

① Buts de ce chapitre

- Introduire l'équation de Boltzmann qui décrit l'évolution de la fonction de distribution d'un gaz sous l'effet des collisions binaires entre atomes. C'est cette équation qui nous permettra ensuite d'étudier la cinétique du refroidissement par évaporation.
- Montrer que cette équation se simplifie considérablement si l'on suppose que la fonction de distribution des atomes dans l'espace des phases ne dépend que de leur énergie. Discuter la signification physique et la validité d'une telle hypothèse et établir la nouvelle forme prise par l'équation de Boltzmann.
- Présenter les résultats de la résolution numérique d'une telle équation pour le refroidissement évaporatif et montrer que la fonction de distribution reste tout le temps très voisine d'une exponentielle tronquée (voir Ref. [1]). Un tel résultat justifiera la description ultérieure de l'état du gaz par une température effective et permettra de développer un traitement analytique du refroidissement évaporatif.

② Rappels sur l'équation cinétique de Boltzmann (voir Ref. [2])

2-1 Descriptions des particules

- Gaz de particules identiques, dans un potentiel $U(\vec{r})$
Régime quantique non dégénéré : $n_0 \Lambda^3 \ll 1$.
- Fonction de distribution dans l'espace des phases : $f(\vec{r}, \vec{p})$
Comme la densité d'états en \vec{r}, \vec{p} est $1/h^3$ (un état par cellule de volume h^3), le nombre dN de particules dans le volume $d^3r d^3p$ de l'espace des phases autour du point \vec{r}, \vec{p} est

$$dN = \frac{d^3r d^3p}{h^3} f(\vec{r}, \vec{p}) \quad (6.1)$$

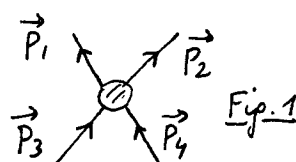
ce qui donne la condition de normalisation suivante pour la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{p})$ (qui est sans dimension) :

$$\frac{1}{h^3} \iint d^3r d^3p f(\vec{r}, \vec{p}) = N \quad (6.2)$$

- Pour étudier la collision au point \vec{r} entre 2 particules d'impulsions \vec{p} et \vec{p}' , il faudrait en toute rigueur utiliser la fonction de distribution à 2 corps $f_2(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}, \vec{p}')$. On néglige les corrélations entre particules entrant en collision (hypothèse de chaos moléculaire), et on utilisera uniquement la fonction de distribution à un corps $f(\vec{r}, \vec{p})$, ce qui revient à poser $f_2(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}, \vec{p}') = f(\vec{r}, \vec{p}) f(\vec{r}, \vec{p}')$.

2-2 Description d'une collision

- Etat initial : 2 particules d'impulsions \vec{p}_3 et \vec{p}_4
Etat final : " " " " \vec{p}_1 et \vec{p}_2



VI-2) - Changement de variables $\vec{p}_3, \vec{p}_4 \rightarrow \vec{P}, \vec{q}$

$$\vec{p}_3 + \vec{p}_4 = \vec{P} \quad (6.3a) \quad \frac{\vec{p}_3 - \vec{p}_4}{2} = \vec{q} \quad (6.3b)$$

\vec{P} est l'impulsion totale, $2\vec{q}$ l'impulsion relative. Des équations (6.3), on déduit :

$$\vec{p}_3 = \frac{\vec{P}}{2} + \vec{q} \quad (6.4a) \quad \vec{p}_4 = \frac{\vec{P}}{2} - \vec{q} \quad (6.4b)$$

Comme le Jacobien des transformations (6.3) ou (6.4) est égal à 1, on a

$$d^3p_3 d^3p_4 = d^3P d^3q \quad (6.5)$$

- On passe de même de \vec{p}_1, \vec{p}_2 à \vec{P}', \vec{q}'

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{P}' \quad (6.6a) \quad \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2}{2} = \vec{q}' \quad (6.6b)$$

$$\vec{p}_1 = \frac{\vec{P}'}{2} + \vec{q}' \quad (6.7a) \quad \vec{p}_2 = \frac{\vec{P}'}{2} - \vec{q}' \quad (6.7b)$$

$$d^3p_1 d^3p_2 = d^3P' d^3q' \quad (6.8)$$

- La conservation de l'impulsion globale entraîne que :

$$\vec{P}' = \vec{P} \quad (6.9)$$

Comme les particules ont même masse m , la conservation de l'énergie totale s'écrit

$$p_3^2 + p_4^2 = p_1^2 + p_2^2 \quad (6.10)$$

ce qui donne, compte tenu de (6.4), (6.7) et (6.9)

$$q^2 = q'^2 \quad \iff \quad |\vec{q}| = |\vec{q}'| \quad (6.11)$$

- La figure 2 représente les vecteurs $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3, \vec{p}_4$.

Par rapport à l'extrémité du vecteur $\vec{P}/2$, \vec{p}_3 et \vec{p}_4 sont repérés par 2 vecteurs opposés $+\vec{q}$ et $-\vec{q}$, \vec{p}_1 et \vec{p}_2 par 2 autres vecteurs opposés $+\vec{q}'$ et $-\vec{q}'$, de même module que \vec{q} .

Les extrémités de $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3, \vec{p}_4$ sont donc sur une même sphère ayant pour centre l'extrémité du vecteur $\vec{P}/2$.

\vec{p}_3 et \vec{p}_4 étant donnés, c'est-à-dire \vec{P} et \vec{q} étant donnés, la collision est entièrement définie par les angles polaires θ et φ de \vec{q}' par rapport à \vec{q} .

- Section efficace de collision

On suppose l'énergie des particules suffisamment faible pour que la collision entre 2 atomes se fasse uniquement dans l'onde s , et soit entièrement décrite par la longueur de diffusion a . La section efficace différentielle $\sigma(\Omega)$ est isotrope et indépendante de l'énergie. Soit $\sigma = 8\pi a^2$ la section efficace totale. On a donc

$$\sigma(\Omega) = \frac{1}{4\pi} \sigma = 2a^2 \quad (6.12)$$

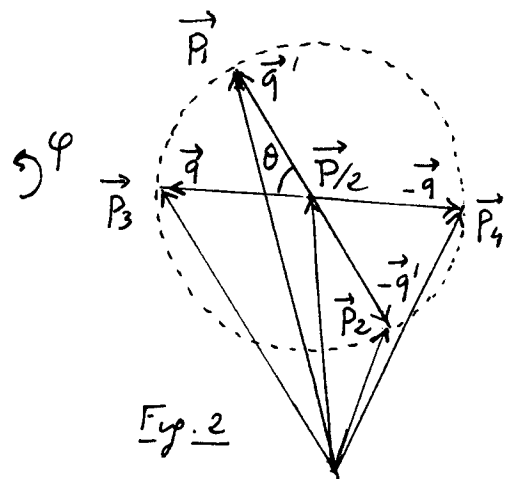


Fig. 2

Cette équation donne la vitesse de variation de la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ sous l'effet des divers facteurs qui la font évoluer : mouvement libre des atomes dans le piège, collisions. Il n'est pas question ici de l'établir (voir par exemple la référence [2]). Nous nous contenterons de rappeler la forme de l'équation et d'interpréter les divers termes.

Forme de l'équation

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} - \vec{\nabla}_{\vec{r}} U \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} \right) f(\vec{r}, \vec{p}, t) = I(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (6.13)$$

- Le membre de gauche de (6.13) est la dérivée totale par rapport au temps de $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$, appelé encore "dérivée hydrodynamique". On a en effet

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{d\vec{r}}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{d\vec{p}}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \quad (6.14)$$

ce qui redonne bien le membre de gauche de (6.13), compte tenu des relations $d\vec{r}/dt = \vec{v} = \vec{p}/m$, $d\vec{p}/dt = \vec{F} = -\vec{\nabla} U(\vec{r})$.

- le membre de droite est l'intégrale de collision, donnant la vitesse de variations de $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ due aux collisions. On a :

$$I(\vec{r}, \vec{p}_4) = \frac{\sigma}{h^3 2\pi m} \iint d^3 p_3 d\Omega' q \left[f(\vec{r}, \vec{p}_1) f(\vec{r}, \vec{p}_2) - f(\vec{r}, \vec{p}_3) f(\vec{r}, \vec{p}_4) \right] \quad (6.15)$$

$\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3, \vec{p}_4, \sigma$ ont été définis plus haut (§ 2.2). $d\Omega'$ est l'élément d'angle solide autour de la direction θ, φ caractérisant l'orientation du vecteur \vec{q}' par rapport au vecteur \vec{q} (voir Fig. 2).

- Nous réécrivons (6.15) sous la forme :

$$I(\vec{r}, \vec{p}_4) = I_{in}(\vec{r}, \vec{p}_4) - I_{out}(\vec{r}, \vec{p}_4) \quad (6.16)$$

avec

$$I_{in}(\vec{r}, \vec{p}_4) = \frac{\sigma}{h^3 2\pi m} \iint d^3 p_3 d\Omega' q f(\vec{r}, \vec{p}_1) f(\vec{r}, \vec{p}_2) \quad (6.17)$$

$$I_{out}(\vec{r}, \vec{p}_4) = \frac{\sigma}{h^3 2\pi m} \iint d^3 p_3 d\Omega' q f(\vec{r}, \vec{p}_3) f(\vec{r}, \vec{p}_4) \quad (6.18)$$

Interprétation de $I_{out}(\vec{r}, \vec{p})$

- Remplaçons \vec{p} par \vec{p}_4 dans (6.13) et multiplions les 2 membres de l'équation par $d^3 r d^3 p_4 / h^3$. Le membre de gauche donne la dérivée totale par rapport au temps du nombre $dN(\vec{r}, \vec{p}_4)$ de particules dans l'élément de volume $d^3 r d^3 p_4$ de l'espace des phases autour de \vec{r}, \vec{p}_4 (voir Eq. 6.1)

- Montrons que $\frac{d^3 r d^3 p_4}{h^3} I_{out}(\vec{r}, \vec{p}_4)$ est le nombre de particules quittant par unité de temps un tel volume sous l'effet de collisions avec une autre particule

Considérons au point \vec{r} les particules d'impulsion comprise dans l'élément $d^3 p_3$ autour de \vec{p}_3 . La densité spatiale de ces

particules est $\frac{f(\vec{r}, \vec{p}_3)}{h^3} d^3 p_3$. Leur vitesse relative par rapport à une particule d'impulsion \vec{p}_4 est $\frac{\vec{p}_3 - \vec{p}_4}{m} = \frac{2\vec{q}}{m}$, d'après (6.3b). Le module de cette vitesse relative est $2q/m$. Le flux correspondant ϕ de particules \vec{p}_3 arrivant sur les particules \vec{p}_4 est

$$\phi = \frac{f(\vec{r}, \vec{p}_3)}{h^3} d^3 p_3 \frac{2q}{m} \quad (6.19)$$

La probabilité par unité de temps de subir une collision sur une particule \vec{p}_4 avec diffusion dans l'angle solide $d\Omega'$ autour de Ω' est donnée $\phi \sigma(\Omega') d\Omega' = \phi \frac{\sigma}{4\pi} d\Omega'$, d'après (6.12). Comme il y a $\frac{d^3 r d^3 p_4}{h^3} f(\vec{r}, \vec{p}_4)$ particules dans l'élément $d^3 r d^3 p_4$ autour de \vec{r}, \vec{p}_4 , le nombre total de collisions pouvant se produire par unité de temps dans l'élément $d^3 r d^3 p_4$ et faisant sortir une molécule de ce volume est donc

$$\begin{aligned} \text{Nombre de particules} &= \frac{d^3 r d^3 p_4}{h^3} f(\vec{r}, \vec{p}_4) \iint d\Omega' \frac{\sigma}{4\pi} \frac{2q}{m} \frac{f(\vec{r}, \vec{p}_3)}{h^3} d^3 p_3 \\ \text{quittant par unité} & \\ \text{de temps le volume} & \\ \text{d}^3 r \text{ d}^3 p_4 \text{ sous l'effet} & \\ \text{des collisions} & = \frac{d^3 r d^3 p_4}{h^3} I_{\text{out}}(\vec{r}, \vec{p}_4) \end{aligned} \quad (6.20)$$

ce qui démontre le résultat annoncé.

Interprétation de $I_{\text{in}}(\vec{r}, \vec{p})$

- Un raisonnement analogue au précédent permet de montrer que $\frac{d^3 r d^3 p_4}{h^3} I_{\text{in}}(\vec{r}, \vec{p}_4)$ est le nombre de collisions par unité de temps faisant apparaître une particule dans l'élément $d^3 r d^3 p_4$ autour de \vec{r}, \vec{p}_4 .

- Il faut pour cela utiliser les propriétés de symétrie des collisions qui résultent de l'invariance des interactions électromagnétiques par réflexion du temps, rotations et réflexions d'espace. La symétrie par renversement du sens du temps entraîne que si

$$\vec{p}_3 + \vec{p}_4 \rightarrow \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad (6.21)$$

est une collision possible, alors

$$-\vec{p}_1 + -\vec{p}_2 \rightarrow -\vec{p}_3 + -\vec{p}_4 \quad (6.22)$$

est une autre collision possible. La symétrie de réflexion d'espace entraîne enfin que

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 \rightarrow \vec{p}_3 + \vec{p}_4 \quad (6.23)$$

est également une collision possible, inverse de (6.21).

- Fixons $d^3 r d^3 p_4$. On peut alors évaluer le taux de collisions faisant entrer une particule dans cet élément. En utilisant $q' = q$ (voir Eq. 6.11), la conservation du volume d'espace des phases lors d'une collision ($d^3 p_3 d^3 p_4 = d^3 p_1 d^3 p_2$), $d\Omega' = d\Omega$, l'égalité des sections efficaces pour les collisions (6.21) et (6.23), on obtient le résultat cherché.

③ Hypothèse simplificatrice : Mouvement suffisamment ergodique VI-5

- On suppose à partir de maintenant que $f(\vec{r}, \vec{p})$ ne dépend que de l'énergie $\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r})$ des particules. En tous les points d'une surface d'énergie ϵ , avec

$$\epsilon = \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) \quad (6.24)$$

$f(\vec{r}, \vec{p})$ a la même valeur $f(\epsilon)$.

- Une telle situation est réalisée si le mouvement d'une particule dans $U(\vec{r})$ est ergodique. En effet un tel mouvement, en l'absence d'interactions avec les autres particules, s'effectue sur une surface d'énergie ϵ , puisque $\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p})$ est une constante du mouvement. Si le mouvement est ergodique, au bout d'un temps suffisamment long, la particule aura exploré uniformément tous les points de la surface d'énergie, et la fonction de distribution sera uniforme sur toute cette surface.

- En réalité, à cause des symétries de U , le mouvement de la particule n'est pas ergodique et son mouvement peut être limité à certaines zones de la surface ϵ . On supposera cependant que les interactions entre particules rendent le mouvement suffisamment ergodique pour que l'hypothèse " $f(\vec{r}, \vec{p})$ ne dépend que de $\epsilon = \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p})$ " soit valable. Mathématiquement, ceci revient à poser

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = f(\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p})) \quad (6.25)$$

que l'on peut encore écrire

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = \int d\epsilon f(\epsilon) \delta(\epsilon - \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p})) \quad (6.26)$$

Tous les états de même énergie ϵ ont la même probabilité d'occupation $f(\epsilon)$.

- Rappelons l'expression de la densité d'états $\rho(\epsilon)$ [voir Eq. 5.5]

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{h^3} \iint d^3r d^3p \delta(\epsilon - \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p})) \quad (6.27)$$

Le nombre total de particules N n'est autre que

$$N = \int d\epsilon \rho(\epsilon) f(\epsilon) \quad (6.28)$$

En reportant (6.27) dans (6.28) et en effectuant l'intégrale sur ϵ , on retrouve la condition de normalisation (6.2), compte tenu de (6.25)

④ Transformation de l'équation cinétique

Buts de ce calcul

Comme $f(\vec{r}, \vec{p})$ ne dépend que de ϵ , on va transformer l'équation cinétique (6.13), qui couple les 4 fonctions $f(\vec{r}_1, \vec{p}_1), f(\vec{r}_2, \vec{p}_2), f(\vec{r}_3, \vec{p}_3), f(\vec{r}_4, \vec{p}_4)$, de 6 variables chacune, en une équation couplant 4 fonctions $f(\epsilon_a), f(\epsilon_b), f(\epsilon_c), f(\epsilon_d)$, ne dépendant chacune que d'une variable ϵ . Cette équation sera plus facile à manier et à intégrer que la précédente. Elle permettra également d'obtenir une expression analytique de la probabilité d'évaporation par unité de temps.

Transformation de la dérivée hydrodynamique

- Comme $f(\vec{r}, \vec{p})$ ne dépend que de $\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r})$, on a

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \frac{df}{d\mathcal{H}} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}} = \frac{df}{d\epsilon} \frac{\partial U}{\partial \vec{p}} \quad \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = \frac{df}{d\mathcal{H}} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}} = \frac{df}{d\epsilon} \frac{\vec{p}}{m} \quad (6.29)$$

de sorte que

$$\frac{\vec{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \frac{df}{dE} \left(\frac{\vec{p}}{m} \cdot \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\vec{p}}{m} \right) = 0 \quad (6.30)$$

Il ne subsiste plus que $\frac{df}{dE}$. Un tel résultat se comprend aisément. Si la densité initiale sur la surface E est constante, le mouvement libre dans $U(\vec{r})$, qui est celui d'un fluide incompressible (théorème de Liouville), ne peut la faire changer.

- Remplaçons \vec{p} par \vec{p}_4 dans (6.13). Multiplions les 2 membres de cette équation par $\frac{1}{h^3} \delta(\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}_4) - E_d)$. Intégrons sur \vec{r} et \vec{p}_4 , en gardant E_d fixe (on utilise la notation E_d , et non E_4 , pour éviter tout risque de confusion entre E_d et $\frac{p_4^2}{2m} + U(\vec{r})$ qui varie avec \vec{p}_4 et \vec{r}). On obtient pour le membre de gauche

$$\frac{1}{h^3} \iint d^3r d^3p_4 \delta(\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}_4) - E_d) \frac{\partial}{\partial t} f(\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}_4), t) \quad (6.31)$$

A cause de la fonction δ , qui n'est non nulle que si $\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}_4) = E_d$, on peut remplacer $\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}_4)$ par E_d dans le dernier terme de (6.31) et sortir ce terme de l'intégrale, qui n'est autre que $\rho(E_d)$ d'après (6.27). On obtient ainsi tout simplement

$$\rho(E_d) \dot{f}(E_d) \quad (6.32)$$

Transformation de la contribution de $I_{in}(\vec{r}, \vec{p}_4)$

- Comme plus haut, on multiplie par $h^{-3} \delta(\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}_4) - E_d)$ et on intègre sur \vec{r} et \vec{p}_4 , ce qui donne avec la notation simplifiée $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}_i)$

$$\frac{\sigma}{2\pi m h^6} \int \dots \int d^3r d^3p_4 d^3p_3 d\Omega' q \delta(\mathcal{H}_4 - E_d) f(\mathcal{H}_1) f(\mathcal{H}_2) \quad (6.33)$$

- Utilisons $f(\mathcal{H}_1) = \int dE_a f(E_a) \delta(\mathcal{H}_1 - E_a)$, $f(\mathcal{H}_2) = \int dE_b f(E_b) \delta(\mathcal{H}_2 - E_b)$, $1 = \int dE_c \delta(\mathcal{H}_3 - E_c)$. On peut réécrire (6.33) sous la forme:

$$\frac{\sigma}{2\pi m h^6} \int \dots \int dE_a dE_b dE_c f(E_a) f(E_b) \times \quad (6.34)$$

$$\times \int \dots \int d^3r d^3p_4 d^3p_3 d\Omega' q \delta(\mathcal{H}_1 - E_a) \delta(\mathcal{H}_2 - E_b) \delta(\mathcal{H}_3 - E_c) \delta(\mathcal{H}_4 - E_d)$$

Transformation de la contribution de $-I_{out}(\vec{r}, \vec{p}_4)$

- Comme plus haut, on part de

$$-\frac{\sigma}{2\pi m h^6} \int \dots \int d^3r d^3p_4 d^3p_3 d\Omega' q' \delta(\mathcal{H}_4 - E_d) f(\mathcal{H}_3) f(\mathcal{H}_4) \quad (6.35)$$

- On utilise $\delta(\mathcal{H}_4 - E_d) f(\mathcal{H}_4) = \delta(\mathcal{H}_4 - E_d) f(E_d)$, $f(\mathcal{H}_3) = \int dE_c f(E_c) \delta(\mathcal{H}_3 - E_c)$, $1 = \int dE_a \delta(\mathcal{H}_1 - E_a)$, $1 = \int dE_b \delta(\mathcal{H}_2 - E_b)$

ce qui permet de transformer (6.35) en

$$-\frac{\sigma}{2\pi m h^6} \int \dots \int dE_a dE_b dE_c f(E_c) f(E_d) \times \quad (6.36)$$

$$\times \int \dots \int d^3r d^3p_4 d^3p_3 d\Omega' q \delta(\mathcal{H}_1 - E_a) \delta(\mathcal{H}_2 - E_b) \delta(\mathcal{H}_3 - E_c) \delta(\mathcal{H}_4 - E_d)$$

- Finalement, en regroupant (6.32), (6.35) et (6.36), on voit (VI-7)
qu'on peut réécrire l'équation cinétique sous la forme

$$\rho(E_d) \dot{f}(E_d) = \frac{\sigma}{2\pi m h^6} \int \dots \int dE_a dE_b dE_c [f(E_a) f(E_b) - f(E_c) f(E_d)] \times \int \dots \int d^3r d^3p_4 d^3p_3 d\Omega' q \delta(\mathcal{H}_1 - E_a) \delta(\mathcal{H}_2 - E_b) \delta(\mathcal{H}_3 - E_c) \delta(\mathcal{H}_4 - E_d) \quad (6.37)$$

On a ainsi éliminé les $f(\vec{r}, \vec{p})$ au profit des $f(E)$. De plus les intégrales se séparent en 2 parties, l'une portant sur les $f(E)$, et dépendant donc de l'état du système, l'autre indépendante de l'état du système et dépendant seulement des caractéristiques du piège (2^{ème} ligne de 6.37).

Intégrale sur les variables autres que E_a, E_b, E_c

L'intégrale de la deuxième ligne de (6.37) ne présente pas de difficultés. Le calcul détaillé est donné dans l'appendice B. On trouve :

$$\int \dots \int d^3r d^3p_4 d^3p_3 d\Omega' q \delta(\mathcal{H}_1 - E_a) \delta(\mathcal{H}_2 - E_b) \delta(\mathcal{H}_3 - E_c) \delta(\mathcal{H}_4 - E_d) = 16 \pi^2 m^2 h^3 \rho(E_{\min}) \delta(E_a + E_b - E_c - E_d) \quad (6.38)$$

où E_{\min} est la plus petite des 4 énergies E_a, E_b, E_c, E_d .

Forme finale de l'équation cinétique

En reportant (6.38) dans (6.37), et en revenant à des notations standard, c-à-d en remplaçant E_a par E_1 , E_b par E_2 , E_c par E_3 et E_d par E_4 , on obtient finalement :

$$\rho(E_4) \dot{f}(E_4) = \frac{8\pi m \sigma}{h^3} \iiint dE_1 dE_2 dE_3 \delta(E_1 + E_2 - E_3 - E_4) \times [f(E_1) f(E_2) - f(E_3) f(E_4)] \rho(E_{\min}) \quad (6.39)$$

5) Résolution numérique de l'équation cinétique décrivant le refroidissement évaporatif (voir Ref. [1])

Principe du calcul

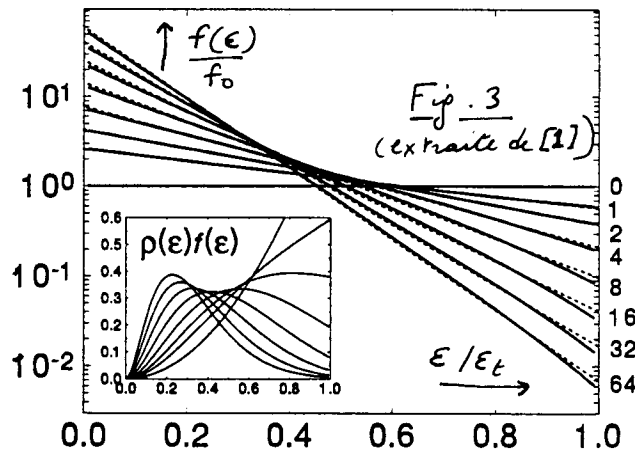
- L'équation (6.39) est utilisée pour décrire l'évolution de la fonction de distribution $f(E)$ d'un gaz d'atomes piégés subissant un refroidissement évaporatif. On suppose que tous les atomes atteignant une énergie supérieure à l'énergie seuil E_f s'échappent du piège et sont éliminés, ce qui revient à prendre la condition aux limites

$$f(E) = 0 \quad \text{si} \quad E \geq E_f \quad (6.40)$$

- L'équation (6.39) est discrétisée en découpant l'intervalle $[0 - E_f]$ en n intervalles élémentaires de largeur $\Delta E = E_f/n$. L'équation ainsi discrétisée est résolue numériquement par la méthode d'Euler, avec la condition aux limites (6.40). A l'instant initial, on prend une fonction $f(E)$ constante entre 0 et E_f , ce qui revient à prendre une température infinie.

Résultats

- Les courbes en traits pleins de la figure 3 (extraite de [1]) représentent la valeur numérique trouvée pour $f(E)$ entre 0 et E_f , à divers instants repérés par le nombre total moyen de collisions subies par atome (chiffres à droite de la figure). $V(\vec{r})$ est un potentiel harmonique, de sorte que la densité d'états $\rho(E)$ est donnée par (5.36)
- Les courbes en pointillés représentent le meilleur ajustement de telles courbes numériques par des exponentielles de Boltzmann.
- Les courbes représentées dans le médaillon sont les courbes $\rho(E)f(E)$.

Conclusions d'un tel calcul

- (i) A chaque instant, la fonction de distribution $f(E)$ est très bien représentée par une exponentielle de Boltzmann tronquée à $E = E_f$

$$f(E) = z e^{-E/k_B T} \gamma(E_f - E) \quad (6.41)$$

où γ est la fonction saut, z un paramètre de normalisation analogue à une fugacité (voir Eq. 5.20), T une température effective.

Un tel résultat demeure valable pour d'autres types de potentiel de piégeage $V(\vec{r})$ (carré, linéaire).

- (ii) En coordonnées semi-logarithmiques ($\log f(E)$ en fonction de E), les fonctions (6.41) sont représentées par des droites de pente $-1/k_B T$, ce qui apparaît bien sur la figure 3. Quand le temps augmente, on voit que ces pentes augmentent en valeur absolue, ce qui montre bien que le gaz se refroidit.

Implication de ces résultats

Le fait que l'état du gaz puisse être valablement décrit à chaque instant par une exponentielle de Boltzmann tronquée permet d'envisager une étude analytique du refroidissement évaporatif.

- (i) Dans une première étape, on calcule les propriétés thermodynamiques d'un gaz décrit par la fonction de distribution (6.41). Le gaz est décrit par 3 variables : la température effective T , le seuil E_f , le nombre N de particules, relié à z . On peut calculer en fonction de ces variables toute une série de grandeurs physiques, comme la répartition spatiale des atomes, le volume effectif occupé par le gaz, l'énergie moyenne par atome... la comparaison avec les résultats du cours V permet en particulier d'évaluer les modifications introduites par la troncature à E_f .
- (ii) A cause de cette troncature à E_f , la distribution (6.41) ne correspond pas à un vrai état d'équilibre. Grâce à l'équation cinétique (6.39) où les $f(E_i)$ sont remplacés par les exponentielles tronquées (6.41), on peut alors calculer le nombre d'atomes qui s'échappent du piège par unité de temps, et la diminution correspondante par unité de temps de l'énergie moyenne par atome du gaz.

(iii) De telles équations permettent alors d'étudier la variation (VI-9) temporelle des diverses grandeurs physiques calculées en (i), et de répondre de manière quantitative aux diverses questions posées à la fin du cours V ?

- Quel est le meilleur compromis entre efficacité et vitesse du refroidissement ? Comment baisser le seuil E_f au cours du temps ?
- Comment augmenter la densité dans l'espace des phases ?
- Comment augmenter le taux de collisions élastiques ?
- Quelles sont les limites introduites par les collisions inélastiques ?

Références

- [1] O.J. Luiten, M.W. Reynolds, J.T.M. Walraven, *Phys. Rev. A* **53**, 381 (1996)
 [2] K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley, New York (1963).

Appendice B : Démonstration de l'équation (6.38)

- Changement de variables $\vec{p}_3, \vec{p}_4 \rightarrow \vec{P}, \vec{q}$ (voir 6.4 et 6.5)

$$d^3p_3 d^3p_4 = d^3P d^3q = d^3P q^2 dq d\Omega = d^3P q^2 dq 2\pi du \quad (B.1)$$

où $u = \cos(\widehat{\vec{P}, \vec{q}})$. De même, si l'on pose $u' = \cos(\widehat{\vec{P}, \vec{q}'})$ on peut écrire $d\Omega' = 2\pi du'$

La 1^{ère} ligne de (6.38) peut donc être réécrite

$$\int \dots \int d^3r d^3P \int \dots \int q^3 dq du du' \delta(\mathcal{H}_1 - E_a) \delta(\mathcal{H}_2 - E_b) \delta(\mathcal{H}_3 - E_c) \delta(\mathcal{H}_4 - E_d) \quad (B.2)$$

- En utilisant (6.4), (6.7) et (6.9), on obtient

$$\begin{cases} \mathcal{H}_1 - E_a = U(\vec{r}) + \frac{\vec{P}^2}{8m} + \frac{q^2}{2m} + \frac{Pq u'}{2m} - E_a \\ \mathcal{H}_2 - E_b = \text{''} \quad \text{''} \quad \text{''} - \frac{Pq u'}{2m} - E_b \\ \mathcal{H}_3 - E_c = \text{''} \quad \text{''} \quad \text{''} + \frac{Pq u}{2m} - E_c \\ \mathcal{H}_4 - E_d = \text{''} \quad \text{''} \quad \text{''} - \frac{Pq u}{2m} - E_d \end{cases} \quad (B.3)$$

- Intégrale sur u' de (B.2). Compte tenu de $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$ et de $\int dx \delta(x-x_1) \delta(x-x_2) = \delta(x_1-x_2)$, on obtient :

$$\int du' \delta(\mathcal{H}_1 - E_a) \delta(\mathcal{H}_2 - E_b) = \frac{2m}{Pq} \delta(E_a + E_b - 2U(\vec{r}) - \frac{\vec{P}^2}{4m} - \frac{q^2}{m}) \quad (B.4)$$

- Intégrale sur u de (B.2). Le même type de calcul donne

$$\int du \delta(\mathcal{H}_3 - E_c) \delta(\mathcal{H}_4 - E_d) = \frac{2m}{Pq} \delta(E_c + E_d - 2U(\vec{r}) - \frac{\vec{P}^2}{4m} - \frac{q^2}{m}) \quad (B.5)$$

- Intégrale sur q de B.2

$$\frac{2m^2}{P^2} \int \underbrace{2q dq}_{dq^2} \delta(E_a + E_b - 2U(\vec{r}) - \frac{\vec{P}^2}{4m} - \frac{q^2}{m}) \delta(E_c + E_d - 2U(\vec{r}) - \frac{\vec{P}^2}{4m} - \frac{q^2}{m}) = \frac{2m^3}{P^2} \delta(E_a + E_b - E_c - E_d) \quad (B.6)$$

- Domaine d'intégration de l'intégrale sur r

Il faut que l'argument de chacune des 4 fonctions δ de (B.2) puisse s'annuler. Sinon, l'une des 4 fonctions δ au moins reste toujours nulle et (B.2) se réduit à zéro.

Comme $u' = \cos(\hat{\vec{P}}, \hat{\vec{q}}')$ varie entre -1 et $+1$, il faut, pour que la 1^{ère} ligne de (B.2) puisse s'annuler, que

$$E_a - \frac{1}{2m} \left(\frac{\vec{P}}{2} + \vec{q} \right)^2 < U(\vec{r}) < E_a - \frac{1}{2m} \left(\frac{\vec{P}}{2} - \vec{q} \right)^2 \quad (\text{B.7})$$

Si $U(\vec{r})$ était supérieur à E_a , $U(\vec{r})$ ne pourrait jamais être inférieur à $E_a - \frac{1}{2m} \left(\frac{\vec{P}}{2} - \vec{q} \right)^2 \leq E_a$. Pour que l'argument

de $\delta(\mathcal{H}_1 - E_a)$ puisse s'annuler, il faut donc que $U(\vec{r}) \leq E_a$.

Le même raisonnement montre que l'on doit avoir $U(\vec{r}) \leq E_b$, $U(\vec{r}) \leq E_c$, $U(\vec{r}) \leq E_d$ et donc $U(\vec{r}) \leq E_{\min}$

E_a, E_b, E_c, E_d étant donnés, il faut donc que l'intégrale sur \vec{r} soit limitée aux valeurs de \vec{r} correspondant à la région accessible énergétiquement, c'est à dire telle que $U(\vec{r}) \leq E_{\min}$

$$\int d^3r = \int_{U(\vec{r}) \leq E_{\min}} d^3r \quad (\text{B.8})$$

- Intégrale sur \vec{P}

• A E_a correspond une valeur p_a de $p_1 = |\vec{P}|$ quand on écrit $\mathcal{H}_1 = \frac{p_1^2}{2m} + U(\vec{r}) = E_a$ à cause de $\delta(\mathcal{H}_1 - E_a)$

$$p_a = \sqrt{2m(E_a - U(\vec{r}))} \quad (\text{B.9})$$

On peut de même définir p_b, p_c, p_d

• Intervalle de variation de $P = |\vec{P}|$. Supposons, sans perte de généralité que p_a soit la plus petite des 4 quantités p_a, p_b, p_c, p_d . Le module de $\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$ varie entre une valeur minimale $P_{\min} = p_b - p_a$ et une valeur maximale $P_{\max} = p_b + p_a$ quand l'angle entre \vec{p}_1 et \vec{p}_2 (de modules p_a et p_b fixés) varie. De même, le module de $\vec{P} = \vec{p}_3 + \vec{p}_4$ varie entre $p_d - p_c$ et $p_d + p_c$, si l'on suppose que $p_d > p_c$. Comme on a $p_a^2 + p_b^2 = p_c^2 + p_d^2$ et que $p_a = P_{\min}$, on peut aisément montrer que $p_b - p_a > p_d - p_c$ et que $p_d + p_c > p_b + p_a$. L'intervalle de variation de $P = |\vec{P}|$, qui est l'intersection des 2 intervalles $[p_b - p_a, p_b + p_a]$ et $[p_d - p_c, p_d + p_c]$ est donc $[p_b - p_a, p_b + p_a]$ et a pour largeur $2p_a = 2P_{\min}$

• Reportons (B.6) dans (B.2). Il vient

$$2m^3 \delta(E_a + E_b - E_c - E_d) \int_{U(\vec{r}) \leq E_{\min}} d^3r \int \frac{1}{P^2} d^3P \quad (\text{B.10})$$

$$\text{Or } \int \frac{1}{P^2} d^3P = 4\pi \int_{p_b - p_a}^{p_b + p_a} dP = 8\pi p_a = 8\pi P_{\min} = 8\pi \sqrt{2m(E_{\min} - U(\vec{r}))} \quad (\text{B.11})$$

En reportant (B.11) dans (B.10) et en utilisant l'expression (5.34) de $\rho(E)$, on retrouve bien (6.38).