18.11.97

Condensation de Bose-Einstein
Bosons sans interactions dans un piège (suite)

(3) Corrections dues au nombre fini de particules

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

- 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 ε_n du Hamiltonien $\hat{h}$ à 1 particule valent :

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega = (n_x + n_y + n_z)\hbar\omega \qquad (5.1)$$

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

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

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

En effet, n_x peut prendre $n+1$ valeurs : $0, 1, .. n$. 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

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

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

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

Le 1er terme du 2ème membre de (5.4), $\frac{1}{2}\frac{\varepsilon^2}{(\hbar\omega)^3}$, est celui déjà calculé en (4.14). Le 2ème terme, $\frac{3}{2}\frac{\varepsilon}{(\hbar\omega)^2}$, 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 :

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

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

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

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

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

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

$$k T_c^{(0)} = \hbar\omega \left[\frac{N}{g_3(1)}\right]^{1/3} \qquad (5.8)$$

- 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)

$$k T_c = k T_c^{(0)} - \frac{1}{2}\,\frac{g_2(1)}{g_3(1)}\,\hbar\omega \qquad (5.9)$$

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

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

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 exacte. Partons de

$$\overline{N_j} = \frac{z\,e^{-\beta\varepsilon_j}}{1 - z\,e^{-\beta\varepsilon_j}} = \sum_{\ell=1}^{\infty} z^\ell\, e^{-\beta\ell\varepsilon_j} \qquad (5.11)$$

avec

$$\varepsilon_j = (n_x + n_y + n_z)\,\hbar\omega \qquad (5.12)$$

On obtient

$$\sum_j \overline{N_j} = \sum_{n_x}\sum_{n_y}\sum_{n_z}\sum_{\ell=1}^{\infty} z^\ell\, e^{-\beta\ell(n_x+n_y+n_z)\hbar\omega} \qquad (5.13)$$

Par ailleurs,

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

de sorte que

$$\sum_j \overline{N_j} = N = \sum_{\ell=1}^{\infty} z^\ell \left(\frac{1}{1-\kappa^\ell}\right)^3 \qquad (5.15)$$

avec

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

- 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 $T \simeq T_c^{(0)}$.

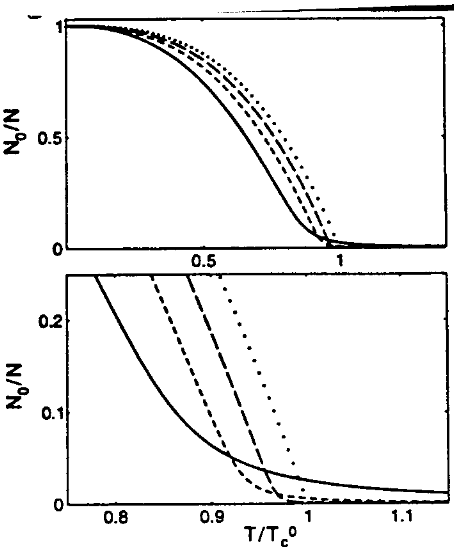


Fig. 1 (Extraite de [11])

Il apparait très clairement que le fait d'avoir un nombre fini N de particules "arrondit" 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 $N \to \infty$, 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 :

$$\sum_j \overline{N_j} = N = \sum_{\ell=1}^{\infty} z^{\ell} \prod_{i=1,2,3} \frac{1}{1-(\kappa_i)^{\ell}} \qquad (5.17)$$

où

$$\kappa_i = e^{-\hbar\omega_i/kT} \qquad i = 1, 2, 3 \qquad (5.18)$$

– 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

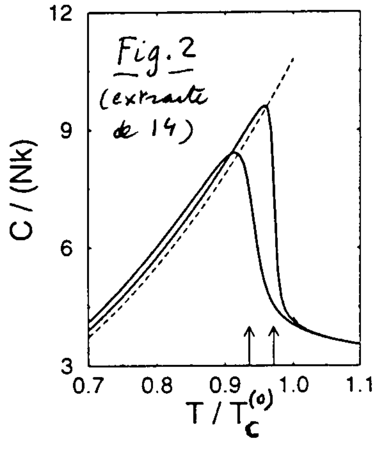


Fig. 2 (extraite de 14)

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 $N \to \infty$

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

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega \qquad n = n_x + n_y \tag{5.19}$$

Dégénérescence g_n de ε_n $\qquad g_n = n+1 \qquad (5.20)$

Densité d'états $\rho(\varepsilon)$ (terme prépondérant) $\qquad \rho(\varepsilon) = \dfrac{\varepsilon}{(\hbar\omega)^2} \qquad (5.21)$

Nombre de particules excitées N_e et condensées N_0

- $$N_e = \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 \int_0^\infty dx\, x \frac{z e^{-x}}{1-ze^{-x}} = \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 \sum_{\ell=1}^\infty \frac{z^\ell}{\ell^2} \underbrace{\int_0^\infty du\, u\, e^{-u}}_{\Gamma(2)=1}$$
$$= \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 g_2(z) \tag{5.22}$$

- $g_2(1) = 1.465$ est fini

- Température critique T_c $\qquad N = \left(\dfrac{kT_c}{\hbar\omega}\right)^2 g_2(1) \qquad (5.23)$

- Pour $T \leqslant T_c$
$$N = N_0 + \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 g_2(1) \tag{5.24}$$
$$= N_0 + \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 N$$

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

- Pour $T > T_c$ $\qquad N = \left(\dfrac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 g_2(z) \qquad (5.26)$

Log Z_G

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

Energie U

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

$T \leqslant T_c$ $\qquad U = 2NkT\left(\dfrac{T}{T_c}\right)^2 \dfrac{g_3(1)}{g_2(1)} \qquad (5.29)$

$T > T_c$ $\qquad U = 2NkT\,\dfrac{g_3(z)}{g_2(z)} \qquad (5.30)$

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

Chaleur spécifique

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

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

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 $N \to \infty$, $\omega \to 0$ avec $N\omega^2 = C^{te}$ pour avoir la densité au centre du nuage thermique $\frac{N}{(\Delta\omega_T)^2} \propto N\omega^2$ 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

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

et on se place à température T suffisamment basse pour que

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

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 $N \to \infty$, $\omega \to 0$ avec $N\omega = C^{te}$

Densité d'états $\rho(\varepsilon)$

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

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\hbar\omega} \qquad (5.36)$$

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

Nombre de particules excitées N_e et condensées N_0

$$N_e = \frac{kT}{\hbar\omega}\int_{x_{min}=\frac{\varepsilon_{min}}{kT}}^{\infty} dx \; \frac{z e^{-x}}{1-ze^{-x}} \qquad (5.37)$$

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 $\rho(\varepsilon)$ n'est plus nul en $\varepsilon = 0$, il faut commencer l'intégrale à une valeur non nulle de ε (ou de $x = \varepsilon/kT$) pour ne tenir compte que des états excités. Comme l'énergie du 1er 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

$$N_e = \frac{kT}{\hbar\omega}\int_{\frac{\hbar\omega}{2kT}}^{\infty} dx \; \frac{z e^{-x}}{1-ze^{-x}} = \frac{kT}{\hbar\omega}\sum_{\ell=1}^{\infty} z^\ell \int_{\frac{\hbar\omega}{2kT}}^{\infty} dx \, e^{-\ell x}$$

$$= \frac{kT}{\hbar\omega}\sum_{\ell=1}^{\infty}\frac{\left(z\,e^{-\hbar\omega/2kT}\right)^\ell}{\ell} = -\frac{kT}{\hbar\omega}\,\mathrm{Log}\left[1 - z e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}}\right] \qquad (5.38)$$

Température critique

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

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

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

$$N = \frac{kT_c}{\hbar\omega}\,\mathrm{Log}\,\frac{2kT_c}{\hbar\omega} \qquad (5.40)$$

Nombre de particules condensées

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

$$N = N_0 + \frac{kT}{\hbar\omega}\,\mathrm{Log}\,\frac{2kT}{\hbar\omega} \qquad (5.41)$$

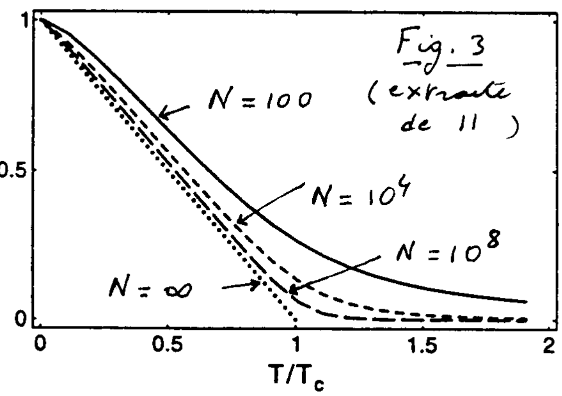
En combinant (5.40) et (5.41), on obtient

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

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

$$\sum_{n=a}^{b} f(n) = \int_a^b f(x)\,dx + \frac{1}{2}\left[f(b)+f(a)\right] + \frac{1}{12}\left[f'(b)-f'(a)\right] + \cdots \qquad (5.43)$$

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 2ème membre) est encore meilleure.

Limite thermodynamique

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

$$\frac{kT_c}{\hbar\omega} \simeq \frac{N}{\mathrm{Log}N} \quad \longrightarrow \quad kT_c \simeq \frac{N\hbar\omega}{\mathrm{Log}\,N} \qquad (5.44)$$

- On voit que, dans la limite $N \to \infty$, $\omega \to 0$ avec $N\omega = C^{te}$, la présence de $\mathrm{Log}\,N$ au dénominateur de (5.44) entraine que $T_c \to 0$

- 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.

Boites à 2 dimensions

- Considérons de nouveau des bosons sans interactions dans une boite. Mais nous considérons maintenant une boite 2D : carré de coté 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

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

Comme $L \gg \lambda_{dB}$, on peut remplacer $\operatorname{Log}\left[L/\lambda_{dB}(T_c)\right]$ par $\frac{1}{2}\operatorname{Log} N$ ce qui montre que $\left[\frac{1}{\lambda_{dB}(T_c)}\right]^2$ est proportionnel à $\frac{N}{L^2 \operatorname{Log} N}$ et tend donc vers 0 quand $N \to \infty$, $L \to \infty$ avec $N/L^2 = C^{te}$. Il en est de même de T_c. Il n'y a donc pas de condensation de Bose Einstein dans une boite 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. Masut 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 M. Holthaus, Phys. Lett. A208, 188 (1995)

15 - T. Haugset, H. Haugerud and J.O. Andersen, Phys. Rev. A55, 2922 (1997)

16 - H. Haugerud, T. Haugset 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.