Benjamin Vest
benjamin.vest@institutoptique.fr
Correction au February 7, 2023

TD 6 Physique Statistique
Condensation de Bose-Einstein

Dans ce problème, nous allons étudier le système composé d'un ensemble de bosons piégés dans un potentiel à 3 dimensions (par exemple des paires de laser contra-propagatifs). Ce système de piégeage est placé au sein d'un gaz contenant les bosons, et qui agit comme un réservoir de particules. Le piège en lui-même limite les mouvements des particules, et agit comme un thermostat pour les particules piégées. On va donc travailler dans l'ensemble grand canonique.

Question1) Niveaux d'un OH 3D. Comme dans tous les problèmes de physique statistique, on va commencer par définir les différents états possibles du système à partir de paramètres microscopiques, ici, des nombres quantiques.

Pour un oscillateur harmonique à une dimension, le hamiltonien est donné par :

$$H_x = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{1}$$

Les niveaux de l'oscillateur harmonique 1D sont donnés par :

$$E_n^x = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{2}$$

avec ω la fréquence propre de l'oscillateur et n_x un entier positif, possiblement nul. L'état d'énergie E_n^x n'est pas dégénéré.

On peut définir un Hamiltonien à 3 dimensions :

$$H = H_x + H_y + H_z \tag{3}$$

où les H_i commutent. Une fonction d'onde du système peut donc s'écrire comme un produit de fonctions d'onde de chaque hamiltonien à une dimension. On note en général cette fonction d'onde $|n_x, n_y, n_z\rangle$. Elle est associée à la valeur propre :

$$E = \hbar\omega\left(n_x + \frac{1}{2} + n_y + \frac{1}{2} + n_z + \frac{1}{2}\right) \tag{4}$$

En sommant cette énergie sur les 3 dimensions, en supposant la fréquence propre du piège identique dans les 3 directions, on obtient :

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{5}$$

avec $n = n_x + n_y + n_z$ le nombre d'excitation de l'oscillateur harmonique, entier positif possiblement nul.

On remarque qu'il y a plusieurs triplets (n_x, n_y, n_z) vérifiant $n_x + n_y + n_z = n$. Le nombre de ces triplets définit la dégénérescence du niveau de l'oscillateur harmonique.

Choisissons de bloquer n_x en choisissant sa valeur entre 0 et n. Alors le couple (n_y, n_z) doit vérifier $(n_y + n_z) = n - n_x$.

Bloquons également n_y en choisissant sa valeur entre 0 et $n - n_x$: il y a donc $n - n_x$ choix possibles pour n_y, qui contraignent ensuite totalement le choix de n_z. On a donc $n - n_x + 1$ couples (n_y, n_z) associés à chaque valeur de n_x. La dégénérescence est alors donnée par :

$$g_n = \sum_{n_x=0}^{n} n - n_x + 1 = \sum_{p=1}^{n+1} p \tag{6}$$

où on a réorganisé la somme en écrivant $p = n - n_x + 1$. On trouve la somme des termes d'une suite arithmétique : elle vaut (nombre de termes)$\times$ (premier terme + dernier terme)/2 :

$$g_n = (n+1)\frac{(n+2)}{2} \tag{7}$$

Question 2) Maintenant que l'on a correctement dénombré les états accessibles au système, on va s'attaquer aux calculs des potentiels et fonction de partition pour en déduire les grandeurs macroscopiques du système.

Le grand potentiel s'écrit $A(\alpha, \beta) = -k_B T \ln Z$, où Z est la fonction de partition grand canonique. Il faut donc calculer cette fonction de partition :

$$Z = \sum_r \exp(-\beta E_r + \beta\mu N_r)$$

où il faut définir ce qu'est un état r. Ici, l'état *d'une particule* est défini par la donnée de trois nombres quantiques (n_x, n_y, n_z) qui représentent les niveaux d'excitation des oscillateurs harmoniques dans les 3 dimensions dans lequel sont piégés les atomes. Pour simplifier les notations (et se raccrocher aux notations du poly), appelons λ le triplet d'entier (n_x, n_y, n_z) qui caractérise un état individuel d'une particule. λ caractérise un état possible (une fonction d'onde possible) pour un atome dans le piège. À cet état à un atome est associée une énergie $\epsilon_\lambda = E_{n_x,n_y,n_z}$.

L'état *du système*, qui peut contenir très peu ou beaucoup de particules, est **en plus** donné par les nombres d'occupation des différents états individuels.

Par exemple, on peut définir un état du système avec 10 atomes dans l'état $|0,0,0\rangle$, 2 dans l'état $|1,0,0\rangle$, 3 en $|0,0,1\rangle$ et aucun dans les autres. C'est un état du système qui contient 15 atomes. On peut imaginer des états du système dans lesquels il peut y avoir moins ou beaucoup plus d'atomes.

On note $r = \{N_\lambda\}$, un état du système complet est ainsi donné par la liste des nombres d'occupation des différents états individuels accessibles recensés. À cet état sont associés :

- Un nombre de particules $N_r = \sum_\lambda N_\lambda$.

- Une énergie $E_r = \sum_\lambda N_\lambda \epsilon_\lambda$.

La fonction de partition grand-canonique s'écrit :

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_r \exp(-\beta E_r + \beta\mu N_r) \\
&= \sum_{\{N_\lambda\}} \exp(-\beta \sum_\lambda N_\lambda \epsilon_\lambda + \beta\mu \sum_\lambda N_\lambda) \\
&= \sum_{\{N_\lambda\}} \exp(-\beta \sum_\lambda N_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)) \\
&= \sum_{\{N_\lambda\}} \exp(-\beta N_0 (E_\lambda - \mu)) \exp(-\beta N_1 (\epsilon_\lambda - \mu))... \\
&= \sum_{\{N_\lambda\}} \prod_\lambda \exp(-\beta N_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)) \\
&= \prod_\lambda \sum_{N_\lambda = 0}^{+\infty} \exp(-\beta N_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)) \\
&= \left(\sum_{N_0=0}^{+\infty} \exp(-\beta N_0 (\epsilon_0 - \mu)) \right) \left(\sum_{N_1=0}^{+\infty} \exp(-\beta N_1 (\epsilon_1 - \mu)) \right) ... \\
&= \left(\frac{1}{1 - \exp(-\beta(\epsilon_0 - \mu))} \right) \left(\frac{1}{1 - \exp(-\beta(\epsilon_1 - \mu))} \right) ... \\
&= \prod_\lambda \frac{1}{1 - \exp(-\beta(\epsilon_\lambda - \mu))}
\end{aligned}
$$

Il est possible d'écrire ces deux dernières lignes à condition que $\epsilon_\lambda - \mu > 0$ pour tout λ. Une condition suffisante est donc $\epsilon_0 - \mu > 0$ soit encore, comme $\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{k_B T}$, $\alpha < \frac{3}{2\beta\hbar\omega}$.

Revenons au grand potentiel $A(\alpha, \beta) = -k_B T \ln Z$:

$$
\begin{aligned}
A(\alpha, \beta) &= -k_B T \ln Z \\
&= -k_B T \ln \left(\prod_\lambda \frac{1}{1 - \exp(-\beta(\epsilon_\lambda - \mu))} \right) \\
&= -k_B T \sum_\lambda \frac{1}{1 - \exp(-\beta(\epsilon_\lambda - \mu))}
\end{aligned}
$$

On peut remplacer la somme sur les différents états individuels λ par une somme sur les différents états d'énergies accessibles ϵ_n pondérés par la dégénérescence de chaque niveaug_n :

$$
\begin{aligned}
A(\alpha, \beta) &= -k_B T \sum_{\epsilon_n} g_n \ln \frac{1}{1 - \exp(-\beta(\epsilon_n - \mu))} \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{+\infty} g_n \ln[1 - \exp(-\beta(\epsilon_n - \mu))] \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{+\infty} g_n \ln \left[1 - \exp\left(-n\beta\hbar\omega - \frac{3}{2}\beta\hbar\omega + \alpha \right) \right]
\end{aligned}
$$

Question 3) Nombre moyen de particules piégées. Avec le grand potentiel, on peut déduire des grandeurs macroscopiques. Le nombre moyen de particules piégées est donné par la dérivée du grand potentiel :

$$
\overline{N} = \frac{\partial \ln Z}{\partial \alpha} = -\beta \frac{\partial A}{\partial \alpha} \tag{8}
$$

On obtient donc :

$$\begin{aligned}
\overline{N} &= \sum_{n=0}^{+\infty} g_n \frac{\exp\left(-n\beta\hbar\omega - \frac{3}{2}\beta\hbar\omega + \alpha\right)}{1 - \exp\left(-n\beta\hbar\omega - \frac{3}{2}\beta\hbar\omega + \alpha\right)} \\
&= \sum_{n=0}^{+\infty} g_n \frac{1}{\exp\left(n\beta\hbar\omega + \frac{3}{2}\beta\hbar\omega - \alpha\right) - 1}
\end{aligned}$$

En posant $\alpha' = \alpha - \frac{3}{2}\beta\hbar$, on peut simplifier un peu l'expression précédente en :

$$\overline{N} = \sum_{n=0}^{+\infty} g_n \frac{1}{\exp\left(n\beta\hbar\omega - \alpha'\right) - 1}$$

Question 4) Passage au continu. Dans cette partie, on introduit la variable quasi-continue $\epsilon = n\hbar\omega$. Pour exprimer la densité d'états $g(\epsilon)$, on va compter le nombre dn d'états d'énergie comprise entre ϵ et $\epsilon + d\epsilon$. Par définition, $dn = g(\epsilon)d\epsilon$.

Nous traitons le cas d'un oscillateur harmonique 3D. Les différents niveaux d'énergie sont espacés régulièrement d'une quantité $\hbar\omega$. Ainsi, dans une largeur $d\epsilon$, on a $\frac{d\epsilon}{\hbar\omega}$.

Mais il ne faut pas oublier de prendre en compte la dégénérescence. Celle-ci était donnée dans le cas discret par $\frac{(n+1)(n+2)}{2}$. On va simplement remplacer n par $\epsilon/\hbar\omega$, et considérer que n est grand (pour que le passage au quasi continuum soit valide) :

$$\frac{(n+1)(n+2)}{2} \to \frac{\frac{\epsilon^2}{\hbar^2\omega^2} + 3\frac{\epsilon}{\hbar\omega} + 2}{2} \approx \frac{1}{2}\frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2} \tag{9}$$

Dans une bande de largeur $d\epsilon$ en énergie, on a donc $\frac{d\epsilon}{\hbar\omega}$ niveaux, chacun de dégénérescence $\frac{1}{2}\frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^2}$, soit un nombre total d'états égal à :

$$dn = \frac{\epsilon^2 d\epsilon}{2(\hbar\omega)^3} \qquad \to \qquad g(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{2(\hbar\omega)^3} \tag{10}$$

Question 5) Application au calcul du nombre moyen de particules Le nombre moyen de particules peut désormais se calculer à l'aide d'une intégrale plutôt que d'une somme discrète :

$$\begin{aligned}
\overline{N} &= \int \frac{g(\epsilon)d\epsilon}{\exp\left(\beta\epsilon - \alpha'\right) - 1} \\
&= \int \frac{1}{2(\hbar\omega)^3} \frac{\epsilon^2}{\exp\left(\beta\epsilon - \alpha'\right) - 1} d\epsilon \\
&= \frac{I_2(\alpha')}{2\gamma^3}
\end{aligned}$$

où on a utilisé la définition de l'énoncé pour $I_2(\alpha) = \int_0^{+\infty} \frac{x^2}{\exp(x-\alpha)-1}dx$ et $\gamma = \beta\hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$.

Question 6) Limite des hautes températures À très haute température, γ devient très petit devant 1 et on a $I_2(\alpha') \approx 2\gamma^3\overline{N}$. A $\overline{N}$ fixé, $I_2(\alpha')$ devient donc très petit devant 1. Or, il est facile de constater que I_2 est une fonction croissante et positive. On a donc nécessairement $\alpha' \to -\infty$, ce qui signifie que que $\alpha = \frac{\mu}{k_B T} \to -\infty$ et donc $\mu \to -\infty$.

Question 7) Limite de condensation. Pour garder N constant lorsque γ augmente (i.e. quand la température T diminue), il faut que $I_2(\alpha')$ augmente. Ce terme va donc croître jusqu'à atteindre $\alpha' = 0$ qui correspond à la borne vue en question 2) ($\alpha = \frac{3}{2}\beta\hbar\omega$).

On a alors :

$$\overline{N} = \frac{I_2(0)}{2\gamma_0^3} \tag{11}$$

et on en déduit la température T_0 à l'aide de $\gamma_0 = \beta\hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{k_B T_0}$:

$$T_0 = \frac{\hbar}{k_B}\left(\frac{2N}{I_2(0)}\right)^{1/3} \tag{12}$$

γ varie en $(1/N)^{1/3}$. Le remplacement d'une série par une intégrale à la question 5) supposait que la température était « élevée », puisqu'il fallait que $\gamma = \beta\hbar\omega$ soit beaucoup plus petit que 1. On voit que cette hypothèse est vraie, non seulement à haute température, mais même à la température de transition, pourvu que N soit suffisamment grand (pour que γ_0 soit petit).

Question 8) Condensation de Bose-Einstein. On sépare, conformément aux précisions de l'énoncé, la contribution du niveau fondamental et celle des niveaux d'énergie plus élevés :

$$\begin{aligned}
\overline{N} &= \frac{1}{\exp(-\alpha') - 1} + \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{g_n}{\exp(n\beta\hbar\omega) - 1} \\
&\approx \frac{1}{\exp(-\alpha') - 1} + \int_0^{+\infty} \frac{g(\epsilon)d\epsilon}{\exp(\epsilon - \alpha') - 1} \\
&= N_0(T) + \int_0^{+\infty} \frac{g(\epsilon)d\epsilon}{\exp(\epsilon - \alpha') - 1}
\end{aligned}$$

Il vient alors $\frac{N'}{N} = \frac{I_2(\alpha')}{2\gamma^3 N}$.

Lorsque la condensation commence, on a $\alpha' = 0$. On voit dans l'expression de $N_0(T)$ que le nombre d'atomes présents sur le niveau fondamental tend donc vers l'infini. En termes plus physiques, cela signifie que ce nombre devient macroscopique - ou encore, qu'il devient de l'ordre de grandeur du nombre total d'atomes dans le système. On a alors $\frac{N'}{N} = \frac{I_2(0)}{2\gamma^3 N}$.

Question 9) Proportion de bosons dans l'état fondamental

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{N'}{N} = 1 - \frac{I_2(0)}{2\gamma^3 N} \tag{13}$$

En reprenant l'expression $\overline{N} = \frac{I_2(0)}{2\gamma_0^3}$ en régime de condensation, on a alors :

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{\gamma_0^3}{\gamma} = 1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^3 \tag{14}$$

La figure 1 montre la variation du nombre de bosons dans l'état fondamental en fonction de la température.

Question 10) Application numérique Les données de l'expérience nous permettent d'écrire $\gamma_0 \approx 3.10^{-2}$. Il est donc bien possible de considérer que l'approximation de la question 5 (passage d'une série à une intégrale) était légitime. On obtient $T_0 \approx 0.3\mu K$.

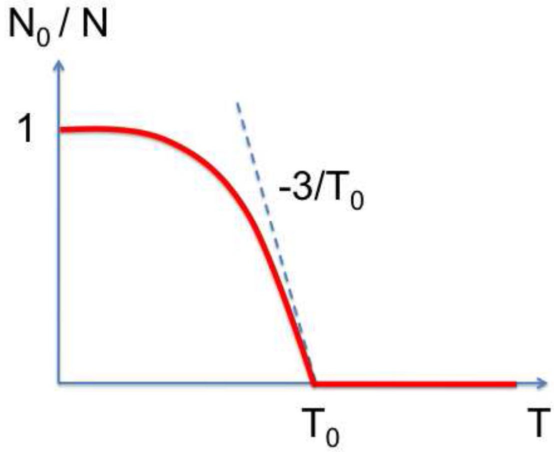

Figure 1: **Variation de la population du niveau fondamental dans le piège harmonique en fonction de la température.** Au-dessus de la température de condensation T_0, le niveau fondamental n'est pas peuplé macroscopiquement.