

COLLÈGE DE FRANCE

COURS DE PHYSIQUE

ATOMIQUE ET MOLÉCULAIRE

Claude COHEN-TANNOUDJI

ANNÉE SCOLAIRE : 1997 - 1998

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION GÉNÉRALE	I-1
Résumé du cours 1996-1997.....	I-1
Thème choisi pour le cours 1997-1998.....	I-7
Sujet abordés cette année	I-7
Quelques remarques générales sur l'intérêt des milieux dilués	I-7
Appendice A - Entropie statistique	I-8
RAPPELS DE MÉCANIQUE STATISTIQUE	II-1
1 - Opérateur densité d'équilibre \hat{D} et fonction de partition Z	II-1
2 - Entropie statistique $S(\hat{D})$ associée à \hat{D}	II-2
3 - Ensembles microcanonique, canonique, grand canonique.....	II-2
4 - Pression	II-4
5 - Liens avec la thermodynamique.....	II-5
6 - Cas particulier des particules indépendantes.....	II-7
7 - Principe variationnel thermodynamique	II-9
CONDENSATION DE BOSE-EINSTEIN	
BOSONS SANS INTERACTIONS DANS UNE BOÎTE.....	III-1
1 - Niveaux d'énergie - Densité d'états	III-1
2 - Etude simple du phénomène de condensation	III-2
3 - Etude des diverses grandeurs physiques.....	III-7
CONDENSATION DE BOSE-EINSTEIN	
BOSONS SANS INTERACTIONS DANS UN PIÈGE	IV-1
1 - Quelques résultats généraux à la limite semiclassique.....	IV-1
2 - Piège harmonique à 3 dimensions	IV-2
3 - Corrections dues au nombre fini de particules.....	V-1
4 - Problèmes de dimension inférieure à 3.....	V-4

**CONDENSATION DE BOSE-EINSTEIN D'ATOMES ALCALINS
ULTRAFROIDS ET PIÉGÉS - PREMIÈRES OBSERVATIONS**

EXPÉRIMENTALES	VI-1
1 - Généralités	VI-2
2 - Expériences sur le rubidium (Boulder).....	VI-3 à VI-5
3 - Expériences sur le sodium (MIT).....	VI-5 à VI-7
4 - Expériences sur le lithium (Texas).....	VI-7

Résumé du cours 1996-1997

L'observation récente aux Etats-Unis d'une condensation de Bose-Einstein d'atomes alcalins ultrafroids n'a été possible que grâce à l'utilisation conjointe de plusieurs techniques développées au cours de la dernière décennie, comme le refroidissement et le piégeage laser, les pièges magnétostatiques, le refroidissement évaporatif. Comme le refroidissement laser a déjà fait l'objet de plusieurs cours, il a semblé intéressant, avant d'analyser les développements récents sur la condensation de Bose-Einstein, de consacrer le cours de l'année 1996-97 à l'étude du piégeage magnétostatique et du refroidissement évaporatif.

Bref historique

Le cours commence par un bref survol des études antérieures sur les gaz quantiques dégénérés. On assiste en effet actuellement à une convergence remarquable entre deux domaines de recherches qui se sont jusqu'ici développés indépendamment : d'une part la recherche d'effets de dégénérescence quantique sur des gaz d'atomes d'hydrogène polarisés, effets qui doivent apparaître quand la distance moyenne entre atomes devient de l'ordre de leur longueur d'onde de de Broglie λ_{dB} ; d'autre part, le développement des méthodes de « manipulation » d'atomes par des faisceaux laser, méthodes qui permettent, dans un environnement non cryogénique et avec des techniques expérimentales relativement simples, de refroidir des atomes à des températures de l'ordre du microkelvin, voire du nanokelvin.

Etudes sur l'hydrogène

L'intérêt de l'hydrogène polarisé pour la recherche d'effets de dégénérescence quantique est évident. La faible masse m de l'atome d'hydrogène conduit à une valeur importante de l'énergie de point zéro. De plus, l'interaction prédominante entre deux atomes d'hydrogène polarisés, c'est-à-dire ayant leurs spins parallèles, est décrite par un potentiel triplet qui n'a pas d'état lié. Les seuls couplages susceptibles de basculer le spin de l'un des deux atomes, lors d'une collision binaire, proviennent d'interactions magnétiques beaucoup plus faibles. Ces éléments favorables permettent de comprendre comment il est possible de stabiliser un échantillon d'hydrogène polarisé à l'état gazeux et à une très basse température T obtenue par thermalisation avec une paroi recouverte d'un film d'hélium liquide.

Pour atteindre le seuil de condensation de Bose-Einstein, il faudrait augmenter la densité n du gaz d'hydrogène polarisé et diminuer sa température T . On se heurte alors à des difficultés sérieuses. Augmenter n à T fixé fait apparaître des collisions à trois corps, conduisant à une recombinaison prohibitive d'atomes d'hydrogène sous forme de molécules. Diminuer la température T du film

d'hélium liquide à n fixé, augmente le nombre d'atomes adsorbés sur le film et conduit là encore à des phénomènes de recombinaison à trois corps.

Une première solution à ces difficultés a été de supprimer tout contact entre les atomes et les parois. On utilise pour cela un piégeage magnétostatique utilisant des gradients de champ magnétique et confinant les atomes dans une petite région de l'espace au centre de la cellule qui les contient. Encore faut-il refroidir les atomes qui ne sont plus maintenant en contact avec l'hélium liquide. Comme le refroidissement laser de l'hydrogène n'est pas aisé à cause de la difficulté d'obtenir des sources lumineuses performantes dans le domaine spectral (ultraviolet) correspondant à la raie de résonance Lyman α , les physiciens travaillant sur l'hydrogène ont eu alors l'idée d'utiliser une autre méthode de refroidissement, le « refroidissement évaporatif ». Cette méthode consiste à utiliser les collisions élastiques binaires (sans basculement de spin) que subissent entre eux les atomes piégés. Au cours d'une telle collision, l'un des deux atomes peut acquérir une énergie suffisante pour s'échapper du piège. A cause de la conservation de l'énergie globale lors de la collision, l'autre atome qui demeure piégé a une énergie beaucoup plus basse. Les collisions avec les autres atomes conduisent alors à une rethermalisation de l'ensemble à une température plus basse. Au prix d'une perte d'atomes, le refroidissement évaporatif permet donc d'abaisser la température du gaz d'atomes piégés.

Ces deux méthodes, piégeage magnétostatique et refroidissement évaporatif, ont été ainsi mises au point au cours d'études portant sur l'hydrogène polarisé. Elles se sont révélées très efficaces, mais pas suffisantes cependant pour atteindre le seuil de condensation pour l'hydrogène.

Etudes sur les alcalins

A première vue, les alcalins semblent constituer un système moins favorable que l'hydrogène pour l'étude des effets de dégénérescence quantique. Leur masse est beaucoup plus élevée et les potentiels d'interaction triplet entre alcalins polarisés sont beaucoup plus profonds, admettant plusieurs états liés.

Plusieurs éléments jouent par contre en faveur des atomes alcalins. La manipulation laser de ces atomes est beaucoup plus aisée. Le refroidissement laser permet d'abaisser leur température à des valeurs suffisamment basses pour qu'ils puissent être piégés dans les puits de potentiels relativement peu profonds créés par des faisceaux laser ou des gradients de champ magnétique. La lumière émise ou absorbée par les atomes permet par ailleurs d'obtenir des informations précises sur la distribution spatiale et la distribution des vitesses des atomes piégés et refroidis. Enfin, les sections efficaces de collisions élastiques entre

atomes alcalins sont beaucoup plus élevées que pour l'hydrogène, ce qui permet au refroidissement évaporatif d'être beaucoup plus efficace pour les alcalins.

Tous ces avantages se sont révélés finalement déterminants et expliquent comment des méthodes, initialement mises au point sur l'hydrogène, puis étendues aux expériences réalisées sur les alcalins ont permis à ces dernières d'atteindre et de franchir le seuil de la condensation de Bose-Einstein.

Piégeage non dissipatif d'atomes neutre - Généralités

Comparaison avec le piégeage des ions

Le piégeage d'atomes neutres est plus difficile que celui des ions car de tels atomes ne possèdent pas de charge globale sur laquelle puissent agir des champs électriques et magnétiques statiques et uniformes. Les couplages pouvant donner naissance à des forces de rappel ne peuvent provenir que des interactions entre moments dipolaires magnétiques ou électriques avec des gradients de champs magnétiques ou électriques. Ces couplages sont beaucoup plus faibles que ceux faisant intervenir une charge globale et les puits de potentiel correspondants sont beaucoup moins profonds. On comprend ainsi la nécessité de refroidir au préalable les atomes neutres pour abaisser leur énergie cinétique d'agitation désordonnée à une valeur suffisamment basse pour leur interdire de s'échapper du piège.

Les atomes neutres présentent cependant un avantage important par rapport aux ions. Il n'y a pas de répulsion électrostatique entre eux et on peut donc réaliser des valeurs beaucoup plus élevées pour la densité d'atomes piégés, ce qui est très important pour atteindre le seuil d'apparition des effets de dégénérescence quantique.

Importance du caractère non dissipatif du piège

Les processus de relaxation, comme l'émission spontanée de photons, les mécanismes de fuite hors du piège, réduisent la longueur de cohérence spatiale des atomes piégés, ce qui éloigne le système du seuil de condensation de Bose-Einstein. Il faut donc les éviter au maximum. C'est ce qui explique l'utilisation fréquente de pièges purement magnétiques, de préférence à des pièges magnéto-optiques qui, bien que plus efficaces, utilisent la pression de radiation de faisceaux laser résonnants. Par contre, on peut utiliser des pièges laser utilisant les forces dipolaires, à condition que la fréquence laser soit très désaccordée par rapport à la fréquence atomique, de manière à éviter toute absorption résonnante de photons par l'atome.

Forces de piégeage

On commence par étudier les forces résultant du couplage du moment magnétique de l'atome avec un gradient de champ magnétique. Si le mouvement de l'atome est suffisamment lent, l'atome peut suivre adiabatiquement le sous-niveau Zeeman dans lequel il se trouve initialement : la projection du spin sur la direction du champ magnétique qui tourne pour un atome en mouvement reste constante. L'énergie du sous-niveau Zeeman correspondant $E_M(r)$, qui varie dans l'espace, apparaît alors comme une énergie potentielle pour l'atome, et donne naissance à une force égale à l'opposé de son gradient $-\nabla E_M(r)$.

Les forces résultant du couplage du moment dipolaire électrique de l'atome avec un gradient d'intensité laser sont également analysées en étudiant les variations spatiales des énergies des niveaux de l'atome « habillé » par les photons laser. On montre ainsi simplement que le signe de ces forces est relié au signe du désaccord $\delta = \omega_L - \omega_A$ entre la fréquence laser ω_L et la fréquence atomique ω_A .

Le théorème de Wing

Pour piéger un atome dans un sous-niveau Zeeman M avec un gradient de champ magnétique, il faut que l'énergie $E_M(r)$ de ce sous-niveau Zeeman présente un minimum dans l'espace. Deux cas alors à distinguer suivant que E_M croît ou décroît quand le module $|B|$ de B croît. Dans le premier cas où E_M croît avec $|B|$, il faut, pour piéger l'atome, réaliser un minimum de $|B|$, alors que dans le second cas il faut réaliser un maximum de $|B|$. Le théorème de Wing, qui est présenté en détail, montre que, dans une région de l'espace sans charge ni courant, les équations de Maxwell entraînent que le module d'un champ statique, magnétique B ou électrique E , ne peut pas avoir de maximum. Par contre, un minimum de $|B|$ ou $|E|$ peut exister. Les contraintes imposées par le théorème de Wing entraînent donc que les pièges magnétostatiques ne peuvent fonctionner que pour des atomes se trouvant dans des sous-niveaux Zeeman où ils sont attirés par les champs faibles, atomes appelés « chercheurs de champ faible » (ou « low-field seekers » en anglais).

Pièges magnétostatique quadrupolaires

Configuration de courants et développement multipolaire du champ

Le piège magnétostatique quadrupolaire le plus simple consiste en deux bobines circulaires de même rayon et de même axe, parcourues par des courants opposés I et $-I$. Au centre de symétrie d'un tel système, le champ magnétique est évidemment nul et son module croît quand on s'éloigne du centre. Il s'agit donc

là clairement d'une situation où le module $|B|$ du champ magnétique présente un minimum dans l'espace, égal ici à zéro.

Le champ magnétique produit par un tel système est développé en harmoniques sphériques et en puissances croissantes des coordonnées du point où il est calculé, l'origine étant prise au centre de symétrie.

Transitions non adiabatiques de Majorana

Un atome qui passe, au cours de son mouvement, près du centre de symétrie d'un champ quadrupolaire où $B = 0$, « voit » la direction du champ tourner, et ce, d'autant plus rapidement qu'il passe plus près de ce point. La variation des états propres du Hamiltonien Zeeman, qui sont repérés en chaque point par rapport à la direction du champ local, est alors trop rapide pour que le spin atomique puisse suivre adiabatiquement les variations de la direction du champ. Des transitions non adiabatiques, appelées transitions de Majorana, se produisent entre sous-niveaux Zeeman, faisant passer l'atome d'un sous-niveau piégeant vers un sous-niveau non piégeant à partir duquel il est expulsé hors du piège.

L'ordre de grandeur des taux de fuite associés à de telles transitions non adiabatiques est évalué. On montre qu'ils deviennent de plus en plus importants quand la température décroît, car les atomes se concentrent alors dans un volume de plus en plus petit autour du centre du piège où $B = 0$.

Le piège TOP (« Time-Orbiting Potential »)

Une solution possible pour réduire ces pertes a été récemment proposée et démontrée par une équipe américaine à Boulder. Elle consiste à ajouter un champ uniforme B_0 le long d'une direction Ox perpendiculaire à l'axe de symétrie Oz du champ quadrupolaire. On peut montrer que le zéro du champ total est déplacé le long de Ox d'une quantité proportionnelle à $|B_0|$. L'idée consiste alors à faire tourner la direction de B_0 à la fréquence angulaire ω_0 dans le plan xOy. Le zéro du champ total tourne sur un cercle d'axe Oz, suffisamment loin de cet axe et suffisamment rapidement pour que les atomes n'aient plus le temps de tomber dans le « trou » associé à ce zéro.

Le potentiel effectif moyen correspondant à un tel dispositif est calculé. On montre que le minimum de ce potentiel n'est plus nul et on calcule les coefficients de raideur du nouveau piège le long des directions axiale et radiale. Les conditions de validité du calcul du potentiel effectif sont également discutées en détail. Enfin, quelques résultats expérimentaux démontrant la réduction des taux de fuite par un tel dispositif sont brièvement présentés.

Piège de Ioffé-Pritchard

Configuration de courants et structure du champ

Quatre fils verticaux parallèles à l'axe Oz et parcourus par des courants opposés 2 à 2 créent un champ quadrupolaire purement radial (sa composante sur Oz est nulle et il s'annule en $x=y=0$). Deux bobines identiques d'axe Oz sont parcourues par les mêmes courants. Elles sont écartées d'une distance supérieure à celle correspondant à la position de Helmholtz, de sorte que le champ axial qu'elles créent le long de l'axe Oz présente un minimum sur cet axe, au point se trouvant à égale distance des deux bobines.

Le champ total créé par une telle configuration est calculé, ce qui permet de déterminer les conditions de confinement correspondant à l'existence d'un minimum du module du champ total. Quelques autres configurations de courants conduisant à des potentiels de piégeage utilisés récemment sont également décrites, comme la configuration « baseball » ou la configuration en « fleur de trèfle ».

Comparaison avec les autres pièges

Par rapport au piège quadrupolaire pur décrit plus haut, le piège de Ioffé-Pritchard présente l'avantage d'avoir un minimum de champ non nul. La direction du champ total varie alors beaucoup moins, ce qui réduit considérablement les pertes par transitions non adiabatiques de Majorana. En réglant la valeur minimale du champ, on peut également très simplement modifier les coefficients de raideur du piège dans les directions longitudinale et radiale.

Par rapport à un piège TOP, le piège de Ioffé-Pritchard ne contient par ailleurs aucun champ dépendant du temps. On montre également que sa « figure de mérite » définie comme étant le produit des trois courbures du champ le long de Ox, Oy, Oz peut être supérieure à celle du piège TOP.

Le piège de Ioffé-Pritchard est en fait déjà utilisé couramment dans plusieurs expériences portant sur des neutrons ou des atomes d'hydrogènes. Quelques unes de ces expériences sont passées en revue.

Le refroidissement évaporatif - Introduction

La deuxième partie du cours est consacrée à l'étude du refroidissement évaporatif. La présentation suivie s'inspire de trois articles parus récemment :

- O.J. Luiten, M.W. Reynolds, J.T.M. Walraven, Phys. Rev. A53, 381 (1996).

- J.T.M. Walraven, in « Quantum dynamics of simple systems », G.L. Oppo, S.M. Barnett, E. Riis and M. Wilkinson, (Eds), Institute of Physics Publishing, Bristol, 1996, p. 315.

- W. Ketterle, N.J. van Druten in « Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics », Vol. 36 (1996), B. Bederson and H. Walther, (Eds).

Cette présentation s'appuie également sur des calculs récents faits par D. Guéry-Odelin et J. Dalibard, en collaboration avec M.J. Reynolds.

On commence par un modèle très simple permettant d'évaluer de manière approchée l'efficacité du refroidissement et d'identifier les problèmes qui se posent et doivent faire l'objet d'une étude plus approfondie.

Propriétés d'un gaz d'atomes piégés en équilibre thermodynamique

On considère N bosons identiques, piégés dans un potentiel $U(r)$ et en équilibre thermodynamique à la température T . Les expressions de plusieurs grandeurs physiques sont rappelées, comme la fonction de distribution de l'énergie $f(\epsilon)$, la densité d'états $\rho(\epsilon)$, la densité spatiale $n(r)$, la fonction de partition $\zeta(T)$, le volume effectif V_e , l'énergie interne E . Les limites de ces diverses expressions dans le cas non-dégénéré (c'est-à-dire en dessous du seuil de condensation) sont également précisées, de même que les formes simples prises par elles dans le cas où le potentiel de piégeage $U(r)$ est décrit par une loi de puissances : $U(r) = Cr^{3/\delta}$ caractérisée par l'exposant $3/\delta$ (C est une constante). Dans ce dernier cas, chaque grandeur physique G peut être exprimée par des lois de puissances des deux variables N et T , nombre total de particules et température T : $G = KN^a T^b$ (K étant une constante). Par exemple, l'énergie interne E s'écrit : $E = \left(\frac{3}{2} + \delta\right) N k_B T$ où k_B est la constante de Boltzmann.

Principe du refroidissement évaporatif

Le calcul précédent suppose les particules en équilibre et néglige le fait que le potentiel de piégeage ayant en général une profondeur finie, les particules peuvent, lors de collisions, acquérir l'énergie suffisante pour s'échapper du piège. Ce phénomène est d'ailleurs à la base du refroidissement évaporatif.

Sans entrer dans le détail des collisions qui permettent aux particules de s'évaporer et en utilisant uniquement des lois de conservation, on commence par présenter un calcul simple permettant de relier l'abaissement relatif de température dT/T à la perte relative de particules dN/N , consécutive à l'évaporation de dN particules. Un paramètre important dans cette discussion est la profondeur ϵ_e du puits, égale à η quand on l'exprime en unités de

$k_B T$: $\eta = \epsilon_i / k_B T$. Supposons que dN particules piégées reçoivent des autres particules piégées une énergie dE leur permettant de s'échapper. Comme l'énergie moyenne de chaque particule piégée vaut $(\frac{3}{2} + \delta)k_B T$ et qu'il lui faut atteindre une énergie légèrement supérieure à $\eta k_B T$ pour s'échapper, énergie que l'on écrit sous la forme $(\eta + \kappa)k_B T$ (où κ est une constante de l'ordre de 1 si $\eta \gg 1$), on trouve immédiatement que $dE = dN[(\eta + \kappa) - (\frac{3}{2} + \delta)]k_B T$. Comme elles ont dû fournir cette énergie dE , les $N - dN$ particules qui restent piégées ont une énergie totale égale à $(N - dN)(\frac{3}{2} + \delta)k_B T - dE$. Si elles se rethermalisent entre elles, cette énergie est aussi égale à $(N - dN)(\frac{3}{2} + \delta)k_B (T - dT)$. On déduit alors aisément de ces diverses équations une relation de la forme $dT/T = \alpha dN/N$, où $\alpha = (\eta + \kappa) / (\frac{3}{2} + \delta) - 1$, entre dT/T et dN/N . Le paramètre α est très important car il caractérise l'efficacité du refroidissement. Plus il est grand plus l'abaissement relatif de température sera important pour une même perte relative de particules.

Les problèmes qui se posent : cinétique du refroidissement

Le calcul précédent permet de comprendre le sens de variation des diverses grandeurs physiques au cours de l'évaporation. En particulier, on trouve que l'efficacité de l'évaporation, caractérisée par α , est d'autant plus élevée que η est plus grand, c'est-à-dire que le puits est plus profond. Un aspect important manque cependant dans cette discussion. Si η est trop grand, la probabilité d'échappement hors du puits sera très faible, car il y a très peu de collisions susceptibles de fournir à une particule l'énergie suffisante pour qu'elle puisse s'échapper. L'évaporation, certes efficace, sera beaucoup trop lente, et d'autres processus de fuite, comme les transitions de Majorana, auront fait perdre les particules avant qu'elles n'aient eu le temps d'être refroidies par évaporation. Il faut donc étudier en plus la cinétique du refroidissement et déterminer la valeur optimale de la profondeur du puits.

Enfin, il est clair que l'évaporation fait sortir le système de son état d'équilibre et qu'il n'est plus en toute rigueur correct d'utiliser les expressions d'équilibre thermodynamique mentionnées plus haut pour les diverses grandeurs physiques, notamment si η n'est pas trop grand.

Description du refroidissement évaporatif par une équation cinétique

L'étude de la cinétique du refroidissement évaporatif est abordée à partir de l'équation de Boltzmann qui décrit l'évolution de la fonction de distribution d'un gaz sous l'effet des collisions binaires entre atomes. Un certain nombre de

rappels sont donnés sur cette équation, notamment sur la structure du noyau de collision.

On montre ensuite que cette équation se simplifie considérablement si l'on suppose que la fonction de distribution des atomes dans l'espace des phases $f(r, p)$ ne dépend que de leur énergie. Une telle situation est réalisée si le mouvement d'une particule dans le potentiel de piégeage $U(r)$ est suffisamment ergodique. En réalité, à cause des symétries de U , le mouvement d'une particule, en l'absence d'interaction, peut être limité à certaines zones de la surface d'énergie constante, qu'il ne peut donc plus explorer uniformément. On suppose cependant que les interactions entre particules rendent le mouvement suffisamment ergodique pour que la fonction de distribution $f(r, p)$ ne dépende plus essentiellement que de l'énergie.

La nouvelle équation de Boltzmann ainsi obtenue ne porte plus que sur des fonctions $f(\varepsilon)$ d'une seule variable ε , énergie de la particule. On présente les résultats de la résolution numérique d'une telle équation montrant l'évolution au cours du temps de la fonction de distribution $f(\varepsilon)$. Le résultat important d'un tel calcul est que, à chaque instant, $f(\varepsilon)$ est très bien approximée par une exponentielle de Boltzmann, tronquée à zéro pour des énergies ε supérieures à la profondeur ε_p du puits. Les atomes piégés peuvent donc à chaque instant être décrits par une température effective T , reliée à la portée de l'exponentielle de Boltzmann $e^{-\varepsilon/k_B T}$. On trouve également que, si l'on part d'une distribution hors d'équilibre, le système atteint un quasi-équilibre caractérisé par la température effective T , au bout d'un temps très court, de l'ordre de quelques τ_{coll} , où τ_{coll} est le temps moyen entre deux collisions successives subies par le même atome. Ensuite, la température T diminue lentement, avec des constantes de temps beaucoup plus longues sous l'effet du refroidissement évaporatif. Deux échelles de temps, bien distinctes, apparaissent donc dans le problème : un temps de thermalisation très court, de l'ordre de quelques τ_{coll} , au bout duquel le système atteint un état de quasi-équilibre caractérisé par la température effective T ; un temps beaucoup plus long T_{ev} caractérisant la variation lente du quasi-équilibre, et donc de la température, sous l'effet de l'évaporation.

Atomes en quasi-équilibre dans un piège de profondeur finie

Le fait que l'état du gaz puisse être valablement décrit à chaque instant par une exponentielle de Boltzmann tronquée et l'existence de deux échelles de temps bien distinctes dans le problème permettent d'étudier analytiquement les propriétés du quasi-équilibre caractérisé par la température effective T .

Propriétés de quasi-équilibre du gaz d'atomes piégés

Le gaz en quasi-équilibre est décrit par trois variables : la température effective T , la profondeur du puits ϵ_i (on se limite ici à des potentiels décrits par des lois de puissances caractérisées par δ), le nombre total de particules N . Comme la fonction de distribution a une forme mathématique simple (exponentielle tronquée), on peut obtenir des expressions analytiques pour toutes les grandeurs physiques calculées plus haut pour un vrai état d'équilibre (correspondant à $\epsilon_i \rightarrow \infty$ ou encore à $\eta = \epsilon_i/k_B T \gg 1$). Ces expressions font intervenir les fonctions gamma incomplètes et elles permettent, par comparaison avec les expressions obtenues précédemment pour $\eta \gg 1$, d'évaluer les modifications introduites par la profondeur finie ϵ_i du piège.

Etude des taux de pertes par évaporation

La forme mathématique simple de la fonction de distribution permet également, en se reportant à l'équation cinétique de Boltzmann, d'obtenir des expressions analytiques pour le nombre de particules qui s'échappent du piège par unité de temps $(dN/dt)_{ev}$, ainsi que pour la diminution correspondante par unité de temps de l'énergie moyenne par atome du gaz $(dE/dt)_{ev}$. On peut ainsi calculer le taux d'évaporation des particules $\Gamma_{ev} = -(dN/dt)_{ev}/N$ et montrer qu'il est beaucoup plus petit que le taux de collision élastiques $\Gamma_{el} = 1/\tau_{coll}$, par un facteur de l'ordre de $\eta e^{-\eta}$ pour η suffisamment grand. Une telle dépendance en η , qui montre clairement l'existence des deux échelles de temps mentionnées plus haut, est interprétée physiquement.

Etude quantitative du refroidissement évaporatif

Principe du calcul

On veut déterminer l'évolution au cours du temps du nombre d'atomes piégés N et de leur température T , ainsi que celle de toutes les grandeurs physiques intéressantes, notamment la densité dans l'espace des phases. Il faut pour cela établir les équations différentielles donnant dN/dt et dT/dt et intégrer ces équations.

L'état de quasi-équilibre étudié plus haut n'évolue que par suite des pertes par évaporation $(dN/dt)_{ev}$ et $(dE/dt)_{ev}$ calculées elles aussi plus haut. Comme ces pertes sont très lentes à l'échelle du temps de thermalisation, on peut considérer que le système reste à chaque instant dans un état de quasi-équilibre. En

différentiant la relation de quasi-équilibre $E = E(T, N, \epsilon_i)$ qui exprime E en fonction des variables indépendantes T , N et ϵ_i , on peut relier dE à dT et dN (on suppose pour l'instant ϵ_i fixe, mais nous reviendrons plus loin sur cette hypothèse), et obtenir ainsi une première équation reliant dE/dt à dT/dt et dN/dt . Les équations de pertes décrivant l'effet de l'évaporation (et celui d'autres mécanismes de pertes, comme l'effet des collisions inélastiques) donnent deux autres équations pour dE/dt et dN/dt . On obtient ainsi finalement trois équations pour dE/dt , dN/dt , dT/dt . En éliminant dE/dt entre ces trois équations, on obtient les deux équations différentielles cherchées pour dN/dt et dT/dt .

Evaporation simple et évaporation forcée

La profondeur ϵ_i du piège, qui est déterminée par les champs de piégeage, est en principe indépendante du temps, à moins que l'expérimentateur ne décide de la modifier en agissant sur les champs de piégeage. L'évaporation à ϵ_i constant est appelée évaporation simple. Au fur et à mesure que T diminue sous l'effet de l'évaporation, le paramètre $\eta = \epsilon_i/k_B T$ augmente donc puisque ϵ_i est constant. Comme le taux d'évaporation varie en $\eta e^{-\eta}$, comme nous l'avons mentionné plus haut, le processus de refroidissement se ralentit exponentiellement et devient tout à fait inefficace.

C'est la raison pour laquelle la quasi-totalité des expériences de refroidissement évaporatif utilisent une évaporation, dite forcée, dans laquelle on diminue ϵ_i au fur et à mesure que T décroît, de manière à maintenir des valeurs pas trop élevées du paramètre η . Le fait que ϵ_i varie entraîne que la différentiation de la relation $E = E(T, N, \epsilon_i)$ conduit à une équation entre dE/dt , et dT/dt , dN/dt , $d\epsilon_i/dt$. Mais il faut bien noter que $d\epsilon_i/dt$ n'est pas ici une inconnue mais est déterminé par le choix de l'expérimentateur qui règle à chaque instant ϵ_i . Nous supposons dans toute la suite que l'évaporation est effectuée à η constant : ϵ_i est diminué proportionnellement à T . Un tel choix conduit à des équations plus simples pour dT/dt et dN/dt .

Evaporation à η constant - Régime d'emballement

Les équations différentielles donnant dT/dt et dN/dt étant ainsi établies, avec la condition que η reste constant, il faut maintenant les intégrer. Il est commode pour cela de changer de variables indépendantes et de remplacer N et T par n , nombre d'atomes piégés par unité de volume au centre du piège, et v , vitesse moyenne d'agitation proportionnelle à \sqrt{T} . On exprime également n et v en unités de n_0 et v_0 , où n_0 et v_0 sont les valeurs initiales de n et v , et le temps t en unités

de τ_0 où τ_0 est le temps séparant 2 collisions élastiques à l'instant initial : $\tau_0 = 1/n_0\sigma v_0$, où σ est la section efficace de collision élastique. On obtient ainsi deux équations différentielles non linéaires simples donnant dn/dt et dv/dt .

I-6

A partir de ces deux équations, il est possible alors de déduire une équation différentielle non linéaire pour la seule variable $x = nv$. Physiquement, cette variable x représente, à un coefficient de proportionnalité près (égal à la section efficace σ), le taux de collision élastique $n\sigma v$. Si l'on suppose σ constant et indépendant de l'énergie, la résolution de l'équation différentielle pour x permet donc de déterminer si x va croître ou décroître au cours du temps, et par suite, comme η est constant, si l'évaporation va s'accélérer ou se ralentir.

On trouve ainsi que, suivant la valeur choisie pour η , et suivant l'importance des collisions inélastiques, x peut décroître rapidement, rester constant, ou au contraire croître rapidement et diverger au bout d'un temps fini. Ce dernier régime où x diverge est particulièrement intéressant. Il décrit une situation où n croît plus vite que v ne décroît, conduisant à des collisions élastiques de plus en plus fréquentes, ce qui entraîne un « emballement » (en anglais « runaway ») du processus de refroidissement évaporatif. A partir de la solution obtenue pour x (et du système différentiel donnant dn/dt et dv/dt), on peut déduire toutes les expressions donnant l'évolution au cours du temps de toutes les grandeurs physiques intéressantes, comme N , T ou la densité D dans l'espace des phases. Un résultat important est que la divergence apparaissant sur x , se retrouve également sur D .

Optimisation du refroidissement évaporatif

Le cours se termine par la présentation de divers diagrammes visualisant l'évolution du système, notamment ceux décrivant la trajectoire du point représentatif du système dans un système de coordonnées $X = \log N$, $Y = \log D$. Une telle représentation est bien adaptée au problème de l'optimisation. Il s'agit en effet d'attendre le seuil de condensation (augmentation de D la plus grande possible) en perdant le moins possible d'atomes (diminution la plus faible possible de N).

Premier cours d'une série consacrée à la
"Condensation de Bose-Einstein des gaz atomiques ultrafroids"

On se propose de passer en revue quelques développements récents, expérimentaux et théoriques, sur les gaz quantiques dégénérés.

Sujets abordés cette année

- Condensation de Bose-Einstein d'un gaz parfait de bosons.
- Condensation dans une boîte et dans un piège.
- Premières observations expérimentales sur les alcalins
- Collisions ultrafroides. Longueur de diffusion. Potentiel effectif
- Effet des interactions entre atomes - Théorie de champ moyen
Structure et dynamique des condensats

Les problèmes de cohérence et de superfluidité seront abordés dans un cours ultérieur.

Quelques remarques générales sur l'intérêt des milieux dilués

- Interactions faibles. Système le plus proche possible d'un gaz parfait de bosons. Les effets de statistique pure ne sont pas dominés par les effets des interactions.
- Possibilité de calculer simplement l'effet des interactions au moyen d'un petit nombre de paramètres caractérisant les collisions binaires à très basse température.
Possibilité d'établir un lien quantitatif entre les propriétés macroscopiques des condensats et des paramètres microscopiques comme la longueur de diffusion.
Problème beaucoup plus simple que celui de He superfluide.
- Confinement spatial des atomes dans un piège magnétique.
 - Suppression des parois matérielles et des phénomènes complexes qui leur sont associés.
 - La condensation se produit dans l'espace des positions (état fondamental du piège) et non plus seulement dans l'espace des impulsions.
- Détection optique très sensible
Possibilité d'observer directement la forme et le mouvement des condensats
- Possibilité de manipuler les condensats (de les couper en 2, de les mettre en mouvement...) par variation des potentiels de piégeage, par introduction de faisceaux laser très désaccordés.

L'état quantique d'un système physique est décrit par un opérateur densité \hat{D}

Pour obtenir l'opérateur densité \hat{D} d'un système en équilibre thermodynamique, soumis à un certain nombre de contraintes, on postule en mécanique statistique que \hat{D} décrit un état qui ne contient pas plus d'informations que celles fournies par les contraintes. Il faut donc pouvoir associer à \hat{D} une quantité caractérisant l'information manquante dans l'état décrit par \hat{D} , puis déterminer \hat{D} en maximisant cette information manquante, compte tenu des contraintes.

L'entropie statistique $S(\hat{D})$ caractérise précisément cette information manquante dans l'état décrit par \hat{D}

Les notes qui suivent, extraites du cours 1989-90, démontrent les propriétés essentielles de $S(\hat{D})$, qui nous seront utiles pour la suite

a. Information manquante associée à une loi de probabilité

- Loi de probabilité $\{P_m\}$, avec $m = 1, 2, \dots, N$, associée à N événements aléatoires

$$\sum_{m=1}^N P_m = 1 \quad (10.1)$$

- L'événement attendu étant aléatoire, il nous manque une certaine information. On peut essayer de chiffrer cette information manquante. En postulant certaines propriétés générales (additivité, continuité...), Shannon a montré que l'information manquante associée à la loi de probabilité $\{P_m\}$ était donnée par

$$S(\{P_m\}) = -k \sum_m P_m \log P_m \quad (10.2)$$

où k est une constante arbitraire. Voir références 1, 2, 3 (§ 3.1) et 4 (complément I.6).

b. Entropie statistique de von Neumann

- En mécanique quantique, toute notre connaissance sur l'état d'un système est rassemblé dans l'opérateur densité \hat{D} (hermitique, semi-positif, de trace 1). Diagonalisons \hat{D} sous la forme

$$\hat{D} = \sum_m P_m |\varphi_m\rangle \langle \varphi_m| \quad (10.3)$$

où

$$\langle \varphi_m | \varphi_p \rangle = \delta_{mp} \quad (10.4.2)$$

$$P_m \text{ réel, } \geq 0 \quad \sum_m P_m = 1 \quad (10.4.b)$$

plusieurs P_m pouvant être égaux (valeurs propres dégénérées).

- Von Neumann a introduit l'entropie statistique $S(\hat{D})$ associée à \hat{D} (référence 5)

$$\begin{aligned} S(\hat{D}) &= -k \sum_m P_m \log P_m \\ &= -k \text{Tr} \hat{D} \log \hat{D} \end{aligned} \quad (10.5)$$

L'entropie statistique (10.5) coïncide avec l'information manquante de Shannon (10.2) associée à la loi de probabilité $\{P_m\}$.

On peut également considérer que $S(\hat{D})$ représente le désordre existant dans l'état \hat{D} , ou encore l'information manquante sur le système dans l'état \hat{D} .

C. Quelques propriétés importantes de l'entropie statistique

Lemme

$$\begin{cases} S(\hat{D}) = -k \text{Tr} \hat{D} \text{Log} \hat{D} \leq -k \text{Tr} \hat{D} \text{Log} \hat{D}' \\ \text{égalité réalisée si et seulement si } \hat{D}' = \hat{D} \end{cases} \quad (10.6)$$

- Démonstration

$$\hat{D} = \sum_m P_m |\varphi_m\rangle \langle \varphi_m| \quad \hat{D}' = \sum_n P'_n |\varphi'_n\rangle \langle \varphi'_n| \quad (10.7)$$

$$\begin{aligned} k \text{Tr}(-\hat{D} \text{Log} \hat{D} + \hat{D} \text{Log} \hat{D}') &= -k \sum_m P_m \text{Log} P_m + k \text{Tr} \left[\sum_m P_m |\varphi_m\rangle \langle \varphi_m| \left(\sum_n \text{Log} P'_n |\varphi'_n\rangle \langle \varphi'_n| \right) \right] \\ &= -k \sum_m P_m \text{Log} P_m + \sum_m \sum_n P_m |\langle \varphi_m | \varphi'_n \rangle|^2 \text{Log} P'_n \\ &= k \sum_{m,n} P_m |\langle \varphi_m | \varphi'_n \rangle|^2 \text{Log} \frac{P'_n}{P_m} \end{aligned} \quad (10.8)$$

Or, $\text{Log} y \leq y - 1$ (10.9)

l'égalité étant réalisée si et seulement si $y = 1$. On en déduit, en posant $y = P'_n / P_m$

$$P_m \text{Log} \frac{P'_n}{P_m} \leq P_m \left(\frac{P'_n}{P_m} - 1 \right) = P'_n - P_m \quad (10.10)$$

ce qui donne

$$k \text{Tr}(-\hat{D} \text{Log} \hat{D} + \hat{D} \text{Log} \hat{D}') \leq \sum_{m,n} (P'_n - P_m) |\langle \varphi_m | \varphi'_n \rangle|^2 = \sum_n P'_n - \sum_m P_m = 0 \quad (10.11)$$

et démontre la 1^{ère} ligne de (10.6).

L'égalité dans (10.11) est réalisée si, pour tout couple m, n , on a, ou bien $\langle \varphi'_n | \varphi_m \rangle = 0$, ou bien $P'_n = P_m$, c'est à dire si

$$\langle \varphi'_n | \varphi_m \rangle (P'_n - P_m) = 0 \quad \forall n, m \quad (10.12a)$$

qu'on peut récrire sous la forme

$$\langle \varphi'_n | \hat{D}' - \hat{D} | \varphi_m \rangle = 0 \quad \forall n, m \quad (10.12b)$$

Comme les $\{|\varphi_m\rangle\}$ et les $\{|\varphi'_n\rangle\}$ forment des bases, cette égalité n'est réalisée que si $\hat{D}' = \hat{D}$, ce qui démontre la 2^{ème} ligne de (10.6)

Maximum et minimum de $S(\hat{D})$

- Supposons l'espace des états de dimension finie W , et prenons pour \hat{D}' l'opérateur de trace 1, proportionnel à l'opérateur unité : $\hat{D}' = \frac{1}{W} \sum_m |\varphi_m\rangle \langle \varphi_m|$. On a alors, d'après (10.6)

$$S(\hat{D}) \leq -k \text{Log} W \text{Tr} \hat{D} = k \text{Log} W \quad (10.13)$$

On a donc

$$S_{\text{max}} = k \text{Log} W \quad (10.14)$$

Pour faire le raccord avec la thermodynamique, nous prendrons désormais $k = k_B$ (constante de Boltzmann) et Log désignera le logarithme népérien.

- Le minimum de $S(\hat{D})$ est réalisé pour un état pur (tous les P_m nuls sauf un qui vaut 1)

$$S_{\text{min}} = 0 \quad (10.15)$$

Additivité

- Le système étudié S est formé par la réunion de 2 systèmes S_1 et S_2

$$\text{Si } \hat{D}(1,2) = \hat{D}(1) \otimes \hat{D}(2) \quad S[\hat{D}(1,2)] = S[\hat{D}(1)] + S[\hat{D}(2)] \quad (10.16)$$

Pour démontrer (10.16), il suffit d'utiliser une base produit tensoriel d'une base $\{|\varphi_m(1)\rangle\}$ qui diagonalise $\hat{D}(1)$ par une base $\{|\chi_n(2)\rangle\}$ qui diagonalise $\hat{D}(2)$.

$$\begin{aligned} S[\hat{D}(1,2)] &= -k_B \sum_m \sum_n P_m^{(1)} P_n^{(2)} \log(P_m^{(1)} P_n^{(2)}) = -k_B \sum_{mn} P_m^{(1)} P_n^{(2)} [\log P_m^{(1)} + \log P_n^{(2)}] \\ &= -k_B \sum_m P_m^{(1)} \log P_m^{(1)} - k_B \sum_n P_n^{(2)} \log P_n^{(2)} = S[\hat{D}(1)] + S[\hat{D}(2)] \quad (10.17) \end{aligned}$$

- Le résultat (10.17) exprime que le désordre dans le tout est la somme de désordres dans les parties, si les parties sont statistiquement indépendantes.

Corrélations

- En général, $\hat{D}(1,2)$ ne se factorise pas. A partir de $D(1,2)$, on peut calculer

$$\hat{D}(1) = \text{Tr}_2 \hat{D}(1,2) \quad \hat{D}(2) = \text{Tr}_1 \hat{D}(1,2) \quad (10.18)$$

On a alors

$$\begin{cases} S[\hat{D}(1)] + S[\hat{D}(2)] \geq S[\hat{D}(1,2)] \\ \text{égalité réalisée si et seulement si } \hat{D}(1,2) = \hat{D}(1) \otimes \hat{D}(2) \end{cases} \quad (10.19)$$

Démonstration

$$S[\hat{D}(1)] = -k_B \text{Tr} \hat{D}(1) \log \hat{D}(1) = -k_B \text{Tr} \hat{D}(1,2) \log \hat{D}(1) \otimes \hat{I}(2) \quad (10.20.a)$$

$$S[\hat{D}(2)] = -k_B \text{Tr} \hat{D}(2) \log \hat{D}(2) = -k_B \text{Tr} \hat{D}(1,2) \log \hat{I}(1) \otimes \hat{D}(2) \quad (10.20.b)$$

Or, en utilisant la base factorisée qui diagonalise $\hat{D}(1)$ et $\hat{D}(2)$, on démontre que

$$\log [\hat{D}(1) \otimes \hat{I}(2)] + \log [\hat{I}(1) \otimes \hat{D}(2)] = \log [\hat{D}(1) \otimes \hat{D}(2)] \quad (10.21)$$

En ajoutant (10.20.a) et (10.20.b) et en utilisant (10.21), on obtient alors, compte tenu de (10.6)

$$\begin{aligned} S[\hat{D}(1)] + S[\hat{D}(2)] &= -k_B \text{Tr} \hat{D}(1,2) \log [\hat{D}(1) \otimes \hat{D}(2)] \\ &\geq -k_B \text{Tr} \hat{D}(1,2) \log \hat{D}(1,2) = S[\hat{D}(1,2)] \quad (10.22) \end{aligned}$$

ce qui démontre (10.19).

- L'inégalité (10.19) exprime physiquement que $\hat{D}(1)$ et $\hat{D}(2)$ contiennent ensemble moins d'information que $\hat{D}(1,2)$, qui contient en plus l'information relative aux corrélations entre 1 et 2.

Concavité

- Soient \hat{D}_a et \hat{D}_b 2 opérateurs densités possibles d'un même système et soit λ un réel tel que $0 \leq \lambda \leq 1$. On a, pour tout λ , et quels que soient \hat{D}_a et \hat{D}_b

$$\{ S[\lambda \hat{D}_a + (1-\lambda) \hat{D}_b] \geq \lambda S[\hat{D}_a] + (1-\lambda) S[\hat{D}_b] \quad (10.23)$$

{ égalité réalisée si et seulement si $\hat{D}_a = \hat{D}_b$

- Démonstration. Posons

$$\hat{D}' = \lambda \hat{D}_a + (1-\lambda) \hat{D}_b \quad (10.24)$$

et appliquons (10.6) avec $\hat{D} = \hat{D}_a$ puis $\hat{D} = \hat{D}_b$

$$-k_B \lambda \text{Tr} \hat{D}_a \text{Log} \hat{D}' \geq \lambda S(\hat{D}_a) \quad (10.25.a)$$

$$-k_B (1-\lambda) \text{Tr} \hat{D}_b \text{Log} \hat{D}' \geq (1-\lambda) S(\hat{D}_b) \quad (10.25.b)$$

Il suffit alors d'ajouter (10.25.a) et (10.25.b) et d'utiliser (10.24) pour obtenir (10.23)

- Physiquement, (10.23) exprime que la réunion en un seul mélange statistique de 2 états d'un même système augmente le désordre.

- Généralisation

$$\left\{ \begin{array}{l} S(\sum_j \mu_j \hat{D}_j) \geq \sum_j \mu_j S(\hat{D}_j) \\ \mu_j \text{ réel}, 0 \leq \mu_j \leq 1, \sum_j \mu_j = 1 \end{array} \right. \quad (10.26)$$

Invariance de $S(\hat{D})$ dans une transformation unitaire de \hat{D}

$$- \text{Si } \hat{D}(t) = U(t) \hat{D}(0) U^\dagger(t), \quad S[\hat{D}(t)] = S[\hat{D}(0)] \quad (10.27)$$

- Démonstration

$$\begin{aligned} S[\hat{D}(t)] &= -k_B \text{Tr} (\hat{D}(t) \text{Log} \hat{D}(t)) = -k_B \text{Tr} (U(t) \hat{D}(0) \text{Log} \hat{D}(0) U^\dagger(t)) \\ &= -k_B \text{Tr} (\underbrace{U^\dagger(t) U(t)}_{=1} \hat{D}(0) \text{Log} \hat{D}(0)) = S[\hat{D}(0)] \end{aligned} \quad (10.28)$$

- L'entropie d'un système ne change donc pas au cours d'une évolution unitaire de ce système.

- Que se passe-t-il si l'hamiltonien qui régit l'évolution unitaire de \hat{D} est mal connu ?

Il faut alors moyenner sur plusieurs évolutions possibles de probabilités respectives p_j ($\sum_j p_j = 1$)

$$\hat{D}(t) = \sum_j p_j U_j(t) \hat{D}(0) U_j^\dagger(t) = \sum_j p_j \hat{D}_j(t) \quad (10.29)$$

Comme $\hat{D}_j(t) = U_j(t) \hat{D}(0) U_j^\dagger(t)$, on a d'après (10.27)

$$S(\hat{D}_j(t)) = S(\hat{D}(0)) \quad (10.30)$$

L'inégalité (10.26) (concavité) entraîne alors, compte tenu de (10.29) et (10.30)

$$S(\hat{D}(t)) = S(\sum_j p_j \hat{D}_j(t)) \geq \sum_j p_j S(\hat{D}(0)) \quad (10.31)$$

c'est à dire encore, comme $\sum_j p_j = 1$

$$S(\hat{D}(t)) \geq S(\hat{D}(0)) \quad (10.32)$$

Si un système isolé évolue sous l'effet d'un hamiltonien mal connu, l'entropie de ce système augmente au cours du temps

Références

1. C.E. Shannon and W. Weaver, The mathematical theory of Communication (Univ. of Illinois Press, Urbana 1949)
2. L. Brillouin, La science et la théorie de l'information (Masson Paris 1959)
3. R. Balian, Du microscopique au macroscopique, cours de physique statistique de l'école polytechnique (Ellipses, Paris 1982)
4. B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet, Physique Statistique (Hermann Paris 1989), Complément I.6
5. J. von Neumann, Mathematical foundations of quantum mechanics (Princeton, 1955), reproduit dans J.A. Wheeler and W.H. Zurek, Quantum theory and measurement (Princeton, 1983).

Buts de ce cours

- Rappeler les notions essentielles et les équations de base permettant d'aborder l'étude de la condensation de Bose-Einstein.
- Montrer comment apparaissent des paramètres importants comme la température, le potentiel chimique, la fugacité.
- Souligner les liens qui existent entre grandeurs statistiques et grandeurs thermodynamiques usuelles.
- Établir des inégalités qui nous serviront dans la suite pour le calcul variationnel de la fonction de partition.

① Opérateur densité d'équilibre \hat{D} et fonction de partition Z Détermination de \hat{D}

- Système en équilibre thermodynamique et soumis à des contraintes
 - Certaines grandeurs (par exemple le volume) sont fixées de manière certaine.
 - D'autres grandeurs "conservées" \hat{A}_i (c-à-d des constantes du mouvement, commutant avec \hat{H}), sont fixées en valeur moyenne : les $\langle A_i \rangle$ sont donnés.

- L'opérateur densité \hat{D} d'équilibre est déterminé par 2 conditions

(i) désordre maximal (voir Appendice du cours 1)

$$S(\hat{D}) = -k \text{Tr} \hat{D} \text{Log} \hat{D} \quad \text{le plus grand possible} \quad (2.1)$$

(ii) Les \hat{A}_i ont des valeurs moyennes fixées

$$\text{Tr}(\hat{D} \hat{A}_i) = \langle A_i \rangle \quad \text{fixé} \quad (2.2)$$

- On maximise $S(\hat{D})$ compte tenu des contraintes (2.2). Pour n'importe quelle variation $d\hat{D}$ de \hat{D} autour de la valeur d'équilibre \hat{D} , on doit avoir $dS = 0$ et $d\text{Tr}(\hat{D} \hat{A}_i) = 0$. La méthode des multiplicateurs de Lagrange donne alors

$$\boxed{\hat{D} = \frac{1}{Z} e^{-\sum_i \lambda_i \hat{A}_i}} \quad (2.3)$$

λ_i : multiplicateur de Lagrange associé à $\langle A_i \rangle$ et déterminé par (2.2)

Z : Facteur de normalisation, appelé "fonction de partition".

Expression de Z . En écrivant que $\text{Tr} \hat{D} = 1$, on obtient

$$\boxed{Z = \text{Tr} e^{-\sum_i \lambda_i \hat{A}_i}} \quad (2.4)$$

Liens entre Z et les contraintes $\langle A_i \rangle$

Z est une fonction des $\{\lambda_j\}$: $Z(\{\lambda_j\})$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_i} \text{Log} Z(\{\lambda_j\}) = \frac{1}{\text{Tr} e^{-\sum_j \lambda_j \hat{A}_j}} \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \text{Tr} e^{-\sum_j \lambda_j \hat{A}_j} = - \frac{1}{Z} \text{Tr} \hat{A}_i e^{-\sum_j \lambda_j \hat{A}_j} = - \langle A_i \rangle \quad (2.5)$$

II - 2

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_i} \text{Log } Z(\{\lambda_j\}) = - \langle A_i \rangle \quad (2.6)$$

- Des calculs très analogues donnent

$$\frac{\partial^2}{\partial \lambda_i \partial \lambda_k} \text{Log } Z(\{\lambda_j\}) = \langle \hat{A}_i \hat{A}_k \rangle - \langle \hat{A}_i \rangle \langle \hat{A}_k \rangle \quad (2.7)$$

Variation d'Log Z de Log Z associée à une variation d' λ_i des λ_i

$$\text{De } d \text{Log } Z = \sum_i \frac{\partial \text{Log } Z}{\partial \lambda_i} d \lambda_i \quad \text{et (2.6), on déduit}$$

$$d \text{Log } Z = - \sum_i \langle A_i \rangle d \lambda_i \quad (2.8)$$

② Entropie statistique $S(\hat{D})$ associée à \hat{D}

Calcul de S

$$\text{Log } \hat{D} = - \text{Log } Z - \sum_i \lambda_i \hat{A}_i \quad (2.9)$$

$$S(\hat{D}) = -k T_0 \hat{D} \log \hat{D} = k \text{Log } Z + k \sum_i \lambda_i T_0 (\hat{D} \hat{A}_i) = k [\text{Log } Z + \sum_i \lambda_i \langle A_i \rangle] \quad (2.10)$$

$$S = k \text{Log } Z + k \sum_i \lambda_i \langle A_i \rangle = k \text{Log } Z - k \sum_i \lambda_i \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \text{Log } Z \quad (2.11)$$

Calcul de dS

$$dS = k d \text{Log } Z + k \sum_i [d \lambda_i \langle A_i \rangle + \lambda_i d \langle A_i \rangle] \quad (2.12)$$

En utilisant (2.8) on obtient alors

$$dS = k \sum_i \lambda_i d \langle A_i \rangle \quad (2.13)$$

de sorte que

$$\lambda_i = \frac{1}{k} \frac{\partial S}{\partial \langle A_i \rangle} \quad (2.14)$$

Lien entre $\text{Log } Z$ et S

- D'après (2.8), $d \text{Log } Z$ s'exprime simplement en fonction des $d \lambda_i$. Les variables adaptées à $\text{Log } Z$ sont les λ_i .
- D'après (2.14), dS s'exprime simplement en fonction des $d \langle A_i \rangle$. Les variables adaptées à S sont les $\langle A_i \rangle$.
- Les λ_i et les $\langle A_i \rangle$ sont des variables conjuguées. Le passage de $\text{Log } Z$ à S est une transformation de Legendre analogue à celle qui fait passer du Lagrangien au Hamiltonien en mécanique.

③ Ensembles microcanonique, canonique, grand canonique

Ensemble microcanonique

De même que le volume, l'énergie totale est fixée de manière certaine entre les valeurs E et $E + \delta E$.

Dans la distribution d'équilibre, tous les états quantiques d'énergie comprise entre E et $E + \delta E$ sont occupés avec la même probabilité. L'opérateur \hat{D} est un multiple de l'opérateur unité dans cette base.

Ensemble canonique

II-3

- V est fixé de manière certaine
- L'énergie totale \hat{H} est fixé en valeur moyenne

$$\langle \hat{H} \rangle = U \quad (2.15)$$

- Le multiplicateur de Lagrange associé à U est noté β et les équations (2.3) et (2.4) deviennent

$$\hat{D} = \frac{1}{Z_c} e^{-\beta \hat{H}} \quad (2.16) \quad Z_c = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \quad (2.17)$$

- On obtient de même à partir de (2.8) et (2.13)

$$d \log Z_c = -U d\beta \quad (2.18)$$

$$dS = k\beta dU \quad (2.19)$$

Ensemble grand canonique

- V est fixé de manière certaine
- L'énergie totale \hat{H} et le nombre total de particules \hat{N} sont fixés en valeur moyennes

$$\langle \hat{H} \rangle = U \quad \langle \hat{N} \rangle = N \quad (2.20)$$

- 2 multiplicateurs de Lagrange : β associé à \hat{H} , α associé à \hat{N}

- Les équations précédentes deviennent :

$$\hat{D} = \frac{1}{Z_G} e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}} \quad (2.21)$$

$$Z_G = \text{Tr} e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}} \quad (2.22)$$

$$d \log Z_G = -N d\alpha - U d\beta \quad (2.23)$$

$$dS = k\alpha dN + k\beta dU \quad (2.24)$$

Équivalence entre les ensembles

- On peut montrer que les prédictions effectuées à partir des 3 ensembles pour les valeurs moyennes des diverses grandeurs physiques sont équivalentes à la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$ avec N/V constant)

- Cette équivalence n'est plus valable pour les fluctuations de certaines grandeurs physiques (par exemple, les nombres d'occupation des états quantiques), notamment en l'absence d'interactions entre particules. Il faut toutefois noter que la prise en compte de interactions atténue ces différences

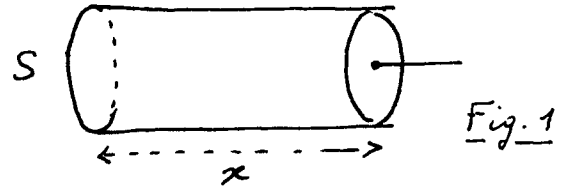
- Pour des valeurs finies de N , les prédictions effectuées à partir des 3 ensembles peuvent différer de manière sensible.

Nous ne tiendrons pas compte ici de ces différences et utiliserons l'ensemble qui conduit aux calculs les plus simples. Pour la condensation de Bose-Einstein, c'est l'ensemble grand canonique.

④ Pression

- Gaz enfermé dans une enceinte de volume V . Confinement modélisé par un potentiel extérieur (barrière de potentiel)

- Enceinte fermée par un piston mobile d'abscisse x qu'on peut déplacer



- Le Hamiltonien \hat{H} dépend de x comme paramètre extérieur, ou encore du volume $V = Sx$ (S : surface du piston)

$$d\hat{H} = -\hat{F} dx = -\hat{P} S dx = -\hat{P} dV \quad (2.25)$$

\hat{F} : Opérateur force \hat{P} : Opérateur pression

- Pression d'équilibre dans l'état \hat{D}

$$P = \text{Tr}(\hat{D} \hat{P}) = - \text{Tr}\left(\hat{D} \frac{\partial \hat{H}}{\partial V}\right) \quad (2.26)$$

Nous relierons plus loin P au travail δW fourni au système dans une transformation quasi-statique

- Lien entre P et les fonctions de partition Z_C et Z_G

$$\frac{\partial}{\partial V} e^{-\beta \hat{H}} = -\beta \frac{\partial \hat{H}}{\partial V} e^{-\beta \hat{H}} = \beta \hat{P} e^{-\beta \hat{H}} \quad (2.27)$$

Remarque: En toute rigueur, (2.27) est inexact car $[\hat{H}, \frac{\partial \hat{H}}{\partial V}] \neq 0$
 Par exemple, $\frac{d}{du} \hat{X}^3 = \frac{d\hat{X}}{du} \hat{X}^2 + \hat{X} \frac{d\hat{X}}{du} \hat{X} + \hat{X}^2 \frac{d\hat{X}}{du} \neq 3\hat{X}^2 \frac{d\hat{X}}{du}$
 Comme on prend ensuite la trace et que la trace est invariante dans une permutation circulaire, il n'est pas incorrect d'utiliser (2.27)

On déduit de (2.26) et (2.27)

$$\frac{\partial}{\partial V} \text{Log } Z_C = \frac{1}{Z_C} \text{Tr} \beta \hat{P} e^{-\beta \hat{H}} = \beta P \quad (2.28.a)$$

$$\frac{\partial}{\partial V} \text{Log } Z_G = \frac{1}{Z_G} \text{Tr} \beta \hat{P} e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}} = \beta P \quad (2.28.b)$$

de sorte que l'on peut écrire

$$\boxed{P = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \text{Log } Z_C(\beta, V) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \text{Log } Z_G(\alpha, \beta, V)} \quad (2.29)$$

- Les formules (2.23) et (2.24) deviennent

$$d \text{Log } Z_G(\alpha, \beta, V) = -N d\alpha - U d\beta + \beta P dV \quad (2.30)$$

$$dS(N, U, V) = k\alpha dN + k\beta dU + k\beta P dV \quad (2.31)$$

et des formules analogues pour $d \text{Log } Z_C(\beta, V)$ et $dS(U, V)$ en laissant tomber les termes en $d\alpha$ et dN .

⑤ Liens avec la thermodynamique

II-5

Variations d'énergie dans une transformation quasi-statique

(i) Changement très lent de \hat{H} - Travail

- Par exemple, on déplace très lentement le piston de la figure 1. Les niveaux d'énergie E_m du Hamiltonien \hat{H} changent très lentement et leurs populations p_m restent les mêmes (approximation adiabatique).
- La variation d'énergie correspondante du système correspond à un travail reçu par le système δW .

$$dU = \sum_m p_m dE_m = \delta W = \text{Tr}(\hat{D} d\hat{H}) = -P dV \quad (2.32)$$

(ii) Echange d'énergie avec un thermostat à V fixe - Chaleur

- \hat{H} ne change pas. Une interaction faible avec un thermostat induit une redistribution des populations entre les niveaux E_m qui restent inchangés.
- La variation d'énergie correspondante du système correspond à une chaleur reçue par le système δQ .

$$dU = \sum_m E_m dp_m = \delta Q = \text{Tr}(\hat{H} d\hat{D}) \quad (2.33)$$

Variations d'entropie dans une transformation quasi-statique

(i) Changement très lent de \hat{H}

On suppose de plus le système isolé thermiquement (pas de couplage avec un thermostat).

Dans ce cas l'évolution est unitaire (évolution Hamiltonienne sous l'effet de $\hat{H}(t)$) et S ne change pas (voir Appendice du cours 1).

(ii) Echange d'énergie avec un thermostat à V fixe

La redistribution des populations entre les niveaux E_m correspond à un changement de l'état de désordre, le système restant à chaque instant en équilibre à cause de la lenteur de la transformation.

L'entropie statistique change car de l'information apparaît dans les corrélations qui s'établissent entre le système et le réservoir.

$$\begin{aligned} dS &= -k d \text{Tr}(\hat{D} \log \hat{D}) = -k \text{Tr}[d\hat{D} \log \hat{D}] - k \underbrace{\text{Tr} d\hat{D}}_{=0} \\ &= k \log Z \underbrace{\text{Tr} d\hat{D}}_{=0} + k \beta \underbrace{\text{Tr}[d\hat{D} \hat{H}]}_{\delta Q} \end{aligned} \quad (2.34)$$

On a utilisé l'expression (2.9) de $\log \hat{D}$ et considéré l'ensemble canonique. On en déduit

$$dS = k \beta \delta Q \quad (2.35)$$

Lien entre le multiplicateur de Lagrange β et la température absolue T

- L'entropie usuelle de la thermodynamique change dans une transformation quasi-statique d'une quantité

II-6

$$dS_{\text{thermo}} = \frac{\delta Q}{T} \quad (2.35)$$

- La comparaison de (2.35) et (2.36) conduit à poser

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (2.37)$$

L'entropie statistique d'équilibre coïncide alors avec l'entropie thermodynamique

- L'entropie statistique a un caractère plus fondamental.

• Elle peut être définie même en dehors de l'équilibre

• Quand $T = 0^\circ \text{K}$, le système est dans un état pur, l'état fondamental $|\varphi_0\rangle$, de sorte que $\hat{D}_0 = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|$. L'entropie

$S(\hat{D}_0) = -kT \text{Tr} \hat{D}_0 \text{Log} \hat{D}_0$ est alors nulle. On retrouve, sans avoir à le postuler, que $S \rightarrow 0$ quand $T \rightarrow 0$ (3^{ème} principe de la thermo).

Liens entre le multiplicateur de Lagrange α et le potentiel chimique μ

- Remplaçons β par $1/kT$ dans (2.31) et utilisons $dS = \delta Q/T$.

On obtient alors pour dU

$$\begin{aligned} dU &= -P dV + T dS - \frac{\alpha}{\beta} dN \\ &= \delta W + \delta Q + \mu dN \end{aligned} \quad (2.38)$$

où l'on a posé

$$\mu = -\frac{\alpha}{\beta} = -kT \alpha \quad (2.39)$$

- On retrouve en (2.38) l'expression thermodynamique habituelle de dU , où μ apparaît comme la variation d'énergie du système quand on ajoute (à V et S constants) une particule

μ est le potentiel chimique.

Fugacité z

- Plutôt que d'utiliser les 2 variables indépendantes α et β dans $\text{Log} Z_G$, on pourrait utiliser μ et β . En fait, on préfère en général utiliser β et la fugacité z reliée à α par

$$z = e^{-\alpha} = e^{\beta\mu} \quad (2.40)$$

- Les formules donnant N , U et P en fonction des dérivées partielles de $\text{Log} Z_G$ sont plus simples quand on utilise z et β que quand on utilise μ et β comme variables indépendantes.

En utilisant $\frac{\partial}{\partial \alpha} = \frac{\partial z}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial z} = -e^{-\alpha} \frac{\partial}{\partial z} = -z \frac{\partial}{\partial z}$, on obtient à partir de (2.30)

$$N = z \frac{\partial}{\partial z} \text{Log} Z_G(z, \beta, V) \quad (2.41)$$

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \text{Log} Z_G(z, \beta, V) \quad (2.42)$$

$$P = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \text{Log} Z_G(z, \beta, V) \quad (2.43)$$

Si l'on utilise μ au lieu de z , il faut remplacer l'équation (2.42) donnant U par

$$U = \frac{1}{\beta} \left(\mu \frac{\partial}{\partial \mu} - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \right) \text{Log } Z_G(\mu, \beta, V) \tag{2.44}$$

Liens entre la fonction de partition et les potentiels thermodynamiques

- L'équation (2.11) relie S à $\text{Log } Z$ et aux multiplicateurs de Lagrange λ_i : $S = k \text{Log } Z + k \sum_i \lambda_i \langle A_i \rangle$

- Ensemble canonique. Une telle équation devient

$$S = k \text{Log } Z_C + k\beta U \tag{2.45}$$

On en déduit, compte tenu de $\beta = 1/kT$

$$-kT \text{Log } Z_C = U - TS = F \tag{2.46}$$

où F est l'énergie libre $F = U - TS$

- Ensemble grand canonique. On a alors

$$S = k \text{Log } Z_C + k\alpha N + k\beta U$$

ce qui donne, compte tenu de $k\beta = 1/T$, $k\alpha = -\mu/T$ [voir (2.39)] :

$$-kT \text{Log } Z_G = U - TS - \mu N = J \tag{2.47}$$

où J est le grand potentiel $J = U - TS - \mu N$

⑥ Cas particulier des particules indépendantes

Definitions

- Pas d'interaction entre les particules. Le Hamiltonien \hat{H} est une somme de termes à 1 particule

$$\hat{H} = \hat{h}(1) + \hat{h}(2) + \dots + \hat{h}(N) \tag{2.48}$$

- Etats propres et valeurs propres de \hat{h}

$$\hat{h} |\lambda\rangle = \epsilon_\lambda |\lambda\rangle \tag{2.49}$$

Etat individuel $|\lambda\rangle$ d'énergie ϵ_λ

- Si le nombre de particules peut varier, il est commode de travailler dans l'espace de Fock (somme directe des espaces de Hilbert correspondant aux diverses valeurs possibles de N) et d'utiliser le formalisme de la seconde quantification

\hat{a}_λ^+ (a_λ) : opérateur de création (d'annihilation) d'une particule dans l'état $|\lambda\rangle$

$\hat{N}_\lambda = a_\lambda^+ a_\lambda$: Nombre de particules dans l'état $|\lambda\rangle$

$$\hat{N} = \sum_\lambda \hat{N}_\lambda \qquad \hat{H} = \sum_\lambda \epsilon_\lambda \hat{N}_\lambda \tag{2.50}$$

- Les états $|e\rangle$ du système des N particules sont définis par la donnée des nombres d'occupation $\{N_\lambda\}$ des divers états individuels $|\lambda\rangle$.

II-8]

$$|\ell\rangle = |\{N_\lambda\}\rangle \quad (2.51.a)$$

$$\hat{N}|\ell\rangle = N_\ell|\ell\rangle \quad N_\ell = \sum_\lambda N_\lambda \quad (2.51.b)$$

$$\hat{H}|\ell\rangle = E_\ell|\ell\rangle \quad E_\ell = \sum_\lambda N_\lambda \epsilon_\lambda \quad (2.51.c)$$

Ensemble canonique - Fonction de partition Z_C

- Pour un tel ensemble, $N = \sum_\lambda N_\lambda$ est fixé

$$Z_C = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \sum_\ell e^{-\beta E_\ell} = \sum_{\{N_\lambda\} \text{ avec } \sum_\lambda N_\lambda = N} e^{-\sum_\lambda \beta N_\lambda \epsilon_\lambda} \quad (2.52)$$

La restriction $\sum_\lambda N_\lambda = N$ rend le calcul de la somme apparaissant dans le dernier terme de (2.52) difficile et empêche de mettre cette somme sous forme d'un produit de sommes indépendantes.

C'est précisément cette difficulté qui motive l'introduction de l'ensemble grand canonique où $\sum_\lambda N_\lambda$ n'est plus fixé de manière certaine.

Ensemble grand canonique - Fonction de partition Z_G

- L'équation (2.52) est remplacé par

$$Z_G = \text{Tr} e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}} = \sum_\ell e^{-\alpha N_\ell - \beta E_\ell} = \sum_{\{N_\lambda\}} e^{-\sum_\lambda N_\lambda (\alpha + \beta \epsilon_\lambda)} = \prod_\lambda \zeta_\lambda \quad (2.53)$$

$$\text{ou} \quad \zeta_\lambda = \sum_{N_\lambda} e^{-N_\lambda (\alpha + \beta \epsilon_\lambda)} \quad (2.54)$$

- La fonction de partition grand canonique Z_G se factorise en un produit de fonctions de partition ζ_λ .

Chaque fonction de partition ζ_λ est associée à un état individuel λ et non à une particule.

- L'expression de la somme (2.54) dépend de la statistique, c'est à dire des valeurs permises possibles pour les N_λ .

Cas des fermions - Nombres d'occupation moyens \bar{N}_λ

- Chaque état individuel $|\lambda\rangle$ ne peut être occupé que par une seule particule au plus. On a donc $N_\lambda = 0, 1$.

- La somme (2.54) se réduit alors à

$$\zeta_\lambda^F = 1 + e^{-(\alpha + \beta \epsilon_\lambda)} = 1 + z e^{-\beta \epsilon_\lambda} = 1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_\lambda)} \quad (2.55)$$

et on obtient pour le logarithme de Z_G :

$$\text{Log} Z_G = \text{Log} \prod_\lambda \zeta_\lambda^F = \sum_\lambda \text{Log} (1 + z e^{-\beta \epsilon_\lambda}) \quad (2.56)$$

- L'équation (2.51) permet alors de calculer le nombre moyen N de particules

$$N = z \frac{\partial}{\partial z} \text{Log} Z_G = z \frac{\partial}{\partial z} \sum_\lambda \text{Log} (1 + z e^{-\beta \epsilon_\lambda}) = \sum_\lambda \bar{N}_\lambda \quad (2.57)$$

ou

$$\bar{N}_\lambda = \frac{z e^{-\beta \epsilon_\lambda}}{1 + z e^{-\beta \epsilon_\lambda}} = \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta \epsilon_\lambda}} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}} \quad (2.58)$$

est le nombre d'occupation moyen de l'état λ .

Cas des bosons - Nombres d'occupation moyens \bar{N}_λ

- Chaque état individuel peut être occupé par un nombre quelconque de particules. N_λ peut prendre alors toutes les valeurs : $N_\lambda = 0, 1, 2, \dots$

- On obtient alors pour (2.54)

$$\sum_{N_\lambda}^B e^{-N_\lambda(\alpha + \beta E_\lambda)} = \sum_{N_\lambda=0}^{\infty} e^{-\beta N_\lambda(E_\lambda - \mu)} \quad (2.59)$$

à savoir une série géométrique de raison $e^{-\beta(E_\lambda - \mu)}$. La valeur la plus basse de E_λ est E_0 (état fondamental de \hat{h}). Si $\mu < E_0$, $e^{-\beta(E_\lambda - \mu)}$ est toujours inférieur à 1, $\forall \lambda$ et la série (2.59) est convergente

$$\sum_{N_\lambda}^B = \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_\lambda - \mu)}} = \frac{1}{1 - e^{-\alpha} e^{-\beta E_\lambda}} = \frac{1}{1 - z e^{-\beta E_\lambda}} \quad (2.60)$$

- Les mêmes calculs que ceux conduisant à (2.58) donnent alors

$$N = z \frac{\partial}{\partial z} \text{Log } Z_G = z \frac{\partial}{\partial z} \sum_{\lambda} \text{Log} \frac{1}{1 - z e^{-\beta E_\lambda}} = \sum_{\lambda} \bar{N}_\lambda$$

$$\boxed{\bar{N}_\lambda = \frac{z e^{-\beta E_\lambda}}{1 - z e^{-\beta E_\lambda}} = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta E_\lambda} - 1} = \frac{1}{e^{\beta(E_\lambda - \mu)} - 1}} \quad (2.61)$$

⑦ Principe variationnel thermodynamique

Idee générale

- Le calcul explicite de $\text{Log } Z_G$ et du grand potentiel J ne peut en général être fait que pour des particules indépendantes (voir § 6). Dans le cas général où des interactions entre particules existent, le calcul de $\text{Log } Z_G$ est beaucoup plus difficile.

- On peut alors essayer de remplacer le véritable Hamiltonien \hat{H} par un "Hamiltonien d'essai" \hat{H}_e à particules indépendantes pour lequel on sait calculer $\text{Log } Z_G$. \hat{H}_e est une somme de Hamiltoniens à une particule, contenant un potentiel de champ moyen \hat{v} qui essaye de reproduire au mieux l'effet des interactions entre particules. \hat{v} est, comme \hat{H}_e , une somme de Hamiltoniens à 1 particule. Le problème qui se pose est de trouver le meilleur \hat{H}_e possible.

- Nous allons pour cela établir une inégalité entre le vrai grand potentiel J associé à \hat{H} et le grand potentiel J_e associé à \hat{H}_e , que l'on sait calculer. La détermination du meilleur \hat{H}_e possible se fera alors par une méthode variationnelle analogue à celle utilisée en mécanique quantique pour calculer les valeurs propres et les vecteurs propres d'un Hamiltonien. Une telle démarche est à la base de la dérivation des équations du type Gross Pitaevskii et de leur généralisation à température finie.

Etablissement de l'inégalité satisfaite par J et J_e

- Opérateur densité d'équilibre \hat{D}_e associé à \hat{H}_e

$$\hat{D}_e = \frac{e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}_e}}{\text{Tr } e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}_e}} = \frac{1}{Z_G} e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}_e} \quad (2.62)$$

II-10) On en déduit

$$\text{Log } \hat{D}_e = -\text{Log } Z_G^e - \alpha \hat{N} - \beta \hat{H}_e = \frac{J_e}{kT} - \alpha \hat{N} - \beta \hat{H}_e \quad (2.63)$$

- Operateur densité d'équilibre \hat{D} et grand potentiel associés à \hat{H} (pour la même valeur de la température et du potentiel chimique, c-à-d pour les mêmes valeurs de α et β). L'équation analogue à (2.63) est

$$\text{Log } \hat{D} = \frac{J}{kT} - \alpha \hat{N} - \beta \hat{H} \quad (2.64)$$

- Utilisons alors l'inégalité (10.6) de l'appendice A du cours I

$$-k \text{Tr } \hat{D}_e \text{Log } \hat{D}_e \leq -k \text{Tr } \hat{D}_e \text{Log } \hat{D} \quad (2.65)$$

Egalité si et seulement si $\hat{D} = \hat{D}_e$

A partir de (2.63) et (2.64), on obtient

$$-k \text{Tr } \hat{D}_e \text{Log } \hat{D}_e = -k \underbrace{\text{Log } Z_G^e}_{=J_e/T} \underbrace{\text{Tr } \hat{D}_e}_{=1} + k\alpha \text{Tr } \hat{N} \hat{D}_e + k\beta \text{Tr } \hat{H}_e \hat{D}_e \quad (2.66)$$

$$-k \text{Tr } \hat{D}_e \text{Log } \hat{D} = -k \underbrace{\text{Log } Z_G}_{=J/T} \underbrace{\text{Tr } \hat{D}_e}_{=1} + k\alpha \text{Tr } \hat{N} \hat{D}_e + k\beta \text{Tr } \hat{H} \hat{D}_e \quad (2.67)$$

En reportant (2.66) et (2.67) dans les 2 membres de l'inégalité (2.65), on obtient finalement

$$J \leq J_e + \text{Tr } \hat{D}_e (\hat{H} - \hat{H}_e) \quad 2.68$$

- On sait calculer J_e . Comme \hat{D}_e est connue (voir (2.62)), on sait aussi en général calculer la valeur moyenne de $\hat{H} - \hat{H}_e$ dans l'état \hat{D}_e . La valeur minimale de $J_e + \text{Tr } \hat{D}_e (\hat{H} - \hat{H}_e)$ constitue alors la meilleure approximation possible de J dans une théorie de champ moyen.

Références (suite de la liste de la page I-11)

En plus des ouvrages de R. Balian (ref. 3) et B. Dine, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet (ref. 4), mentionnons quelques autres livres de mécanique statistique

- 6 - L. Landau et E. Lifchitz, Physique Statistique, Editions MIR, Moscou 1967
- 7 - K. Huang, Statistical Mechanics, Wiley, New York 1963
- 8 - R.K. Pathria, Statistical Mechanics, Pergamon, Oxford 1972

28.10.97

Condensation de Bose-Einstein

Bosons sans interactions dans une boîte

III-1

Buts de ce cours

- Présenter le problème habituellement considéré d'un ensemble de bosons sans interactions mutuelles, enfermés dans une boîte de volume V et en équilibre thermodynamique à la température T .
- Montrer que pour une température suffisamment basse, les bosons s'accumulent dans l'état fondamental de la boîte. Calculer les diverses grandeurs physiques du système (énergie totale, pression, chaleur spécifique...) et interpréter les résultats obtenus.
- Nous aborderons dans le cours suivant le cas des bosons piégés dans un potentiel extérieur et qui ne sont plus confinés par des parois matérielles. C'est une telle situation qui correspond aux expériences réalisées récemment sur les alcalins.

① Niveaux d'énergie - Densité d'états

Boîte cubique

Côté L - Volume $V = L^3$

Conditions aux limites périodiques

- Pour simplifier, on prend des conditions aux limites périodiques. Les composantes de l'impulsion de la particule sont quantifiées

$$p_i = \frac{2\pi\hbar}{L} n_i \quad i = x, y, z \quad n_i \text{ entier } \geq 0 \quad (3.1)$$

Les niveaux d'énergie sont repérés par 3 entiers n_x, n_y, n_z et valent

$$E_p = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (3.2)$$

- L'état fondamental $n_x = n_y = n_z = 0$ a une énergie nulle

$$E_0 = 0 \quad (3.3)$$

L'écart d'énergie δE entre l'état fondamental et le premier niveau excité vaut

$$\delta E = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2} \quad (3.4)$$

Nous verrons plus loin que la condensation de Bose-Einstein apparaît pour une température T_c telle que $kT_c \gg \delta E$.

Cette condensation n'est donc pas due au fait que l'énergie thermique kT_c est de l'ordre de ou plus faible que l'écart séparant l'état fondamental des autres états excités

Densité d'états

- Remplacement de la somme discrète sur les valeurs possibles (3.1) des composantes de \vec{p} par une intégrale

$$\sum_{\vec{p}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi\hbar/L)^3} \int_0^\infty 4\pi p^2 dp \quad (3.5)$$

Utilisons

$$E = p^2/2m \quad p dp = m dE \quad p^2 dp = \sqrt{2mE} m dE$$

$$\text{III-2)} \quad \sum_{\vec{p}} \rightarrow \frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{2} m^{3/2} \int_0^{\infty} \sqrt{E} dE = \int_0^{\infty} \rho(E) dE \quad (3.6)$$

avec

$$\rho(E) = \frac{V m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} \sqrt{E} \quad (3.7)$$

- Il est commode, dans les calculs qui suivent, d'utiliser, au lieu de E , la variable sans dimension

$$x = \frac{E}{kT} = \beta E \quad (3.8)$$

On a alors

$$\sum_{\vec{p}} \rightarrow \frac{V}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} \left(\frac{m}{\beta}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} \sqrt{x} dx \quad (3.9)$$

En introduisant la longueur d'onde de de Broglie thermique

$$\lambda_{dB} = \left(2\pi\hbar^2 \frac{\beta}{m}\right)^{1/2} = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m kT}\right)^{1/2} \quad (3.10)$$

on obtient

$$\sum_{\vec{p}} \rightarrow \int_0^{\infty} \rho(x) dx \quad (3.11)$$

avec

$$\rho(x) = \frac{V}{\lambda_{dB}^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{x} \quad (3.12)$$

Autres conditions aux limites

- On pourrait imposer à la fonction d'onde de s'annuler sur les parois. Ceci serait d'ailleurs plus réaliste pour décrire des particules enfermées dans une boîte aux parois réfléchissantes.

- De telles conditions aux limites conduisent, pour E suffisamment grand, à la même densité d'états (3.7) ou (3.12) que les conditions aux limites périodiques. Ce sont précisément ces équations que nous utiliserons dans la suite.

- Notons toutefois que l'énergie E_0 de l'état fondamental n'est plus nulle avec des parois réfléchissantes. Elle est de l'ordre de \hbar^2/mL^2 et du même ordre que l'écart ΔE séparant l'état fondamental du premier niveau excité.

② Etude simple du phénomène de condensation

a) - Problème posé : Trouver la fugacité z pour N et T fixés

- Nous avons calculé dans le cours II les nombres moyens d'occupation \bar{N}_p des états individuels E_p pour un ensemble de bosons en équilibre thermodynamique et sans interactions :

$$\bar{N}_p = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta E_p} - 1} = \frac{1}{e^{\beta(E_p - \mu)} - 1} \quad (3.13)$$

où z est la fugacité, μ le potentiel chimique. Comme les \bar{N}_p sont positifs, on a $E_p - \mu > 0, \neq 0$ et donc, d'après (3.3)

$$\mu < 0 \quad z = e^{\beta\mu} < 1 \quad (3.14)$$

- Jusqu'ici, nous avons considéré $\beta = 1/kT$ et z fixés. L'équation (3.13) donne alors les nombres moyens d'occupation des états E_p . Nous considérons maintenant un autre problème. On se donne N bosons en équilibre à la température T . Comment se répartissent-ils entre les niveaux E_p ? Comment

cette répartition varie-t-elle quand on change T ? III-3

- Si l'on ignore les fluctuations des nombres de particules autour de leurs valeurs moyennes, on peut utiliser les résultats de l'étude de l'ensemble grand canonique et écrire

$$N = \sum_P \bar{N}_P = \sum_P \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_P} - 1} \quad (3.15)$$

Dans l'équation (3.15), nous considérons maintenant N comme une donnée et z comme une inconnue que nous calculons à partir de cette équation en fonction de N et β . Une fois z déterminé, les \bar{N}_P sont calculés à partir de (3.13)

b) Calcul de $\sum_P \bar{N}_P$

Approximation du spectre continu - Difficulté rencontrée

- Si l'on applique l'approximation (3.11) pour le calcul de $\sum_P \bar{N}_P$ avec l'expression (3.12) de $\rho(x)$, la notation (3.8), on est conduit à calculer l'intégrale

$$I(z) = \int_0^\infty dx \rho(x) \frac{1}{z^{-1} e^x - 1} = \frac{V}{\lambda_{dB}^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \frac{z e^{-x}}{1 - z e^{-x}} \quad (3.16)$$

- Comme x est positif et que z est inférieur à 1, $z e^{-x} < 1$. On peut donc développer la fraction apparaissant dans (3.16)

$$\frac{z e^{-x}}{1 - z e^{-x}} = \sum_{l=1}^{\infty} (z e^{-x})^l \quad (3.17)$$

On obtient alors pour $I(z)$

$$I(z) = \frac{V}{\lambda_{dB}^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{l=1}^{\infty} z^l \int_0^\infty dx \sqrt{x} e^{-lx} = \frac{V}{\lambda_{dB}^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^{3/2}} \int_0^\infty du \sqrt{u} e^{-u} \quad (3.18)$$

- En utilisant $\int_0^\infty du \sqrt{u} e^{-u} = \Gamma(\frac{3}{2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ et en introduisant la "fonction de Bose"

$$g_{\frac{3}{2}}(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^{3/2}} \quad (3.19)$$

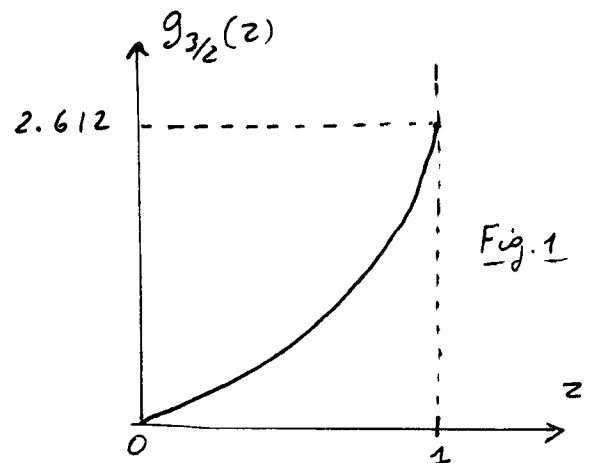
on obtient finalement

$$I(z) = \frac{V}{\lambda_{dB}^3} g_{\frac{3}{2}}(z)$$

- Les variations de $g_{\frac{3}{2}}(z)$ avec z sont représentées sur la figure 1.

$g_{\frac{3}{2}}(z)$ est une fonction croissante de z quand z varie entre 0 et 1.

Pour $z \ll 1$, $g_{\frac{3}{2}}(z) \sim z$. La valeur maximale de $g_{\frac{3}{2}}(z)$, atteinte en $z=1$, vaut :



III-4)

$$g_{3/2}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{3/2}} = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612 \quad (3.20)$$

où ζ est la "fonction de Riemann"

- Peut-on utiliser l'approximation du spectre continue pour calculer la somme discrète apparaissant dans (3.15) et écrire ainsi :

$$N \stackrel{?}{=} I(z) \quad (3.21)$$

On se heurte à la difficulté suivante. Comme $I(z) \leq 2.612$ dans l'intervalle $0 \leq z \leq 1$ permis pour z , on a toujours

$$I(z) \leq 2.612 \frac{V}{\lambda_{dB}^3} \quad (3.22)$$

Si donc

$$N \geq 2.612 \frac{V}{\lambda_{dB}^3} \quad (3.23)$$

c'est à dire encore si

$$n \lambda_{dB}^3 \geq 2.612 \quad (3.24)$$

où

$$n = \frac{N}{V} \quad (3.25)$$

est le nombre de particules par unité de volume, l'équation $N = I(z)$ n'a pas de solution correspondant à $0 \leq z \leq 1$. On n'arrive pas à répartir les N particules sur les niveaux individuels ϵ_p en suivant la statistique de Bose (3.15).

Critiques du traitement précédent

- L'approximation consistant à prendre une densité d'états continue $\rho(x) \propto \sqrt{x}$, revient à pondérer la contribution à N de l'état fondamental $\epsilon_0 = 0$ par $\rho(0) = 0$. On néglige donc ainsi la population \bar{N}_0 de l'état fondamental. Si cette population est du même ordre que celle des autres états, l'erreur commise en négligeant \bar{N}_0 est négligeable, compte tenu du nombre énorme d'états contribuant à la somme (3.15). Si par contre \bar{N}_0 devient macroscopique et de l'ordre d'une fraction non négligeable de N , il n'est bien sûr plus légitime de négliger \bar{N}_0 .

- l'expression exacte de \bar{N}_0 s'écrit compte tenu (3.13) et (3.3)

$$\bar{N}_0 = \frac{1}{z^{-1} - 1} = \frac{z}{1 - z} \quad (3.26)$$

Quand z tend vers 1, on voit que \bar{N}_0 prend des valeurs considérables. En particulier, \bar{N}_0 prend sa valeur maximale $\bar{N}_0 = N$ pour

$$z = 1 - \frac{1}{N} \rightarrow \bar{N}_0 = N \quad (3.27)$$

Traitement plus précis

- Un traitement plus précis consiste à séparer la contribution \bar{N}_0 de l'état fondamental ϵ_0 et à utiliser l'approximation du spectre continue pour tous les autres états. On obtient ainsi

$$N = \frac{z}{1 - z} + \frac{V}{\lambda_{dB}^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{x_1}^{\infty} dx \sqrt{x} \frac{z e^{-x}}{1 - z e^{-x}} \quad (3.28)$$

où $x_1 = \beta \epsilon_1$, ϵ_1 étant l'énergie du 1^{er} niveau excité

- Nous verrons plus loin qu'aux températures où l'inégalité (3.23) commence à être satisfaite, $x_1 \ll 1$, de sorte que l'on commet une erreur négligeable en étendant à 0 la borne inférieure de l'intégrale de (3.28). En utilisant les calculs précédents de $I(z)$ on obtient alors pour (3.28)

$$N = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(z) \tag{3.29}$$

c) Discussion physique

Phénomène de condensations - Température critique T_c

- Partons d'une température très élevée, la longueur d'onde de de Broglie étant très petite devant la distance moyenne entre particule $n^{-1/3}$. On a alors $n \lambda_{dB}^3 \ll 1$ et l'équation $N = \frac{V}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(z)$ a une solution $z \ll 1$ et le 1^{er} terme $\frac{z}{1-z}$ de (3.29), qui est petit devant 1, a une contribution négligeable (N est macroscopique!)

- Quand T décroît, λ_{dB} croît, et pour une certaine valeur $T = T_c$ de T , on a $T = T_c \rightarrow n \lambda_{dB}^3 = 2.612$ (3.30)

En utilisant l'expression (3.10) de λ_{dB} , on obtient aisément

$$k T_c = \frac{2\pi \hbar^2}{m} \left(\frac{n}{2.612} \right)^{2/3} \tag{3.31}$$

Pour cette valeur de T , le dernier terme de (3.29), $\frac{V}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(z)$, est égal à N pour la valeur maximale possible $z=1$ de z .

- Quand T est inférieure à T_c , λ_{dB} croît encore, et même pour $z=1$, le dernier terme de (3.29) est inférieur à N . C'est le 1^{er} terme $\frac{z}{1-z}$ qui fournit alors la population macroscopique manquante : z prend une valeur suffisamment proche de 1 (comme en 3.27) pour que \bar{N}_0 atteigne une valeur macroscopique. Notons par le fait que z ne soit pas tout à fait égal à 1 ne change pas la valeur du dernier terme de (3.29) puisque $g_{3/2}(z)$ est continue en $z=1$

- Conclusion : Quand N est fixe et qu'on diminue progressivement T , une population macroscopique \bar{N}_0 se condense dans l'état fondamental quand T devient inférieur à T_c

Variations avec T/T_c de la fraction condensée N_0/N

- Par définition même de T_c , on a

$$N = \frac{V}{\lambda_{dB}^3(T_c)} g_{3/2}(1) \tag{3.32}$$

- Par ailleurs, pour $T < T_c$, on peut écrire

$$N = N_0 + \frac{V}{\lambda_{dB}^3(T)} g_{3/2}(1), \quad T < T_c \quad (3.33)$$

- En éliminant $V g_{3/2}(1)$ entre (3.32) et (3.33) et en utilisant le fait que $\lambda_{dB}(T)$ est proportionnel à $T^{-1/2}$, on obtient

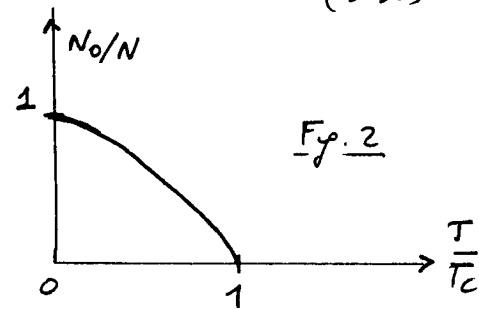
$$N = N_0 + \left[\frac{\lambda_{dB}(T_c)}{\lambda_{dB}(T)} \right]^3 N = N_0 + \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} N, \quad T \leq T_c \quad (3.34)$$

c'est à dire encore

$$\boxed{\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \quad \text{pour } T \leq T_c} \quad (3.35)$$

- Les variations de $\frac{N_0}{N}$ avec T/T_c sont représentées sur la figure 2.

$\frac{N_0}{N}$ qui est négligeable pour $T > T_c$, croît de 0 à 1 quand T décroît de T_c à 0



Comparaison de kT_c à l'écart δE entre premiers niveaux d'énergie

- La comparaison de (3.4) et (3.31) donne, en négligeant des facteurs de l'ordre de quelques unités

$$\frac{\delta E}{kT_c} \sim \frac{1}{L^2} n^{-2/3} = \frac{1}{L^2} \left(\frac{N}{L^3} \right)^{-2/3} = \frac{1}{N^{2/3}} \ll 1 \quad (3.36)$$

- La condensation de Bose-Einstein apparaît donc pour des températures T_c considérablement plus élevées que $\delta E/k$.

Par exemple pour $N \sim 10^6$, $kT_c \sim 10^4 \delta E$

Population des premiers niveaux excités en dessous du seuil de condensation

- Comparons N_0 à la population N_1 du premier niveau excité quand N_0 a atteint une valeur macroscopique, par exemple $N_0 = N/2$. On a alors, d'après (3.26)

$$\frac{z}{1-z} = \frac{N}{2} \quad \rightarrow \quad z \approx 1 - \frac{2}{N} \quad (3.37)$$

- Replaçons cette valeur de z l'expression de N_1 . En remplaçant $e^{-\beta E_1}$ par $1 - \beta E_1 = 1 - \beta \delta E$ (puisque $\delta E \ll kT$), on obtient

$$N_1 = \frac{z e^{-\beta E_1}}{1 - z e^{-\beta E_1}} \sim \frac{1}{1 - (1 - \frac{2}{N})(1 - \beta \delta E)} \sim \frac{1}{\frac{2}{N} + \beta \delta E} \quad (3.38)$$

Or $\beta \delta E \sim \frac{\delta E}{kT_c} \sim N^{-2/3}$ d'après (3.36). On a donc $\beta \delta E \ll \frac{2}{N}$ et donc

$$\frac{N_1}{N_0} \sim \frac{1}{\beta \delta E N} \sim \frac{N^{2/3}}{N} \sim \frac{1}{N^{1/3}} \ll 1 \quad (3.39)$$

En dessous du seuil de condensation, la population du niveau fondamental est donc considérablement plus élevée que celle du 1^{er} niveau excité. Même pour N aussi petit que 10^6 , $N_0 \sim 100 N_1$

$$T > T_c \quad N = \frac{V}{\lambda_{dB}^3(T)} g_{3/2}(z) \quad (3.40.a)$$

$$T = T_c \quad N = \frac{V}{\lambda_{dB}^3(T_c)} g_{3/2}(1) \quad (3.40.b)$$

$$T < T_c \quad N = N_0 + \frac{V}{\lambda_{dB}^3(T)} g_{3/2}(1) \quad (3.40.c)$$

- Quand $T > T_c$, le premier terme $N_0 = z/(1-z)$ de 3.29 est négligeable. L'inversion de 3.40.a donne z en fonction de N, V, T
- les équations (3.40.b) et (3.40.c) reprennent (3.32) et (3.33)

③ Étude des diverses grandeurs physiques

a) Grand potentiel J

- Calculons $\text{Log } Z_G = -\beta J$. D'après le § 6 du cours II (voir Eqs (2.53) et (2.60)), $Z_G = \prod_P \zeta_P^B$ où

$$\zeta_P^B = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_P - \mu)}} = \frac{1}{1 - z e^{-\beta \epsilon_P}} \quad (3.41)$$

On en déduit

$$\text{Log } Z_G = - \sum_P \text{Log}(1 - z e^{-\beta \epsilon_P}) \quad (3.42)$$

- Comme pour le calcul de N fait plus haut, nous séparons la contribution de l'état fondamental $\epsilon_0 = 0$ et utilisons l'approximation du spectre continu pour la contribution des autres états excités. Il vient :

$$\begin{aligned} \text{Log } Z_G &= - \text{Log}(1-z) - \sum_{P \neq 0} \text{Log}(1 - z e^{-\beta \epsilon_P}) \\ &= - \text{Log}(1-z) - \frac{V}{\lambda_{dB}^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{x_1}^{\infty} \text{Log}(1 - z e^{-x}) \sqrt{x} dx \end{aligned} \quad (3.43)$$

Comme $z e^{-x} < 1$, on peut développer le logarithme

$$\text{Log}(1 - z e^{-x}) = - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l e^{-lx}}{l} \quad (3.44)$$

ce qui donne

$$\text{Log } Z_G = - \text{Log}(1-z) + \frac{V}{\lambda_{dB}^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \int_{x_1}^{\infty} e^{-lx} \sqrt{x} dx \quad (3.45)$$

Comme plus haut, on peut étendre la borne inférieure de l'intégrale à 0 car $x_1 = \beta \epsilon_1 \ll 1$. L'intégrale vaut alors $e^{-3/2} \Gamma(3/2) = e^{-3/2} \sqrt{\pi}/2$, ce qui donne

$$\boxed{\text{Log } Z_G = - \text{Log}(1-z) + \frac{V}{\lambda_{dB}^3} g_{5/2}(z)} \quad (3.46)$$

où

$$g_{5/2}(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^{5/2}} \quad (3.47)$$

- Notons que

$$z \frac{d}{dz} g_{5/2}(z) = z \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^{l-1}}{l^{3/2}} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^{3/2}} = g_{3/2}(z) \quad (3.48)$$

de sorte que l'utilisation de l'équation (3.41) du cours II redonne pour

III-8) l'expression $N = z \frac{\partial}{\partial z} \log Z_G$ l'équation (3.29).

b) Energie totale U

- Utilisons l'équation (2.42) du cours II qui donne $U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_G$.
 Le seul endroit où apparaît β dans (3.46) est dans λ_{dB} qui
 varie en $1/\sqrt{T} \propto \sqrt{\beta}$. On a donc $d\lambda_{dB}/\lambda_{dB} = \frac{1}{2} d\beta/\beta$, ce qui donne

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_G = \frac{3V}{\lambda_{dB}^3} \frac{d\lambda_{dB}}{d\beta} g_{5/2}(z) = 3 \frac{V}{\lambda_{dB}^3} \frac{1}{2\beta} g_{5/2}(z) \quad (3.45)$$

c'est à dire encore

$$U = \frac{3}{2} kT \frac{V}{\lambda_{dB}^3(T)} g_{5/2}(z) \quad (3.50)$$

- Pour $T < T_c$

• On peut remplacer z par 1, ce qui fait apparaître

$$g_{5/2}(1) = \zeta(5/2) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{1}{\ell^{5/2}} = 1.341 \quad (3.51)$$

• Par ailleurs, on peut éliminer V entre (3.40.b) et (3.50), ce qui conduit à

$$U = \frac{3}{2} N kT \left[\frac{\lambda_{dB}(T_c)}{\lambda_{dB}(T)} \right]^3 \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} \quad T < T_c$$

$$= \frac{3}{2} N kT \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \frac{1.341}{2.612} = 0.770 N kT \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \quad (3.52)$$

En dessous de T_c , U varie donc en $T^{5/2}$.

- Pour $T > T_c$

• On peut éliminer $\frac{V}{\lambda_{dB}^3}$ entre (3.40.a) et (3.50), ce qui donne

$$U = \frac{3}{2} N kT \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \quad T > T_c \quad (3.53)$$

• Pour $T \gg T_c$, on a $z \ll 1$ et les développements (3.19) et (3.47) de $g_{3/2}$ et $g_{5/2}$ se réduisent à leur premier terme, z de sorte que $g_{5/2}(z)/g_{3/2}(z) \rightarrow 1$ si $z \rightarrow 0$. On a donc

$$T \gg T_c \rightarrow U = \frac{3}{2} N kT \quad (3.54)$$

qui est l'expression habituelle de l'énergie d'un gaz parfait classique

• Notons en passant que pour $T \gg T_c$, on obtient, en remplaçant $g_{3/2}(z)$ par z dans (3.40.a), une expression simple de z

$$T \gg T_c \rightarrow z = \frac{N}{V} \lambda_{dB}^3(T) = n \lambda_{dB}^3(T) \quad (3.55)$$

c) Pression P

- D'après l'expression (2.43) du cours II, on a, compte tenu de (3.46) :

$$P = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \log Z_G = \frac{1}{\beta} \frac{1}{\lambda_{dB}^3(T)} g_{5/2}(z) \quad (3.56)$$

- La comparaison de (3.50) et (3.56) donne la relation générale III-9

$$\boxed{U = \frac{3}{2} PV} \quad (3.57)$$

- Pour $T < T_c$,

- On peut remplacer z par 1 dans (3.56). P ne dépend plus que de T et est indépendant de N et V . En utilisant (3.51) et l'expression (3.10) de λ_{dB} , on obtient

$$P = 1.341 \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (kT)^{5/2} \quad T < T_c \quad (3.58)$$

- L'interprétation d'un tel résultat est la suivante : Les particules condensées, d'énergie nulle, ne contribuent pas à la pression. Seules les particules non condensées, dont le nombre d'occupation moyen ne dépendent que de T et de z (qui vaut ici 1) interviennent dans P .

- Pour $T > T_c$

- On peut utiliser l'expression (3.53) de U . La relation générale (3.57) donne alors

$$P = \frac{NkT}{V} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \quad T > T_c \quad (3.59)$$

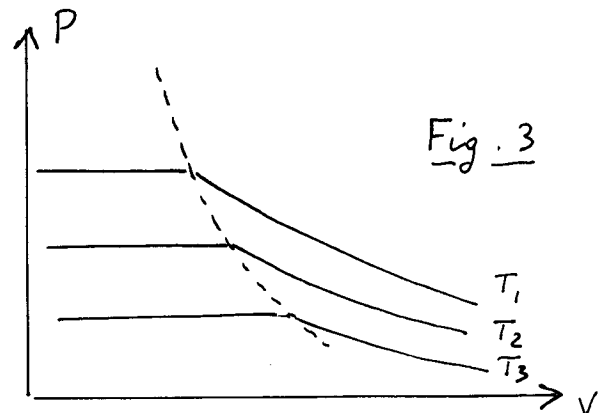
- Pour $T \gg T_c$, $z \rightarrow 0$, $g_{5/2}(z)/g_{3/2}(z) \rightarrow 1$ et on retrouve l'expression classique

$$P = \frac{NkT}{V} \quad T \gg T_c \quad (3.60)$$

- Isothermes $P = f(V)$

- Partons de N particules dans un volume V très grand, de sorte que $n\lambda_{dB}^3 \ll 1$, et diminuons lentement V à T fixé. D'après (3.60) qui est valable pour V très grand, P croît.
- Pour une certaine valeur V_c de V , $n\lambda_{dB}^3$ atteint la valeur critique 2.612. Si l'on continue à diminuer V , on est dans le régime critique ou T devient inférieure à la température critique calculée à partir de N et V . P reste alors constant puisque P ne dépend alors que de T d'après (3.58) et que nous considérons ici une isotherme.

- On obtient ainsi pour diverses valeurs de T un réseau d'isothermes, avec des paliers de condensation qui rappellent beaucoup les isothermes de changement d'état d'un corps pur (équilibre liquide vapeur).



d) Chaleur spécifique à volume constant C_V

- Rappelons la définition de C_V

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V} \quad (3.61)$$

$\partial U / \partial T$ doit être calculé à N et V constants

- Pour $T \gg T_c$, l'équation (3.5) donne

$$T \gg T_c \quad C_V = \frac{3}{2} Nk \quad (3.62)$$

qui est la valeur bien connue pour un gaz parfait classique

- Pour $T < T_c$

• U ne dépend que de T (voir (3.52)), de sorte que :

$$T < T_c \quad C_V = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} Nk \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \quad (3.63)$$

C_V croît en $T^{3/2}$ à partir de 0.

• En particulier, pour $T = T_c$, C_V atteint la valeur

$$C_V(T_c) = \frac{15}{4} \frac{1.341}{2.612} Nk = 1.925 Nk \quad (3.64)$$

qui est plus grande que la valeur $1.5 Nk$ atteinte pour $T \gg T_c$.

- Pour $T > T_c$, il faut utiliser (3.53)

• Dans la dérivation par rapport à T , il faut prendre garde au fait que, N et V étant fixés, z est une fonction de T .

On a donc

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V} = \frac{3}{2} Nk \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} + \frac{3}{2} Nk T \left[\frac{\partial}{\partial z} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right] \frac{\partial z}{\partial T} \quad (3.65)$$

• Calcul de $\partial z / \partial T$

N et V étant fixés, l'équation (3.40.a), valable pour $T > T_c$, donne

$$\frac{\partial g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(z)} = \frac{3 \partial \lambda_{dB}(T)}{\lambda_{dB}(T)} = -\frac{3}{2} \frac{\partial T}{T} \quad (3.66)$$

d'où l'on déduit

$$\frac{\partial g_{3/2}(z)}{\partial T} = -\frac{3}{2T} g_{3/2}(z) \quad (3.66)$$

Par ailleurs, un calcul analogue à celui conduisant à (3.48) donne

$$z \frac{\partial}{\partial z} g_{3/2}(z) = g_{1/2}(z) \quad (3.67)$$

où
$$g_{1/2}(z) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^{\ell}}{\ell^{1/2}} \quad (3.68)$$

De $\frac{\partial g_{3/2}(z)}{\partial T} = \frac{\partial g_{3/2}(z)}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial T}$, on déduit alors, compte tenu de (3.66) et (3.67) :

$$\frac{\partial z}{\partial T} = - \frac{3z}{2T} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \quad (3.69) \quad \text{III-11}$$

• Calcul de C_V

$$\frac{d}{dz} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} = \frac{\frac{d}{dz} g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}^2(z)} \frac{d}{dz} g_{3/2}(z) \quad (3.70)$$

En reportant (3.70) et (3.69) dans (3.65), et en utilisant (3.48) et (3.67), on obtient

$$C_V = Nk \left[\frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \right] \quad (3.71)$$

- Quand $T \rightarrow T_c$ par valeurs supérieures, on doit faire $z = 1$ dans (3.71) pour obtenir $C_V(T_c + \epsilon)$. Par ailleurs, la série (3.68) est divergente pour $z = 1$, de sorte que $g_{1/2}(1) = \infty$ et le dernier terme de (3.71) s'annule. On a donc

$$C_V(T_c + \epsilon) = Nk \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} \quad (3.72)$$

ce qui coïncide avec la valeur $C_V(T_c - \epsilon)$ de C_V quand T tend vers T_c par valeurs inférieures (voir (3.64)). On en déduit que C_V est continue en $T = T_c$

Par contre, le calcul de $\partial C_V / \partial T$, que nous ne détaillerons pas ici montre que $\partial C_V / \partial T$ est discontinue en $T = T_c$

- Tous les résultats précédents sur les variations avec T de $C_V(T)$ sont regroupés sur la figure 4

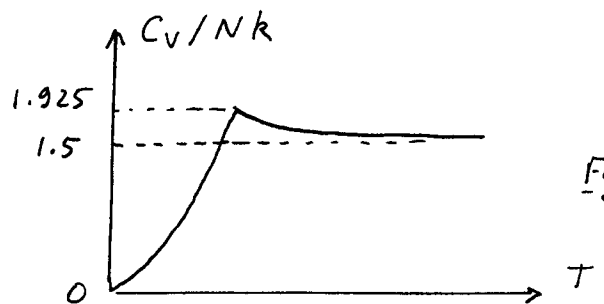


Fig. 4

Addendum : Pression P_0 exercée par les atomes condensés III-12

- La dérivée partielle par rapport à V de l'expression (3.46) de $\log Z_G$, ne fait apparaître qu'une seule contribution, celle de la 2^{ème} terme de (3.46), relative aux N_0 atomes dans des états excités. Cela veut-il dire que les N_0 atomes condensés ne contribuent pas à P ?
- Pour répondre à cette question, il faut prendre des conditions aux limites plus réalistes que les conditions aux limites périodiques utilisées dans ce qui précède. En effet, les particules n'exercent une pression que si elles sont confinées par des parois réfléchissantes. L'énergie de l'état fondamental E_0 n'est alors plus nulle. Elle dépend de L , donc de $V = L^3$ et les N_0 particules condensées dans l'état fondamental apportent bien une contribution P_0 à la pression totale P , que nous allons maintenant évaluer. Notons bien cependant que la contribution des atomes dans des états excités ne change pas car, comme nous l'avons déjà mentionné, la densité d'états (pour les états excités) est pratiquement la même que l'on prenne des conditions aux limites périodiques ou des parois réfléchissantes.

- Nouvelle expression de E_0

$$\psi_0 \propto \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{\pi y}{L} \sin \frac{\pi z}{L} \quad (3.73)$$

$$\hookrightarrow E_0 = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{m L^2} \quad (3.74)$$

On peut encore considérer que cette énergie de l'état fondamental est l'énergie de point 0 liée au confinement des coordonnées de l'atome sur des distances de l'ordre de L

- Il est clair maintenant que E_0 dépend de L , donc de $V = L^3$. Nous noterons $E_0(V)$ une telle énergie

- Nouvelle expression de $\log Z_G$. Dans la contribution de l'état fondamental, il faut maintenant utiliser $z e^{-\beta E_0(V)}$ et non z (avec $E_0 = 0$, on avait plus haut $e^{-\beta E_0} = 1$)

$$\log Z_G = -\log(1 - z e^{-\beta E_0(V)}) + \text{Contribution des états excités} \quad (3.74)$$

- Contribution P_0 (à la pression) des N_0 atomes condensés

$$\begin{aligned} P_0 &= kT \frac{\partial}{\partial V} \left[-\log(1 - z e^{-\beta E_0(V)}) \right] \\ &= kT \frac{z e^{-\beta E_0(V)}}{1 - z e^{-\beta E_0(V)}} (-\beta) \frac{dE_0(V)}{dV} \end{aligned} \quad (3.75)$$

On voit apparaître dans (3.75) le nombre N_0 de particules condensées

$$N_0 = \frac{z e^{-\beta E_0}}{1 - z e^{-\beta E_0}} \quad (3.76)$$

de sorte que P_0 s'écrit :

III-13

$$P_0 = - N_0 \frac{dE_0}{dV} \quad (3.77)$$

L'interprétation de (3.77) est très claire : quand on fait varier lentement la longueur d'une des arêtes de la boîte, le travail $-P \delta L_x$ de la force qui il faut exercer représente la variation $N_0 dE_0$ de l'énergie de N_0 particules.

- Ordres de grandeur

D'après (3.74), et en ignorant des facteurs numériques de l'ordre de 1

$$E_0 \propto \frac{\hbar^2}{mL^2} = \frac{\hbar^2}{mV^{2/3}} \quad (3.78)$$

de sorte que

$$\frac{dE_0}{dV} \propto - \frac{\hbar^2}{mV^{5/3}} \propto - \frac{E_0}{V} \quad (3.79)$$

En reportant (3.79) dans (3.77), on obtient :

$$P_0 \propto N_0 \frac{E_0}{V} = \frac{N_0}{V} E_0 \propto n E_0 \quad (3.80)$$

Si l'on revient à (3.59) et qu'on prend $T \sim T_c$, on voit que la contribution P_e , à la pression, des états excités vaut

$$P_e \propto \frac{N}{V} k T_c = n k T_c \quad (3.81)$$

Comme $E_0 \sim \delta E$ (voir (3.4)), on obtient finalement, compte tenu de (3.36)

$$\frac{P_0}{P_e} \propto \frac{n E_0}{n k T_c} \propto \frac{\delta E}{k T_c} \propto \frac{1}{N^{2/3}} \quad (3.82)$$

A la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N/V = \text{cte}$), on voit donc que P_0 est négligeable devant P_e , ce qui justifie a posteriori le calcul fait plus haut avec des conditions aux limites périodiques.

Buts de ce cours

- Étendre l'étude du cours III à des bosons sans interactions piégés dans un potentiel extérieur $U(\vec{r})$. On considèrera surtout des pièges harmoniques
- Souligner les différences avec le cas des bosons contenus dans une boîte. Montrer en particulier l'existence d'une condensation spatiale.
- Étudier sur des cas simples des corrections liées au nombre fini de particules et des problèmes de dimension inférieure à 3.

① Quelques résultats généraux à la limite semiclassique

Limite semiclassique

- La condensation de Bose-Einstein apparaît à des températures T_c telles que $kT_c \gg \delta E$ où δE est l'écart entre niveaux d'énergie. Ce résultat, établi pour des bosons dans une boîte [voir (3.36)] demeure valable dans un piège. Un grand nombre de niveaux sont alors peuplés et on peut donc, pour calculer la population totale des états excités, remplacer les sommes discrètes par des intégrales, avec une densité d'états $\rho(E)$ continue
- Dans ce §1, nous établissons quelques résultats généraux valables quel que soit $U(\vec{r})$, dans le cadre de cette approximation semiclassique.

Densité d'états $\rho(E)$

- A l'approximation semiclassique, on peut considérer qu'il existe un état quantique pour chaque cellule de l'espace des phases de volume $h^3 = (2\pi\hbar)^3$. Le nombre $F(E)$ d'états d'énergie inférieure à E est donc égal à

$$F(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iint d^3r d^3p \chi\left(E - \frac{\vec{p}^2}{2m} - U(\vec{r})\right) \quad (4.1)$$

où χ est la fonction saut : $\chi(u) = 1$ si $u > 0$ $\chi(u) = 0$ si $u < 0$

- A partir de $F(E)$ on peut calculer la densité d'états $\rho(E)$ en écrivant $\rho(E)dE = F(E+dE) - F(E)$, ce qui donne, compte tenu de $d\chi(u)/du = \delta(u)$:

$$\rho(E) = \frac{dF(E)}{dE} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iint d^3r d^3p \delta\left(E - \frac{\vec{p}^2}{2m} - U(\vec{r})\right) \quad (4.2)$$

- L'intégrale sur \vec{p} de (4.2) se calcule aisément (voir Appendice A page V-10 du cours 1996-97). On trouve :

$$\rho(E) = \frac{(2\pi)(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \int_{U(\vec{r}) \leq E} d^3r \sqrt{E - U(\vec{r})} \quad (4.3)$$

Densité spatiale $n(\vec{r})$

- Pour $T \geq T_c$, le nombre total de particules s'écrit :

$$N = \int_0^\infty dE \rho(E) f(E) \quad (4.4)$$

où $f(E)$ est le nombre moyen d'occupation des états d'énergie E

$$f(E) = \frac{ze^{-\beta E}}{1 - ze^{-\beta E}} = \sum_{l=1}^{\infty} z^l e^{-l\beta E} \quad (4.5)$$

- En reportant (4.2) et (4.5) dans (4.4) on obtient :

IV-2]
$$N = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{l=1}^{\infty} z^l \iint d^3r d^3p e^{-l\beta U(\vec{r})} e^{-l\beta \vec{p}^2/2m} \quad (4.6)$$

L'intégrale sur \vec{p} est élémentaire et fait apparaître la longueur d'onde de de Broglie λ_{dB} [voir (3.10)]. On obtient $N = \int d^3r n(\vec{r})$ avec :

$$n(\vec{r}) = \frac{1}{\lambda_{dB}^3} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^{3/2}} e^{-lU(\vec{r})/kT} = \frac{1}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(z e^{-U(\vec{r})/kT}) \quad (4.7)$$

où $g_{3/2}(z)$ est la fonction de Bose (3.19)

Limite $T \gg T_c$. On a alors $z \ll 1$ et $g_{3/2}(z) \approx z$ de sorte que

$$n(\vec{r}) \approx \frac{1}{\lambda_{dB}^3} z e^{-U(\vec{r})/kT}, \quad T \gg T_c \quad (4.8)$$

Si l'on suppose que le minimum de $U(\vec{r})$ est en $\vec{r} = \vec{0}$ et si l'on prend ce minimum comme zéro d'énergie, on a $U(\vec{0}) = 0$ et donc $n(\vec{0}) \approx z/\lambda_{dB}^3$, de sorte qu'on peut récrire (4.8) sous la forme

$$T \gg T_c \quad n(\vec{r}) \approx n(\vec{0}) e^{-U(\vec{r})/kT} \quad (4.9)$$

Seuil de condensation $T = T_c$. On a alors $z = 1$

En faisant $z = 1$, $\vec{r} = \vec{0}$ dans (4.7), et en utilisant $U(\vec{0}) = 0$, on obtient

$$T = T_c \quad n(\vec{0}) \lambda_{dB}^3 = g_{3/2}(1) = 2.612 \quad (4.10)$$

La condensation de Bose-Einstein apparaît donc quand la densité au fond du piège $n(\vec{0})$ atteint la valeur critique donnée par (4.10), c'est à dire la même valeur que pour des bosons dans une boîte. Ce résultat est valable quel que soit $U(\vec{r})$.

L'intérêt des pièges est de concentrer les particules au fond du piège et d'atteindre plus rapidement le seuil que dans une boîte où la densité est uniforme

② Piège harmonique à 3 dimensions

a - Calcul de la densité d'états

- Dans le cas général d'un piège anisotrope, on a

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{2} m [\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2] \quad (4.11)$$

En reportant (4.11) dans (4.3) et en effectuant le changement de variables

$$\frac{1}{2} m \omega_1^2 x^2 = \xi^2 \quad \frac{1}{2} m \omega_2^2 y^2 = \eta^2 \quad \frac{1}{2} m \omega_3^2 z^2 = \zeta^2 \quad (4.12)$$

on obtient, après des calculs sans difficultés

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{2\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} \epsilon^2 \quad (4.13)$$

- Dans le cas d'un oscillateur isotrope, $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$ et on a

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{2(\hbar\omega)^3} \epsilon^2 \quad (4.14)$$

Nous retrouverons plus loin (§ 3a) l'expression (4.14) par une autre méthode, ainsi qu'une expression plus précise de $\rho(\epsilon)$.

b. Etude simple du phénomène de condensation

IV-3

Nombre de particules dans des états excités N_e

- Prenons l'énergie de l'état fondamental comme zéro d'énergie. Comme $p(\epsilon) \propto \epsilon^2$ s'annule en $\epsilon=0$, l'expression semiclassical (4.4) ne contient pas le nombre N_0 de particules dans l'état fondamental et représente plutôt le nombre N_e de particules dans des états excités. En reportant (4.13) dans (4.4), en utilisant (4.5) et en effectuant le changement de variables $\beta\epsilon = x$, on obtient:

$$N_e = \frac{1}{2} \frac{(kT)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^3} \underbrace{\int_0^{\infty} dx x^2 e^{-x}}_{=\Gamma(3)=2} = \frac{(kT)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} g_3(z) \quad (4.15)$$

où
$$g_3(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^3} \quad (4.16)$$

- En toute rigueur, la borne inférieure de l'intégrale de (4.15) devrait être $\beta\hbar\omega_i$ (où ω_i est la plus petite des 3 fréquences $\omega_1, \omega_2, \omega_3$). Mais comme l'intégrale est convergente et que $\beta\hbar\omega_i \ll 1$ (nous le verrons plus loin), l'erreur commise en prenant la borne inférieure à 0 est négligeable.

Température critique T_c - Nombre de particules condensées N_0

- La fugacité z varie dans l'intervalle $[0, 1]$. Dans cet intervalle, la fonction de Bose $g_3(z)$ est une fonction croissante de z et reste donc inférieure à sa valeur maximale

$$g_3(1) = \zeta(3) = 1.2 \quad (4.17)$$

- Quand on diminue T à partir d'une valeur élevée, le nombre total N de particules restant constant, on atteint une valeur critique de T , $T=T_c$, pour laquelle le nombre total N de particules est égal à la valeur maximale possible $(N_e)_{\max}$ de N_e atteinte pour $z=1$

$$N = \frac{(kT_c)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} g_3(1) \quad (4.18)$$

Si l'on diminue T en dessous de T_c , les états excités ne peuvent accueillir toutes les particules et l'excès de particules se condense dans l'état fondamental, dont la population $N_0 = z/(1-z)$ devient macroscopique. La fugacité z est alors très proche de 1; on peut la remplacer par 1 dans l'expression de la somme sur les états excités puisque $g_3(z)$ est continue en $z=1$. On obtient ainsi

$$T \leq T_c \quad N = \frac{z}{1-z} + \frac{(kT)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} g_3(1) \quad (4.19)$$

- En remplaçant $z/(1-z)$ par N_0 dans (4.19) et en réexprimant $g_3(1)/\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3$ à partir de N et T_c grâce à (4.18), on obtient

$$N = N_0 + \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 N \quad (4.20)$$

c'est à dire encore

$$\boxed{\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \quad \text{pour } T \leq T_c} \quad (4.21)$$

équation qui est l'équivalent de (3.35)

IV.4]

- Supposons pour simplifier l'oscillateur isotrope : $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$.
L'équation (4.18) donne :

$$\frac{\hbar\omega}{kT_c} \approx N^{-1/3} \ll 1 \quad (4.22)$$

Au seuil de condensation, kT_c est donc lui aussi très petit devant l'écart entre niveaux. Un calcul analogue à celui de la page III-7 donne aussi :

$$\frac{N_1}{N_0} \approx \frac{1}{\beta \hbar \omega N} \sim \frac{N^{1/3}}{N} = \frac{1}{N^{2/3}} \ll 1 \quad (4.23)$$

En dessous du seuil de condensation, la population N_1 du 1^{er} niveau excité est très petite devant celle du niveau fondamental N_0 .

C. Fonction de partition - Energie totale

Calcul de $\log Z_G$

- Comme pour le calcul de N , on sépare la contribution de l'état fondamental et celle des états excités, cette dernière contribution étant approximée par une intégrale. Compte tenu de (2.56), on obtient :

$$\log Z_G = -\log(1-z) - \frac{1}{2} \frac{(kT)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} \int_0^\infty dx x^2 \log(1-z e^{-x}) \quad (4.24)$$

Comme $z e^{-x} < 1$, on peut développer le logarithme en série [voir (3.44)]
L'intégrale sur x fait apparaître $\int_0^\infty dx x^2 e^{-lx} = \Gamma(3)/l^3 = 2/l^3$, de sorte qu'il vient finalement

$$\log Z_G = -\log(1-z) + \frac{(kT)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} g_4(z) \quad (4.25)$$

avec

$$g_4(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^4} \quad (4.26)$$

Calcul de U

- L'équation (2.42) du cours II donne, compte tenu de (4.25) :

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_G = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \log Z_G = 3kT \frac{(kT)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} g_4(z) \quad (4.27)$$

- Pour $T \leq T_c$, on peut remplacer z par 1 dans $g_4(z)$ qui vaut alors $g_4(1) = 1.082$

$$T \leq T_c \quad U = 3kT \frac{(kT)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} g_4(1) \quad (4.28)$$

L'élimination de $\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3$ entre (4.18) et (4.28) donne

$$T \leq T_c \quad U = 3NkT \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \frac{g_4(1)}{g_3(1)} \quad (4.29)$$

- Pour $T \geq T_c$, N_0 est négligeable devant la population totale excitée N_e donnée en (4.15). En remplaçant N_e par N dans (4.15), et en éliminant $(kT)^3 / \hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3$ entre (4.15) et (4.27), on obtient

$$T > T_c \quad U = 3NkT \frac{g_4(z)}{g_3(z)} \quad (4.30)$$

- Pour $T \gg T_c$, $z \ll 1$, $g_4(z) \approx g_3(z) \approx z$. On retrouve l'expression classique

$$T \gg T_c \quad U \approx 3NkT \quad (4.31)$$

($kT/2$ pour chacun des 6 degrés de liberté d'énergie cinétique et d'énergie potentielle). 11V-5

d. Chaleur spécifique

- Il n'est pas question ici d'introduire une chaleur spécifique à volume constant (ou à pression constante), car la notion de volume n'est pas bien définie pour des atomes piégés. La chaleur spécifique C est donc définie par

$$C = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_N \quad (4.32)$$

- A partir de (4.29) et (4.30), on obtient alors :

$$T \leq T_c \quad C = 12 N k \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \frac{g_4(1)}{g_3(1)} \quad (4.33)$$

$$T > T_c \quad C = 3 N k \frac{\partial}{\partial T} \left[T \frac{g_4(z)}{g_3(z)} \right] \quad (4.34)$$

$$= 3 N k \left\{ \frac{g_4(z)}{g_3(z)} + T \left[\frac{d g_4(z)/dz}{g_3(z)} - \frac{g_4(z) d g_3(z)/dz}{(g_3(z))^2} \right] \frac{dz}{dT} \right\}$$

- Le calcul de dz/dT dans (4.34) se fait comme dans le § 3d du cours III. Pour $T > T_c$, on remplace N_c par N dans (4.15). Par différentiation, il vient

$$\frac{d g_3(z)}{dz} = - \frac{3 dz}{T} \quad (4.35)$$

Par ailleurs, la généralisation de (3.67) s'écrit

$$z \frac{d}{dz} g_3(z) = g_2(z) \quad (4.36)$$

où $g_2(z) = \sum_{\ell=1}^{\infty} z^{\ell}/\ell^2$. A partir de (4.35) et (4.36), on obtient $\frac{dz}{dT} = - \frac{3z}{T} \frac{g_3(z)}{g_2(z)}$, ce qui, reporté dans (4.34), donne, compte tenu de $z \frac{d}{dz} g_4(z) = g_3(z)$:

$$T > T_c \quad C = 3 N k \left[4 \frac{g_4(z)}{g_3(z)} - 3 \frac{g_3(z)}{g_2(z)} \right] \quad (4.37)$$

- Quand T tend vers T_c par valeurs inférieures, on obtient d'après (4.33)

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} C(T_c - \eta) = 12 N k \frac{g_4(1)}{g_3(1)} \quad (4.38)$$

Quand T tend vers T_c par valeurs supérieures, il faut utiliser (4.37). A la différence de ce qui se passait pour (3.71), le dénominateur $g_2(z)$ de la 2^{ème} fraction du crochet de (4.37) ne tend pas vers l'infini quand $z \rightarrow 1$, car $g_2(1)$ est fini. On a donc

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} C(T_c + \eta) = 3 N k \left[\frac{4 g_4(1)}{g_3(1)} - \frac{3 g_3(1)}{g_2(1)} \right] \quad (4.39)$$

- Les 2 limites (4.38) et (4.39) ne sont pas égales. A la différence de ce qui se passe pour des bosons sans interactions dans une boîte, la chaleur spécifique d'un gaz parfait de bosons dans un piège harmonique subit en $T = T_c$ une discontinuité égale à

$$\Delta C = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} [C(T_c - \eta) - C(T_c + \eta)] = 9 N k \frac{g_3(1)}{g_2(1)} = 6.576 N k \quad (4.40)$$

- Pour $T \gg T_c$, on obtient, en utilisant $g_4(z) \simeq g_3(z) \simeq g_2(z) \simeq z$, le résultat classique

$$T \gg T_c \quad C = 3 N k \quad (4.41)$$

e - Condensation spatiale

- Considérons pour simplifier un piège isotrope. Les particules condensées dans l'état fondamental ont toutes la même fonction d'onde d'extension spatiale Δx_0

$$\Delta x_0 \sim \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (4.42)$$

- Les particules non condensées forment un nuage thermique dont l'extension Δx_T se déduit de l'équation

$$\frac{1}{2} m \omega^2 \Delta x_T^2 \sim \frac{1}{2} kT \quad (4.43)$$

ce qui donne

$$\Delta x_T \sim \sqrt{\frac{kT}{m}} \frac{1}{\omega} \quad (4.44)$$

- On en déduit, au voisinage de $T = T_c$

$$\frac{\Delta x_0}{\Delta x_T} \sim \sqrt{\frac{\hbar\omega}{kT}} \sim \sqrt{\frac{\hbar\omega}{kT_c}} \quad (4.45)$$

- Or, d'après (4.18), où l'on remplace $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ par ω

$$kT_c \sim \hbar\omega N^{1/3} \quad (4.46)$$

On en déduit

$$\frac{\Delta x_0}{\Delta x_T} \sim N^{-1/6} \quad (4.47)$$

- A la limite $N \rightarrow \infty$, le pic des particules condensées est donc beaucoup plus étroit que le fond thermique de particules non condensées, et la condensation de Bose-Einstein apparaît sous forme d'une condensation spatiale très nette. Par exemple, pour $N = 10^6$, Δx_0 est environ 10 fois plus petit que Δx_T .

f - Limite thermodynamique

- La limite thermodynamique est obtenue en faisant tendre N vers l'infini. Il y a condensation de Bose-Einstein si T_c ne tend pas vers 0 lors d'une telle limite. D'après (4.46), il faut faire tendre également ω vers 0 quand $N \rightarrow \infty$, en gardant $\omega N^{1/3}$ constant

$$N \rightarrow \infty, \quad \omega \rightarrow 0 \quad \text{avec} \quad N\omega^3 = \text{cte} \quad (4.48)$$

- L'interprétation physique de (4.48) est très claire. Comme, d'après (4.45), l'extension du nuage thermique varie en $1/\omega$, la condition $N\omega^3 = \text{cte}$ signifie que la densité moyenne du nuage, de l'ordre de $N/(\Delta x_T)^3$, reste constante quand on augmente N

- La même idée, à savoir que la densité moyenne reste constante quand on fait tendre N vers l'infini, s'applique également au cas des particules dans une boîte. D'après (3.40.b), $\lambda_{dB}(T_c)$, et donc T_c , restent constants quand $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow 0$ avec $\frac{N}{V} = \text{cte}$

Références : Seront données à la fin du cours V

③ Corrections dues au nombre fini de particules

a - Expressions plus précises pour la densité d'états et le nombre de particules excités.

- Là aussi, nous nous limitons pour simplifier à un piège isotrope. Si l'on prend pour zéro d'énergie l'énergie de l'état fondamental, les valeurs propres E_n des Hamiltoniens \hat{h} à 1 particule valent :

$$E_n = n \hbar \omega = (n_x + n_y + n_z) \hbar \omega \quad (5.1)$$

où n_x, n_y, n_z sont des entiers ≥ 0 .

- La dégénérescence g_n de la valeur propre E_n est égale à

$$g_n = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \quad (5.2)$$

En effet, n_x peut prendre $n+1$ valeurs : $0, 1, \dots, n$. Pour chaque valeur de n_x , n_y peut prendre $n - n_x + 1$ valeurs, variant de 0 à $n - n_x$, n_z étant alors fixé à la valeur $n - n_x - n_y$. On a donc

$$g_n = \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = \sum_{n'=0}^n (n'+1) = \sum_{n''=1}^{n+1} n'' = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \quad (5.3)$$

- Si l'on remplace la fonction à variable discrète g_n par une densité d'états $\rho(E)$, fonction continue de l'énergie E , on obtient, en utilisant $E = n \hbar \omega$ et $\rho(E) dE = g_n dn$

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{dn}{dE} g_n = \frac{1}{\hbar \omega} \frac{(n+1)(n+2)}{2} \\ &= \frac{1}{2 \hbar \omega} \left[\frac{E}{\hbar \omega} + 1 \right] \left[\frac{E}{\hbar \omega} + 2 \right] = \frac{1}{2} \frac{E^2}{(\hbar \omega)^3} + \frac{3}{2} \frac{E}{(\hbar \omega)^2} + \frac{1}{\hbar \omega} \end{aligned} \quad (5.4)$$

Le 1^{er} terme du 2^{ème} membre de (5.4), $\frac{1}{2} \frac{E^2}{(\hbar \omega)^3}$, est celui déjà calculé en (4.14). Le 2^{ème} terme, $\frac{3}{2} \frac{E}{(\hbar \omega)^2}$, représente une correction dont nous allons maintenant calculer l'effet.

- Si l'on reporte ce terme correctif dans l'expression (4.15) de N_e (avec $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$), on obtient une correction ΔN_e à N_e :

$$\Delta N_e = \frac{3}{2} \left(\frac{kT}{\hbar \omega} \right)^2 \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^\ell}{\ell^2} \underbrace{\int_0^{\infty} du u e^{-u}}_{= \Gamma(2) = 1} = \frac{3}{2} \left(\frac{kT}{\hbar \omega} \right)^2 g_2(z) \quad (5.5)$$

En regroupant (4.15) et (5.5), et en ajoutant la population $N_0 = \frac{z}{1-z}$ de l'état fondamental, on obtient une expression plus précise du nombre total N de particules

$$N = \frac{z}{1-z} + \left(\frac{kT}{\hbar \omega} \right)^3 g_3(z) + \frac{3}{2} \left(\frac{kT}{\hbar \omega} \right)^2 g_2(z) \quad (5.6)$$

Le dernier terme de (5.6), qui provient de (5.5), est plus petit que le second par un facteur $\hbar \omega / kT \ll 1$

V-2) b - Déplacement de la température critique T_c

- Définissons, de manière un peu arbitraire, T_c par la relation

$$T = T_c \quad \leftrightarrow \quad N_e(z=1) = N \quad (5.7)$$

- Si l'on néglige le dernier terme de (5.6), N_e se réduit au 2^{ème} terme de (5.6) et on obtient une valeur $T_c^{(0)}$ de la température critique égale, d'après (4.18), à

$$kT_c^{(0)} = \frac{1}{2} \hbar \omega \left[\frac{N}{g_3(1)} \right]^{1/3} \quad (5.8)$$

- La prise en compte du dernier terme de (5.6) introduit une correction $\Delta T_c = T_c - T_c^{(0)}$. Un calcul perturbatif simple de ΔT_c donne, à partir de (5.6) et (5.8)

$$kT_c = kT_c^{(0)} - \frac{1}{2} \frac{g_2(1)}{g_3(1)} \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (5.9)$$

c'est à dire encore, compte tenu de (5.8)

$$\frac{T_c}{T_c^{(0)}} = 1 - \frac{1}{2} \frac{g_2(1)}{[g_3(1)]^{2/3}} \frac{1}{N^{1/3}} = 1 - 0.727 \frac{1}{N^{1/3}} \quad (5.10)$$

Le fait que N soit fini entraîne donc une diminution de la température critique. Par exemple, pour $N=1000$, l'abaissement relatif de T_c est de l'ordre de 7%.

c - Comparaison avec des calculs numériques.

- La simplicité du spectre énergétique d'un oscillateur harmonique isotrope permet d'obtenir des expressions compactes et exactes. Partons de

$$\bar{N}_j = \frac{z e^{-\beta \epsilon_j}}{1 - z e^{-\beta \epsilon_j}} = \sum_{l=1}^{\infty} z^l e^{-\beta l \epsilon_j} \quad (5.11)$$

avec $\epsilon_j = (n_x + n_y + n_z) \hbar \omega \quad (5.12)$

On obtient

$$\sum_j \bar{N}_j = \sum_{n_x} \sum_{n_y} \sum_{n_z} \sum_{l=1}^{\infty} z^l e^{-\beta l (n_x + n_y + n_z) \hbar \omega} \quad (5.13)$$

Par ailleurs,

$$\sum_{n_x} \sum_{n_y} \sum_{n_z} e^{-\beta l (n_x + n_y + n_z) \hbar \omega} = \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta l n \hbar \omega} \right]^3 = \left[\frac{1}{1 - e^{-\beta l \hbar \omega}} \right]^3 \quad (5.14)$$

de sorte que

$$\sum_j \bar{N}_j = N = \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\frac{1}{1 - \kappa^l} \right)^3 \quad (5.15)$$

avec $\kappa = e^{-\hbar \omega / kT} \quad (5.16)$

- Pour chaque valeur de T , donc de κ , on peut à partir de (5.15) calculer numériquement à partir de la série (5.15) la courbe donnant N en fonction de z . Si l'on se donne N , on peut alors déterminer la valeur correspondante de z , et donc celle de $N_0 = \frac{z}{1-z}$. On peut ainsi tracer point par point la courbe $N_0/N = f(T/T_c^0)$ où

$T_c^{(0)}$ est donné par (5.8)

- La figure 1, extraite de la référence 11 donne les résultats d'un tel calcul

La courbe en traits pleins correspond à $N = 100$, la courbe en tirets courts à $N = 1000$, la courbe en tirets longs à $N = 10^4$, la courbe en pointillés à $N = \infty$. La figure inférieure est un agrandissement de la région $T \approx T_c^{(0)}$.

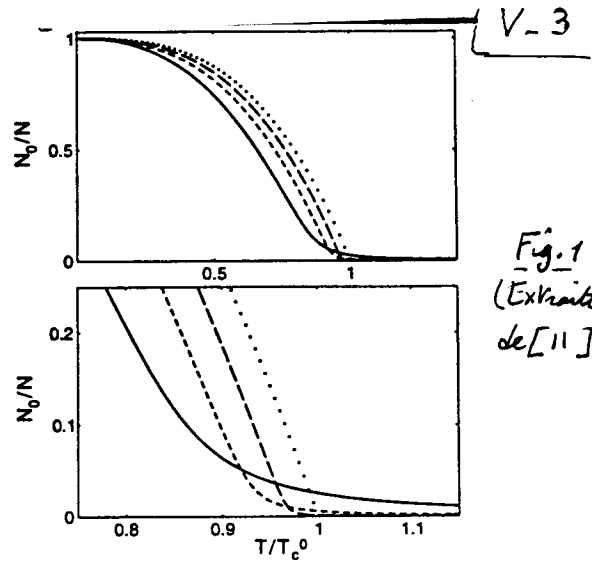


Fig. 1
(Extrait de [11])

Il apparaît très clairement que le fait d'avoir un nombre fini N de particules "arrondi" les variations de N_0/N au voisinage de $T/T_c^{(0)} = 1$ et déplace les courbes vers la gauche.

C'est uniquement à la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$, lorsque la formule (4.21) est valable, que N_0/N croît brutalement à partir de 0 quand $T/T_c^{(0)}$ devient inférieur à 1

Remarque : La formule (5.15) se généralise aisément au cas d'un piège harmonique anisotrope. On obtient :

$$\sum_j \bar{N}_j = N = \sum_{l=1}^{\infty} z^l \prod_{i=1,2,3} \frac{1}{1 - (K_i)^l} \quad (5.17)$$

où $K_i = e^{-\hbar \omega_i / RT} \quad i = 1, 2, 3 \quad (5.18)$

- Il est possible aussi d'étudier numériquement la variation de C avec T pour des valeurs finies de N . La figure 2, extraite de la référence 14 montre les résultats d'une telle étude pour un piège harmonique anisotrope

Fig. 2 (extraite de 14)

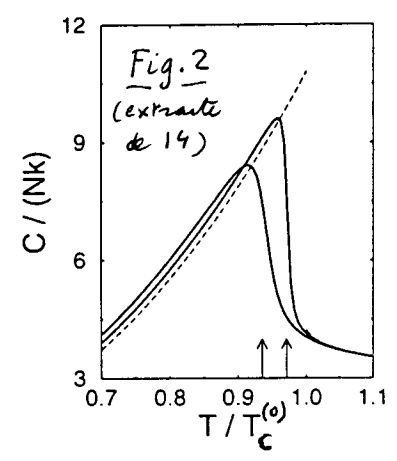
Variations de C/Nk en fonction de T/T_c

Les 2 courbes en traits pleins correspondent à des valeurs finies de N

$N = 2000$ (courbe de gauche)

$N = 20000$ (courbe de droite)

La courbe en traits tiretés correspond à la limite $N \rightarrow \infty$



Il ressort de cette étude que la discontinuité de C en $T = T_c$ n'apparaît qu'à la limite thermodynamique. Pour N fini, C est continue, mais varie de plus en plus rapidement au voisinage de T_c quand N croît.

④ Problèmes de dimension inférieure à 3

a - Piège harmonique à 2 dimensions

- Les calculs sont très analogues à ceux faits dans le § 2 pour un piège harmonique à 3 dimensions. Nous ne les détaillons pas et donnons simplement les résultats en nous limitant à un piège isotrope

Dégénérescence des niveaux d'énergie - Densité d'états

$$E_n = n \hbar \omega \quad n = n_x + n_y \quad (5.19)$$

$$\text{Dégénérescence } g_n \text{ de } E_n \quad g_n = n + 1 \quad (5.20)$$

$$\text{Densité d'états } \rho(E) \quad \rho(E) = \frac{E}{(\hbar \omega)^2} \quad (5.21)$$

(terme prépondérant)

Nombre de particules excitées N_e et condensées N_0

$$\begin{aligned} \bullet N_e &= \left(\frac{kT}{\hbar \omega}\right)^2 \int_0^\infty dx x \frac{z e^{-x}}{1 - z e^{-x}} = \left(\frac{kT}{\hbar \omega}\right)^2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^2} \underbrace{\int_0^\infty du u e^{-u}}_{\Gamma(2)=1} \\ &= \left(\frac{kT}{\hbar \omega}\right)^2 g_2(z) \end{aligned} \quad (5.22)$$

$$\bullet g_2(1) = 1.465 \text{ voir jini}$$

$$\bullet \text{Température critique } T_c \quad N = \left(\frac{kT_c}{\hbar \omega}\right)^2 g_2(1) \quad (5.23)$$

$$\begin{aligned} \bullet \text{Pour } T \leq T_c \quad N &= N_0 + \left(\frac{kT}{\hbar \omega}\right)^2 g_2(1) \\ &= N_0 + \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 N \end{aligned} \quad (5.24)$$

$$\bullet \frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \quad (5.25)$$

$$\bullet \text{Pour } T > T_c \quad N = \left(\frac{kT}{\hbar \omega}\right)^2 g_2(z) \quad (5.26)$$

$$\text{Log } Z_G \quad \text{Log } Z_G = -\text{Log}(1-z) + \left(\frac{kT}{\hbar \omega}\right)^2 g_3(z) \quad (5.27)$$

Energie U

$$U = 2kT \left(\frac{kT}{\hbar \omega}\right)^2 g_3(z) \quad (5.28)$$

$$T \leq T_c \quad U = 2NkT \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \frac{g_3(1)}{g_2(1)} \quad (5.29)$$

$$T > T_c \quad U = 2NkT \frac{g_3(z)}{g_2(z)} \quad (5.30)$$

$$T \gg T_c \quad U = 2NkT \quad (5.31)$$

Chaleur spécifique

V-5

$$T < T_c \quad C = 6Nk \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \frac{g_3(1)}{g_2(1)} \quad (5.32)$$

$$T > T_c \quad C = 2Nk \left[3 \frac{g_3(z)}{g_2(z)} - 2 \frac{g_2(z)}{g_1(z)} \right] \quad (5.33)$$

Quand T tend vers T_c par valeurs supérieures, z tend vers 1. Comme $g_1(1)$ est infini, le deuxième terme du crochet de (5.33) tend vers 0. On trouve alors que C tend vers la même limite, $6Nk \frac{g_3(1)}{g_2(1)}$, que T tende vers T_c par valeurs supérieures ou inférieures. C est donc continue en $T = T_c$.

Conclusion : On trouve des résultats très analogues au cas du piège 3D. La seule différence importante est le comportement de C au voisinage de T_c : C est discontinue pour le piège 3D, continue pour le piège 2D.

Notons enfin que la limite thermodynamique correspond ici à $N \rightarrow \infty$, $\omega \rightarrow 0$ avec $N\omega^2 = \text{cte}$ pour avoir la densité au centre du nuage thermique $\frac{N}{(\Delta\omega)^2}$ et $N\omega^2$ constante. On vérifie alors sur (5.23) que T_c ne tend pas vers 0 dans une telle limite.

Comment réaliser concrètement un piège harmonique 2D ?

On part d'un piège 3D très anisotrope avec

$$\omega_3 \gg \omega_1 = \omega_2 \quad (5.34)$$

et on se place à température T suffisamment basse pour que

$$kT \ll \hbar\omega_3 \quad (5.35)$$

le degré de liberté correspondant à ω_3 est alors gelé.

Il faut bien sûr vérifier ensuite que la température critique T_c correspondant à la condensation 2D vérifie bien (5.35).

b. Piège harmonique à 1 dimension

Nous allons voir que, dans ce cas, T_c s'annule à la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$, $\omega \rightarrow 0$ avec $N\omega = \text{cte}$.

Densité d'états $\rho(\epsilon)$

Les valeurs propres, $\epsilon_n = n\hbar\omega$ avec $n = 0, 1, 2, \dots$, sont non dégénérées et un calcul simple donne pour $\rho(\epsilon)$

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{\hbar\omega} \quad (5.36)$$

$\rho(\epsilon)$ est constant et ne dépend pas de ϵ .

V-6

Nombre de particules excitées N_e et condensées N_0

$$N_e = \frac{kT}{\hbar\omega} \int_{x_{\min} = \frac{\epsilon_{\min}}{kT}}^{\infty} dx \frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}} \quad (5.37)$$

On ne peut plus maintenant prendre égale à 0 la borne inférieure de l'intégrale, ce qui est possible quand l'intégrale converge et que $\int_0^{x_{\min}}$ donne une contribution négligeable. On voit en effet sur (5.37) que l'intégrale diverge logarithmiquement à sa borne inférieure quand $z = 1$.

Comme $\rho(\epsilon)$ n'est plus nul en $\epsilon = 0$, il faut commencer l'intégrale à une valeur non nulle de ϵ (ou de $x = \epsilon/kT$) pour ne tenir compte que des états excités. Comme l'énergie du 1^{er} état excité est $\hbar\omega$, correspondant à $x_1 = \hbar\omega/kT$, on pourrait prendre $x_{\min} = x_1$. En fait, d'autres manières plus précises d'évaluer la somme discrète et de la remplacer par une intégrale, montrent qu'on obtient une meilleure approximation de la somme discrète en prenant dans (5.37) $x_{\min} = \hbar\omega/2kT$ (voir références 11 et 15). De toutes façons, la divergence à la borne inférieure n'étant que logarithmique, les résultats obtenus sont peu sensibles à la valeur exacte de la borne inférieure, pourvu que cette borne soit supérieure à 0. On obtient ainsi

$$\begin{aligned} N_e &= \frac{kT}{\hbar\omega} \int_{\frac{\hbar\omega}{2kT}}^{\infty} dx \frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}} = \frac{kT}{\hbar\omega} \sum_{l=1}^{\infty} z^l \int_{\frac{\hbar\omega}{2kT}}^{\infty} dx e^{-lx} \\ &= \frac{kT}{\hbar\omega} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(ze^{-\hbar\omega/2kT})^l}{l} = -\frac{kT}{\hbar\omega} \text{Log} \left[1 - ze^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}} \right] \end{aligned} \quad (5.38)$$

Température critique

Nous prenons toujours la définition (5.7), ce qui donne :

$$N = -\frac{kT_c}{\hbar\omega} \text{Log} \left[1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT_c}} \right] \quad (5.39)$$

Comme $\hbar\omega \ll kT_c$, on peut développer $1 - e^{-\hbar\omega/2kT_c}$, ce qui conduit à la relation

$$N = \frac{kT_c}{\hbar\omega} \text{Log} \frac{2kT_c}{\hbar\omega} \quad (5.40)$$

Nombre de particules condensées

Pour $T < T_c$, on a toujours $z \approx 1$, et $N_e = \frac{kT}{\hbar\omega} \text{Log} \frac{2kT}{\hbar\omega}$ n'est plus égal à N . L'excès de particules se condense dans l'état fondamental, ce qui donne

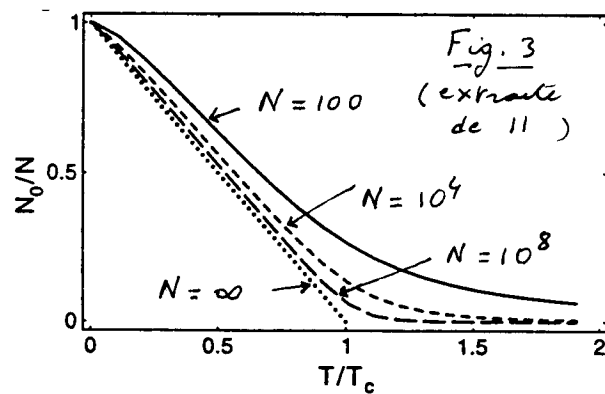
$$N = N_0 + \frac{kT}{\hbar\omega} \text{Log} \frac{2kT}{\hbar\omega} \quad (5.41)$$

En combinant (5.40) et (5.41), on obtient

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{T}{T_c} \frac{\text{Log}(2kT/\hbar\omega)}{\text{Log}(2kT_c/\hbar\omega)} \quad (5.42)$$

Evolution des phénomènes pour des valeurs croissantes de N

- La figure 3, extraite de [11], donne la courbe $\frac{N_0}{N} = f\left(\frac{T}{T_c}\right)$ pour diverses valeurs de N
 $N = 10^2, 10^4, 10^8, \infty$



On voit que l'établissement d'une population macroscopique N_0 au voisinage de $T = T_c$ est d'autant plus brutal que N est grand. Les variations de N_0/T avec T/T_c sont alors quasi-linéaires.

- La figure 4 de la référence (15) montre, pour une valeur donnée de N, la comparaison entre les résultats d'un calcul numérique exact de la somme discrète sur les états de l'oscillateur harmonique et diverses approximations de cette somme discrète : celle consistant à la remplacer par une intégrale avec $x_{min} = \hbar\omega/2kT$ comme borne inférieure ; celle consistant à utiliser la formule de Euler-Mac Laurin pour évaluer une somme discrète

$$\sum_{n=a}^b f(n) = \int_a^b f(x) dx + \frac{1}{2}[f(b)+f(a)] + \frac{1}{12}[f'(b)-f'(a)] + \dots \quad (5.43)$$

On constate que l'approximation utilisée dans (5.38) est très bonne et que celle consistant à partir de (5.43) (en gardant les 3 termes du 2^{ème} membre) est encore meilleure.

Limite thermodynamique

- Comme $kT_c \gg \hbar\omega$ et que $\text{Log } u \ll u$ si $u \gg 1$, on peut approximer (5.40) par $N = (kT_c/\hbar\omega) \text{Log } 2N$, ce qui donne

$$\frac{kT_c}{\hbar\omega} \approx \frac{N}{\text{Log } N} \rightarrow kT_c \approx \frac{N \hbar\omega}{\text{Log } N} \quad (5.44)$$

- On voit que, dans la limite $N \rightarrow \infty, \omega \rightarrow 0$ avec $N\omega = \text{cte}$, la présence de $\text{Log } N$ au dénominateur de (5.44) entraîne que $T_c \rightarrow 0$

- En fait, les expériences sont réalisées avec N fini. On voit sur la figure 3 que pour N suffisamment grand, une population macroscopique peut apparaître dans l'état fondamental de manière assez brutale. Les expériences récentes sur les alcalins donnent donc un intérêt à toute une série de problèmes de statistique quantique avec un nombre fini de particules.

Boîtes à 2 dimensions

- Considérons de nouveau des bosons sans interactions dans une boîte. Mais nous considérons maintenant une boîte 2D ; carré de côté L , de surface $S = L^2$, avec des conditions aux limites périodiques.

- On calcule aisément la densité d'états $\rho(E)$ et on trouve que c'est une constante, indépendante de E . Les calculs sont donc très voisins de ceux faits plus haut pour un piège harmonique 1D et l'équivalent de (5.40) est

$$N = 2 \left[\frac{L}{\lambda_{dB}(T_c)} \right]^2 \text{Log} \frac{L}{\lambda_{dB}(T_c)} \quad (5.45)$$

Comme $L \gg \lambda_{dB}$, on peut remplacer $\text{Log} [L/\lambda_{dB}(T_c)]$ par $\frac{1}{2} \text{Log} N$

ce qui montre que $\left[\frac{1}{\lambda_{dB}(T_c)} \right]^2$ est proportionnel à $\frac{N}{L^2 \text{Log} N}$ et tend donc vers 0 quand $N \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$ avec $N/L^2 = \text{cte}$. Il en est de même de T_c . Il n'y a donc pas de condensation de Bose Einstein dans une boîte 2D à la limite thermodynamique.

Références (suite des pages (I-11), (II-10))

- 9 - S.R. de Groot, G.J. Hooyman and C.A. ten Seldam, Proc. Roy. Soc. London, A203, 266 (1950)
- 10 - V. Bagnato, D.E. Pritchard and D. Kleppner, Phys. Rev. A35, 4354 (1987)
V. Bagnato and D. Kleppner, Phys. Rev. A44, 7439 (1991)
- 11 - W. Ketterle and N.J. van Druten, Phys. Rev. A54, 656 (1996)
- 12 - R. Mosut and W.J. Mullin, Am. J. Phys. 47, 493 (1979)
- 13 - W.J. Mullin, J. Low. Temp. Phys. 106, 615 (1997)
- 14 - S. Grossmann and A. Holthaus, Phys. Lett. A208, 188 (1995)
- 15 - T. Hanzel, H. Hangerud and J.O. Andersen, Phys. Rev. A55, 2922 (1997)
- 16 - H. Hangerud, T. Hanzel and F. Ravndal, Phys. Lett. A225, 18 (1997)
- 17 - N.J. van Druten and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. 79, 549 (1997)

Cette dernière référence contient une étude intéressante sur une possibilité de condensation en 2 étapes dans un piège harmonique 3D très anisotrope.

25.11.97

Condensation de Bose-Einstein d'atomes alcalins
ultrafroids et piégés - Premières observations expérimentales

(VI-1)

Buts de ce cours

Passer en revue et décrire de manière succincte les premières mises en évidence expérimentales de la condensation de Bose-Einstein sur des milieux dilués (gaz d'atomes alcalins ultrafroids et piégés)

La plupart des effets observés peuvent être interprétés, au moins de manière qualitative, au moyen de la théorie de la condensation de Bose-Einstein d'un gaz de bosons sans interactions décrite précédemment. D'autres expériences ont été réalisées depuis, mettant en évidence des effets liés aux interactions entre bosons. Elles seront décrites et analysées dans des cours ultérieurs.

Plan

- 1 - Généralités : Transparents T1 à T4
Séquence expérimentale - Evaporation RF
- 2 - Expériences sur le rubidium (Boulder) : Transparents T5 à T.13
- 3 - Expériences sur le sodium (MIT) : Transparents T14 à T22
- 4 - Expériences sur le lithium (Texas) : Transparent T23

Références (suite des pages I-11, II-10, V-8)

- 18 - D. Pritchard, K. Helmerson, A. Martin, in *Atomic Physics 11*, ed. by S. Haroche, J.C. Gay, G. Grynberg, (World Scientific, 1989), p. 179
- 19 - M. Anderson, J. Ensher, M. Matthews, C. Wieman, E. Cornell, *Science*, 269, 198 (1995)
- 20 - C. Wieman, E. Cornell, D. Jin, J. Ensher, M. Matthews, C. M. Myatt, E. Burt, R. Christ, in *Atomic Physics*⁽¹⁵⁾, ed. by H. van Linden van den Heuvell, J. Walraven, M. Reynolds (World scientific, 1997), p. 132
- 21 - J. Ensher, D. Jin, M. Matthews, C. Wieman, E. Cornell
Phys. Rev. Lett. 77, 4984 (1996)
- 22 - K. Davis, M.O. Mewes, M. Andrew, N.J. van Druten, D. Durfee, D. Kurn, W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* 75, 3969 (1995)
- 23 - C. Townsend, N.J. van Druten, M. Andrews, D. Durfee, D. Kurn, M.O. Mewes, W. Ketterle, in *Atomic Physics 15* (même référence qu'en 20), p. 192
- 24 - M.O. Mewes, M. Andrews, N. J. van Druten, D. Kurn, D. Durfee, W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* 77, 416 (1997)
- 25 - C. Bradley, C. Sackett, J. Tollett, R. Hulet
Phys. Rev. Lett. 75, 1687 (1995)
- 26 - C. Bradley, C. Sackett, P. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* 78, 985 (1997)

V1-2

T1

Séquence temporelle d'une expérience

1 - Refroidissement et piégeage laser d'atomes dans une mélasse ou un piège magneto-optique (à partir d'un jet ralenti ou d'une vapeur)

$T \sim$ quelques μK , $N \sim 10^7$ à 10^8 atomes

2 - Coupure des faisceaux laser et branchement d'un piège magnétique
Adaptation des volumes de piégeage
Compression du piège magnétique

3 - Evaporation radiofréquence.

On diminue lentement ω_{rf} pour rester à la valeur optimale de $\eta = E_t/kT$

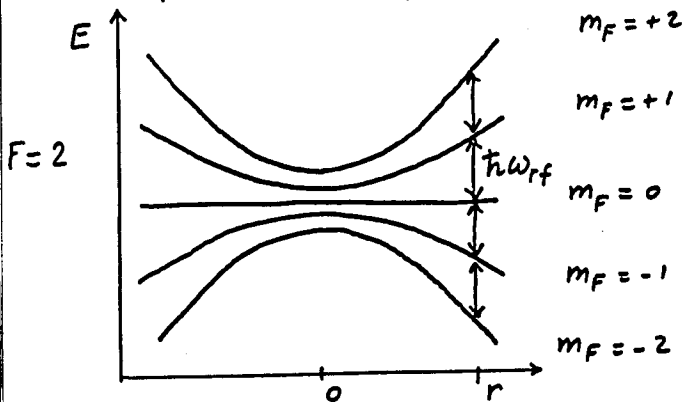
4 - Détection optique de la distribution de position et de vitesse, après une phase d'expansion ballistique pour augmenter la taille du nuage atomique

Absorption ou dispersion

T2

Evaporation radiofréquence (ref 18)

Energie des sous-niveaux $|F, m_F\rangle$ dans un champ \vec{B}_0 inhomogène (piège)



L'écart entre sous-niveaux $m_F, m_F \pm 1$ est résonnant avec un champ RF de fréquence ω_{rf} en tous les points r d'une surface

En ces points, transferts de l'atome des sous-niveaux piégeants $m_F = +1, +2$ vers les sous-niveaux non piégeants

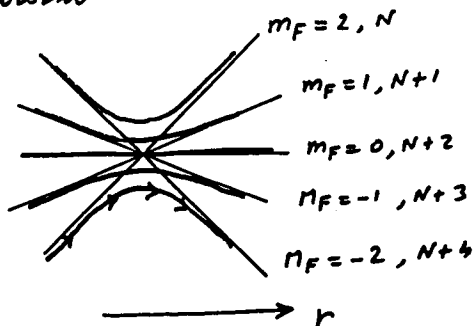
Possibilité de choisir la valeur de ω_{rf} , de balayer ω_{rf} au cours de l'évaporation

T3

Niveaux "habillés" et surfaces de potentiel adiabatiques

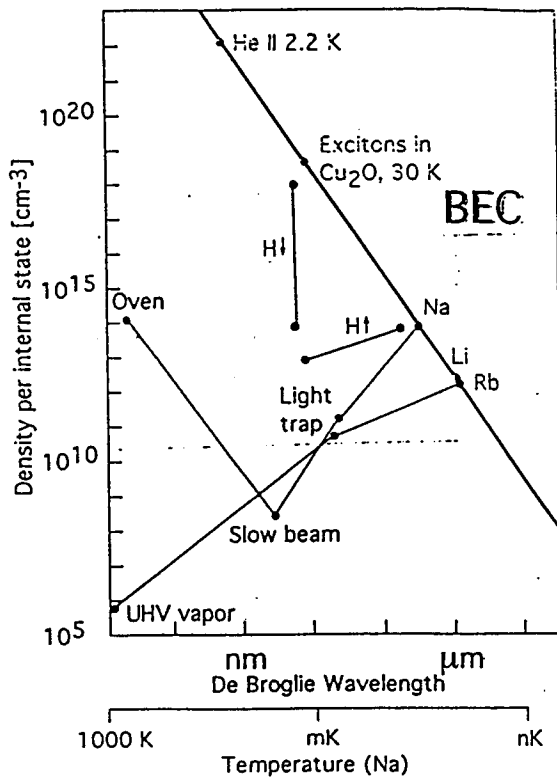
- Au voisinage du point r où le champ RF est résonnant, les énergies des sous-niveaux $|m_F=2, N\rangle, |m_F=1, N+1\rangle, |m_F=0, N+2\rangle, |m_F=-1, N+3\rangle, |m_F=-2, N+4\rangle$ (N : nombre de photons RF) varient linéairement avec r , en l'absence de couplage atome-photon RF.

- Le couplage atome-photon RF transforme ces états non couplés en niveaux habillés qui s'anticroisent

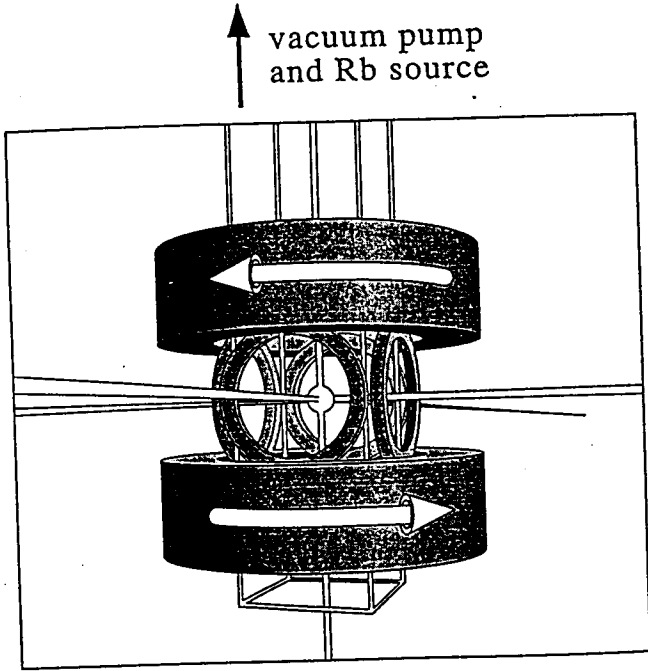


Un atome initialement dans $m_F = 2$ et s'éloignant suffisamment lentement du centre du piège sort adiabatiquement du piège dans l'état $m_F = -2$

T4

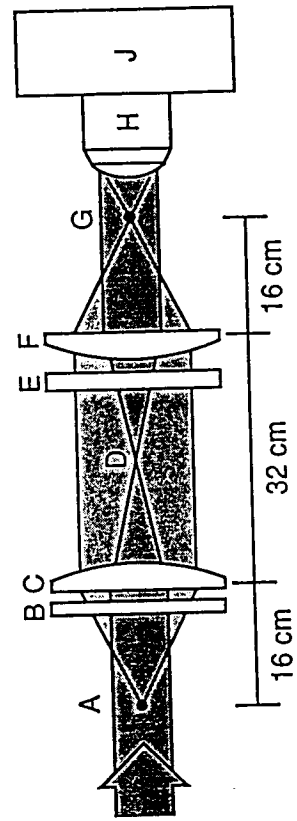


T5

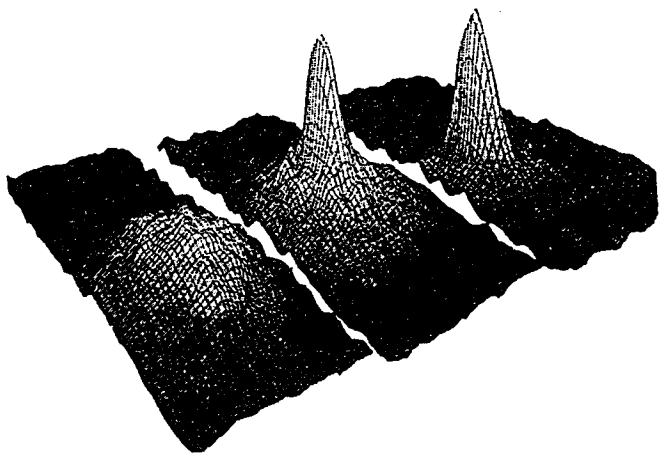


VI-3

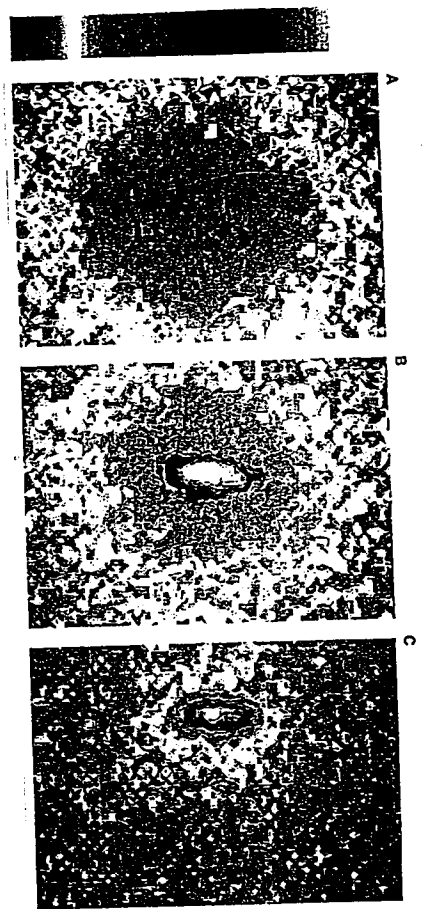
T6



T7

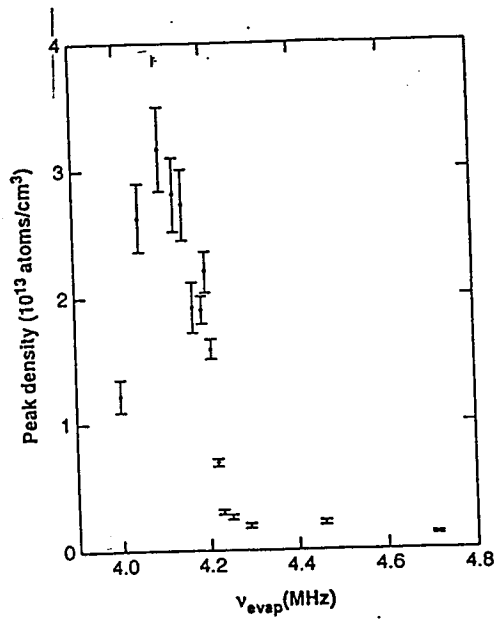


T8

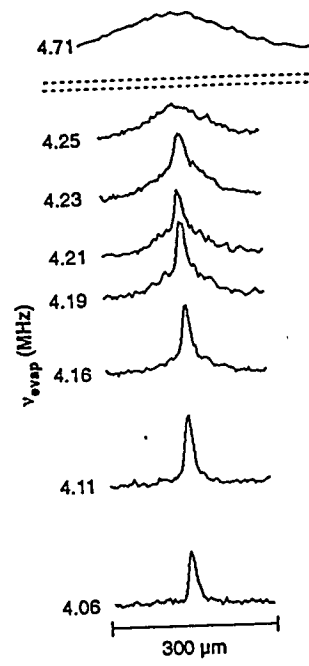


V1-4

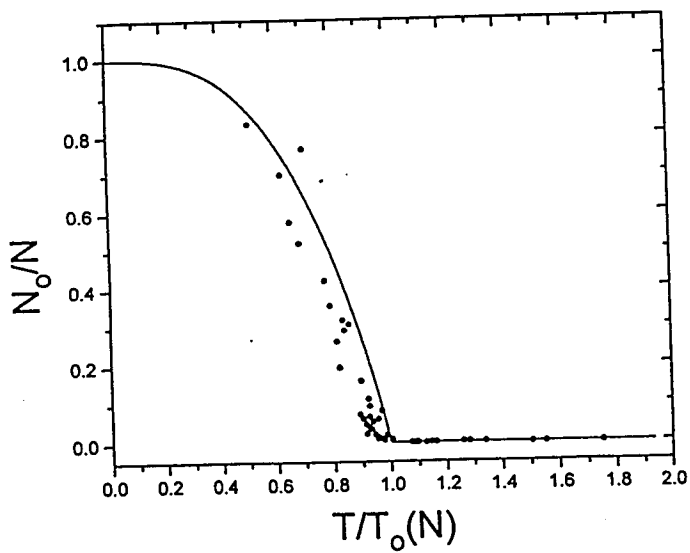
T9



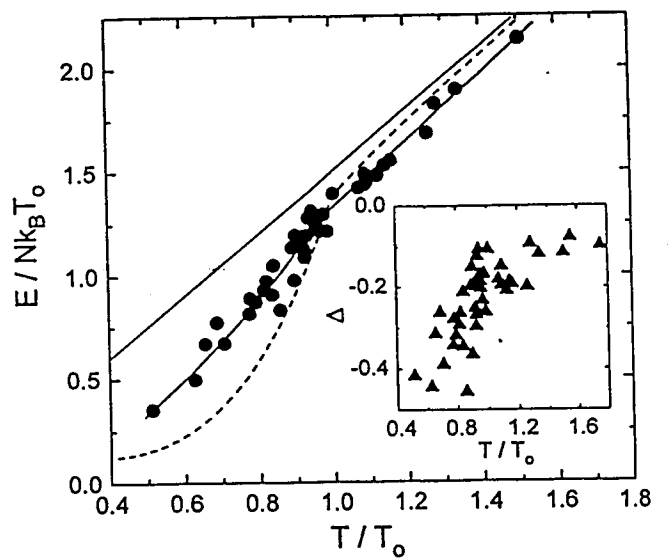
T10



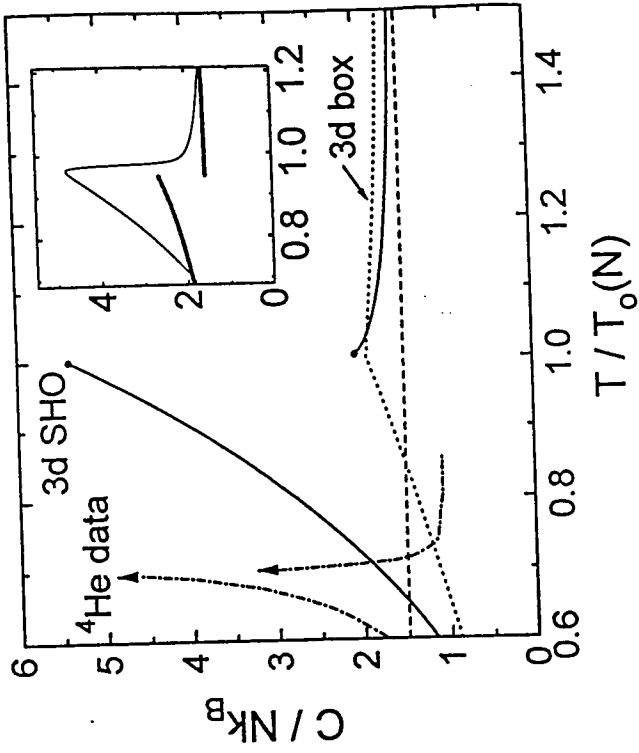
T11



T12

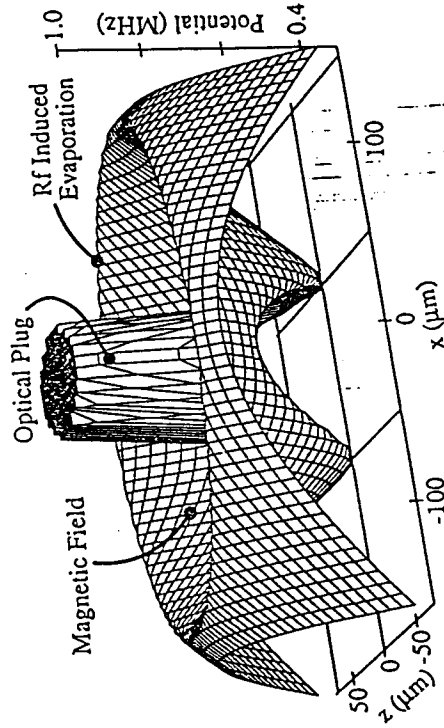


T13



T14

Le "bouchon optique"

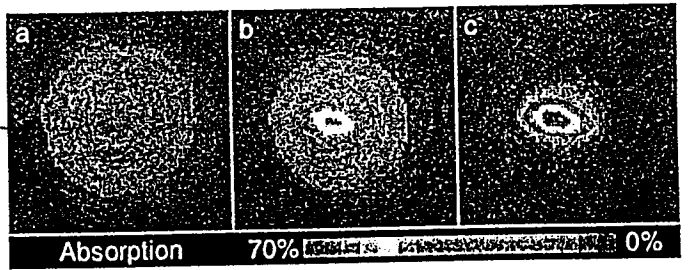


K. Davis, M. Mewes, M. Andrews, N. van Druten
 D. Durfee, D. Kurn, W. Ketterle
 Phys. Rev. Lett. 75, 3969 (1995)

T15

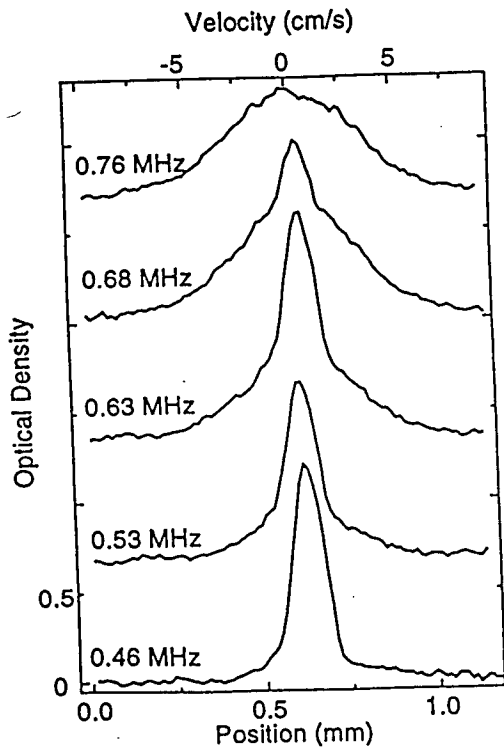


T16

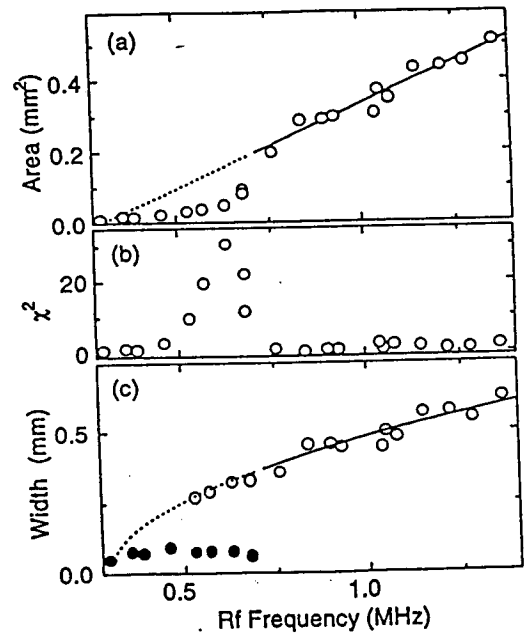


VI-6

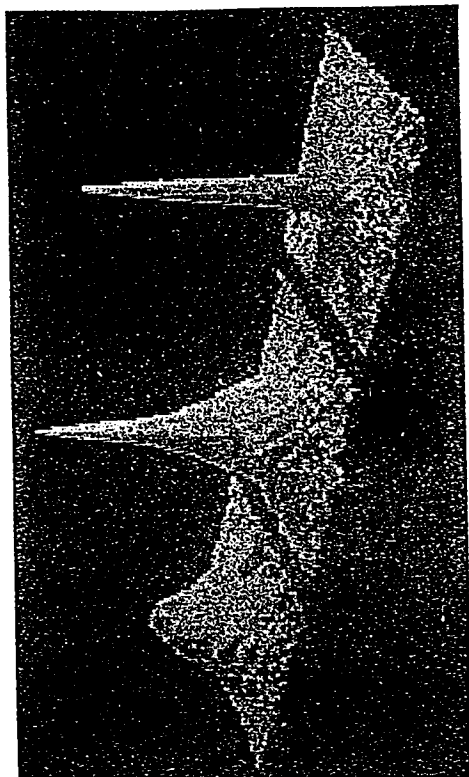
T 17



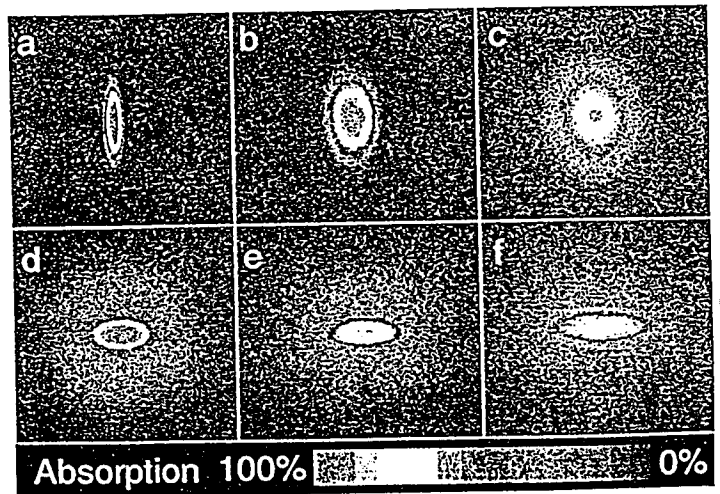
T 18



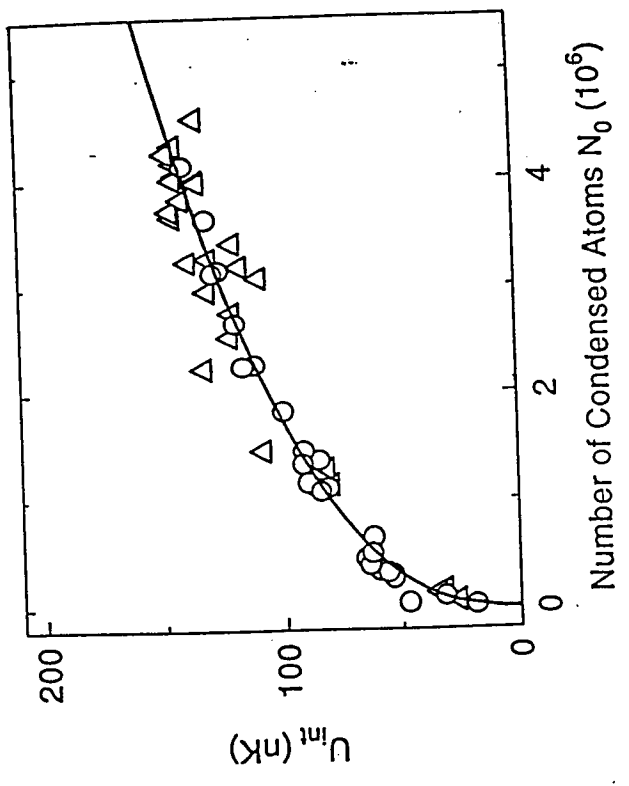
T 19



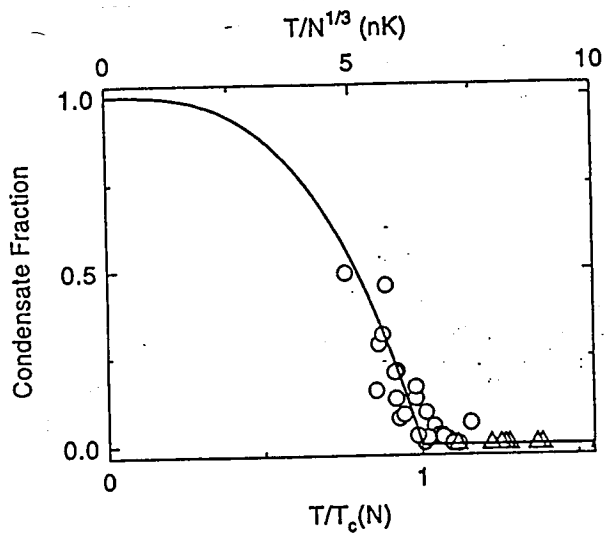
T 20



T 22



T 21



T 23

