TD de Physique Statistique n° 9

Condensation de Bose-Einstein dans un piège harmonique

Un gaz parfait quantique de bosons est composé de N particules ponctuelles de masse m, de spin nul, confinées dans un potentiel harmonique. Le hamiltonien du système est $H_{tot} = \sum_{i=1}^{N} H(\vec{r}_i, \vec{p}_i\,)$, où $H(\vec{r}, \vec{p}\,) = \vec{p}^{\,2}/(2m) + m\,\omega^2\,\vec{r}^{\,2}/2 - 3\,\hbar\,\omega/2$ est appelé hamiltonien "à un corps" (on a choisi le zéro des énergies de sorte que le fondamental de H a une énergie nulle).

1/ Calculer la densité d'état $\rho(\varepsilon)$ du hamiltonien H à partir de la règle semi-classique (cf. TD2). On se placera dans la limite $\varepsilon \gg \hbar\,\omega$ qui correspond à la limite classique (dont on verra qu'elle est pertinente à la limite thermodynamique).

2/ Rappeler sans démonstration l'expression du nombre moyen d'occupation $<n_{\varepsilon_{\underline{\nu}}}>$ d'un état propre d'énergie $\varepsilon_{\underline{\nu}}$[1]. Montrer que le potentiel chimique μ est nécessairement négatif.

3/ On se place à température élevée, de telle sorte qu'on imagine que la condition $\mu < 0$ est bien vérifiée (comme dans le cas classique à haute température). On travaille dans l'ensemble grand canonique, à la limite thermodynamique.

(a) Écrire la relation implicite qui permet de calculer $\mu(T, N)$.

(b) Pour $z \in [0, 1]$, on définit :

$$g_3(z) = \frac{1}{2}\int_0^{\infty} \frac{x^2}{z^{-1}e^x - 1}\mathrm{d}x\ . \tag{1}$$

Récrire l'équation précédente en faisant apparaître $g_3(e^{\beta\mu})$. Pourquoi se limite-t-on à $z \in [0, 1]$?

(c) On admettra (ou on démontrera) que :

$$g_3(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^3} \quad \text{et} \quad \sum_{n=1}^{\infty} n^{-3} = \zeta(3) = 1,202..\ . \tag{2}$$

Tracer l'allure de $g_3(z)$ pour $z \in [0, 1]$. Proposer une détermination graphique de $z = e^{\beta\,\mu(T,N)}$.

(d) Montrer qu'à haute température le développement (2) permet de retrouver le résultat du gaz classique sans interaction contenu dans un puits harmonique : $\mu_{\text{class}}(T) = -3\,k_B T \ln(T/T^*)$. Le potentiel chimique exact se situe-t-il au dessus ou au dessous de la valeur classique ? Tracer son allure.

(e) Monter que lorsque la température diminue, on arrive à une température T_{BE} où $\mu = 0$. Commenter. Donner l'expression de T_{BE}. Calculer sa valeur pour des données expérimentales typiques ($N = 10^6$ et $\omega = 2\pi \times 100$ Hz)[2]. Comparer la valeur de T_{BE} à celle que l'on obtient pour la température en dessous de laquelle des particules discernables (sans interaction) se placent toutes dans le fondamental.

[1] $\underline{\nu}$ est une notation abrégée pour (ν_1, ν_2, ν_3) où $\nu_i \in \mathbb{N}$.

[2] On rappelle que $\hbar = 1,05 \times 10^{-34}$ J.s et que $k_B = 1,38 \times 10^{-23}$ J/K.

4/ Aux températures inférieures à T_{BE} on fait les deux hypothèses *ad hoc* suivantes :

(i) $\mu(T, N)$ reste fixé à 0.

(ii) le nombre moyen de particules dans l'état fondamental $<n_0>$ ne pouvant plus être évaluée en utilisant l'expression habituelle (déterminée à la question **2/**) qui diverge, on écrit :

$$N = N_0(T) + \sum_{\underline{\nu} \neq (0,0,0)} \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_{\underline{\nu}}} - 1} \,, \tag{3}$$

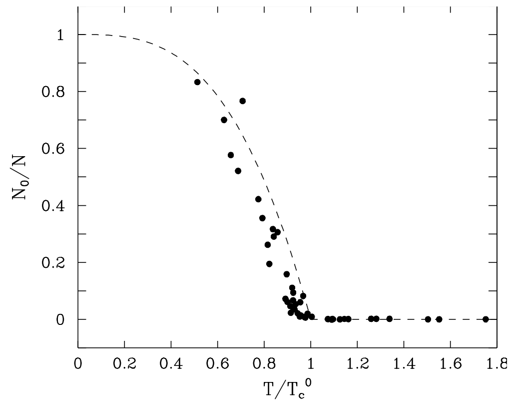
où $N_0(T)$ est le nombre de particules dans l'état fondamental. Il est (pour l'instant) indéterminé.

(a) Justifier que le second terme du membre de gauche de (3) peut s'écrire comme

$$N'(T) = \int_0^{+\infty} \mathrm{d}\varepsilon \, \rho(\varepsilon) \, \frac{1}{e^{\beta\varepsilon} - 1} \,. \tag{4}$$

Que représente $N'(T)$?

(b) Montrer que $N'(T)/N = (T/T_{BE})^3$. Donner alors l'expression de $N_0(T)$. Tracer son allure. Comparer avec les résultats expérimentaux ci-contre [reproduisant les résultats du groupe de JILA pour 40000 atomes de ^{87}Rb : Phys. Rev. Lett. **77**, 4984 (1996)].

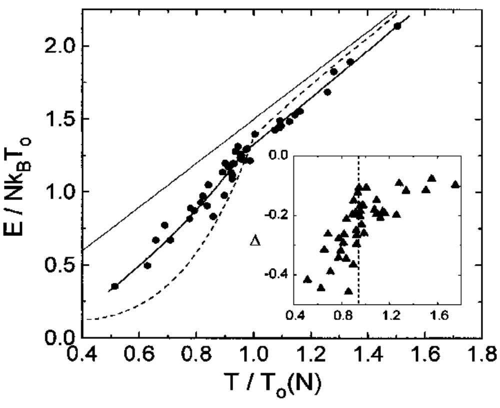


5/ On admettra (ou on démontrera) que :

$$\frac{1}{6} \int_0^{\infty} \frac{x^3 \, \mathrm{d}x}{e^x - 1} = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-4} = \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90} = 1,082.. \,. \tag{5}$$

Montrer alors que, pour $T \leq T_{BE}$, l'énergie moyenne par particules est donnée par l'expression :

$$\frac{E}{N \, k_B T_{BE}} = \frac{3\,\zeta(4)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_{BE}}\right)^4 \,. \tag{6}$$



Comparer avec les résultats expérimentaux ci-dessus[3]. Calculer la capacité calorifique à volume constant du gaz en fonction de N, T et T_{BE}. Comparer ce résultat à la capacité calorifique d'un gaz classique.

[3]Dans la figure, les cercles sont les résultats expérimentaux du groupe de JILA. La ligne droite est le résultat classique. La ligne pointillée correspond à la formule (6) et à la formule qui la prolonge pour $T > T_{BE}$. La courbe en trait plein est un fit des résultats expérimentaux. L'encart représente l'écart Δ entre le résultat classique et les données expérimentales. L'expérience semble indiquer une température de transition $0,94\,T_{BE}$. Quelles sont les causes possibles du phénomène ? [il est expliqué pour une bonne partie par un argument avancé par Ketterle et van Druten, Phys. Rev. A **54**, 656 (1996), cf. la discussion dans l'article du groupe de JILA].