Christophe Texier 11 mai 2018

Examen du 11 mai 2018 — Solutions

Question de cours

Considérons N atomes soumis à un potentiel extérieur et décrits classiquement. La distribution canonique prend la forme

$$\rho^{c}(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}, \cdots, \vec{r}_{N}, \vec{p}_{1}, \cdots, \vec{p}_{N}) = C e^{-\beta H} \propto \exp \left\{ -\beta \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\vec{p}_{i}^{2}}{2m} + V(\vec{r}_{i}) \right) \right\}$$
(8)

et C est une constante de normalisation t.q. $\int_{\text{esp. des phases}} \rho^c = 1$. Elle a une forme $factoris\acute{e}e$, à double titre : (i) impulsion/position (ii) entre les différents atomes qui sont indépendants (classiquement). La loi marginale pour une position, i.e. la densité moyenne, est donc trivialement

$$n(\vec{r}) = A e^{-\beta V(\vec{r})} \tag{9}$$

où A est t.q. $\int d\vec{r} \, n(\vec{r}) = N$. Pour le potentiel quadratique, la densité a la forme gaussienne

$$n(\vec{r}) \propto \exp{-\frac{m\omega^2 \vec{r}^2}{2k_B T}} \tag{10}$$

qui montre que le gaz s'étale sur une distance typique $\sim \sqrt{k_B T/(m\omega^2)}$ (plus la température est grande, plus l'agitation thermique augmente et plus le gaz s'étale).

BEC dans un piège harmonique : effet de taille finie

On étudie un gaz de N bosons dans un piège harmonique isotrope (comme dans le TD).

1/ La règle semiclassique permet facilement de trouver la densité d'états intégrée :

$$\Phi(\varepsilon) = \int \frac{\mathrm{d}^{3}\vec{r}\mathrm{d}^{3}\vec{p}}{h^{3}} \; \theta_{\mathrm{H}} \left(\varepsilon - \frac{1}{2m}\vec{p}^{2} - \frac{1}{2}m\omega^{2}\vec{r}^{2} \right) = \left(\frac{2}{h\omega} \right)^{3} \underbrace{\int \mathrm{d}^{3}\vec{R}\mathrm{d}^{3}\vec{P} \; \theta_{\mathrm{H}} \left(\varepsilon - \vec{P}^{2} - \vec{R}^{2} \right)}_{\text{(vol. sphère de rayon } \sqrt{\varepsilon}) = \frac{\pi^{3}}{\Gamma(4)}\varepsilon^{3}}$$

Finalement $\Phi(\varepsilon) = \frac{1}{6} \left(\frac{\varepsilon}{\hbar \omega} \right)^3$ d'où $\rho_{\rm sc}(\varepsilon) = \Phi'(\varepsilon) = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon^2}{(\hbar \omega)^3}$.

- 2/ Distribution de Bose-Einstein : $\overline{n}^{\mathrm{B}}(\varepsilon) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}$ avec $\mu < \varepsilon_0 = 0$.
- 3/ À la limite thermodynamique, on écrit

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon \, \rho_{\rm sc}(\varepsilon) \, \overline{n}^{\rm B}(\varepsilon) \tag{11}$$

qui est une contrainte entre N, T et μ .

4/ BEC : accumulation d'un nombre macroscopique de bosons dans le fondamental individuel, les états excités gardant des occupations microscopiques. La transition se produit à $T=T_{\rm BE}$ telle que $\mu=0$, i.e.

$$N = \int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon \, \frac{\rho_{\mathrm{sc}}(\varepsilon)}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon} - 1} = \frac{1}{2} \Gamma(3) \zeta(3) \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega}\right)^3 \text{ pour } T = T_{\mathrm{BE}} \quad \text{d'où } k_B T_{\mathrm{BE}} = \left(\frac{N}{\zeta(3)}\right)^{1/3} \hbar \omega \,.$$

5/ Pour $T \leq T_{\rm BE}$ le potentiel chimique reste bloqué à sa valeur maximale, $\mu = 0$. L'intégrale donne le nombre de bosons dans les états excités

$$N_{\rm ex}(T) = \int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon \, \frac{\rho_{\rm sc}(\varepsilon)}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon} - 1} = \zeta(3) \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega}\right)^3 = N \, \left(\frac{T}{T_{\rm BE}}\right)^3$$

et l'on doit singulariser la contribution (macroscopique) du fondamental $N=N_0(T)+N_{\rm ex}(T)$ d'où

$$\frac{N_0(T)}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_{\rm BE}}\right)^3$$
 (12)

6/ Nous allons étudier l'effet de la première correction à $\rho_{\rm sc}(\varepsilon)$. On connait la dégénérescence $d_{\ell} = (\ell^2 + 3\ell + 1)/2$ des niveaux. Puisqu'ils sont équidistants, en utilisant $\ell = \varepsilon_{\ell}/(\hbar\omega)$, on a

$$\rho(\varepsilon_{\ell}) \simeq \frac{d_{\ell}}{\hbar \omega} \simeq \frac{1}{2\hbar \omega} \left[\left(\frac{\varepsilon_{\ell}}{\hbar \omega} \right)^2 + 3 \frac{\varepsilon_{\ell}}{\hbar \omega} + 1 \right] = \rho_{\rm sc}(\varepsilon) + \delta \rho(\varepsilon) \quad \text{avec } \delta \rho(\varepsilon) \simeq \frac{3 \varepsilon}{2(\hbar \omega)^2} \ .$$

7/ Dans la suite, on recalcule l'intégrale donnant $N_{\rm ex}(T)$ avec $\rho(\varepsilon)$, ce qui apporte une nouvelle contribution :

$$\begin{split} N_{\rm ex}(T) &= \int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon \, \frac{\rho_{\rm sc}(\varepsilon) + \delta \rho(\varepsilon)}{\mathrm{e}^{\beta \varepsilon} - 1} \simeq \zeta(3) \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega}\right)^3 + \frac{3}{2} \zeta(2) \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega}\right)^2 \\ &= N \, \left(\frac{T}{T_{\rm BE}}\right)^3 + \frac{3}{2} \zeta(2) \left(\frac{N}{\zeta(3)}\right)^{2/3} \left(\frac{T}{T_{\rm BE}}\right)^2 \end{split}$$

d'où

$$\frac{N_0(T)}{N} \simeq 1 - \left(\frac{T}{T_{\rm BE}}\right)^3 - N^{-1/3} \frac{3\zeta(2)}{2\zeta(3)^{2/3}} \left(\frac{T}{T_{\rm BE}}\right)^2$$
(13)

Puisque la dernière correction est négative, cette fonction s'annule à une température $\widetilde{T}_{\rm BE} < T_{\rm BE}$.

8/ On cherche l'expression de $\widetilde{T}_{\rm BE}$, telle que $N_0(\widetilde{T}_{\rm BE})=0$ ou $N_{\rm ex}(\widetilde{T}_{\rm BE})=N$. Introduisons $\widetilde{T}_{\rm BE}=T_{\rm BE}+\delta T_{\rm BE}$ et $\epsilon\stackrel{\rm def}{=}\delta T_{\rm BE}/T_{\rm BE}\ll 1$. L'équation $N_{\rm ex}(\widetilde{T}_{\rm BE})=N$ devient

$$(1+\epsilon)^3 + N^{-1/3} \frac{3\zeta(2)}{2\zeta(3)^{2/3}} (1+\epsilon)^2 \simeq 1$$

On développe l'équation au premier ordre en $\epsilon = \mathcal{O}(N^{-1/3})$: $1 + 3\epsilon + N^{-1/3} \frac{3\zeta(2)}{2\zeta(3)^{2/3}} \simeq 1$. Finalement $\epsilon = -N^{-1/3} \frac{\zeta(2)}{2\zeta(3)^{2/3}}$, i.e.

$$k_B \widetilde{T}_{BE} \simeq \left[\left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3} - \frac{\zeta(2)}{2\zeta(3)} \right] \hbar \omega$$
 (14)

9/ A.N.: Pour $\omega \simeq 100~{\rm Hz}$ et des atomes de rubidium, on obtient $\hbar\omega \simeq 6\times 10^{-14}~{\rm eV}$ et $\ell_\omega \simeq 2.6~\mu{\rm m}$ (qui donne la distance sur laquelle s'étale la fonction d'onde du fondamental individuel du puits harmonique). Pour $N=10^6$ atomes, on a $T_{\rm BE}\simeq 66~{\rm nK}$.

La correction à la température critique est $\delta T_{\rm BE}/T_{\rm BE} \simeq -\frac{\zeta(2)}{2\zeta(3)^{2/3}}N^{-1/3} \simeq -0.007$. On compare cette correction à celle due à l'interaction répulsive $\delta T_{\rm BE}^{(int)}/T_{\rm BE} \simeq -1.3\frac{a}{\ell_{\omega}}N^{1/6} \simeq -0.03$ (qui traduit que l'étalement du gaz diminue la densité). La seconde correction est un peu plus grande, mais les deux corrections sont du même ordre de grandeur. Si N diminue, $\delta T_{\rm BE}/T_{\rm BE}$ deviendrait plus importante que $\delta T_{\rm BE}^{(int)}/T_{\rm BE}$.

Pour en savoir plus sur la BEC:

On pourra consulter l'article de revue : F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Review of Modern Physics **71**, p. 463 (1999). Les deux équations (13,14) sont les équations 19 et 20 de cette revue, qui donne les références dans lesquelles elles ont été obtenues, en 1995.

Gaz d'atomes fermioniques dans un piège harmonique

On considère maintenant un gaz de fermions dans un piège harmonique. Le gaz de fermions ultrafroid s'est révélé plus difficile à étudier expérimentalement car les collisions sont moins efficaces dans le cas fermionique que dans le cas bosonique. Or les collisions jouent un rôle crucial dans la technique de refroidissement évaporatif et la relaxation vers un équilibre thermodynamique. L'origine de la moins bonne efficacité des collisions dans le cas fermionique est liée au principe de Pauli, qui limite les processus de collisions. Les expérimentateurs utilisent des astuces pour refroidir les fermions, par exemple en mélangeant les fermions à des bosons, se refroidissant plus efficacement et assurant la thermalisation des fermions grâce aux collisions bosons/fermions. Ceci explique que les gaz fermioniques ont été étudiés plus tardivement que les gaz de bosons.

La densité d'états est la même que celle calculée plus haut pour les bosons, en tenant compte de la dégénérescence de spin (deux) : $\rho(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{(\hbar\omega)^3}$.

1/ La distribution de Fermi-Dirac est : $\overline{n}^{F}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$. Cela correspond au nombre moyen de fermion dans un état individuel d'énergie ε , et aussi à la probabilité pour qu'un état soit occupé. À T=0, la distribution est une marche, $\overline{n}^{F}(\varepsilon) = \theta_{H}(\mu-\varepsilon)$.

2/ À la limite thermodynamique, le nombre de fermions et l'énergie du gaz s'expriment comme (formules grands canoniques)

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon \, \rho(\varepsilon) \, \overline{n}^{\mathrm{F}}(\varepsilon) \qquad \text{et} \qquad E = \int_0^\infty d\varepsilon \, \rho(\varepsilon) \, \varepsilon \, \overline{n}^{\mathrm{F}}(\varepsilon)$$

3/ Si T=0 on obtient $N=\int_0^\mu \mathrm{d}\varepsilon \, \rho(\varepsilon)=\frac{1}{3}\left(\frac{\mu}{\hbar\omega}\right)^3$ i.e. $\mu=(3N)^{1/3}\hbar\omega$. La définition de l'énergie de Fermi est $\varepsilon_F\stackrel{\mathrm{def}}{=}\mu^\mathrm{c}(T=0,N)$, d'où $\varepsilon_F=(3N)^{1/3}\hbar\omega$.

4/ Énergie.

- a) Dans le régime classique $E(T)=3Nk_BT$ (th. d'équipartition). Validité : $T\gg T_F\stackrel{\text{def}}{=}\varepsilon_F/k_B$.
- b) Pour T=0, on obtient $E(T=0)\equiv E_0=\int_0^\mu \mathrm{d}\varepsilon \,\rho(\varepsilon)\,\varepsilon=\frac{1}{4}\frac{\mu^4}{(\hbar\omega)^3}$ (expression grand canonique). On déduit $E_0=\frac{3}{4}N\varepsilon_F=\frac{1}{4}(3N)^{4/3}\hbar\omega$.
- c) Partant du régime dilué (classique) et abaissant la température, l'énergie est d'abord linéaire, $E(T) \simeq 3Nk_BT$, puis sature à la valeur $E(T) \simeq E_0$ (régime quantique dégénéré). Donc le comportement de $E(T)/(3Nk_BT)$ est $\simeq 1$ à haute T, puis diverge comme $E(T)/(3Nk_BT) \simeq E_0/(3Nk_BT) \propto 1/T$ pour $T \ll T_F$. C'est précisément ce que montre la figure, qui démontre donc qu'aux plus basses températures, le gaz est dans le régime dégénéré.

5/ Densité.

a) Introduisons $\rho(\varepsilon) = 2 \int \frac{d^3 \vec{r} d^3 \vec{p}}{h^3} \delta(\varepsilon - \varepsilon(\vec{r}, \vec{p})) dans$

$$N = \int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon \, \rho(\varepsilon) \, \overline{n}^\mathrm{F}(\varepsilon) = \int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon \, 2 \int \frac{\mathrm{d}^3 \vec{r} \mathrm{d}^3 \vec{p}}{h^3} \, \delta(\varepsilon - \varepsilon(\vec{r}, \vec{p})) \, \overline{n}^\mathrm{F}(\varepsilon) = 2 \int \frac{\mathrm{d}^3 \vec{r} \mathrm{d}^3 \vec{p}}{h^3} \, \overline{n}^\mathrm{F}(\varepsilon(\vec{r}, \vec{p}))$$

ce qui montre que $f(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{2}{h^3} \overline{n}^{\mathrm{F}}(\varepsilon(\vec{r}, \vec{p}))$ est la fonction de distribution dans l'espace des phases à un fermion.

b) Dans le régime classique $\overline{n}^F(\varepsilon) \ll 1 \ \forall \varepsilon$, ce qui se produit pour $e^{\beta\mu} \ll 1$. Dans ce cas $\overline{n}^F(\varepsilon) \simeq e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}$ (ce qu'on a noté $\overline{n}^{MB}(\varepsilon)$ en cours). On déduit

$$f(\vec{r}, \vec{p}) \simeq \frac{2}{h^3} e^{\beta \mu} e^{-\beta \varepsilon (\vec{r}, \vec{p})}$$

c'est la distribution canonique pour une particule (résultat classique). La densité est donc

$$n(\vec{r}) = \int d^3 \vec{p} f(\vec{r}, \vec{p}) \propto e^{-\beta V(\vec{r})}$$

qui est ici la distribution gaussienne de largeur typique $\sim \sqrt{k_B T/(m\omega^2)}$ (on a retrouvé le résultat de la question de cours... jusque là tout va bien ©).

c) Dans la limite T=0 (gaz complètement dégénéré), $\overline{n}^F(\varepsilon)=\theta_H(\varepsilon_F-\varepsilon)$:

$$n(\vec{r}) = \frac{2}{h^3} \int d^3 \vec{p} \, \theta_{\rm H} \left(\varepsilon_F - \frac{\vec{p}^2}{2m} - V(\vec{r}) \right) = \frac{4\pi}{h^3} \underbrace{\int_0^\infty dp \, p^2 \, \theta_{\rm H} \left(2m(\varepsilon_F - V(\vec{r})) - p^2 \right)}_{=\frac{1}{3} \left(\sqrt{2m(\varepsilon_F - V(\vec{r}))} \right)^3}$$

Le résultat est donc

$$n(\vec{r}) = \frac{8\pi}{3h^3} [2m(\varepsilon_F - V(\vec{r}))]^{3/2}$$
:

c'est la forme générale de la densité à T=0 dans l'approximation de Thomas-Fermi. Pour le confinement harmonique, on obtient

$$n(\vec{r}) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{m\omega}{h}\right)^3 \left[R_F^2 - \vec{r}^2\right]^{3/2}$$
(15)

où $\varepsilon_F = (1/2)m\omega^2 R_F^2$, i.e. $R_F = \sqrt{2}(3N)^{1/6}\ell_\omega$.

Expérimentalement, c'est plutôt la densité doublement intégrée qui est mesurée

$$n^{(1)}(z) \stackrel{\text{def}}{=} \int \mathrm{d}x \mathrm{d}y \, n(\vec{r}) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{m\omega}{h}\right)^3 \underbrace{\int \mathrm{d}x \mathrm{d}y \, \left[R_F^2 - z^2 - x^2 - y^2\right]^{3/2}}_{=2\pi \int_0^{\sqrt{R_F^2 - z^2}} \mathrm{d}\rho \, \rho \, \left[R_F^2 - z^2 - \rho^2\right]^{3/2} = \pi \int_0^{R_F^2 - z^2} \mathrm{d}t \, \left[R_F^2 - z^2 - t\right]^{3/2}$$

d'où finalement

$$n^{(1)}(z) = \frac{48N}{15\pi} \frac{\left[R_F^2 - z^2\right]^{5/2}}{R_F^6}$$
(16)

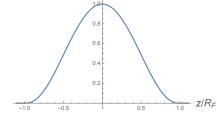


FIGURE 2 : Densité doublement intégrée pour le gaz de fermions dégénéré à T=0.

d) Comparaison avec le gaz de bosons à T=0.— À cause du phénomène de condensation de Bose-Einstein, les bosons se regroupent dans le fondamental individuel, qui a une faible extension spatiale, $\sim \ell_{\omega}$. Les interactions répulsives deviennent alors dominantes. On a obtenu en cours quelques résultats simples décrivant le gaz de bosons en interaction répulsive. On compare avec les résultats obtenus ici pour les fermions :

Fermions sans int. à $T=0$	Bosons avec int. répulsive à $T=0$
$\varepsilon_F \sim N^{1/3}\hbar\omega$	$\mu \sim \left(N\frac{a}{\ell_{\omega}}\right)^{2/5}\hbar\omega$
$n^{(1)}(z) \propto (R_F^2 - z^2)^{5/2}$	$n^{(1)}(z) \propto (R_B^2 - z^2)^2$
$R_F \sim N^{1/6} \ell_\omega$	$R_B \sim \left(N\frac{a}{\ell_\omega}\right)^{1/5} \ell_\omega$

Finalement, les résultats ne sont pas si éloignés, même si les exposants diffèrent... La similitude entre le gaz de bosons en *interactions répulsives* et le gaz de fermions sans interaction s'explique par le fait que le principe de Pauli est responsable d'une **interaction répulsive** effective entre les fermions.

Sur la figure, les profils de densité pour des gaz de 6 Li (fermions) et 7 Li (bosons) sont comparés. Notez toutefois que le lien avec la discussion présente est délicat car l'expérience est réalisée à T finie, pas si petite comparée à T_F ou $T_{\rm BE}$.

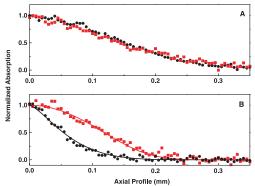


Fig. 2. Comparison of 6 Li and 7 Li atom cloud axial profiles. The red squares correspond to 6 Li, and the black circles to 7 Li. (A) Data from the top image of Fig. 1, corresponding to 7 L $_F = 1.0$ and 7 L $_C = 1.5$. (B) Data from the lower image of Fig. 1, corresponding to 7 L $_F = 0.25$ and 7 L $_C = 1.0$. The fits to the data are shown as solid lines.

FIGURE 3 : Figure tirée de : A. G. Truscott et al, Observation of Fermi pressure in a gas of trapped atoms, Science **291**, p. 2570 (2001). T_c désigne $T_{\rm BE}$.

Pour en savoir plus sur les gaz de fermions :

On pourra consulter l'article de revue : S. Giorgini, L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Theory of ultracold atomic Fermi gases*, Review of Modern Physics **80**, p. 1215 (2008).