

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 proportionnel 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 : $E = (\frac{3}{2} + \delta) N k_B T$ 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_i 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 $f(\epsilon)$ 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 $f(\epsilon)$. Le résultat important d'un tel calcul est que, à chaque instant, $f(\epsilon)$ est très bien approximée par une exponentielle de Boltzmann, tronquée à zéro pour des énergies ϵ supérieures à la profondeur ϵ_i 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 $e^{-\epsilon/k_B T}$. 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 - Théories 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 rassemblée dans l'opérateur densité $\hat{D}$ (hermitique, semipositif, de trace 1). Diagonalisons $\hat{D}$ sous la forme

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

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

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

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

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

- Démonstration

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

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

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

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

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

ce qui donne

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

et démontre la 1^{re} 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

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

qui on peut réécrire 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^{de} 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)

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

On a donc

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

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)

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

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 $\hat{D}(2)$.

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

- 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 $\hat{D}(1,2)$, 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)

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

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 $\hat{D}_b$

$$\begin{cases} S[\lambda \hat{D}_a + (1-\lambda) \hat{D}_b] \geq \lambda S[\hat{D}_a] + (1-\lambda) S[\hat{D}_b] \\ \text{égalité réalisée si et seulement si } \hat{D}_a = \hat{D}_b \end{cases} \quad (10.23)$$

- 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).