

Buts de ce cours

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

① Quelques résultats généraux à la limite semiclassiqueLimite semiclassique

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

Densité d'états $\rho(E)$

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

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

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

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

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

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

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

Densité spatiale $n(\vec{r})$

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

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

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

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

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

IV-2

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

② Piège harmonique à 3 dimensions

a - Calcul de la densité d'états

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

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

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

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

on obtient, après des calculs sans difficultés

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

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

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

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

b. Etude simple du phénomène de condensation

IV-3

Nombre de particules dans des états excités N_e

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

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

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

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

Température critique T_c - Nombre de particules condensées N_0

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

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

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

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

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

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

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

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

c'est à dire encore

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

équation qui est l'équivalent de (3.35)

IV.4]

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

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

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

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

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

C - Fonction de partition - Energie totale

Calcul de $\log Z_G$

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

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

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

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

avec

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

Calcul de U

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

d. Chaleur spécifique

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

e - Condensation spatiale

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

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

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

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

ce qui donne

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

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

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

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

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

On en déduit

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

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

f - Limite thermodynamique

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

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

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

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

Références : Seront données à la fin du cours V