



La Condensation de Bose-Einstein : introduction

Claude Cohen-Tannoudji

1. Rappels de mécanique statistique

1.1. Fonction de partition grand-canonique

Pour décrire un ensemble de particules quantiques indiscernables, l'ensemble statistique le plus commode est l'ensemble grand-canonique [2, 3, 4]. Il est obtenu en supposant que le système considéré peut échanger de l'énergie et des particules avec un réservoir, supposé beaucoup plus grand [5]. La présence de ce réservoir fixe le nombre moyen de particules N et l'énergie moyenne U . L'état d'équilibre est alors déterminé en choisissant l'opérateur densité du système $\hat{\rho}$ qui maximise l'information manquante, ou *entropie statistique* :

$$(1) \quad S(\hat{\rho}) = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln(\hat{\rho})) ,$$

compte-tenu des deux contraintes :

$$(2) \quad \langle \hat{N} \rangle = N \quad \langle \hat{H} \rangle = U .$$

Cette maximisation sous contraintes se traite simplement dans le formalisme des multiplicateurs de Lagrange. On obtient :

$$(3) \quad \hat{\rho} = \frac{e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}}}{Z_G} \quad \text{avec} \quad Z_G = \text{Tr} \left(e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}} \right) .$$

La fonction Z_G est appelée *fonction de partition grand-canonique*. Les multiplicateurs de Lagrange α et β sont associés aux contraintes sur $\langle \hat{N} \rangle$ et $\langle \hat{H} \rangle$. Le paramètre β est relié à la température T par $\beta = (k_B T)^{-1}$. Le paramètre α est relié au potentiel chimique μ (énergie à fournir pour ajouter une particule) par $\alpha = -\beta\mu$, ainsi qu'à la fugacité $z = e^{-\alpha} = e^{\beta\mu}$. La détermination des valeurs de z et β qui vérifient les contraintes (2) se fait par l'intermédiaire de :

$$(4) \quad N = z \frac{\partial}{\partial z} \ln Z_G(z, \beta, V) ,$$

$$(5) \quad U = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_G(z, \beta, V) .$$

qu'il suffit d'inverser pour obtenir z et β comme fonctions de N et U .

Une fois Z_G déterminée, toutes les grandeurs thermodynamiques s'en déduisent par simple dérivation. Ainsi la pression se détermine à partir de :

$$(6) \quad P = k_B T \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_G(z, \beta, V) .$$

1.2. Le gaz parfait quantique

Le calcul explicite de Z_G , qui permet d'obtenir des résultats explicites à partir d'expressions comme (6) est très ardu dans le cas général d'un fluide en interaction. En revanche, le cas du gaz parfait peut être traité exactement d'une manière remarquablement simple, comme nous allons le voir maintenant.

Pour un système de N particules n'interagissant pas, l'hamiltonien total est une somme d'hamiltoniens à un corps :

$$(7) \quad \hat{H} = \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \dots + \hat{h}_N .$$

Notons $\{|\lambda\rangle\}$ une base de vecteurs propres de l'hamiltonien à un corps $\hat{h}$, et ε_λ l'énergie associée à $|\lambda\rangle$:

$$(8) \quad \hat{h} |\lambda\rangle = \varepsilon_\lambda |\lambda\rangle .$$

Passons maintenant en seconde quantification, et introduisons les opérateurs de destruction a_λ et de création $a_\lambda^\dagger$ d'une particule dans l'état individuel λ . L'hamiltonien total et l'opérateur *nombre de particules* s'écrivent :

$$(9) \quad \hat{H} = \sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \quad \hat{N} = \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} .$$

Une base d'états propres de l'espace de Fock est $\{|N_\lambda, N_{\lambda'}, N_{\lambda''}, \dots\rangle\}$ où les nombres d'occupation N_λ des états quantiques individuels (i) valent 0 ou 1 dans le cas de fermions, (ii) sont des entiers positifs ou nuls quelconques dans le cas de bosons. On note par commodité ℓ un ensemble donné $\{N_\lambda\}$: $|\ell\rangle \equiv |N_\lambda, N_{\lambda'}, N_{\lambda''}, \dots\rangle$. On a donc

$$(10) \quad \hat{N} |\ell\rangle = N_\ell |\ell\rangle \quad \text{avec} \quad N_\ell = \sum_{\lambda} N_{\lambda} ,$$

$$(11) \quad \hat{H} |\ell\rangle = E_\ell |\ell\rangle \quad \text{avec} \quad E_\ell = \sum_{\lambda} N_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} .$$

La fonction de partition grand-canonique Z_G donnée en (3) se calcule aisément dans la base $|\ell\rangle$:

$$\begin{aligned} (12) \quad Z_G &= \sum_{\ell} e^{-\alpha N_\ell - \beta E_\ell} \\ &= \sum_{N_\lambda, N_{\lambda'}, \dots} e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_\lambda) N_\lambda} \times e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_{\lambda'}) N_{\lambda'}} \times e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_{\lambda''}) N_{\lambda''}} \times \dots \\ &= \prod_{\lambda} \zeta_{\lambda} , \end{aligned}$$

où on a posé :

$$(13) \quad \zeta_\lambda = \sum_{N_\lambda} e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_\lambda) N_\lambda} .$$

Cette factorisation de Z_G en produit de fonctions de partition, relatives chacune à un état quantique individuel λ est l'avantage majeur de l'utilisation du formalisme grand-canonique.

1.3. Cas des fermions : statistique de Fermi-Dirac

Pour des fermions, les valeurs possibles de N_λ dans la somme (13) sont $N_\lambda = 0$ ou $N_\lambda = 1$. On a donc :

$$(14) \quad \zeta_\lambda^{(F)} = 1 + e^{-\alpha - \beta \varepsilon_\lambda} = 1 + ze^{-\beta \varepsilon_\lambda} .$$

La fonction de partition vérifie :

$$(15) \quad \ln Z_G = \sum_\lambda \ln (1 + ze^{-\beta \varepsilon_\lambda}) .$$

En utilisant (4), on en déduit l'expression du nombre de particules total dans le système :

$$(16) \quad N = \sum_\lambda N_\lambda \quad \text{avec} \quad N_\lambda = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\lambda - \mu)} + 1} .$$

Pour un système de température fixée, le potentiel chimique peut prendre n'importe quelle valeur, positive ou négative. Une valeur grande et négative correspond à un nombre moyen de particules très faible, donc à un système bien décrit par la statistique de Boltzmann classique :

$$(17) \quad \mu \longrightarrow -\infty \quad : \quad N_\lambda \simeq ze^{-\beta \varepsilon_\lambda} .$$

Une valeur positive et grande devant $k_B T$ correspond au contraire à un nombre de particules très élevé, et donc à un gaz de Fermi fortement dégénéré. Les nombres d'occupation N_λ valent presque 1 si $\varepsilon_\lambda < \mu$ et 0 sinon.

1.4. Cas des bosons : statistique de Bose-Einstein

Pour des bosons, le calcul de (13) se ramène à une série géométrique, soit :

$$(18) \quad \zeta_\lambda^{(B)} = \frac{1}{1 - e^{-\alpha - \beta \varepsilon_\lambda}} = \frac{1}{1 - ze^{-\beta \varepsilon_\lambda}} .$$

Le nombre de particules est alors donné par :

$$(19) \quad N = \sum_\lambda N_\lambda \quad \text{avec} \quad N_\lambda = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\lambda - \mu)} - 1} .$$

Dans ce cas le potentiel chimique peut prendre toutes les valeurs depuis $-\infty$ jusqu'à $\varepsilon_{\min}$, qui représente l'énergie du niveau fondamental de $\hat{h}$. Pour un potentiel chimique au-delà de cette valeur, la population de ce niveau fondamental deviendrait négative, ce qui n'a bien sûr aucun sens. Comme pour le gaz de Fermi, les

valeurs grandes et négatives de μ correspondent à un gaz bien décrit par la physique classique (distribution de Boltzmann) :

$$(20) \quad \mu \longrightarrow -\infty \quad : \quad N_\lambda \simeq z e^{-\beta \varepsilon_\lambda}.$$

2. Condensation de Bose-Einstein dans un piège harmonique

2.1. La saturation des niveaux excités

Considérons la statistique de Bose-Einstein donnée en (19). Quand μ tend vers $\varepsilon_{\min}$, à température fixée, le nombre de particules N_0 dans le niveau fondamental de $\hat{h}$ tend vers l'infini :

$$(21) \quad \mu \longrightarrow \varepsilon_{\min} \quad : \quad N_0 \simeq \frac{k_B T}{\varepsilon_{\min} - \mu}$$

Si le gaz est confiné dans une enceinte de taille finie ou piégé par un potentiel harmonique, le spectre de $\hat{h}$ est discret. Le nombre de particules N' dans les niveaux excités de $\hat{h}$ est borné supérieurement :

$$(22) \quad N' = \sum'_\lambda \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\lambda - \mu)} - 1} < N'_{\max} = \sum'_\lambda \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\min})} - 1},$$

où $\sum'$ représente la somme sur tous les états propres λ de $\hat{h}$ sauf l'état fondamental.

Dans ce qui suit, nous appellerons *nombre de saturation* la valeur de $N'_{\max}$. L'existence de ce nombre, qui représente une borne supérieure au nombre de particules que l'on peut disposer dans les états autres que le niveau fondamental, peut être considérée comme une signature de la condensation de Bose-Einstein : si, à température fixée, on place dans le piège un nombre de particules N supérieur à $N'_{\max}$, on est certain qu'au moins $N - N'_{\max}$ particules iront se loger sur le niveau fondamental. Cet effet suffit à rendre compte des phénomènes observés dans un piège harmonique.

La saturation des niveaux excités de $\hat{h}$ ne doit pas être identifiée à une transition de phase. Pour introduire cette notion, il faudra prendre la limite thermodynamique du système considéré, et voir si la densité correspondant aux N' atomes disposés sur les niveaux excités reste elle aussi bornée. La réponse à cette question dépendra fortement de la dimensionalité du système. Auparavant, nous allons étudier l'application de (22) au cas d'un piège harmonique, pour lequel cette notion de limite thermodynamique n'est pas nécessaire [6, 7, 8, 9]

2.2. La saturation dans un piège harmonique isotrope

Pour un piège harmonique isotrope de fréquence $\nu = \omega/2\pi$, les niveaux d'énergie de $\hat{h}$ sont caractérisés par les trois nombres quantiques $(n_x, n_y, n_z) \equiv \mathbf{n}$ caractérisant l'état de vibration de l'oscillateur selon les trois axes. L'énergie correspondante est :

$$(23) \quad \varepsilon_{\mathbf{n}} = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \quad \varepsilon_{\min} = \frac{3}{2}\hbar\omega.$$

D'autre part, chaque niveau d'énergie est a une dégénérescence g_n donnée par :

$$(24) \quad g_n = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \quad n = n_x + n_y + n_z .$$

Le nombre de saturation s'écrit alors simplement :

$$(25) \quad N'_{\max} = \sum_{(n_x, n_y, n_z) \neq (0,0,0)} \frac{1}{e^{(n_x+n_y+n_z)\xi} - 1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{g_n}{e^{n\xi} - 1} \quad \text{avec} \quad \xi = \frac{\hbar\omega}{k_B T} .$$

Dans la limite où le quantum de vibration $\hbar\omega$ est très petit devant l'énergie thermique $k_B T$, soit $\xi \ll 1$, on peut calculer de manière approchée cette somme discrète en la remplaçant par une intégrale (voir appendice). On trouve :

$$(26) \quad N'_{\max} \simeq 1.202 \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 .$$

La qualité de cette approximation peut être évaluée sur la figure 1 qui donne la variation avec $k_B T / \hbar\omega$ de la somme discrète (25) et du résultat approché (26). Quand $k_B T$ devient supérieur à $25 \hbar\omega$, les deux résultats diffèrent de moins de 5%. En pratique une fréquence typique de piège harmonique est de l'ordre de 100 Hz, soit $\hbar\nu/k_B \sim 5$ nK. Pour un gaz refroidi à 200 nK, le nombre maximal d'atomes en dehors de l'état fondamental est alors de 80 000.

2.3. La distribution d'équilibre dans un piège harmonique

Disposant du nombre de saturation pour un piège harmonique, nous pouvons décrire l'état d'équilibre d'un système de N bosons dans ce piège, quand on varie sa température [10]. Nous nous limiterons dans la discussion qui suit au cas d'un nombre d'atomes grand devant 1. Ce cas correspond à la ligne continue de la figure 2. La ligne tiretée de cette figure 2 donne une indication sur les modifications à apporter pour des nombres d'atomes plus faibles ($N = 100$ respectivement). Pour

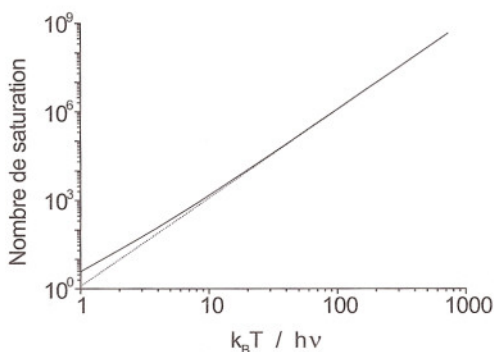


FIG. 1. Nombre de saturation dans un piège harmonique tridimensionnel isotrope. La courbe en trait plein donne le résultat exact (25) et la courbe pointillée représente le résultat approché (26).

simplifier les notations, nous décalerons l'origine des énergies de $3/2 \hbar\omega$ pour que l'énergie du niveau fondamental soit 0.

La température critique pour laquelle $N'_{\max} = N$ se déduit de (26). Elle est donnée par :

$$(27) \quad k_B T_c = 0.94 \hbar\omega N^{1/3}$$

et elle est donc grande devant $\hbar\omega/k_B$: les expressions approchées calculées au paragraphe précédent sont valables.

À haute température, le nombre de saturation $N'_{\max}$ (proportionnel à T^3) est bien supérieur à N . Le gaz n'est alors que très faiblement dégénéré et on peut lui appliquer la statistique de Boltzmann (20). La fugacité est déterminée en utilisant $N = \sum_n N_n \simeq \sum_n g_n z e^{-\epsilon_n}$, ce qui donne après sommation d'une triple série géométrique :

$$(28) \quad z = N (1 - e^{-\xi})^3 \simeq N \xi^3 \simeq 1.202 \frac{N}{N'_{\max}} \ll 1,$$

dont on déduit l'occupation de chaque niveau :

$$(29) \quad N_{n_x, n_y, n_z} = N e^{-\xi(n_x + n_y + n_z)} (1 - e^{-\xi})^3 \simeq N \xi^3 e^{-\xi(n_x + n_y + n_z)}.$$

En particulier, la proportion d'atomes dans l'état fondamental N_0/N est donnée par $\xi^3 = (\hbar\omega/k_B T)^3$ et est très petite devant 1. Les distributions en position et en vitesse des atomes sont des gaussiennes, de variances respectives $k_B T/(m\omega^2)$ et $k_B T/m$.

Quand la température s'abaisse et se rapproche de T_c , la fugacité z croît et se rapproche de 1. On la calcule par résolution de l'équation transcendante :

$$(30) \quad N = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g_n}{z^{-1} e^{\epsilon_n} - 1} \simeq N_0 + \xi^{-3} g_3(z) \quad \text{avec} \quad N_0 = \frac{z}{1 - z}$$

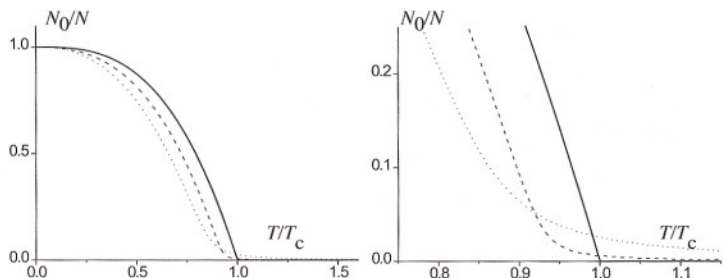


FIG. 2. Fraction d'atomes condensés N_0/N en fonction de la température réduite T/T_c . La courbe continue correspond à la limite d'un grand nombre d'atomes (eq. 32). Les courbes pointillées et tiretées sont les résolutions exactes de (19) pour $N = 100$ et $N = 1000$ respectivement. La figure de droite est un agrandissement au voisinage de la transition de condensation.

où on a effectué une approximation similaire à (50-53). Notons qu'il est essentiel d'exclure la contribution du niveau fondamental dans ce passage d'une somme discrète à une intégrale. Si on ne le fait pas, la borne inférieure de l'intégrale remplaçant (51) vaut $-1/2$ et l'intégrale peut diverger si z est assez proche de 1.

Pour $T = T_c$, la proportion d'atomes dans l'état fondamental est encore faible devant 1, mais la population des niveaux excités est quasiment saturée. Notons que de très nombreux niveaux ont une occupation significative en ce point. Le nombre quantique de vibration n_v à partir duquel le taux d'occupation devient inférieur à 1 est de l'ordre de $k_B T / \hbar \omega$, soit $n_v \sim N^{1/3} \gg 1$. Il ne faut donc pas confondre la condensation qui se produit en ce point avec le phénomène plus trivial qu'on attend dans le régime d'ultra-basse température, i.e. $k_B T \ll \hbar \omega$, pour lequel seul le niveau fondamental a une population appréciable, quel que soit le nombre de particules présentes.

Si la température s'abaisse au dessous de T_c , on assiste à une redistribution des particules depuis les niveaux excités vers le niveau fondamental, la fugacité restant quasiment égale à 1. La population des niveaux excités décroît selon la loi de saturation déterminée précédemment :

$$(31) \quad N'(T) = 1.202 \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^3 = N \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 ,$$

et la population du niveau fondamental vaut donc :

$$(32) \quad N_0(T) = N \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right) .$$

Le résultat (30) doit donc être compris de la manière suivante dans le régime $\xi \ll 1$:

– ou bien $T > T_c$, et le nombre d'atomes dans l'état fondamental est négligeable; on a alors :

$$(33) \quad N \simeq \xi^{-3} g_3(z) ;$$

– ou bien $T < T_c$ et la distribution des états excités est saturée :

$$(34) \quad N \simeq N_0 + \xi^{-3} g_3(1) .$$

Une fois la température abaissée sous la température critique, la distribution spatiale et la distribution en vitesse des atomes présentent chacune deux composantes bien distinctes. Par exemple la distribution spatiale est la superposition d'un pic étroit, de largeur $\Delta x_0 = (\hbar / m \omega)^{1/2}$ correspondant à l'état fondamental du piège harmonique, et d'un pic plus large correspondant à la fraction d'atomes non condensés, de largeur $\Delta x' = (k_B T / m \omega^2)^{1/2}$. Le rapport des deux largeurs vaut :

$$(35) \quad \frac{\Delta x_0}{\Delta x'} = \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^{1/2} \quad \text{soit, pour } T = T_c : \quad \frac{\Delta x_0}{\Delta x'} \simeq N^{-1/6} \ll 1 .$$

De même, dans l'espace des vitesses, on trouve

$$\Delta v_0 = (\hbar \omega / m)^{1/2} \quad \text{et} \quad \Delta v' = (k_B T / m)^{1/2}$$

ce qui conduit à un rapport $\Delta v_0 / \Delta v'$ égal au rapport $\Delta x_0 / \Delta x'$.

3. Condensation de Bose-Einstein dans une boîte

Nous passons maintenant à la description de la condensation de Bose-Einstein pour un gaz confiné dans une boîte parallélépipédique, qui est la situation initialement considérée par Einstein en 1924, pour découvrir ce phénomène. Cette géométrie correspond aux expériences menées sur des échantillons macroscopiques confinés dans des récipients matériels, comme l'étude de la superfluidité de l'hélium dans un cryostat, ou d'un gaz d'excitons dans un semi-conducteur, ou encore d'un gaz bidimensionnel d'atomes d'hydrogène maintenus en lévitation au-dessus d'une surface d'hélium liquide.

3.1. Niveaux d'énergie

Considérons une boîte parallélépipédique, de côtés L_x , L_y , L_z . On note $V = L_x L_y L_z$ le volume de la boîte. Nous choisirons ici des conditions aux limites périodiques. Les états propres λ de l'hamiltonien à un corps sont les ondes planes $|\lambda\rangle \equiv |\mathbf{k}\rangle$:

$$(36) \quad \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \quad k_i = \frac{2\pi n_i}{L_i} \quad i = x, y, z,$$

où les n_i sont des entiers positifs ou négatifs. On a :

$$(37) \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

et $\varepsilon_{\min} = 0$.

Le problème que nous souhaitons maintenant résoudre est le suivant : lorsqu'on prend la limite thermodynamique pour ce système, en faisant tendre les dimensions de la boîte vers l'infini en gardant constant la densité de particules, la température, et le potentiel chimique, comment se répartissent les particules sur les niveaux d'énergie ? Plus précisément, il s'agit de déterminer si la saturation des niveaux excités de $\hat{h}$, trouvée au paragraphe précédent pour un système de taille finie, va « survivre » à ce passage à la limite, bien que l'écart entre $\varepsilon_{\min}$ et les premiers niveaux excités de $\hat{h}$ tende vers 0 quand la taille de la boîte augmente indéfiniment.

3.2. Le gaz de bosons quasi-unidimensionnel

Commençons par la situation la plus simple, qui correspond à un confinement fort selon les axes x et y : les dimensions transverses L_x et L_y de la boîte sont supposées petites et fixées. Plus précisément, on suppose que l'énergie nécessaire pour exciter le mouvement d'une particule selon ces directions $\hbar^2 \pi^2 / (2mL_i^2)$ (avec $i = x, y$) est bien supérieure à l'énergie thermique $k_B T$. La limite thermodynamique est prise en faisant tendre L_z vers l'infini avec N/L_z constant, et on cherche comment se comporte la densité linéique maximale de particules non condensées dans l'état fondamental de la boîte $N'_{\max}/L_z$.

Le calcul explicite de $N'_{\max}$ à partir de (22) pour les niveaux d'énergie (37) se fait de manière très simple si on néglige la population des niveaux excités transversalement ($n_x \neq 0$ ou $n_y \neq 0$). On obtient :

$$(38) \quad N'_{\max} \simeq 2 \sum_{n_z=1}^{+\infty} \frac{1}{e^{2\pi^2 \hbar^2 n_z^2 / (mk_B T L_z^2)} - 1}.$$

Introduisons la longueur d'onde thermique :

$$(39) \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}},$$

et posons :

$$(40) \quad f(u) = \frac{1}{e^{\pi u^2 \lambda^2 / L_z^2} - 1}$$

En utilisant le résultat (50) de l'appendice, qui est valable si $\lambda \ll L_z$, on trouve :

$$(41) \quad N'_{\max} \simeq 2 \int_{1/2}^{\infty} f(u) du = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{L_z}{\lambda} \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{dv}{e^{v^2} - 1},$$

où la borne inférieure de l'intégrale vaut $\varepsilon = \sqrt{\pi} \lambda / (2L_z)$. La densité linéique non condensée dans le niveau fondamental vaut donc au plus :

$$(42) \quad \Lambda'_{\max} = \frac{N'_{\max}}{L_z} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\lambda} \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{dv}{e^{v^2} - 1}.$$

Faisons maintenant tendre la taille L_z de la boîte vers l'infini. L'intégrale qui intervient dans (42) diverge comme $1/\varepsilon$, soit plus précisément :

$$(43) \quad \Lambda'_{\max} \simeq \frac{4}{\pi} \frac{L_z}{\lambda^2}.$$

Il n'y a donc pas de limite finie à la densité linéique de saturation quand on prend la limite thermodynamique $L_z \rightarrow \infty$. En d'autres termes, pour une densité linéique N/L_z et une température fixées, il y a une taille L_z au-dessus de laquelle les atomes se répartiront essentiellement sur les niveaux excités, la fraction d'atomes dans le niveau fondamental étant négligeable. Dans ce cas unidimensionnel, la saturation des niveaux excités n'a pas survécu à la limite thermodynamique.

3.3. Le gaz de bosons tridimensionnel

Prenons maintenant $L_x = L_y = L_z = L$. Le nombre d'atomes non condensés s'écrit :

$$(44) \quad N'_{\max} = \sum_{(n_x, n_y, n_z)}' \frac{1}{e^{\pi \lambda^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) / L^2} - 1} \simeq \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{L^3}{\lambda^3} \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{v^2 dv}{e^{v^2} - 1}$$

La somme discrète porte sur tous les triplets différents du triplet nul $(0, 0, 0)$ correspondant à l'état fondamental. De même, la borne inférieure ε de l'intégrale correspond à l'exclusion d'une sphère de rayon de l'ordre de λ/L , correspondant à la contribution de ce niveau fondamental. Dans le cas tridimensionnel qui nous intéresse ici, l'intégrale à calculer est convergente, même quand on remplace sa

borne inférieure par 0, et sa valeur ne dépend donc pas de ε dans la limite $L \rightarrow \infty$. On trouve :

$$(45) \quad n'_{\max}(T) = \frac{N'_{\max}}{L^3} = \frac{g_{3/2}(1)}{\lambda^3} \quad \text{soit} \quad n'_{\max}(T) \lambda^3 \simeq 2.612 .$$

Dans ce cas, la saturation des niveaux excités a « survécu » au passage à la limite thermodynamique. L'étude de ce gaz est faite en détail dans de nombreux manuels de physique statistique et nous donnerons simplement les résultats majeurs, la démarche à suivre pour les obtenir étant similaire à celle suivie dans le cas du piège harmonique [2, 3, 4].

Prenons un gaz de densité fixée n . Dans le domaine de haute température, caractérisé par $n\lambda^3 \ll 1$, la densité critique $n'_{\max}(T)$, qui varie comme $T^{3/2}$, est bien supérieure à n , et le gaz n'est que très faiblement dégénéré. Physiquement, ce domaine de température correspond au cas où la distance entre les particules $n^{-1/3}$ est très grande devant leur longueur d'onde thermique. Les effets quantiques sont donc en général masqués et le gaz peut être décrit valablement par la statistique de Boltzmann. Sa distribution en vitesse est bien décrite par une gaussienne, de variance $k_B T/m$, et la fugacité est donnée par $z = n\lambda^3 \ll 1$.

Quand on abaisse la température de ce gaz, l'approximation gaussienne pour la distribution en vitesse devient de moins en moins bonne, et la fugacité z doit être déterminée par l'équation transcendante :

$$(46) \quad n = n_0 + \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda^3} \quad \text{avec} \quad n_0 = \frac{1}{L^3} \frac{z}{1-z} .$$

D'une façon similaire à ce que nous avons vu pour (30), cette équation doit être comprise de la manière suivante :

– Si $T > T_c$, où la température critique T_c est telle que $n = n'_{\max}(T_c)$, alors la densité dans l'état fondamental n_0 est négligeable et on a :

$$(47) \quad n = \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda^3} .$$

– Si $T < T_c$, alors les niveaux excités sont saturés, et on a :

$$(48) \quad n = n_0 + \frac{g_{3/2}(1)}{\lambda^3} .$$

Les $N - N'$ atomes restants s'accumulent dans l'état fondamental $\mathbf{p} = 0$, et la densité condensée est :

$$(49) \quad n_0(T) = n - n'_{\max}(T) = n \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right) .$$

Au contraire du piège harmonique, cette condensation se produit uniquement dans l'espace des vitesses. La distribution en position des atomes reste uniforme, comme il se doit compte tenu de l'invariance par translation du système.

3.4. Appendice : démonstration de l'approximation (26)

Quand une fonction $f(x)$ varie lentement sur un intervalle de largeur 1, on a l'approximation :

$$(50) \quad f(1) + f(2) + f(3) + \dots \simeq \int_{1/2}^{3/2} f(u) du + \int_{3/2}^{5/2} f(u) du + \int_{5/2}^{7/2} f(u) du + \dots$$

Pour la somme (25), cette hypothèse de variation lente correspond au cas $\xi \ll 1$. On a alors :

$$(51) \quad N'_{\max} = \frac{1}{2} \int_{1/2}^{\infty} \frac{(u+1)(u+2) du}{e^{u\xi} - 1},$$

soit, en posant $x = u\xi$:

$$(52) \quad N'_{\max} \simeq \frac{1}{2\xi^3} \int_{\xi/2}^{\infty} \frac{(x+\xi)(x+2\xi) dx}{e^x - 1}.$$

Quand on développe le numérateur de l'intégrand en $x^2 + 3x\xi + 2\xi^2$, il est simple de montrer que, pour $\xi \ll 1$, la contribution essentielle provient de x^2 car la fonction à intégrer prend des valeurs significatives pour $x \sim 1$. Gardons uniquement ce terme, et faisons tendre la borne inférieure de l'intégrale ($\xi/2$) vers 0, ce qui est possible puisque la fonction à intégrer est continue en 0. On trouve alors :

$$(53) \quad N'_{\max} \simeq \frac{1}{2\xi^3} \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1},$$

ou encore

$$(54) \quad N'_{\max} \simeq \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 g_3(1).$$

Nous avons introduit ici les deux fonctions spéciales :

$$(55) \quad g_{\alpha}(z) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^{\ell}}{\ell^{\alpha}} \quad I_{\alpha}(z) = \int_0^{\infty} \frac{x^{\alpha-1} dx}{z^{-1}e^x - 1},$$

reliées par la relation :

$$(56) \quad I_{\alpha}(z) = \Gamma(\alpha) g_{\alpha}(z) \quad \text{avec} \quad \Gamma(\alpha) = \int_0^{+\infty} y^{\alpha-1} e^{-y} dy.$$

On a $\Gamma(\alpha+1) = \alpha \Gamma(\alpha)$ avec notamment :

$$\Gamma(1) = \Gamma(2) = 1, \quad \Gamma(3/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad \Gamma(3) = 2,$$

et

$$g_{3/2}(1) \simeq 2.612, \quad g_2(1) = \frac{\pi^2}{6}, \quad g_3(1) \simeq 1.202.$$

Pour obtenir une meilleure précision sur la valeur de la température critique, on peut chercher à évaluer les contributions des termes $3x\xi$ et $2\xi^2$ intervenant au numérateur de (52). Pour le terme en $3x\xi$ on peut encore étendre la borne inférieure de l'intégrale à 0 et on obtient une correction en ξ^{-2} à $N'_{\max}$. Pour le terme en $2\xi^2$, la fonction à intégrer diverge comme $1/x$ en 0, et il faut garder la borne

inférieure égale à $\xi/2$. La contribution dominante pour ce dernier terme est $\xi^{-1} \ln \xi$. Notons toutefois que ces développements plus raffinés que (54) sont en pratique peu intéressants. Si on cherche à déterminer le nombre de saturation avec une très bonne précision dans le cas où $k_B T$ n'est pas très grand devant $\hbar\omega$, il est plus sûr et plus rapide de revenir à la série (25).

4. Références

- [1] A. Einstein, *Sitzber. Klg. Preuss. Akad. Wiss.* **261** (1924); A. Einstein, *Sitzber. Klg. Preuss. Akad. Wiss.* **3** (1925).
- [2] K. Huang, *Statistical Mechanics* (Wiley, New-York, 1963).
- [3] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet, *Physique statistique* (Hermann, Paris, 1989).
- [4] M. Le Bellac et F. Mortessagne, *Thermodynamique statistique* (Dunod, Paris, 2001).
- [5] Même si ce réservoir n'existe pas en pratique, ceci importe peu. En effet, on peut montrer que les prédictions des différents ensembles (micro-canonique, canonique, ou grand-canonique) coïncident, pourvu qu'on se limite au calcul des valeurs moyennes des grandeurs thermodynamiques. En revanche, des différences peuvent apparaître au niveau du calcul des fluctuations, et il faut alors revenir précisément à la situation physique concrètement envisagée pour faire des prédictions pertinentes.
- [6] V. Bagnato, D. Pritchard, D. Kleppner, *Phys. Rev. A* **35**, 4354 (1987).
- [7] V. Bagnato and D. Kleppner, *Phys. Rev. A* **44**, 7439 (1991).
- [8] C. Cohen-Tannoudji, cours au Collège de France 1997-98, [http ://www.ens.fr/cct](http://www.ens.fr/cct).
- [9] DEA de Physique Quantique, option *atomes froids*, notes de cours : [http ://www.lkb.ens.fr/~ dalibard/Notes_de_cours/DEA_atomes_froids.pdf](http://www.lkb.ens.fr/~dalibard/Notes_de_cours/DEA_atomes_froids.pdf).
- [10] W. Ketterle and N. van Druten, *Phys. Rev. A* **54**, 656 (1996).