small circles in Fig. 1, c_{ij} may have important contributions stemming from more than one representative of the path (r_j, r'_j) , especially for small systems. Of course, a cutoff procedure can be installed.

We now find for the mean-square winding number in the interacting system

$$\langle W^2 \rangle_a = \frac{\langle (1 - aC)W^2 \rangle_0}{\langle (1 - aC) \rangle_0}, \quad (15)$$

where we put $C = \sum_{i < j} c_{ij}$. Expanding in a , this yields

$$\langle W^2 \rangle_a - \langle W^2 \rangle_0 = -a \langle (\Delta W^2) (\Delta C) \rangle_0, \quad (16)$$

where $\Delta \mathcal{O} = \mathcal{O} - \langle \mathcal{O} \rangle_0$ [11].

For a finite system of N bosons, the shift in the superfluid density $\delta \rho_s = \rho_s(a) - \rho_s(0)$ can thus be proven to be linear in a

$$\frac{\delta \rho_s}{\rho} = -\frac{X_N}{\beta N^{1/3}} a \rho^{1/3}, \quad (17)$$

with $X_N = \langle (\Delta W^2) (\Delta C) \rangle_0 / (3\rho)$.

To determine quantitatively the shift of the intersection points in Fig. 2, we expand the ideal gas superfluid density around the intersection temperature T_s of two systems with N and $8N$ bosons at the same density,

$$\rho_s / \rho(T) N^{1/3} = \rho_s / \rho(T_s) N^{1/3} + \alpha_N \times [T - T_s]. \quad (18)$$

In this formula, the linear expansion coefficients can be computed. With interactions, only $\rho_s / \rho(T_s) N^{1/3}$ is modified to linear order in a . $\alpha(N)$ remains unchanged, as we restrict the expansion to $|T - T_s| / T_s \sim a \rho^{1/3}$. We find the new intersection point of the two systems to be shifted in temperature as

$$\frac{\Delta T_s}{T_s(0)} := \frac{T_s(a) - T_s(0)}{T_s(0)} = \frac{X_{8N} - X_N}{\alpha_{8N} - \alpha_N} a \rho^{1/3}. \quad (19)$$

We have also computed the shift in ρ_s / ρ , but found

out only that it must be extremely small. We are unaware of any fundamental reason for a vanishing shift in this quantity. In Fig. 3, we plot the shift ΔT_s for different system sizes ranging from $(N_1, N_2) = (37, 296)$ to $(2368, 18\,944)$ vs $N_1^{-1/2}$. We have not attempted a thorough analysis of the finite-size effects, which already appear negligible for our largest systems.

We conclude that the transition temperature of the weakly interacting Bose gas increases linearly in the scattering length a by an amount of

$$\frac{\Delta T_C}{T_C} = (2.3 \pm 0.25)a\rho^{1/3}. \quad (20)$$

Our result Eq. (20) is almost an order of magnitude larger than what was found in a previous Monte Carlo calculation [3]. However, this calculation was restricted to very small particle numbers and it used a problematic finite-size scaling ansatz, as pointed out. The agreement of Eq. (20) with the renormalization group calculation [2] seems to be quite good.

It is very interesting to understand whether the result Eq. (20) directly applies to the current Bose-Einstein condensation experiments (cf., e.g., [12,13]). In earlier papers [8,14], we have pointed out the particularities of these finite systems in external potentials (cf. [15] for a general overview). Notwithstanding the differences between the two systems, a relevant parameter is for both cases $a\rho^{1/3}$, where the maximum density (at the center of the trap) at the transition point must be taken in the inhomogeneous case. The experimental value is of the order $a\rho^{1/3} \sim 0.02$.

Within our method, we can also study finite values of the interaction, even though we no longer compute a correlation function, and also have to introduce interior time slices. Contributions beyond s -wave scattering need to be monitored, as we have in [14]. For $N = 125$ bosons we have found agreement with the linear response formula Eq. (16) up to $a\rho^{1/3} \lesssim 0.005$, but a 15% decrease for the full treatment for $a\rho^{1/3} = 0.023$. A detailed investigation of this question goes beyond the scope of this paper.

In conclusion, it is worth noting that we have encountered none of the difficulties which usually haunt boson calculations: We work in the canonical ensemble; therefore, the fluctuation anomaly of the grand-canonical Bose gas plays no role. The density remains automati-

cally constant as a function of a so that an expansion in $a\rho^{1/3}$ is well defined. At finite N , we can furthermore prove that the shift in ρ_s/ρ is linear in the interaction parameter. We have also consistently approached the weakly interacting system from the vantage point of the ideal gas. This allows us to obtain the crucial information on exactly where to do our simulation (cf. Fig. 2). Finally, our extremely powerful direct sampling algorithm has allowed us to partially dispel the curse of Monte Carlo simulations: limitations to small system sizes.

We thank Boris V. Svistunov for discussions. M.H. acknowledges support by the Deutscher Akademischer Austauschdienst. The FORTRAN programs used in this work are made available (from M.H. or W.K.).

*Email address: holzmann@physique.ens.fr

†Email address: krauth@physique.ens.fr

http://www.lps.ens.fr/~krauth

‡Laboratoire Kastler-Brossel is a unité de recherche de l'Ecole Normale Supérieure et de l'Université Pierre et Marie Curie, associée au CNRS.

- [1] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics* (Benjamin/Cummings, Reading, MA, 1972).
- [2] H.T.C. Stoof, Phys. Rev. A **45**, 8398 (1992); M. Bijlsma and H.T.C. Stoof, Phys. Rev. A **54**, 5085 (1996).
- [3] P. Grüter, D.M. Ceperley, and F. Laloë, Phys. Rev. Lett. **79**, 3549 (1997).
- [4] M. Holzmann, P. Grüter, and F. Laloë, Eur. Phys. J. B **10**, 739 (1999).
- [5] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1996).
- [6] E.L. Pollock and D.M. Ceperley, Phys. Rev. B **30**, 2555 (1984); **36**, 8343 (1987); D.M. Ceperley, Rev. Mod. Phys. **67**, 1601 (1995).
- [7] P. Borrmann and G. Franke, J. Chem. Phys. **98**, 2484 (1993); B. Eckhardt, in *Emerging Applications of Number Theory*, edited by D. Hejhal et al. (Springer, New York, 1997); S. Grossmann and M. Holthaus, Phys. Rev. Lett. **79**, 3557 (1997); M. Wilkens and C. Weiss, J. Mod. Opt. **44**, 1801 (1997).
- [8] W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **77**, 3695 (1996).
- [9] E.L. Pollock and K.J. Runge, Phys. Rev. B **46**, 3535 (1992).
- [10] W. Krauth, in *Advances in Computer Simulation*, edited by J. Kertész and I. Kondor, Lecture Notes in Physics (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- [11] As it stands, Eq. (16) is extremely sensitive to sampling noise both in C and in W^2 . The latter can be completely eliminated by an explicit calculation of the probability distribution of $P(W_x)$, along the lines of Eq. (7).
- [12] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
- [13] K.B. Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [14] M. Holzmann, W. Krauth, and M. Naraschewski, Phys. Rev. A **59**, 2956 (1999).
- [15] F. Dalfovo, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii, and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).

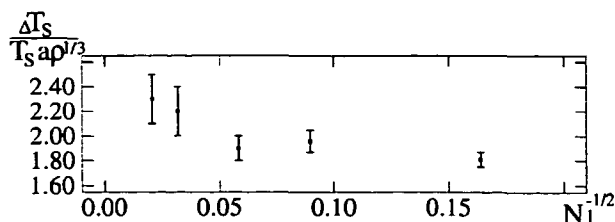


FIG. 3. Shift of the intersection temperature $\Delta T_s / [T_s(0) a \rho^{1/3}]$ as a function of $N_1^{-1/2}$ ($N_2 = 8N_1$). The system sizes are $(N_1, N_2) = (37, 296)$, $(125, 1000)$, $(296, 2368)$, $(1000, 8000)$, and $(2368, 18\,944)$.

Publication IV

M. Holzmann, W. Krauth, and M. Naraschewski

Precision Monte Carlo test of the Hartree-Fock approximation for a trapped Bose gas

Phys. Rev. A **59**, 2956 (1999)

Dans cet article nous utilisons les méthodes de Monte-Carlo quantique pour étudier les effets d'interaction entre des atomes sur la transition de Bose-Einstein dans des vapeurs atomiques. Nous avons choisi les paramètres du système adaptés au cas des expériences sur du ^{87}Rb : $N = 10\,000$ bosons dans un piège harmonique autour de la température critique avec une longueur de diffusion $a = 0.0043\,a_0$, où a_0 est la largeur d'état fondamental du piège.

Nous calculons le profil spatial de la densité des atomes. A partir de la densité spatiale, la fraction condensée est déterminée par un ajustement très précis. Nous comparons *quantitativement* ces résultats avec les prédictions de l'approximation semi-classique de Hartree-Fock (approximation du champ moyen). La différence entre les deux théories montre une petite augmentation du nombre de particules condensées dans la simulation de Monte-Carlo par rapport à la solution des équations non-linéaires de Hartree-Fock. Comme des effets de taille finie sont inclus dans les deux théories, la différence est due aux effets des corrélations, étudiées dans les publications [I-III] pour un système homogène. Dans le calcul de Monte-Carlo nous avons explicitement étudié l'origine de cette différence: Elle ne vient pas d'une défaillance de l'approximation utilisée pour décrire les collisions binaires (longueur de diffusion a en onde s , indépendamment des impulsions relatives), mais elle est une conséquence des corrélations dans le système à N corps.

Par ailleurs, nous montrons que le calcul de Monte-Carlo permet d'estimer l'incertitude systématique d'une mesure expérimentale qui détermine la température du système à partir d'un ajustement de la densité spatiale. Nous discutons aussi la résolution nécessaire pour mesurer expérimentalement ces corrections au champ moyen.

Precision Monte Carlo test of the Hartree-Fock approximation for a trapped Bose gas

Markus Holzmann,^{1,2,*} Werner Krauth,^{1,†} and Martin Naraschewski^{3,‡}

¹CNRS-Laboratoire de Physique Statistique, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France

²Laboratoire Kastler-Brossel,[§] Ecole Normale Supérieure, 24, rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France

³Jefferson Laboratory, Department of Physics, Harvard University, Cambridge, Massachusetts 02138
and ITAMP, Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, 60 Garden Street, Cambridge, Massachusetts 02138

(Received 26 October 1998)

We compare the semiclassical Hartree-Fock approximation for a trapped Bose gas to a direct path-integral quantum Monte Carlo simulation. The chosen parameters correspond to current ⁸⁷Rb experiments. We observe corrections to the mean-field density profile: the path-integral calculation reveals an increase of the number of condensed particles, which is of the same order as a previously computed result for a homogeneous system. We discuss the experimental observability of the effect and propose a method to analyze data of *in situ* experiments. [S1050-2947(99)02404-X]

PACS number(s): 03.75.Fi, 02.70.Lq, 05.30.Jp

The experimental realization of Bose-Einstein condensation (BEC) in dilute atomic vapors [1–3] has generated extraordinary experimental and theoretical interest. From the viewpoint of quantum many-body physics, the trapped atomic vapors are peculiar. Well above the critical point, the gases are extremely dilute, and their description as noninteracting bosons is very accurate. As the condensation sets in, the trapped atoms are strongly compressed in real space. Then, interactions become much more important and even the simplest thermodynamic quantities (spatial distribution, condensate fraction, etc.) have to be obtained by the appropriate quantum many-body technique. At zero temperature, the Bogoliubov approach of weakly interacting Bose gases is well established [4]. There, the macroscopic condensate wave function is given by the Gross-Pitaevskii equation [5]. The effects of noncondensed particles at finite temperatures can be included via the Hartree-Fock-Bogoliubov equations, which have been solved in the Popov approximation [6] and in various simplified forms [7].

The equilibrium properties of Bose gases can also be directly computed by path integral quantum Monte Carlo (QMC) simulation [8]. Very importantly, the QMC calculation is free of systematic errors: apart from purely statistical fluctuations, it gives an exact numerical solution of BEC. For simulations corresponding to dilute atomic vapors, the QMC calculation can be performed directly for the large particle numbers ($\sim 10^4$ – 10^5) and the temperatures of experimental interest [9].

A subject of considerable interest in these systems is the detailed study of the critical region of the phase transition. The QMC approach was already used to show [9] that the trapped Bose gas with repulsive interactions has a lower critical temperature T_c and a smaller number N_0 of con-

densed particles below T_c than the free Bose gas, one of the predictions of mean-field theories [10,11]. This effect is intrinsic to the inhomogeneous trap potential, where the density is not fixed: The mean interaction of a given particle with the other particles, as well as with the external potential, changes the density profile with respect to the ideal Bose gas.

Although this leads to a shift of the critical temperature (even within mean-field theory), condensation sets in as soon as the phase-space density reaches (locally) the ideal gas limit: As for the ideal gas, mean-field theory predicts the occurrence of BEC for a degeneracy parameter in the center of the trap $\rho(0)\lambda_T^3 = 2.61 \dots$, where $\rho(0)$ denotes the density in the center of the trap and $\lambda_T = \hbar \sqrt{2\pi/mk_B T}$ is the thermal wavelength.

Up to now, the deviation of the degeneracy parameter from the ideal gas value due to interactions has not been determined. Only the homogeneous system has been studied, and has given contradictory results for the order of magnitude and even the sign of the critical temperature shift [12]. Relevant recent works are a QMC [13] and a renormalization group calculation [14] in the homogeneous case. Both predict a decreasing degeneracy parameter, which is equivalent to an increased critical temperature. The two calculations differ considerably in the amount of this shift.

The main point of this paper is to calculate corrections to mean-field theory of the trapped Bose gas directly in an experimental setting. It was proposed earlier to measure the local degeneracy parameter in the center of the trap, $\rho(0)\lambda_T^3$, precisely at the onset of condensation and to check whether it was smaller or bigger than the ideal gas value [15]. However, the total number of particles close to the center of the trap is necessarily small and large fluctuations in this number are inevitable. These large fluctuations prevent a precise measurement of the central density. A second obstruction to the direct measurement comes from the finite-size effects, which are far from negligible for current experimental setups. For finite systems, the critical point lacks a unique definition and finite-size scaling has to be performed. To circumvent these difficulties, we propose another scheme for detecting effects beyond mean-field theory: We compare the results of the exact QMC calculation with the Hartree-Fock

*Electronic address: holzmann@physique.ens.fr

†Electronic address: krauth@physique.ens.fr

‡Electronic address: martin@mistral.harvard.edu

§Laboratoire Kastler-Brossel is a unité de recherche de l'Ecole Normale Supérieure et de l'Université Pierre et Marie Curie, associée au CNRS.

(HF) mean-field approximation. Since both computations can be done for the same finite number of atoms, deviations lead to an estimate of the critical temperature shift, which will be largely independent of finite-size effects. The use of scaling arguments is thus avoided.

Besides extracting the effect of interactions on the critical temperature, we concentrate in this paper on a precision test of the HF calculation at finite temperatures. In this approximation, the local density is determined by the local trap potential and the mean interaction energy of the atoms in a self-consistent way. We have chosen this theory for several reasons: First, it is the simplest approach for an interacting Bose gas at finite temperature. Although collective modes and anomalous averages are neglected, we will show that it already gives a rather accurate description for static properties of the gas. Further, it provides an ideal reference system, since it corresponds to a *locally homogeneous* Bose gas. Thus the corrections to HF should be comparable to previous calculations in a homogeneous system, which predict an increased critical temperature [13,14]. One could therefore expect that the full QMC solution should give a higher condensate fraction than HF at identical temperatures close to the transition point. Since this effect also lies beyond the Bogoliubov and Popov description, there is no need to compare with these theories in this temperature regime. We prefer the HF approximation as a reference, since it is qualitatively easier to understand.

For a system closely corresponding to many experiments with ^{87}Rb , we find deviations from the HF density which are concentrated in the overlap region between the excited atoms and the condensate. The number of condensed particles N_0 is increased around the critical temperature by about 5%. For the quantitative analysis, we use a one-parameter fit to determine the condensate fraction. Our data analysis is based on reasonable physical assumptions and can also be used for a precision determination of the experimental temperature.

The QMC calculation is beset with statistical fluctuations. In fact, the noise of independent Monte Carlo configurations reproduces the sample-to-sample variations of repeated experimental measurements at the same temperature T and particle number N (or chemical potential). This allows us to discuss the experimental observability of these corrections to mean-field theory.

The Hamiltonian of N interacting particles in an *isotropic* harmonic trap with frequency ω is given by

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 r_i^2 \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N V(r_{ij}), \quad (1)$$

where V is the interatomic (pseudo) potential between two particles. Since we want to identify corrections beyond mean field we are very careful to assure the compatibility of QMC and HF on the level of the interparticle potential. In HF, the interaction is described by a single parameter, the s -wave scattering length a . In QMC, we have adopted a hard-core potential of diameter a . In HF, the interaction is described by the same parameter a , the s -wave scattering length. Notice that the s -wave scattering length of a hard-sphere potential coincides with its diameter, so that the low-energy collisions

of both potentials are identical. Up to now there is no evidence that a more complex pseudopotential has to be used for ^{87}Rb .

The partition function Z of the system with inverse temperature $\beta = (k_B T)^{-1}$ is given by the trace of the symmetrized density matrix $\rho = e^{-\beta H}$ over all states. Z satisfies the usual convolution equation:

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{N!} \sum_P \int dR \rho(R, R^P, \beta) \\ &= \frac{1}{N!} \sum_P \int dR \int dR_2 \cdots \int dR_M \rho(R, R_2, \tau) \cdots \\ &\quad \times \rho(R_M, R^P, \tau). \end{aligned} \quad (2)$$

Here $\tau = \beta/M$, R is the $3N$ -dimensional vector of the particle coordinates $R = (r_1, r_2, \dots, r_N)$, and R^P denotes the vector with permuted labels: $R^P = (r_{P(1)}, r_{P(2)}, \dots, r_{P(N)})$ [16]. As explained elsewhere [8], the QMC calculation relies on virtually exact formulas for the density matrices $\rho(R, R', \tau)$ at the higher temperature $1/\tau$ and performs the integral over $R, R_2, \dots, R_M$ as well as the sum over all permutations P in Eq. (2) by Monte Carlo sampling. Special data-handling techniques allow us to cope with very large atom numbers N .

As in [9] we consider a model system of 10 000 particles, corresponding to a critical temperature of the ideal gas of $k_B T_c^0 = 20.25 \hbar \omega$ and a hard-core potential with diameter $a = 0.0043 a_0 [a_0 = (\hbar/m\omega)^{1/2}]$. These values are typical for most ^{87}Rb experiments which are now in operation. We generally perform computations at different values of τ , and extrapolate to $\tau \rightarrow 0$, the limit in which the QMC formulas for the density matrices in Eq. (2) become manifestly exact. Notice that the convolution formula Eq. (2) is satisfied only for the *full* density matrix $\rho(R, R', \tau)$ but *not* for the s -wave contribution to $\rho(R, R', \tau)$. As τ becomes smaller, the region of applicability of the s -wave approximation for $\rho(R, R', \tau)$ shrinks, as higher angular momenta have to be taken into account. This is a “lifetime” effect, which stems from an increased collision rate with other particles. We can now understand that the corrections of the full QMC calculations with respect to the HF approximation can logically have two distinct origins: (i) the inapplicability of the s -wave approximation, (ii) the contribution of graphs (in the sense of a complete quantum many-body calculation), which are not contained in HF, but which are completely summed up by the Monte Carlo procedure.

Within our QMC simulation, we have explicitly studied the contributions of higher angular momenta ($l \geq 1$) to $\rho(R, R', \tau)$ and find them negligible. This allows us to affirm that the essential contributions from these graphs depend only on the low-energy scattering properties. Only the above point (ii) is realized.

In BEC, a single quantum state is occupied by a very large number of bosons. In the presence of interactions this state is a complicated many-body wave function. As far as one-particle properties are concerned it can, however, be described by a single-particle wave function $\psi_0(r)$ which describes the condensate. In HF theory, $\psi_0(r)$ is determined by the modified Gross-Pitaevskii equation

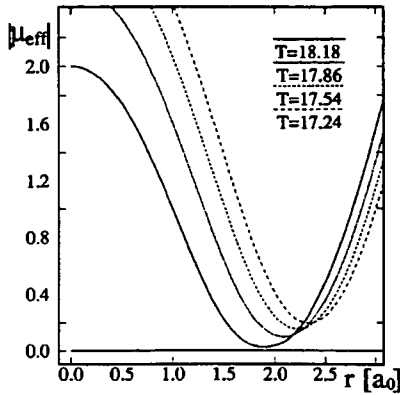


FIG. 1. Absolute value of the effective chemical potential $|\mu_{\text{eff}}|$ vs r/a_0 of the Hartree-Fock solution for different temperatures below the transition point (μ_{eff} and T are in units of $\hbar\omega$). As the effective chemical potential approaches zero, the HF solution becomes unstable.

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} r^2 + U[n_0(\mathbf{r}) + 2n_T(\mathbf{r})] - \mu_0 \right) \psi_0(\mathbf{r}) = 0, \quad (3)$$

where the densities of condensed particles $n_0(\mathbf{r}) = N_0 |\psi_0(\mathbf{r})|^2$ and of thermally excited particles $n_T(\mathbf{r})$ account for interactions between these particles. The interaction strength is given by $U = 4\pi\hbar^2 a/m$, where a denotes the s -wave scattering length, which coincides with the hard-core diameter. The factor of 2 in front of n_T accounts for the quantum-statistical exchange energy. In the semiclassical HF approximation, the thermal density is given by [10,11]

$$n_T(\mathbf{r}) = \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2}(e^{-[m\omega^2 r^2/2 + 2Un(\mathbf{r}) - \mu_T]/k_B T}). \quad (4)$$

Here, the thermal wavelength $\lambda_T = \hbar \sqrt{2\pi/mk_B T}$ and the Bose function $g_{3/2}(z) = \sum_{j=1}^{\infty} z^j/j^{3/2}$ have been used. In order to obtain the density distributions of the condensate and of the thermal component, Eqs. (3) and (4) have to be solved conjointly at the same chemical potential $\mu = \mu_0 = \mu_T$ with the constraint of the fixed particle number N (different notations for the chemical potential appear for later convenience, cf. below). HF neglects the collective excitations of a more fundamental Bogoliubov theory. However, it was observed that these excitations do not contribute significantly to thermodynamic properties at temperatures well above the chemical potential [17]. On the other hand, collective excitations are fully included in our QMC calculation, as recently confirmed by a comparison of two-particle correlation functions at low temperatures [19].

The precise solution of the HF equation is quite difficult. We have obtained identical results both with an iterative procedure [17] and an interpolation-minimization routine cf. [9]. In a small window around the transition temperature, the HF equations have no solution. In fact, on approaching this window from below, the effective chemical potential $\mu_{\text{eff}}(r) = -m\omega^2 r^2/2 - 2Un(r) + \mu_T$ in Eq. (4) approaches zero as shown in Fig. 1. Since the Bose function $g_{3/2}(z)$ diverges for $z > 1$, this causes a discontinuity of the HF solution. This problem is a finite-size effect which is related to the nonva-

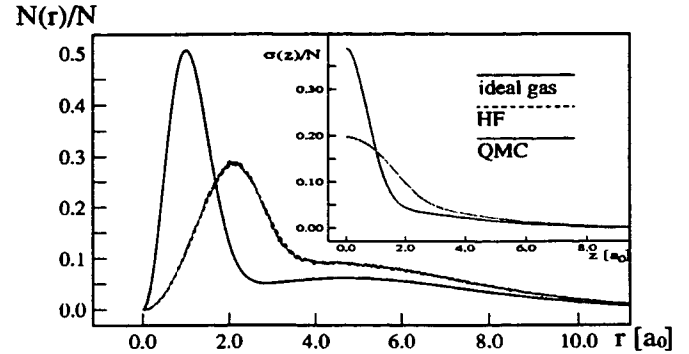


FIG. 2. Number density $N(r)/N$ from HF and the exact QMC calculations compared to the noninteracting Bose gas, both for $N = 10\,000$ particles in an isotropic trap with $\beta = 0.07/\hbar\omega$ ($T \approx 0.7 T_c^0$). The inset shows the corresponding cuts $\sigma(z)/N$ of the total density profile [20].

nishing kinetic energy of the condensate wave function, and falls within the region of critical fluctuations [10,18,17].

The raw output of our Monte Carlo simulations consists of histograms of the number density $N(r)$, where $N(r)dr$ describes the number of particles in a spherical shell between r and $r+dr$. The density $\rho(r)$ is given by $\rho(r) = N(r)/4\pi r^2$. Notice that the number density $N(r)$ is small near the center of the (isotropic) trap simply because the volume of the spherical shell goes to zero as $r \rightarrow 0$. A small value of $N(r)$ for $r \sim 0$ implies, however, that the fluctuations of this quantity $\sim \sqrt{N(r)}$ are necessarily large. As discussed above, this makes the *direct* measurement of the degeneracy parameter impractical. Of course, experiments measure neither $N(r)$, nor $\rho(r)$, but most often *cuts* of the total density profile $\sigma(z) = \int dx \int dy N'(x, y, z)$ or $\tilde{\sigma}(x, y) = \int dz N'(x, y, z)$, where $N'(x, y, z) dx dy dz$ is the number of particles in the volume element at $\vec{r} = (x, y, z)$. This quantity is straightforward to calculate with the knowledge of the number density $N(r)$. However, the averaging process which obtains σ or $\tilde{\sigma}$ from $N(r)$ convolutes both the data and the noise, and it is therefore preferable to analyze the number density $N(r)$ directly.

In Fig. 2, we compare the QMC results for $N(r)$ with the HF solution far below the critical temperature, $T \approx 0.7 T_c^0$. We notice an excellent agreement between the two approaches. For comparison we also show the corresponding result for 10 000 noninteracting bosons at the same temperature. The cuts $\sigma(z)$ of the respective density profiles are shown in the inset. Both plots exhibit the two components which make up the particle distribution: one component in the region of the trap center, which belongs to the condensed atoms, and the second component of the thermal atoms with a much larger width. The cuts exhibit the customary peaks of BEC at $z=0$. In the plots of the number density $N(r)$, the condensate distribution is given by the profile of the inner peak. One can directly see that the peak height of the interacting solution (both for HF and QMC) is reduced with respect to the noninteracting case, whereas their distribution is widened. The last point corresponds to a shift of the position of the first peak to larger values in $N(r)$. The area underlying the first peak determines the condensate fraction, and one can deduce that the number of condensed particles is de-

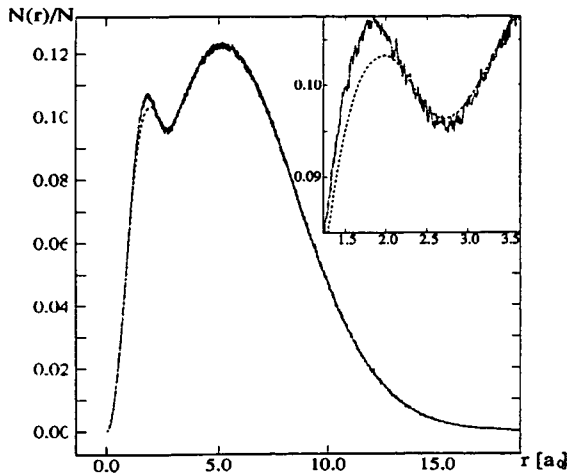


FIG. 3. $N(r)/N$ from HF and the exact QMC calculations for the same system as in Fig. 1, but at a higher temperature, $\beta = 0.056/\hbar\omega$ ($T \approx 0.88T_c^0$). The inset shows the two curves in the overlap region [20].

creased by the interaction. The second component of the distribution profile is built up by thermal atoms. Notice that even far away from the center of the trap the distribution of the interacting gas is quantitatively different from the ideal gas. Therefore a precise temperature determination within the ideal gas model is not feasible. We have attempted to fit the distribution of the wings to the semiclassical thermal density of the ideal gas, Eq. (4) with $U = \mu_T = 0$. A temperature determination within this model fails by up to 5%. At the very edge of the wings this error disappears, but the number of bosons found goes to zero, giving rise to the same measurement problem as discussed above. The determination of the temperature is much more successful if we fit the tails of the distribution with Eq. (4), where we replace the total density $n(r)$ with the density of thermal atoms $n_T(r)$ [21].

In Fig. 3, we show the data for the number density $N(r)$ for a temperature closer to the critical point, $T \approx 0.88T_c^0$. Here, the thermal component clearly dominates over the condensate contribution, as the majority of the atoms is thermal. The difference between QMC and HF becomes visible: The number of condensed particles in the exact numerical calculation is *increased* with respect to the mean field solution, as can be seen from the first peak. Qualitatively, this point agrees nicely with recent QMC [13] and renormalization group calculations [14] for the homogeneous case. These calculations indicate that the degeneracy parameter is changed by interaction effects beyond mean-field and that for a dilute gas the critical temperature is increased linearly in a/λ_T . The increased number of condensed particles is also reflected in the cuts $\sigma(z)$ which are not shown. However, the cuts are less sensitive and the peak at $z=0$ is raised by less than 1% as compared to HF.

It might be suspected that this increase is a mere consequence of quasiparticle excitations. However, it has been shown within the Popov approximation that quasiparticles lead rather to a minute decrease of the critical temperature [17].

To analyze the data we extract the number of condensed particles as well as their distribution function from the QMC calculation. In Ref. [9] both were obtained from the

permutation-cycle lengths (cf. also [22]). Strictly, the determination of the condensate fraction requires the computation of the off-diagonal elements of the one-particle density matrix. These elements are not obtained in the calculation, as Eq. (2) samples the diagonal terms only. The largest eigenvalue of the one-particle density matrix *defines* the number of condensed atoms, and the corresponding eigenvector the ground state wave function. At a difference with the case of ^4He , where the nondiagonal density matrix can be probed by neutron scattering (in the homogeneous sample), these elements seem to be experimentally inaccessible in the trap. In the present case, however, it is perfectly adequate to “fit” the QMC-generated histograms of $N(r)$ from a very large number of samples to smooth curves $n_0(r)$ and $n_T(r)$, as has been done to analyze experimental *in situ* measurements. We have found an excellent way of analyzing the data by using functional forms for $n_0(r)$ and $n_T(r)$ as given in Eqs. (3) and (4) with unrestricted “chemical potentials” μ_0 and μ_T . Equations (3) and (4) are used, but the data analysis is *not* a HF approximation in disguise: In the HF calculation, the single parameter μ allows us to satisfy the constraint on the total number of particles, but it also determines the condensate fraction. The HF solution, whenever it exists, usually is unique. With both μ_0 and μ_T , we have an additional parameter which allows us to vary the ratio between condensed and thermal atoms. This new parameter is fixed by the condition of minimizing the mean-square displacement between the data points and the interpolating function. Physically, this fit procedure corresponds to the assumption that the corrections to mean-field theory will not change the shape of the wave functions but rather their statistical weight, corresponding to the unrestricted “chemical potentials” μ_0 and μ_T in our fit. This assumption is also confirmed by a numerical diagonalization of the one-particle density matrix, obtained by a QMC calculation of trapped, interacting bosons including the nondiagonal elements [22]. Therefore, our data analysis is in the spirit of the common applications of the variational principle [16]: We take the best available functional form for the distribution function with one open parameter to minimize the deviations to the QMC results. This explains the extremely small value of the obtained χ^2 of the fit, which was compatible with purely statistical deviations for histograms containing more than 10^7 data points. We note in passing that the density $\rho(r) = N(r)/4\pi r^2$ and the component densities are obtained with very good precision *after* performing the fit of the raw-data histogram rather than from a direct rescaling of the data.

This fit could also provide a scheme for the accurate determination of T within experimental *in situ* measurements. In current experiments the temperature is mostly determined by a time-of-flight method. Due to collisions during the expansion and the noninstantaneous switch off of the trap this method limits the temperature determination to 5%, so that a more accurate determination of the critical temperature and the condensate fraction has not yet been possible [23,24].

The use of the fit allows us to compute N_0 vs temperature for the set of parameters chosen. The results, extrapolated to $\tau \rightarrow 0$, are plotted in Fig. 4 together with the HF result. The QMC calculation gives a consistently larger value of N_0 than HF at the same temperatures. It should be noticed that the

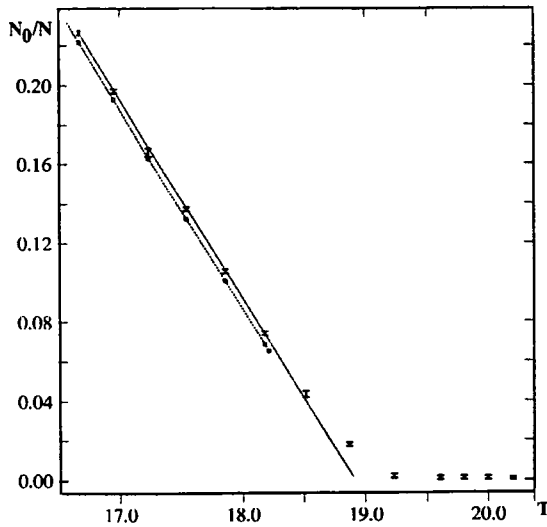


FIG. 4. Extrapolated condensate fraction N_0/N from HF (lower) and from QMC (upper) vs T in units of $\hbar\omega$. The gray line interpolates the QMC data. The inset illustrates the instability of the HF solution as the effective chemical potential $|\mu_{\text{eff}}(r)|$ approaches zero.

HF equations, as mentioned above, have no solution for a range of temperatures close to T_c .

The correction to mean-field theory shown in Fig. 4 provides definite support for the scenario found in the spatially homogeneous Bose gas: Interaction effects beyond mean-field lead to an increased tendency towards Bose condensation [13,14]. There is, however, an important difference of context: in a homogeneous system the density at each point is fixed and unchanged by interactions, so that the shift in T_c corresponds directly to corrections to the homogeneous HF calculation. As we have seen in the present case, the trap is much more complicated since the finite-size effects, the mean field itself, and finally the corrections to mean field all influence the density profile and the condensate fraction. However, the finite-size effects and the mean field itself are already included in HF. Therefore the difference between QMC and HF becomes directly comparable to the corrections calculated for the homogeneous system. In Ref. [13], the following behavior is proposed: $\delta T_c/T_c^0 = (T_c - T_c^0)/T_c^0 \approx 0.34a\rho^{0.34} \approx 0.46a/\lambda_T^0$, where T_c^0 is the critical temperature of a homogeneous Bose gas. In our case we would ex-

pect a change of the critical temperature $\delta T_c \sim 0.065\hbar\omega$. This corresponds roughly to the apparently constant offset in T of the two lines in Fig. 4.

It has been suggested [15] that a direct measurement of the density in the center of the trap $\rho(r=0)$ would be useful to determine the deviation of the degeneracy parameter from the mean-field result, $\rho(0)\lambda_T^3 = 2.61$. Even though we are able to extract $\rho(0)$ from QMC or from experimental data very precisely, the onset of condensation is not very sharp and the finite-size effects prevent a precise determination of the critical degeneracy parameter [25]. We repeat that a direct comparison between HF (which is available for finite systems) and the data is much more promising.

It is evident from an experimental point of view that the observation of these corrections necessitates a high resolution for T and for $N(r)$. Naturally, a single observation of a condensate will not result in a smooth curve for the histograms: even for ideal experiments there are intrinsic quantum-statistical fluctuations which may prevent the precise measurement of $N(r)$, necessary to determine the deviations from mean-field theory. Within QMC, we have determined these fluctuations from repeated measurements of the *complete* distribution of one whole sample. We find that an average of at least 50 independent samples has to be taken in order to detect that there is a difference between HF and the exact result in the sense of a Kolmogorov-Smirnov test [26]. For a precise evaluation (as in Fig. 3) a much larger data pool is necessary. Experimentally this seems to require a nondestructive measurement scheme, where the needed configuration averages must be accumulated by a time average over many thermal relaxation times. A detailed quantitative prescription for this effect is beyond the scope of this paper.

In conclusion, we have shown that the Hartree-Fock approximation succeeds in giving an accurate description of static properties in current BEC experiments. Moreover, we have computed the *corrections* to this mean-field theory by using numerically exact quantum Monte Carlo methods. Experimental access to the mean-field corrections will be of fundamental theoretical interest [27]. Comparison between theory and experiment on the level treated in this paper is very difficult but, we hope, conceivable.

Fruitful discussions with Franck Lalöe are acknowledged. This work was partially supported by the EC (TMR Network No. ERBFMRX-CT96-0002), the Deutscher Akademischer Austauschdienst, and the Deutsche Forschungsgemeinschaft. We are grateful to the ITP, Santa Barbara, for hospitality.

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [2] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [3] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tolett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995); C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, *ibid.* **78**, 985 (1997).
- [4] N. N. Bogoliubov, *J. Phys. (Moscow)* **11**, 23 (1947).
- [5] E. P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961); L. P. Pitaevskii,

- Zh. Éksp. Teor. Fiz.* **40**, 646 (1961) [*Sov. Phys. JETP* **13**, 451 (1961)].
- [6] D. A. W. Hutchinson, E. Zaremba, and A. Griffin, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1842 (1997).
- [7] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* (to be published).
- [8] E. L. Pollock and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **30**, 2555 (1984); **36**, 8343 (1987); D. M. Ceperley, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 1601 (1995).
- [9] W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3695 (1996).

- [10] V. V. Goldman, I. F. Silvera, and A. J. Leggett, *Phys. Rev. B* **24**, 2870 (1981).
- [11] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Phys. Rev. A* **54**, R4633 (1996).
- [12] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle System* (McGraw-Hill, New York, 1971); T. Toyoda, *Ann. Phys. (N.Y.)* **141**, 154 (1982); K. Huang, in *Studies in Statistical Mechanics* (North-Holland, Amsterdam, 1964), Vol. II.
- [13] P. Grüter, D. Ceperley, and F. Laloë, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3549 (1997).
- [14] M. Bijlsma and H. T. C. Stoof, *Phys. Rev. A* **54**, 5085 (1996); H. T. C. Stoof, *ibid.* **45**, 8398 (1992).
- [15] M. Houbiers, H. T. C. Stoof, and E. A. Cornell, *Phys. Rev. A* **56**, 2041 (1997).
- [16] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics* (Benjamin/Cummings, Reading, MA, 1972).
- [17] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *J. Low Temp. Phys.* **109**, 309 (1997); F. Dalfovo, S. Giorgini, M. Guilleumas, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Phys. Rev. A* **56**, 3840 (1997).
- [18] A. Griffin and E. Zaremba, *Phys. Rev. A* **56**, 4839 (1997).
- [19] M. Holzmann and Y. Castin, e-print physics/9812029; M. Naraschewski and R. J. Glauber, e-print cond-mat/9806362.
- [20] The displayed QMC data were obtained with $\tau=0.005/\hbar\omega$. A minute systematic shift subsists.
- [21] M. Naraschewski and D. M. Stamper-Kurn, *Phys. Rev. A* **58**, 2423 (1998).
- [22] M. Holzmann and W. Krauth (unpublished).
- [23] M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. M. Kurn, D. S. Durfee, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 416 (1996).
- [24] J. R. Ensher, D. S. Jin, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4984 (1996).
- [25] The scaling behavior seems to be similar to an ideal gas, where finite-size effects lead to a deviation of the critical degeneracy parameter by $O(N^{-1/6})$.
- [26] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes*, 2nd ed. (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1992).
- [27] The FORTRAN program for the fit procedure and the QMC code are made available (from M.H. or W.K.).

Publication V

M. Holzmann and Y. Castin

Pair correlation function of an inhomogeneous interacting Bose-Einstein condensate

Eur. Phys. J. D **7**, 425 (1999)

Nous calculons la fonction corrélation de densité-densité

$$\rho^{(2)}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}'', \beta) = \sum_{i \neq j} \langle \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}_j) \rangle = \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \Psi^\dagger(\mathbf{r}'') \Psi(\mathbf{r}'') \Psi(\mathbf{r}') \rangle$$

avec un calcul de Monte-Carlo quantique et nous comparons les résultats avec des approximations simples.

Nous utilisons les mêmes paramètres du système que dans [IV] qui décrivent des atomes de ^{87}Rb dans un piège harmonique. Pour obtenir une fonction dépendant uniquement de la distance relative $r = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|$, nous intégrons la fonction de corrélation sur la position du centre de masse $\mathbf{R} = (\mathbf{r}' + \mathbf{r}'')/2$

$$\varphi^{(2)}(r, \beta) \propto \int d^3\mathbf{R} \rho^{(2)}(\mathbf{R} + \mathbf{r}/2; \mathbf{R} - \mathbf{r}/2, \beta)$$

Autour de la température critique T_0 du gaz parfait, l'approximation de Hartree-Fock — légèrement adaptée pour tenir compte des effets répulsifs à petite distance r — est quantitativement en accord avec les prédictions du calcul de Monte-Carlo pour $\varphi^{(2)}$.

A des températures plus basses $T \lesssim 0.5T_0$, les prédictions de Hartree-Fock deviennent imprécises. En utilisant une description de Bogoliubov dans l'approximation de densité locale, la fonction de corrélation est bien décrite. Ce résultat est particulièrement intéressant, parce que la contribution des modes phononiques pour $k \rightarrow 0$ dans la description de Bogoliubov modifie le comportement à longue distance $r \gg \xi$ de la fonction de corrélation $\varphi^{(2)}(r, \beta)$, où $\xi = (8\pi na)^{-1/2}$ est la longueur de corrélation ("healing length"). Ce changement est bien visible dans le calcul de Monte-Carlo.

Nous avons également étudié la relation entre l'énergie d'interaction et la fonction de corrélation, utilisée dans les expériences pour mesurer la cohérence spatiale du deuxième ordre. Nous montrons que les résultats des expériences ne peuvent pas être directement interprétés comme une mesure de la fonction de corrélation qui doit s'annuler à petite distance. Les données expérimentales peuvent seulement donner une valeur extrapolée de la fonction de corrélation qui ne tient pas compte du vrai comportement de la fonction de corrélation à petite distance.

Pair correlation function of an inhomogeneous interacting Bose-Einstein condensate

M. Holzmann^a and Y. Castin^b

Laboratoire Kastler-Brossel^c, CNRS-Laboratoire de Physique Statistique de l'École Normale Supérieure,
24 rue Lhomond, 75005 Paris, France

Received 16 December 1999

Abstract. We calculate the pair correlation function of an interacting Bose gas in a harmonic trap directly *via* Path Integral Quantum Monte-Carlo simulation for various temperatures and compare the numerical result with simple approximative treatments. Around the critical temperature of Bose-Einstein condensation, a description based on the Hartree-Fock approximation is found to be accurate. At low temperatures the Hartree-Fock approach fails and we use a local density approximation based on the Bogoliubov description for a homogeneous gas. This approximation agrees with the simulation results at low temperatures, where the contribution of the phonon-like modes affects the long range behavior of the correlation function. Further we discuss the relation between the pair correlation and quantities measured in recent experiments.

PACS. 03.75.Fi Phase coherent atomic ensembles; quantum condensation phenomena (Bose condensation) – 02.70.Lq Monte Carlo and statistical methods – 05.30.Jp Boson systems

1 Introduction

One of the appealing features of the experimental achievement of Bose-Einstein condensation in dilute vapors [1–3], is the demonstration of first order coherence of matter waves [4]. The interference pattern of this experiment agrees with the theoretical calculation [5], which reveals that the underlying theoretical concept of off-diagonal long range order due to a macroscopically occupied quantum state is justified [6]. Additional experiments have explored certain aspects of second and third order coherence of a trapped Bose gas [7–9]. Here we study the density-density correlation function which is related to second order coherence. With the knowledge of this pair correlation function, the total interaction energy can be calculated. In [7] the release energy of the atoms was measured after switching off the magnetic trap. In the Thomas Fermi regime at zero temperature the initial kinetic energy can be neglected and the release energy is dominated by the interaction energy. By comparison with the usual mean field interaction energy using a contact potential, it was concluded that the release energy is mainly proportional to the pair correlation function at vanishing relative distance. Strictly speaking this statement cannot be correct as for interactions with a repulsive hard core the pair correlation function must vanish at zero distance. To give a

precise meaning to this statement one needs to access the whole correlation function.

In this paper we consider in detail the spatial structure of the correlation function of an interacting trapped Bose gas. The Fourier transform of this function is directly related to the static structure factor which can be probed by off-resonant light scattering. The tendency of bosonic atoms to cluster together causes atom-bunching for an ideal gas above the condensation temperature, for the atoms separated by less than the thermal de-Broglie wavelength [10]. For the condensate atoms, this bunching vanishes, since they all occupy the same quantum state [11,12]. However, for a gas with strong repulsive interatomic interaction, it is impossible to find two atoms at exactly the same place, and hence the pair correlation function must vanish at very short distances. This mutual repulsion can significantly reduce the amount of bosonic bunching at temperatures around the transition temperature [13]. At much lower temperature, the presence of the condensate changes the excitation spectrum as compared to the noninteracting case. It is known that in a homogeneous Bose gas the modes of the phonons give rise to a modification of the long range behavior of the correlation function [14].

Using path integral quantum Monte-Carlo simulations all equilibrium properties of Bose gases can be directly computed without any essential approximation [15]. It has been shown that this calculation can be performed directly for the particle numbers and temperatures of experimental interest [16]. Here, we use this approach to calculate

^a e-mail: holzmann@lps.ens.fr

^b e-mail: castin@physique.ens.fr

^c Laboratoire Kastler Brossel is a unité de recherche de l'École Normale Supérieure et de l'Université Pierre et Marie Curie, associée au CNRS.

the pair correlation function for various temperatures and compare our results with simple approximate treatments.

Near the critical temperature our data are quantitatively well explained by an improved semiclassical Hartree-Fock theory, where the full short range behavior is taken into account. At low temperature this single-particle approximation fails since the low lying energy modes become important and they are not correctly described by the Hartree-Fock treatment. In the Bogoliubov approach these modes are phonon-like and change the behavior of the correlation function. Adapting the homogeneous Bogoliubov solution locally to the inhomogeneous trap case we find an excellent agreement with the Monte-Carlo simulation results at low temperature.

2 Hamiltonian of the problem

The Hamiltonian of N interacting particles in an isotropic harmonic trap with frequency ω is given by

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 r_i^2 \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(r_{ij}), \quad (1)$$

where V is the interatomic potential, which depends only on the relative distance $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ between two particles. This potential in the experiments with alkali atoms has many bound states, so that the Bose-condensed gases are metastable systems rather than systems at thermal equilibrium. To circumvent this theoretical difficulty, we have to replace the true interaction potential by a model potential with no bound states.

This model potential is chosen in a way that it has the same low energy binary scattering properties as the true interaction potential. In the considered experiments, the s -wave contribution strongly dominates in a partial wave expansion of the binary scattering problem, so that it is sufficient that the model potential have the same s -wave scattering length a as the true potential. For simplicity we take in the quantum Monte-Carlo calculations a pure hard-core potential with diameter a . In the analytical approximations of this paper, we have taken, as commonly done in the literature, the pseudo-potential described in [14], which is a regularized form of the contact potential, $g\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)(\partial/\partial r_{12})(r_{12})$, with a coupling constant

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (2)$$

3 Path integral quantum Monte-Carlo approach

3.1 Reminder of the method

The partition function Z of the system with inverse temperature $\beta = (k_B T)^{-1}$ is given as the trace over the (unnormalized) density matrix ϱ :

$$\varrho(\beta) = e^{-\beta H} \quad (3)$$

over all symmetrized states. Both satisfy the usual convolution equation which we can write in the position representation:

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_P \int d^{3N} R \varrho(R, R^P, \beta) \quad (4)$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_P \int d^{3N} R \int d^{3N} R_2 \dots \times \int d^{3N} R_M \varrho(R, R_2, \tau) \dots \varrho(R_M, R^P, \tau). \quad (5)$$

Here $\tau = \beta/M$, where M is an arbitrary integer, R is the $3N$ -dimensional vector of the particle coordinates $R = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$, P is a permutation of the N labels of the atoms and R^P denotes the vector with permuted labels: $R^P = (\mathbf{r}_{P(1)}, \mathbf{r}_{P(2)}, \dots, \mathbf{r}_{P(N)})$. Since only density matrices at higher temperature ($\tau \ll \beta$) are involved, high temperature approximations of the N -body density matrix can be used.

The simplest approximation is the primitive approximation corresponding to

$$\exp[\tau(A+B)] \simeq \exp[\tau B/2] \exp[\tau A] \exp[\tau B/2],$$

which neglects the commutator of the operators A and B . It corresponds to a discrete approximation of the Feynman-Kac path integral and gives the correct result in the limit $M \rightarrow \infty$ [15,17]. This can be seen by using the Trotter formula for the exponentials of a sum of two noncommuting operators

$$e^{\tau(A+B)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{\tau A/n} e^{\tau B/n} \right)^n. \quad (6)$$

The discretized path integral for the N -particle density matrix at inverse temperature τ can therefore be written in the primitive approximation with symmetric splitting as

$$\varrho(R, R', \tau) \simeq \prod_{k=1}^N \varrho_1(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}'_k, \tau) \prod_{i < j} \exp \left[-\frac{\tau}{2} (V(\mathbf{r}_{ij}) + V(\mathbf{r}'_{ij})) \right], \quad (7)$$

where $\varrho_1(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}'_k, \tau)$ is the density matrix of noninteracting particles in the harmonic trap and $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, $\mathbf{r}'_{ij} = \mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_j$. However, this approximation leads to slow convergence since the potential energy in the argument of the exponentials are not slowly varying compared to the density matrix of one particle in the external potential, $\varrho_1(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_i, \tau)$. This has the consequence that equation (7) is not a smooth function in the region where two particles are in contact, as it should. In order to get such a smooth function we use the fact that the potential energy part of equation (7) can also be written as:

$$e^{-\tau(V(\mathbf{r}_{ij})+V(\mathbf{r}'_{ij}))/2} \simeq g_2(\mathbf{r}_{ij}; \mathbf{r}'_{ij}, \tau) = \left\langle e^{-\int_0^\tau dt V(\mathbf{r}_{ij}(t))} \right\rangle_{rw}, \quad (8)$$

where the brackets correspond an average over an arbitrary distribution of $\mathbf{r}_{ij}(t)$, starting from $\mathbf{r}_{ij}$ and ending at $\mathbf{r}'_{ij}$, which reproduces the correct high temperature limit of the primitive approximation. It is convenient to take the random walk corresponding to the kinetic energy as weight function so that g_2 is the solution of the binary scattering problem in free space:

$$g_2(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}'_{ij}; \tau) = \frac{\langle \mathbf{r}_{ij} | \exp[-\tau(p_{ij}^2/m + V(r_{ij}))] | \mathbf{r}'_{ij} \rangle}{\langle \mathbf{r}_{ij} | \exp[-\tau p_{ij}^2/m] | \mathbf{r}'_{ij} \rangle}, \quad (9)$$

where $\mathbf{p}_{ij}$ is the operator of the relative momentum between particles i and j . This leads to the so called pair-product approximation [15,18], where the density matrix is approximated as

$$\varrho(R, R', \tau) \simeq \prod_{n=1}^N \varrho_1(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}'_n, \tau) \prod_{i < j} g_2(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}'_{ij}, \tau). \quad (10)$$

This approximation has the advantage to include exactly all binary collisions of atoms in free space, only three and more atoms in close proximity will lead to an error; convergence with respect to $M \rightarrow \infty$ is reached much faster. In the simulation the two-particle correlation function g_2 is equal to one for non-interacting particles and plays the role of a binary correction term in presence of two-body interactions.

As in [16] we take $N = 10\,000$ particles with a hard-core radius of $a = 0.0043(\hbar/m\omega)^{1/2}$. The transition temperature of the noninteracting Bose-gas is $k_B T_c^0 = 20.26 \hbar\omega$ or $\beta_c^0 \simeq 0.05(\hbar\omega)^{-1}$ and a value of $\tau = 0.01(\hbar\omega)^{-1}$ was found sufficient. In the low temperature regime ($k_B T \ll \hbar^2/ma^2$) the most important contribution to g_2 for hard spheres is the s -wave contribution, which can be calculated analytically [19]; for non vanishing relative angular momenta ($l > 0$) we neglect the effect of the potential outside of the hard core. In this way we can obtain an explicit formula for g_2 ,

$$g_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = 1 + \left(\frac{\hbar^2 \beta}{m} \right) \frac{1}{rr'} \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{a^2 - a(r+r')}{\hbar^2 \beta / m} \right] \right\} \times e^{-(rr' + \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')/m/2\hbar^2 \beta} \quad (11)$$

for $\mathbf{r}$ and $\mathbf{r}'$ outside of the hard core diameter ($|\mathbf{r}| > a$ and $|\mathbf{r}'| > a$), otherwise $g_2 = 0$.

The density-density correlation function can be easily calculated as

$$\varrho^{(2)}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}'', \beta) = \sum_i \sum_{j \neq i} \langle \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}_j) \rangle. \quad (12)$$

As the atoms are in a trap rather than in free space, this quantity is not a function of the relative coordinates $\mathbf{r}' - \mathbf{r}''$ of the two particles only. Imagine however that this pair distribution function be probed experimentally by scattering of light by the atomic gas, where we assume a large beam waist compared to the atomic sample. As the Doppler effect due to the atomic motion is negligible, the scattering cross-section depends only on the

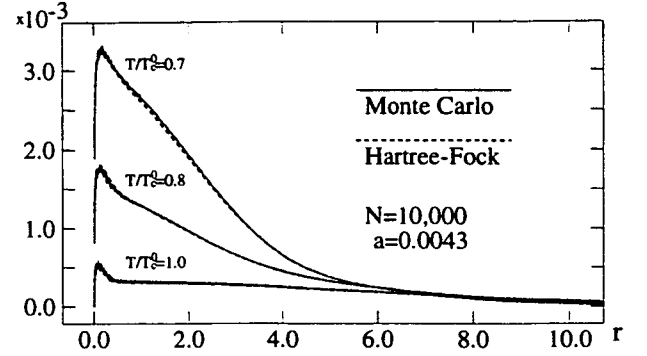


Fig. 1. Pair correlation function $\varphi^{(2)}(r, \beta)$ vs. r in units of the harmonic oscillator length $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ from the Monte-Carlo and the Hartree-Fock calculations for $\beta = 0.05(\hbar\omega)^{-1}$, $\beta = 0.06(\hbar\omega)^{-1}$, and $\beta = 0.07(\hbar\omega)^{-1}$ (from the bottom to the top). The corresponding condensate fractions N_0/N obtained from Monte-Carlo are $< 10^{-3}$ ($T/T_c^0 \simeq 1.0$), 0.22 ($T/T_c^0 \simeq 0.8$), and 0.45 ($T/T_c^0 \simeq 0.7$). T_c^0 is the Bose-Einstein condensation temperature for the ideal gas. For clarity we removed the part of short r for the upper curves.

spatial distribution of the atoms. Furthermore, for a weak light field very far detuned from the atomic transitions, the scattering cross-section can be calculated in the Born approximation; it then depends only on the distribution function of the relative coordinates $\mathbf{r}' - \mathbf{r}''$ between pairs of atoms. We therefore take the trace over the center-of-mass position $\mathbf{R} = (\mathbf{r}' + \mathbf{r}'')/2$:

$$\varphi^{(2)}(r, \beta) \equiv \frac{1}{N(N-1)} \int d^3\mathbf{R} \varrho^{(2)}(\mathbf{R} + \mathbf{r}/2; \mathbf{R} - \mathbf{r}/2, \beta), \quad (13)$$

where we have divided by the number of pairs of atoms to normalize $\varphi^{(2)}$ to unity. Note that the result depends only on the modulus r of $\mathbf{r}$ as the trapping potential is isotropic.

3.2 Results of the simulation

In Figure 1 we show $\varphi^{(2)}(r, \beta)$ for various temperatures below T_c^0 , obtained by the simulation of the interacting bosons in the harmonic trap, where the critical temperature T_c is reduced compared to the ideal gas [16,20,21]. All pair correlation functions are zero in the region of the hard-core radius as they should. At larger length scales the r dependence of the result is also simple to understand qualitatively, as we discuss now.

Consider first the case $T > T_c$, where no condensate is present. As the typical interaction energy $n(r)g$ ($n(r)$ being the total one-particle density at $\mathbf{r}$) is much smaller than $k_B T$, we expect to recover results close to the ideal Bose gas. The size of the thermal cloud $(k_B T/m\omega)^{1/2}$ determines the spatial extent of $\varphi^{(2)}(r)$; the bosonic statistics leads to a spatial bunching of the particles

with a length scale given by the thermal de Broglie wavelength

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}. \quad (14)$$

The Bose enhancement of the pair distribution function is maximal and equal to a factor of 2 for particles at the same location ($\mathbf{r} = 0$). This effect is preserved by the integration over the center of mass variable and manifests itself through a bump on $\varphi^{(2)}(\mathbf{r})$ in Figure 1. Due to the influence of interactions the bump is suppressed at small distances and the factor of 2 is not completely obtained.

For $T < T_c$ a significant fraction of the particles accumulate in the condensate. As the size of the condensate is smaller than that of the thermal cloud, the contribution to $\varphi^{(2)}$ of the condensed particles has a smaller spatial extension, giving rise to wings with two spatial components in $\varphi^{(2)}$, as seen in Figure 1. Apart from this geometrical effect the building up of a condensate also affects the bosonic correlations at the scale of λ_T : the bosonic bunching at this scale no longer exists for particles in the condensate. This property, referred to as a second order coherence property of the condensate [7,8,13], is well-understood in the limiting case $T = 0$; neglecting corrections due to interactions, all the particles are in the same quantum state $|\psi_0\rangle$ so that *e.g.* the 2-body density matrix factorizes in a product of one-particle pure state density matrices. This reveals the absence of spatial correlations between the condensed particles. This explains why in Figure 1 the relative height of the exchange bump with respect to the total height is reduced when T is lowered, that is when the number of non-condensed particles is decreased.

4 Comparison with simple approximate treatments

At this stage a quantitative comparison of the Quantum Monte-Carlo results with well-known approximations can be made.

4.1 In presence of a significant thermal cloud: Hartree-Fock approximation

As shown in [21] in detail, at temperatures sufficiently away from the critical temperature, the Hartree-Fock approximation [20] gives a very good description of the thermodynamic one-particle properties.

To derive the Hartree-Fock Hamiltonian we start from the second quantized form of the Hamiltonian with contact potential

$$\hat{H} = \int d^3\mathbf{r} \left[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})(H_0 - \mu)\hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}) \right] \quad (15)$$

where H_0 is the single particle part of the Hamiltonian. Due to the presence of the condensate we split the field

operator $\hat{\psi}$ in a classical part ψ_0 , corresponding to the macroscopically occupied ground state and the part of the thermal atoms $\hat{\psi}$ with vanishing expectation value $\langle\hat{\psi}\rangle = 0$:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) \simeq \psi_0(\mathbf{r}) + \hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (16)$$

After this separation we make a “quadratization” of the Hamiltonian by replacing the interaction term by a sum over all binary contractions of the field operator, keeping one or two operators uncontracted, *e.g.*

$$\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}\hat{\psi} \simeq 4\langle\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}\rangle\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi} - 2\langle\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}\rangle\langle\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}\rangle. \quad (17)$$

This is done in such a way that the mean value of the right hand side agrees with the mean value of the left hand side in the spirit of Wick’s theorem. In the Hartree-Fock approximation we neglect the anomalous operators, such as $\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}^\dagger$, and their averages, and we end up with a Hamiltonian which is quadratic in ψ_0 and $\hat{\psi}$, but also linear in $\hat{\psi}$ and $\hat{\psi}^\dagger$. Now we choose ψ_0 such that these linear terms vanish in order to force $\langle\hat{\psi}\rangle = 0$. This gives the Gross-Pitaevskii equation for the condensate [22]

$$\left\{ -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + g[n_0(\mathbf{r}) + 2n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r})] \right\} \psi_0(\mathbf{r}) = \mu\psi_0(\mathbf{r}) \quad (18)$$

where $n_0(\mathbf{r}) = |\psi_0(\mathbf{r})|^2$ corresponds to the condensate density with N_0 particles and $n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \langle\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\rangle$ is the density of the thermal cloud.

Up to a constant term we are left with the Hamiltonian for the thermal atoms

$$\hat{H} = \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})(H_0 + 2gn(\mathbf{r}) - \mu)\hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (19)$$

where $n(\mathbf{r}) = n_0(\mathbf{r}) + n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ denotes the total density and depends only on the modulus of $\mathbf{r}$. To work out the density-density correlation function, we formulate (12) in second quantization:

$$\rho^{(2)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) = \langle\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})\rangle, \quad (20)$$

we use the splitting (16), together with Wick’s theorem and get

$$\begin{aligned} \rho_{\text{HF}}^{(2)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) = & \psi_0(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r}')\psi_0(\mathbf{r}') \\ & + \psi_0(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r})n_T(\mathbf{r}', \mathbf{r}') \\ & + \psi_0(\mathbf{r}')\psi_0(\mathbf{r}')n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \\ & + 2\psi_0(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r}')n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ & + n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r})n_T(\mathbf{r}', \mathbf{r}') \\ & + n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}')n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (21)$$

Here we have chosen the condensate wave function to be real and

$$n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})\rangle \quad (22)$$

corresponds to the nondiagonal elements of the thermal one body density matrix. Since the Hamiltonian (19) of the thermal atoms is quadratic in $\hat{\psi}$, this density matrix is given by

$$n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \frac{1}{\exp[\beta(H_0 + 2gn(\mathbf{r}) - \mu)] - 1} | \mathbf{r}' \rangle. \quad (23)$$

In the semiclassical approximation ($k_B T \gg \hbar\omega$) we can calculate explicitly these matrix elements by using the Trotter break-up, neglecting the commutator of r and p :

$$\begin{aligned} n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_{l=1}^{\infty} \langle \mathbf{r} | e^{-l\beta(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + 2gn(\mathbf{r}) - \mu)} | \mathbf{r}' \rangle \\ &\simeq \sum_{l=1}^{\infty} e^{-\frac{l\beta}{2}(\frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + 2gn(\mathbf{r}) - \mu)} \langle \mathbf{r} | e^{-l\beta\frac{p^2}{2m}} | \mathbf{r}' \rangle \\ &\quad \times e^{-\frac{l\beta}{2}(\frac{1}{2}m\omega^2 r'^2 + 2gn(\mathbf{r}') - \mu)}. \end{aligned} \quad (24)$$

We finally get

$$\begin{aligned} n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{1}{\lambda_T^3} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{3/2}} \left(\exp \left[-\pi \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}{l\lambda_T^2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - l\beta \left(m\omega^2(r^2 + r'^2)/4 + g(n(\mathbf{r}) + n(\mathbf{r}') - \mu) \right) \right] \right). \end{aligned} \quad (26)$$

For the diagonal elements the summation gives immediately the Bose function $g_{3/2}(z) = \sum_{l=1}^{\infty} z^l / l^{3/2}$. For a given number of particles N , equation (18) and the diagonal elements $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ of equation (26) have to be solved self consistently to get the condensate density $n_0(r)$ and the thermal cloud density $n_T(\mathbf{r}, \mathbf{r})$. With this solution we can work out the nondiagonal matrix elements of the density operator which give rise to the exchange contribution of the density-density correlation (21), and the correlation function can be written as a sum over the direct and the exchange contribution

$$\varrho_{\text{HF}}^{(2)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) = \varrho_{\text{direct}}^{(2)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) + \varrho_{\text{exchange}}^{(2)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta). \quad (27)$$

Up to now the short range correlations due to the hard core repulsion have not been taken into account, but we can improve the Hartree-Fock scheme further to include the fact that it is impossible to find two atoms at the same location: we assume that the particle at $\mathbf{r}$ interacts with the full Hamiltonian with the particle at $\mathbf{r}'$ but only with the mean-field of all others (over which we integrated to derive the reduced density matrix). This gives in first approximation:

$$\begin{aligned} \tilde{\varrho}_{\text{HF}}^{(2)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) &= \varrho_{\text{direct}}^{(2)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) g_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \mathbf{r} - \mathbf{r}', \beta) \\ &\quad + \varrho_{\text{exchange}}^{(2)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) g_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \mathbf{r}' - \mathbf{r}, \beta) \end{aligned} \quad (28)$$

$$\simeq \varrho_{\text{HF}}^{(2)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \beta) g_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \mathbf{r} - \mathbf{r}', \beta) \quad (29)$$

where the two particle correlation function g_2 is the solution of the binary scattering problem, equation (11). Further we used the fact that $g_2 \simeq 1$ for particle distances

of the order of λ_T and larger. In principle one should integrate over the second particle to get a new one-particle density matrix and find a self-consistent solution of the Hamiltonian. But since the range of g_2 is of the order of the thermal wavelength, it will only slightly affect the density, so we neglect this iteration procedure. Using the solution of the coupled Hartree-Fock equations to calculate (29), and integrating over the center-mass-coordinate, we get $\varphi_{\text{HF}}^{(2)}(r, \beta)$. As shown in Figure 1, this gives a surprisingly good description of the correlation function at high and intermediate temperatures.

4.2 The quasi-pure condensate: Bogoliubov approach

The Hartree-Fock description must fail near zero temperature: since the anomalous operators $\hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^\dagger$ and $\hat{\psi} \hat{\psi}$ have been neglected, it describes not well the low energy excitations of the systems. It is known that the zero temperature behavior can be well-described by the Bogoliubov approximation [23]. In this paper it is not our purpose to calculate the correlation function using the complete Bogoliubov approach in the inhomogeneous trap potential. This could be performed using approaches developed in [24, 25]. Here we use the homogeneous description of the Bogoliubov approximation and adapt it to the inhomogeneous trap case with a local density approximation. This approach already includes the essential features which the Hartree-Fock description neglects at low temperatures.

We start with the description of the homogeneous system with quantization volume V and uniform density $n = N/V$. As in [26] we split the field operator $\hat{\Psi}$ into a macroscopically populated state Φ and a remainder, which accounts for the noncondensed particles:

$$\hat{\Psi}(r) = \Phi(r) \hat{a}_\Phi + \delta\hat{\Psi}(r). \quad (30)$$

In the thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, keeping $N/V = n$ and $Ng = \text{const}$, the typical matrix elements of $\delta\hat{\Psi}$ at low temperatures are $\sqrt{N}$ times smaller than $\hat{a}_\Phi$. Hence we can neglect terms cubic and quartic in $\delta\hat{\Psi}$, when we insert (30) in the expression of the density-density correlation function (20). Since the condensate density is given by the total density minus the density of the excited atoms, we have to express the operator of the condensate density in the same order of approximation for consistency,

$$\hat{a}_\Phi^\dagger \hat{a}_\Phi = \hat{N} - \frac{1}{N} \int d^3r \delta\hat{\Psi}^\dagger(r) \hat{a}_\Phi \hat{a}_\Phi^\dagger \delta\hat{\Psi}(r) + O(\hat{N}^{-1/2}). \quad (31)$$

Finally we use the mode decomposition of the homogeneous system

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \hat{a}_\Phi^\dagger \delta\hat{\Psi}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left[\hat{b}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} v_{\mathbf{k}}^* \right] \quad (32)$$

where $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ annihilates a quasiparticle with momentum $\mathbf{k}$. The components u_k and v_k satisfy the following equations:

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + gn & gn \\ -gn & -\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + gn\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \quad (33)$$

together with the normalization:

$$|u_k|^2 - |v_k|^2 = 1. \quad (34)$$

At low temperatures the quasiparticles have negligible interactions and we can use Wick's theorem to get the following expression for the correlation function

$$\begin{aligned} \varrho_{\text{BG}}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}'', \beta) &= n^2 + 2n \int d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')} \\ &\times \left[(u_k^2 + v_k^2 + 2u_k v_k) (\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}) + v_k^2 + u_k v_k \right] + O(\sqrt{n}) \end{aligned} \quad (35)$$

where we used $\Phi(r) = V^{-1/2}$. The quasiparticles obey Bose statistics, so that the mean number of quasiparticles with momentum $\mathbf{k}$ and energy E_k is given by

$$\langle \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_k} - 1}. \quad (36)$$

We see from equation (35) that in the homogeneous system the density-density correlation function depends only on the relative distance $r = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|$. The derivation of the properties of the pair correlation function is given in the appendix. At $T = 0$ the pair correlation function has the following behavior [14, 27]

$$\varphi_{n=\text{const}}^{(2)}(r, T=0) \simeq \begin{cases} \frac{1}{V} \left[1 - \frac{2a}{r} \right] \simeq \frac{1}{V} \left[1 - \frac{a}{r} \right]^2 & (r \ll \xi) \\ \frac{1}{V} \left[1 - 16 \sqrt{\frac{na^3}{\pi}} \left(\frac{\xi}{r} \right)^4 \right] & (r \gg \xi) \end{cases} \quad (37)$$

where $\xi = (8\pi na)^{-1/2}$ is the healing length of the condensate. For finite but small temperatures this structure is only slightly changed (see Appendix). The modification of the low energy spectrum due to the Bogoliubov approach is responsible for the long range part of the correlation function.

Apart from the edge of the condensate, the total density $n(r)$ for low temperature in the trapped system varies rather slowly compared to the healing length ξ for the considered parameters. So it is possible to adapt the result of the homogeneous system to the inhomogeneous trap case. For a given density $n(r)$ we get with a local density approximation for the pair correlation function instead of

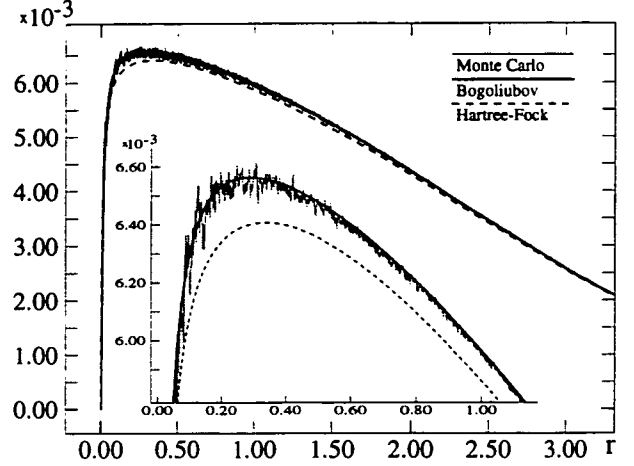


Fig. 2. Pair correlation function $\varphi^{(2)}(r, \beta)$ vs. r in units of the harmonic oscillator length $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ from the Monte-Carlo, the Bogoliubov and the Hartree-Fock calculations for $\beta = 0.20(\hbar\omega)^{-1}$ with a condensate fraction $N_0/N \simeq 0.95$ ($T/T_c^0 \simeq 0.25$). The healing length is roughly $\xi \simeq 0.3$ in this units.

equation (35)

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{BG}}^{(2)}(r, \beta) &\simeq \int d^3\mathbf{R} \{ n(|\mathbf{R} + \mathbf{r}/2|) n(|\mathbf{R} - \mathbf{r}/2|) \\ &+ 2n(R) \int d^3k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} [(u_k^2(R) + v_k^2(R) \\ &+ 2u_k(R)v_k(R)) (e^{\beta E_k(R)} - 1)^{-1} \\ &+ v_k^2(R) + u_k(R)v_k(R)] \} \end{aligned} \quad (38)$$

where $u_k(R)$, $v_k(R)$, and $E_k(R)$ are solutions of equation (33) for the given density $n(R)$.

As shown in Figure 2 this gives an excellent agreement with the Quantum Monte-Carlo results at low temperature. We have checked that at this temperature the difference with the Bogoliubov solution at $T = 0$ is almost negligible. The good agreement with the simulation reflects that the long range behavior of the pair correlation function in this approximation is correctly described by equation (37). We note that in an intermediate temperature regime, which is not shown, both approaches, the Hartree-Fock and the local density Bogoliubov calculation, do not reproduce the simulation results quantitatively: the maximum local error is about 5%.

5 Connection to the interaction energy

The knowledge of the pair correlation function permits us to calculate the total energy of the trapped atoms E_{tot} :

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{\text{Tr}\{\rho\}} [\text{Tr}\{H_0\rho\} + \text{Tr}\{H_1\rho\}]. \quad (39)$$

One has to pay attention that the regularized form of the contact potential, $V = g\delta(\mathbf{r})(\partial/\partial\mathbf{r})(\mathbf{r}\cdot)$, acts on the

off-diagonal elements r_{12} and r'_{12} of the density-density correlation function $\varphi(r'_{12}, r_{12}, \beta) = \langle \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2 | \rho | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle$ in the space of relative coordinates r_{12} and r'_{12} . As the 2-body density matrix $\varphi(r'_{12}, r_{12}, \beta)$ diverges as $(1 - a/r'_{12})(1 - a/r_{12})$ we actually get the simple form:

$$\frac{1}{\text{Tr}\{\rho\}} \text{Tr}\{H_I \rho\} = \frac{N(N-1)g}{4} \int d\mathbf{r} \frac{\delta(\mathbf{r})}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \varphi^{(2)}(r, \beta) \right). \quad (40)$$

This form involves only the diagonal elements of the correlation function $\varphi^{(2)}(r, \beta)$. Both the improved Hartree-Fock solution and the Bogoliubov solution behave for small distances ($r \ll \xi$) like

$$\varphi^{(2)}(r \simeq 0, \beta) \simeq (1 - a/r)^2 \tilde{\varphi}^{(2)}(0, \beta) \quad (41)$$

where $\tilde{\varphi}^{(2)}(0, \beta)$ can be obtained graphically by extrapolating the pair correlation function to zero, neglecting the short range behavior ($r < \xi$); numerically it can be obtained from the Hartree-Fock calculation of (21) (see [13] for analysis of the temperature dependence of $\tilde{\varphi}^{(2)}(0, \beta)$). This behavior of the correlation functions shows that equation (40) gives a finite contribution linear in a , which we can identify with the mean interaction energy $\langle H_I \rangle$:

$$\langle H_I \rangle \simeq g \frac{N(N-1)}{2} \tilde{\varphi}^{(2)}(0, \beta). \quad (42)$$

In order g^2 , equation (40) contains a diverging part, we note without proof that this divergence is compensated within the Bogoliubov theory by a divergent part of the kinetic energy, so that the mean total energy, equation (39), is finite. This lacks in the Hartree-Fock calculation, which is, however, limited to linear order of g .

In the Thomas-Fermi limit the kinetic energy is negligible, and the interaction energy equation (42) dominates the total energy, which can be measured. This measurement provides some information about the correlation function, however, the true correlation function is not accessible. Only the fictive correlation function $\tilde{\varphi}^{(2)}(0, \beta)$ for vanishing interparticle distances is obtained.

6 Conclusion

We numerically calculated the pair correlation function of a trapped interacting Bose gas with a Quantum Monte-Carlo simulation using parameters typical for recent experiments of Bose-Einstein condensation in dilute atomic gases. At temperatures around the critical point, an improved Hartree-Fock approximation was found to be in good quantitative agreement with the Monte-Carlo results. The improved Hartree-Fock calculation presented in this paper takes the short-range behavior of the correlation function into account, especially the fact that two particles can never be found at the same location. At low temperature we compared our simulation results to a local density approximation based on the homogeneous Bogoliubov approach. The phonon spectrum changes the

behavior of the pair correlation function for distances r of the order of the healing length ξ . With the knowledge of the pair correlation function we calculated the total interaction energy. We showed that the results of recent experiments on second order coherence do not measure the true correlation function, which has to vanish for small interparticle distances. Only an extrapolated correlation function is determined, where the exact short range behavior disappears.

This work was partially supported by the EC (TMR network ERBFMRX-CT96-0002) and the Deutscher Akademischer Austauschdienst. We are grateful to Martin Naraschewski, Werner Krauth, Franck Laloe, Emmanuel Mandonnet, Ralph Dum and Bart van Tiggelen for many fruitful discussions.

Appendix

In this appendix we give the explicit formulas for the pair correlation function in the Bogoliubov approach for an homogeneous system and discuss its behavior at short and long distances, since only some aspects have been discussed in literature [14,28]. Starting from equation (35), the pair correlation function $\phi_{n=const}^{(2)}$ can be written explicitly as:

$$\phi_{n=const}^{(2)}(r, \beta) = \frac{1}{V} \left[1 + \frac{16a}{\pi r} \int_0^\infty dq \sin(qR) f(q) \right], \quad (43)$$

with $R = \sqrt{2}r/\xi$ ($\xi = (8\pi na)^{-1/2}$ is the definition of the healing length) and

$$f(q) = \frac{q^2}{\sqrt{1+q^2}} \left[e^{\frac{\lambda^2}{2\pi\xi^2} q \sqrt{1+q^2}} - 1 \right]^{-1} + \frac{q}{2} \left(\frac{q}{\sqrt{1+q^2}} - 1 \right). \quad (44)$$

To get the behavior of equation (43) for small distances ($r \ll \xi$), we can replace $f(q)$ by its behavior for large wavevectors, $q \rightarrow \infty$

$$f(q) \sim -\frac{1}{4q}, \quad q \rightarrow \infty. \quad (45)$$

Using the value of the integral [29]

$$\int_0^\infty dx \frac{\sin x}{x} = \frac{\pi}{2}, \quad (46)$$

we get the short range behavior of the pair correlation function [27]:

$$\phi_{n=const}^{(2)}(r, \beta) = \frac{1}{V} \left[1 - 2\frac{a}{r} \right] \simeq \frac{1}{V} \left[1 - \frac{a}{r} \right]^2, \quad r \ll \xi. \quad (47)$$

To get the long range behavior ($r \gg \xi$), we integrate several times by part:

$$\int_0^\infty dq \sin(qR) f(q) = \frac{1}{R} f(0) - \frac{1}{R^3} f^{(2)}(0) + \frac{1}{R^5} f^{(4)}(0) - \dots \quad (48)$$

For the function $f(q)$ and its derivatives at $q = 0$ we get

$$\begin{aligned} T = 0: \quad & f(0)=0, \quad f^{(2)}(0)=1 \\ T \neq 0: \quad & f(0)=0, \quad f^{(2)}(0)=0, \quad f^{(4)}(0)=0, \dots \end{aligned} \quad (49)$$

and the long range behavior at zero temperature given in (37) is obtained. For finite temperature it can be shown that $f(q)$ is an odd function of q , so that $f^{(2n)}(0) = 0$ for all n . Due to that the correlation function vanishes faster than any power law in $1/R$.

To work out an explicit expression for finite temperatures we use this antisymmetry to extend the range of the integral (43) to $-\infty$ and we can analytically calculate the expression for two limiting cases via the residue calculus. For large distances we only have to take the poles q_0 of $f(q)$ with the smallest modulus into account. For $\lambda_T/2\pi \ll \xi$ corresponding to $k_B T \gg ng$, and $r \gg \xi$, we get $q_0 = i$, so that

$$\phi_{n=const}^{(2)}(r, \beta) = \frac{1}{V} \left[1 + 2 \frac{1}{n\lambda_T^3} \frac{\lambda_T}{r} \exp\left(-\sqrt{2}\frac{r}{\xi}\right) \right]. \quad (50)$$

Note the + sign in this expression, leading to $\phi_{n=const}^{(2)} > 1/V$, that we interpret as a bosonic bunching effect for thermal atoms. In the opposite limit, $\lambda_T/2\pi \gg \xi$ and $r \gg \lambda_T^2/4\pi^2\xi$, the pole with the smallest imaginary part is given by $q_0 = i4\pi^2\xi^2/\lambda_T^2$ and we get [28]

$$\phi_{n=const}^{(2)}(r, \beta) = \frac{1}{V} \left[1 - \frac{(2\pi)^3}{n} \frac{4\pi\xi^4}{\lambda_T^6 r} \exp\left(-4\pi^2 \frac{\sqrt{2}\xi r}{\lambda_T^2}\right) \right]. \quad (51)$$

References

- M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, E.A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- K.B. Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tolett, R.G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995); C.C. Bradley, C.A. Sackett, R.G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 985 (1997).
- M.R. Andrews, C.G. Townsend, H.-J. Miesner, D.S. Durfee, D.M. Kurn, W. Ketterle, *Science* **275**, 637 (1997).
- A. Röhrl, M. Naraschewski, A. Schenzle, H. Wallis, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4143 (1997).
- C.N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962).
- W. Ketterle, H.-J. Miesner, *Phys. Rev. A* **56**, 3291 (1997).
- E.A. Burt, R.W. Ghrist, C.J. Myatt, M.J. Holland, E.A. Cornell, C.E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 337 (1997).
- Yu. Kagan, B.V. Svistunov, G.V. Shlyapnikov, *Pisma. Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **42**, 169 (1985) [*JETP Lett.* **42**, 209 (1985)].
- L. van Hove, *Phys. Rev.* **95**, 249 (1954).
- F. London, *J. Chem. Phys.* **11**, 203 (1942).
- F. Brosens, J.T. Devreese, L.F. Lemmens, *Phys. Rev. E* **55**, 6795 (1997).
- M. Naraschewski, R.J. Glauber, *Phys. Rev. A* **59**, 4595 (1999).
- K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, MA 1987), Chap. 13; T.D. Lee, K. Huang, C.N. Yang, *Phys. Rev.* **106**, 1135 (1957).
- E.L. Pollock, D.M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **30**, 2555 (1984); **36**, 8343 (1987); D.M. Ceperley, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 1601 (1995).
- W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3695 (1996).
- R.P. Feynman, *Statistical Mechanics* (Benjamin-Cummings, Reading, MA, 1972).
- J.A. Barker, *J. Chem. Phys.* **70**, 2914 (1979).
- S.Y. Larsen, *J. Chem. Phys.* **48**, 1701 (1968).
- V.V. Goldman, I.F. Silvera, A.J. Leggett, *Phys. Rev. B* **24**, 2870 (1981); S. Giorgini, L.P. Pitaevskii, S. Stringari, *Phys. Rev. A* **54**, R4633 (1996).
- M. Holzmann, M. Naraschewski, W. Krauth, *Phys. Rev. A* **59**, 2956 (1999).
- E.P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961); L.P. Pitaevskii, *Sov. Phys. JETP* **13**, 451 (1961).
- N.N. Bogoliubov, *J. Phys. (Moscow)* **11**, 23 (1947).
- A.-C. Wu, A. Griffin, *Phys. Rev. A* **54**, 4204 (1996).
- A. Csordás, R. Graham, P. Szépfalusy, *Phys. Rev. A* **57**, 4669 (1998).
- C. Gardiner, *Phys. Rev. A* **56**, 1414 (1997); Y. Castin, R. Dum, *Phys. Rev. A* **57**, 3008 (1998).
- For the short range contribution $r \ll \xi$ we get in our approach $(1 - 2a/r)/V$ instead of $(1 - a/r)^2/V$, which is the true short range behavior. But the correcting term in order a^2 is of higher order than the calculation; see also [14].
- E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, *Statistical Physics, Part 2* (Pergamon Press, Oxford, 1980), Chap. 9.
- M. Abramowitz, I.A. Stegun, *Handbook of mathematical functions* (Dover Publications, New York, 1972), Chap. 5.

Résumé

Dans cette thèse je présente mes travaux sur la transition de Bose-Einstein dans un gaz dilué, où l'interaction entre les bosons est caractérisée par la longueur de diffusion a .

À l début j'étudie la température critique de la condensation dans un gaz homogène. En mettant en oeuvre des approches diverses — analytiques et numériques —, je montre la linéarité en a de la correction dominante à la température critique du gaz parfait. En utilisant une approche perturbative dans un calcul de Monte-Carlo quantique, la valeur de la température critique est obtenue dans la limite d'un gaz très dilué.

Ensuite je présente mes calculs de Monte-Carlo quantique adaptés à une situation expérimentale avec $N = 10\,000$ atomes piégés dans un potentiel harmonique. Je détermine la fraction condensée et la fonction d'onde du condensat dans ce système inhomogène, partant du concept de l'ordre non-diagonal à longue portée. La comparaison quantitative du calcul de Monte-Carlo quantique avec des approximations simples montre les limites d'une approximation de champ moyen et permet d'estimer les effets de corrélation dans un gaz piégé.

Abstract

In this thesis I study the influence of the inter-particle interactions on the Bose-Einstein phase transition of a dilute gas, where the collisional properties are characterized by the scattering length a .

One part of my work concerns the calculation of the critical temperature in an homogeneous system. Within various — analytical and numerical — approaches I show that the interactions give rise to a shift of the critical temperature linear in a . Combining perturbation theory with a quantum Monte-Carlo calculation, the value of the critical temperature is determined in the very dilute limit.

In a second part I present the results of my quantum Monte Carlo calculations corresponding to current experiments for $N = 10\,000$ bosons trapped in a harmonic potential. The concept of non-diagonal long-range order of the condensate allows to determine the condensate fraction and the condensate wave function in this inhomogeneous, interacting system. Quantitative comparisons of the Monte Carlo calculation with simple approximations show the limits of mean field approximations and allow to estimate the effects of correlations for trapped gases.

Mots-clés

condensation de Bose-Einstein, température critique, opérateur d'Ursell, fonction de Green, calcul de Monte-Carlo quantique, fonction de corrélation, fraction condensée, système inhomogène