

Le gaz de Bose bidimensionnel

M2 de physique quantique 2011-2012

Examen de mécanique quantique

Y. Castin et A. Sinatra

On considère un gaz de particules bosoniques sans spin et non relativistes de masse m dans un espace à deux dimensions. Le gaz subit des interactions binaires à courte portée faibles et répulsives, caractérisées par la longueur de diffusion à 2D, notée a , dont on rappelle qu'elle est toujours positive. Sauf indication contraire, le gaz ne subit pas de potentiel extérieur, il se trouve simplement dans une boîte de quantification carrée de côté L , $\mathbf{r} \in [0, L]^2$, c'est-à-dire que l'on impose à la fonction d'onde des conditions aux limites périodiques de période L suivant les axes orthogonaux Ox et Oy . On se place dans l'ensemble grand canonique, où l'on spécifie le potentiel chimique μ plutôt que le nombre total de particules N . De plus, on suppose que la température est nulle, $T = 0$, si bien que le gaz se trouve dans l'état fondamental. À la fin des calculs, on passe à la limite thermodynamique, en faisant tendre L vers l'infini à μ fixé.

Comme la condensation de Bose-Einstein subsiste à $T = 0$ en dimension deux à la limite thermodynamique, et que les interactions sont faibles, on va utiliser l'approche de Bogoliubov pour calculer la densité moyenne ρ du gaz en fonction du potentiel chimique μ , ce que l'on appelle l'équation d'état du gaz. On effectuera ensuite quelques applications à des expériences sur les atomes froids.

Il est conseillé de traiter les questions dans leur ordre d'apparition. Les notes prises lors des cours d'Y. Castin et des Travaux Dirigés d'A. Sinatra sont autorisées, de même que le photocopié du cours d'Y. Castin.

1 Description du modèle et dérivation du Hamiltonien de Bogoliubov

Comme on l'a vu dans la section 3.3.9 du cours, un modèle d'interaction en delta de Dirac n'a aucun sens en dimension deux mais on peut utiliser une interaction en delta de Kronecker dans un modèle sur réseau. On suppose donc que les positions \mathbf{r} des particules se trouvent sur un réseau carré d'axes propres Ox et Oy et de pas b , le rapport L/b étant entier. Ceci permet de limiter les vecteurs d'onde \mathbf{k} des particules à la première zone de Brillouin du réseau,

$$\mathbf{k} \in \text{PZB} = [-\pi/b, \pi/b]^2 \quad (1)$$

Contrairement à ce qui a été fait en cours, on se place dans l'ensemble grand canonique, si bien que l'on introduit le Hamiltonien grand canonique $H_{\text{GC}} = H - \mu\hat{N}$, où H est le

Hamiltonien canonique et \hat{N} l'opérateur nombre total de particules. Le potentiel chimique μ est pris positif, car on se place ici à température nulle.

On se place en seconde quantification. On introduit la version discrète de l'opérateur champ $\hat{\psi}(\mathbf{r})$, qui annihile une particule sur le site du réseau de position \mathbf{r} avec une convention de normalisation conduisant aux relations de commutation :

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')] = 0 \quad \text{et} \quad [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \frac{\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}}{b^2} \quad (2)$$

Cette convention de normalisation fait que l'on retrouve un commutateur en distribution de Dirac à la limite d'un espace continu $b \rightarrow 0$. Le Hamiltonien grand canonique du modèle sur réseau s'écrit

$$H_{GC} = \sum_{\mathbf{r}} b^2 \hat{\psi}^\dagger \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \mu \right] \hat{\psi} + \frac{g_0}{2} \sum_{\mathbf{r}} b^2 \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi} \quad (3)$$

Dans le terme d'énergie cinétique, l'opérateur Laplacien Δ est défini sur le réseau par le fait qu'il admette la fonction $\mathbf{r} \rightarrow \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ comme fonction propre avec la valeur propre $-k^2$, où \mathbf{k} est dans la première zone de Brillouin. On a donc

$$\Delta e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = -k^2 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad \mathbf{k} \in \text{PZB} \quad (4)$$

même si \mathbf{r} est une variable discrète. Par ailleurs, la constante de couplage nue g_0 apparaissant dans l'interaction sur site est ajustée pour reproduire la longueur de diffusion physique a . On admet que

$$g_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{\ln(Cb/a)} \quad (5)$$

où la valeur de la constante numérique $C > 0$ est connue mais n'est pas utile pour la suite. Afin d'avoir une interaction faiblement répulsive et de pouvoir utiliser l'approche de Bogoliubov, on se place donc dans le régime

$$a \ll b \quad (6)$$

Rappelons les principaux éléments de l'approche de Bogoliubov. Comme vu dans la section 3.3.2 du cours, on décompose l'opérateur champ en

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) a_\phi + \hat{\psi}_\perp(\mathbf{r}) \quad (7)$$

où a_ϕ annihile une particule dans le mode $\phi(\mathbf{r}) = 1/L$ du condensat, et obéit aux relations de commutation bosoniques habituelles. Comme vu en particulier dans la section 3.3.6 du cours, on est conduit à éliminer le mode du condensat en utilisant la décomposition module-phase

$$a_\phi = e^{i\hat{\theta}} \sqrt{\hat{n}_\phi} \quad (8)$$

L'opérateur phase $\hat{\theta}$, supposé hermitien, est éliminé par redéfinition du champ des modes non condensés :

$$\hat{\Lambda}(\mathbf{r}) = e^{-i\hat{\theta}} \hat{\psi}_\perp(\mathbf{r}) \quad (9)$$

L'opérateur nombre $\hat{n}_\phi = a_\phi^\dagger a_\phi$ est éliminé par la relation

$$a_\phi^\dagger a_\phi = N - \sum_{\mathbf{r}} b^2 \hat{\psi}_\perp^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\perp(\mathbf{r}) \quad (10)$$

On a remplacé dans l'équation (10) l'opérateur nombre total de particules \hat{N} par le nombre moyen N de particules dans le gaz. Comme le système est à température nulle, on peut en effet négliger les fluctuations du nombre total de particules. Le nombre N de particules est cependant une fonction inconnue de μ que nous allons déterminer de façon approchée par la méthode de Bogoliubov.

1.1 Ordres zéro et un en $\hat{\psi}_\perp$

- a) Dans le Hamiltonien H_{GC} , on remplace l'opérateur champ sous la forme (7) par son approximation d'ordre zéro en $\hat{\psi}_\perp$. Après avoir négligé 1 devant \hat{n}_ϕ , montrer qu'on obtient le Hamiltonien d'un condensat pur :

$$H_{\text{pur}} = -\mu \hat{n}_\phi + \frac{g_0}{2L^2} \hat{n}_\phi^2 \quad (11)$$

- b) Dans H_{pur} , éliminer le mode du condensat à l'aide de l'équation (10), en se plaçant toujours à l'ordre zéro en $\hat{\psi}_\perp$. On donnera le résultat, noté $H_{GC}^{(0)}(N)$, en fonction de N , μ , g_0 et L .
- c) Sachant que le système est à température nulle, comment déterminer le nombre total de particules $N^{(0)}$ à l'ordre zéro de la théorie de Bogoliubov ? Exprimer $N^{(0)}$ en fonction de μ , g_0 et L .
- d) La valeur moyenne de H_{GC} n'est en fait pas l'énergie du gaz mais le *grand potentiel* Ω . Donner la valeur $\Omega^{(0)}$ du grand potentiel à l'ordre zéro, en fonction de μ , g_0 et L .
- e) Les résultats $N^{(0)}$ et $\Omega^{(0)}$ dépendent-ils du pas du réseau b ? Expliquer pourquoi ce n'est pas satisfaisant.
- f) Vérifier que $H_{GC}^{(0)}(N) - \Omega^{(0)}$ est un monôme simple en $N - N^{(0)}$ que l'on précisera. Ceci sera utile pour la suite.
- g) Expliquer pourquoi la contribution $H_{GC}^{(1)}$ d'ordre un en $\hat{\psi}_\perp$ est nulle.

1.2 Ordre deux en $\hat{\psi}_\perp$ et Hamiltonien de Bogoliubov

Pour obtenir le Hamiltonien de Bogoliubov, il reste à déterminer dans H_{GC} toutes les contributions du second ordre en $\hat{\psi}_\perp$. Comme on l'a vu dans la section 3.3.5 du cours, on s'attend *a priori* à trouver deux contributions, une contribution *indirecte* venant du fait que \hat{n}_ϕ et N dans H_{pur} ne coïncident plus à cet ordre, et une contribution *directe* obtenue en injectant la décomposition (7) dans H_{GC} et en gardant les termes quadratiques en $\hat{\psi}_\perp$.

- a) On examine d'abord la contribution *indirecte*. Eliminer le mode du condensat dans le Hamiltonien H_{pur} en utilisant la relation (10), en gardant cette fois tous les termes d'ordre inférieur ou égal à deux en $\hat{\psi}_{\perp}$.
- b) Expliquer pourquoi $N - N^{(0)}$ est *a priori* du second ordre en $\hat{\psi}_{\perp}$.
- c) Dans les termes de H_{pur} quadratiques en $\hat{\psi}_{\perp}$, expliquer pourquoi on peut remplacer N par $N^{(0)}$. En déduire que, jusqu'à l'ordre deux inclus en $\hat{\psi}_{\perp}$, H_{pur} coïncide avec $H_{\text{GC}}^{(0)}(N)$.
- d) En utilisant la réponse à la question f de la sous-section 1.1, montrer alors que, jusqu'à l'ordre deux inclus en $\hat{\psi}_{\perp}$, H_{pur} coïncide avec $\Omega^{(0)}$, c'est-à-dire que la contribution indirecte recherchée est en fait nulle...
- e) Evaluer maintenant la contribution *directe* à H_{GC} du second ordre en $\hat{\psi}_{\perp}$.
- f) En éliminant a_{ϕ} grâce à la représentation module-phase (8), montrer que l'approximation de Bogoliubov pour H_{GC} , incluant *toutes* les contributions d'ordre inférieur ou égal à deux en $\hat{\psi}_{\perp}$, vaut

$$H_{\text{GC}}^{\text{Bog}} = -\frac{\mu^2 L^2}{2g_0} + \sum_{\mathbf{r}} b^2 \left[\hat{\Lambda}^{\dagger} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\Lambda} + \mu \hat{\Lambda}^{\dagger} \hat{\Lambda} + \frac{\mu}{2} \left(\hat{\Lambda}^2 + \hat{\Lambda}^{\dagger 2} \right) \right] \quad (12)$$

2 Equation d'état du gaz

A partir des résultats de la théorie de Bogoliubov, on va déterminer la densité moyenne du gaz en passant à la limite thermodynamique et à la limite d'un espace continu. Pour prendre la limite thermodynamique, on fait tendre L vers l'infini à potentiel chimique fixé ; les sommes sur \mathbf{k} qui vont apparaître peuvent être remplacées par des intégrales. Le passage à un espace continu correspond à la limite où b/ξ tend vers zéro,

$$b \ll \xi, \quad (13)$$

ξ étant la longueur de relaxation telle que $\hbar^2/(m\xi^2) = \mu$. Ceci peut être réalisé en pratique en réduisant le potentiel chimique du gaz.

Le point de départ est le Hamiltonien de Bogoliubov (12). Comme on l'a vu en cours, la valeur propre minimale de (12), qui correspond ici au grand potentiel du gaz à température nulle dans l'approximation de Bogoliubov, vaut

$$\Omega = -\frac{\mu^2 L^2}{2g_0} - \sum_{\mathbf{k} \in \text{PZB}^*} \epsilon_k V_k^2 \quad (14)$$

On rappelle l'expression du spectre d'excitation ϵ_k de Bogoliubov :

$$\epsilon_k = [E_k(E_k + 2\mu)]^{1/2} \quad \text{avec} \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (15)$$

et l'expression de l'amplitude V_k des modes propres de Bogoliubov :

$$V_k = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{E_k}{E_k + 2\mu} \right)^{1/4} - \left(\frac{E_k + 2\mu}{E_k} \right)^{1/4} \right] \quad (16)$$

- a) En utilisant les expressions de V_k et ϵ_k , montrer qu'à la limite thermodynamique, la densité surfacique de grand potentiel vaut

$$\frac{\Omega}{L^2} = -\frac{\mu^2}{2g_0} - \int_{\text{PZB}} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{1}{2} (E_k + \mu - \epsilon_k) \quad (17)$$

- b) On rappelle la relation thermodynamique bien connue $N = -\partial_\mu \Omega$. En déduire que la densité du gaz est donnée par

$$\rho \xi^2 = \frac{\hbar^2}{mg_0} + \xi^2 \int_{\text{PZB}} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{1}{2} \left[1 - \left(\frac{E_k}{E_k + 2\mu} \right)^{1/2} \right] \quad (18)$$

- c) Quel est le comportement à grand k ($E_k \gg \mu$) de l'intégrand dans l'équation (18) ? En déduire que l'intégrale dans (18) diverge logarithmiquement lorsque $b/\xi \rightarrow 0$.
- d) Or l'inverse de la constante de couplage nue comporte lui aussi un logarithme de b , voir l'équation (5). Plus précisément, on donne le résultat mathématique suivant : à la limite $b/\xi \rightarrow 0$,

$$\frac{\hbar^2}{mg_0} + \xi^2 \int_{\text{PZB}} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\mu}{2(E_k + 2\mu)} = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{\xi}{ae^\gamma} \right) + O(b/\xi)^2 \quad (19)$$

où $\gamma = 0,577\dots$ est la constante d'Euler. On négligera dans la suite les termes qui tendent vers zéro lorsque b/ξ tend vers zéro. Montrer que le résultat mathématique (19) permet d'exprimer la densité en termes d'une intégrale sur \mathbf{k} qui converge lorsqu'on passe à la limite $b/\xi \rightarrow 0$, c'est-à-dire que l'on peut étendre le domaine d'intégration de la première zone de Brillouin à \mathbb{R}^2 tout entier.

- e) On donne la valeur de l'intégrale

$$\int_0^{+\infty} dx \left[2x \left(1 - \frac{x}{\sqrt{1+x^2}} \right) - \frac{x}{1+x^2} \right] = \ln 2 - \frac{1}{2} \quad (20)$$

En déduire l'équation d'état du gaz de Bose à 2D à $T = 0$:

$$\rho = \frac{m\mu}{4\pi\hbar^2} \ln \left(\frac{e_0}{\mu} \right) \quad (21)$$

où l'on exprimera la quantité e_0 en fonction de \hbar , m , a et de la constante d'Euler γ . Le résultat central (21) a été obtenu par V. N. Popov en 1972.

- f) Pour déterminer le domaine de validité de la formule (21), on calcule la fraction de particules non condensées, qui vaut d'après la théorie de Bogoliubov à la limite thermodynamique :

$$f_{\text{nc}} = \frac{1}{\rho} \int_{\text{PZB}} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} V_k^2 \quad (22)$$

Montrer qu'on peut passer directement à la limite $b/\xi \rightarrow 0$ dans cette intégrale. En utilisant l'identité

$$\frac{d}{dx} \left(x\sqrt{1+x^2} \right) = \sqrt{1+x^2} + \frac{x^2}{\sqrt{1+x^2}} \quad (23)$$

calculer explicitement l'intégrale.

- g) En déduire que le petit paramètre de la théorie de Bogoliubov a une expression très simple en fonction de μ et e_0 .
- h) Les conditions (6) et (13) peuvent-elles être simultanément satisfaites dans le régime de validité de la théorie de Bogoliubov ?

3 Applications

3.1 Expériences à l'ENS et à Chicago

Dans les équipes de Jean Dalibard à l'ENS et de Cheng Chin à Chicago, une réalisation expérimentale du gaz de Bose à deux dimensions a été effectuée avec des atomes froids, et l'équation d'état a été mesurée en 2011. On suppose pour simplifier que, dans les expériences, les atomes sont à température nulle et sont fortement piégés selon la direction Oz par un potentiel harmonique, alors qu'ils peuvent se déplacer librement dans le plan xOy à l'intérieur de la boîte de quantification. On appelle ω_z la pulsation d'oscillation des atomes selon l'axe fortement piégeant Oz , et l'énergie de l'état vibrationnel fondamental selon Oz est prise comme origine des énergies.

- a) A quelle condition sur le potentiel chimique μ le gaz peut-il être considéré comme bidimensionnel ? On supposera cette condition satisfaite dans la suite.
- b) Dans la revue *Nature* en 2011, l'équipe de Chicago affirme haut et fort avoir observé que le gaz de Bose à 2D est invariant d'échelle (l'équipe de l'ENS reste plus mesurée). Ceci signifie que l'équation d'état, écrite sous une forme reliant ρ à ξ , garde la même expression quelle que soit l'unité de longueur choisie. On note $\rho = f(\xi)$ l'équation d'état dans le système métrique, ρ étant donc la densité surfacique exprimée en mètres⁻² et ξ la longueur de relaxation exprimée en mètres. Donner les valeurs ρ_λ et ξ_λ de la densité surfacique et de la longueur de relaxation si l'on prend une unité de longueur λ fois plus grande que le mètre.
- c) En déduire que l'invariance d'échelle à 2D implique que $\rho\xi^2$ est une constante.
- d) L'équation d'état (21) vous semble-t-elle compatible avec une invariance d'échelle ?
- e) Dans l'expérience de Chicago, on peut faire varier le potentiel chimique d'un facteur dix, entre $\mu_{\text{sup}} = 0,1\hbar\omega_z$ et $\mu_{\text{inf}} = 0,01\hbar\omega_z$, et la valeur de e_0 est typiquement

$$e_0 \simeq 10^{17}\hbar\omega_z \quad (24)$$

En utilisant l'équation d'état (21), calculer les valeurs de $\rho\xi^2$ aux potentiels chimiques μ_{inf} et μ_{sup} . Est-on dans le régime de validité de la théorie de Bogoliubov ?

- f) L'équipe de Chicago a une sensibilité sur la densité de l'ordre de 10%. En admettant que la longueur de relaxation ξ est parfaitement connue, ceci lui permettrait-il de voir une violation de l'invariance d'échelle ?
- g) Pour rendre une éventuelle violation plus évidente, faudrait-il augmenter ou diminuer la longueur de diffusion à 2D ?

3.2 Effet d'un confinement dans le plan xOy

On prend finalement en compte le fait que le gaz bidimensionnel subit en pratique un piégeage harmonique dans le plan xOy , avec un potentiel isotrope

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2) \quad (25)$$

où ω est la pulsation d'oscillation dans le plan xOy . On appelle μ le potentiel chimique du gaz piégé. On suppose que le système est macroscopique, ce qui permet d'effectuer l'approximation de densité locale : un petit élément du gaz au voisinage du point \mathbf{r} a la même densité surfacique $\rho(\mathbf{r})$ qu'un gaz à 2D homogène (sans potentiel extérieur) de potentiel chimique local $\mu_{\text{loc}}(\mathbf{r}) = \mu - U(\mathbf{r})$.

- a) Quelle densité faut-il prendre aux points où $\mu_{\text{loc}}(\mathbf{r}) < 0$?
- b) On appelle R le rayon du cercle sur lequel $\mu_{\text{loc}}(\mathbf{r}) = 0$. On remarquera alors l'écriture très simple $\mu_{\text{loc}}(\mathbf{r})/\mu = 1 - r^2/R^2$. Pour $r < R$, donner l'expression de la densité surfacique $\rho(\mathbf{r})$ résultant de l'équation d'état (21) (et de l'approximation de densité locale).
- c) A l'aide du changement de variable $X = 1 - r^2/R^2$ dans une intégrale que l'on précisera, donner l'expression explicite du nombre de particules dans le piège en fonction de μ , $\hbar\omega$ et e_0 .