Examen de “Fluides quantiques” M1 ICFP 2017-2018

Alice Sinatra et Alexandre Evrard

Cet examen comprend deux exercices indépendants. La durée totale de l'épreuve est de 3 heures.

1 Fluctuations du nombre de particules dans un condensat de Bose-Einstein

Dans cet exercice nous nous intéressons aux fluctuations du nombre de particules dans un condensat de Bose-Einstein, pour un gaz parfait puis pour un gaz en interaction, à l'aide de la théorie de Bogoliubov. Ce sera l'occasion de constater que l'ensemble canonique et l'ensemble grand canonique ne sont équivalents que si les fluctuations du nombre de particules sont petites en valeurs relatives, ce n'est pas le cas dans certaines situations ...

1.1 Le gaz parfait de Bose

Considérons un gaz parfait de bosons à l'équilibre thermique dans l'ensemble grand canonique. L'énergie et le nombre de particules sont fixés en moyenne et les paramètres $\beta = 1/k_BT$ et μ sont fixés. On désignera par $\{\phi_\lambda\}$ et ϵ_λ les fonctions propres et les énergies propres à une particule. L'état à une particule d'énergie minimale ϕ_0 (λ=0) est supposé non dégénéré.

1.1.1 Gaz parfait de bosons dans l'ensemble grand canonique

(a) Soit l un état microscopique du système d'énergie E_l et de nombre de particules N_l. Écrire sa probabilité de réalisation P_l dans l'ensemble grand canonique.

(b) À chaque état microscopique l correspond un ensemble de nombres d'occupation des différents états à une particule

$$l \leftrightarrow \{n_\lambda^{(l)}\} \tag{1}$$

où $\{n_\lambda^{(l)}\}$ est le nombre de particules dans l'état à une particule ϕ_λ lorsque le système est dans l'état microscopique l. Écrire l'énergie E_l et le nombre de particules N_l en fonction des $\{n_\lambda^{(l)}\}$.

(c) Montrer que P_l, désormais $P_l(\{n_\lambda^{(l)}\})$ ou plus simplement $P(\{n_\lambda\})$ est un produit :

$$P(\{n_\lambda\}) = \Pi_\lambda P_\lambda(n_\lambda) \tag{2}$$

Donner les fonctions $P_\lambda(n_\lambda)$. Que signifie physiquement le fait que $P(\{n_\lambda\})$ soit factorisée ?

(d) Tracer qualitativement la probabilité $P_\lambda(n_\lambda)$ en fonction de n_λ. Quelle est la valeur la plus probable de n_λ ?

(e) À partir de $P_\lambda(n_\lambda)$, calculer les nombres moyens d'occupation $\bar{n}_\lambda$ dans l'ensemble grand canonique.

(f) Toujours à partir de $P_\lambda(n_\lambda)$, montrer que la variance de n_λ vaut

$$(\Delta n_\lambda)^2 \equiv \overline{n_\lambda^2} - (\bar{n}_\lambda)^2 = \bar{n}_\lambda(\bar{n}_\lambda + 1) \tag{3}$$

(g) Supposons que chaque état λ soit faiblement peuplé : $\bar{n}_\lambda \ll 1$. Montrer que les fluctuations dans le mode sont poissonniennes (la variance est égale à la valeur moyenne).

(h) Supposons maintenant que l'état fondamental à une particule ϕ_0 soit macroscopiquement peuplé, c'est-à-dire mettons-nous en présence d'un condensat. Que peut-on dire de $(\Delta n_0)^2$? Commenter.

1.1.2 Gaz parfait de bosons dans l'ensemble canonique

Nous allons maintenant fixer le nombre total de particules à une valeur N, ce qui correspond d'ailleurs mieux à la situation expérimentale.

(i) Soit l un état microscopique du système d'énergie E_l (et de nombre de particules N). Écrire sa probabilité de réalisation P_l dans l'ensemble canonique.

(j) À chaque état microscopique l correspond un ensemble de nombres d'occupation des différents états à une particule

$$l \leftrightarrow \{n_\lambda\} \qquad \text{avec} \qquad \sum_\lambda n_\lambda = N \tag{4}$$

où nous avons imposé la contrainte supplémentaire de la conservation du nombre total de particules. On se place à une température inférieure à la température critique de condensation de Bose. Le nombre de particules dans le condensat est donné par :

$$n_0 = N - \sum_{\lambda \neq 0} n_\lambda \tag{5}$$

et n'est pas une variable indépendante. On a donc la correspondance biunivoque :

$$l \leftrightarrow \{n_\lambda\}_{\lambda \neq 0} \tag{6}$$

avec la contrainte $\sum_{\lambda \neq 0} n_\lambda < N$.

Exprimer E_l en fonction des n_λ et montrer que la distribution de probabilité des nombres d'occupation des états excités à une particule s'écrit

$$P(\{n_\lambda\}_{\lambda \neq 0}) = \Theta(N - \sum_{\lambda \neq 0} n_\lambda) \times \Pi_{k \neq 0} P_\lambda(n_\lambda) \tag{7}$$

où Θ est la fonction d'Heaviside $\Theta(x) = 1$ pour $x \geq 0$ et $\Theta(x) = 0$ pour $x < 0$. Donner les fonctions $P_\lambda(n_\lambda)$ à un coefficient de proportionnalité près.

(k) Nous introduisons maintenant une approximation justifiée en présence d'un condensat. Nous négligeons la possibilité que le condensat soit vide. Ceci nous conduit à

$$P(\{n_\lambda\}_{\lambda \neq 0}) \simeq \Pi_{\lambda \neq 0} P_\lambda(n_\lambda) \tag{8}$$

À partir de l'expression de $P_\lambda(n_\lambda)$, montrer que l'on retrouve formellement un ensemble grand canonique pour les particules non condensées avec un potentiel chimique (égal à ϵ_0) fixé par le condensat qui sert ici de réservoir infini de particules.

(l) Montrer que, N étant fixé, on a $(\Delta n_0)^2 = (\Delta n_\perp)^2$ où $N_\perp = \sum_{\lambda \neq 0} n_\lambda$.

1.1.3 Cas uniforme $3D$

Dans cette section, les atomes sont dans une boîte cubique de côté L (à 3 dimensions) avec des conditions aux limites périodiques. On a donc $\lambda = \mathbf{k}$ où $\mathbf{k}$ est un vecteur d'onde.

(m) Donner l'expression des ϕ_λ et des ϵ_λ. Spécifier quelles sont les valeurs du vecteur d'onde $\mathbf{k}$ compatibles avec les conditions aux limites périodiques.

(n) Montrer que

$$(\Delta n_0)^2 = \sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}} \frac{1}{4\,\mathrm{sh}^2(\beta\epsilon_k/2)} \tag{9}$$

(o) Montrer qu'en remplaçant la somme discrète sur $\mathbf{k}$ par une intégrale à la limite thermodynamique, on obtient une intégrale divergente.

(p) On garde donc la somme discrète. La somme est dominée par les termes avec $\beta\epsilon_k \ll 1$, on peut ainsi linéariser la fonction sinus hyperbolique. Montrer que

$$(\Delta n_0)^2 = \left(\frac{k_B T}{\Delta}\right)^2 \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^{3*}} \frac{1}{(n_x^2+n_y^2+n_z^2)^2} = \left(\frac{k_B T}{\Delta}\right)^2 \times 16,53\ldots \tag{10}$$

et donner la valeur de Δ en fonction de la masse m des particules et de la taille L de la boîte. Quelle est la signification physique de Δ ?

(q) En utilisant le résultat précédent et un résultat de la première sous-section, montrer que, tout en restant grandes à la limite thermodynamique : $N \to \infty$, $V \to \infty$, N/V = constante, les fluctuations du nombre de particules dans le condensat sont plus petites que dans l'ensemble grand canonique.

(r) Les fluctuations de n_0 sont-elles plus grandes ou plus petites que les fluctuations poissonniennes ?

1.2 Le gaz en interaction

On considère maintenant un gaz de Bose en interaction dans l'ensemble canonique, le but étant de voir comment les interactions vont affecter le résultat obtenu dans la sous-section précédente. Nous allons utiliser la théorie de Bogoboliubov et nous considérerons d'emblée le cas d'un système homogène (boîte cubique de volume $V = L^3$ avec conditions aux limites périodiques). On introduit $\rho = N/V$ la densité de particules et g la constante de couplage qui caractérise les interactions entre particules.

En cours, nous avons introduit le champ $\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{N}\phi_0(\mathbf{r})$, où N est le nombre de particules et $\phi_0(x)$ la fonction d'onde du condensat obéissant à l'équation de Gross-Pitaevskii. Nous avons vu qu'une fluctuation $\delta\psi(\mathbf{r})$ de ce champ, développée sur les modes propres de la dynamique linéarisée des fluctuations, prend la forme

$$\delta\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}} \left(b_{\mathbf{k}} U_k + b^*_{-\mathbf{k}} V_k\right) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \tag{11}$$

où les amplitudes U_k, V_k et l'énergie du mode ϵ_k sont données par :

$$U_k - V_k = \frac{1}{U_k + V_k} = \left(\frac{\epsilon_k}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}\right)^{1/2} \qquad \text{et} \qquad \epsilon_k = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho g\right)} \tag{12}$$

Les amplitudes $b_{\mathbf{k}}$, $b^*_{\mathbf{k}}$ dans les modes évoluent simplement : $b_{\mathbf{k}}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k t}\, b_{\mathbf{k}}(0)$. Dans la version quantique de la théorie, elles sont remplacées par des opérateurs bosoniques

$$b_{\mathbf{k}} \to \hat{b}_{\mathbf{k}} \quad ; \quad b^*_{\mathbf{k}} \to \hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}} \quad ; \quad [\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}'}] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \tag{13}$$

Le champ

$$\delta\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}} \left(\hat{b}_{\mathbf{k}} U_k + \hat{b}^\dagger_{-\mathbf{k}} V_k\right) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \tag{14}$$

représente alors le champ des particules dans les modes orthogonaux au mode $\phi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}$ du condensat et

$$\hat{N}_\perp = \int d^3r\, \delta\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\delta\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{15}$$

représente l'opérateur *nombre de particules non condensées.*

(s) À partir des équations (14) et (15), montrer que

$$\hat{N}_\perp = \sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}} (U_k^2 + V_k^2)\hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}} + V_k^2 + U_k V_k(\hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}}\hat{b}^\dagger_{-\mathbf{k}} + \hat{b}_{-\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}}) \tag{16}$$

Dans la description de Bogoliubov quantique, le système est décrit comme un ensemble de quasi-particules indépendentes. Les opérateurs $\hat{a}_0$ et $\hat{a}_0^\dagger$ de création et annihilation d'une particule dans le mode du condensat peuvent être éliminés du hamiltonien au profit de $\delta\hat{N}_\perp$ dans l'approximation du "condensat jamais vide". Finalement on obtient :

$$\hat{H}_{\text{Bog}} = E_0(N) + \sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}} \epsilon_k \hat{n}_{\mathbf{k}} \qquad \text{avec} \qquad \hat{n}_{\mathbf{k}} = \hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}} \tag{17}$$

Un état microscopique l du système est alors représenté par l'ensemble des nombres d'occupation $\{n_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k}\neq 0}$ des modes de Bogoliubov (ou modes de quasiparticule) :

$$l \leftrightarrow \{n_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k}\neq 0} \tag{18}$$

et la contrainte sur le nombre total de particules dans l'ensemble canonique impose

$$\hat{n}_0 = N - \hat{N}_\perp \tag{19}$$

où $\hat{n}_0$ est l'opérateur nombre de particules dans le condensat. Le système à l'équilibre dans l'ensemble canonique (dans l'approximation du "condensat jamais vide") est donc décrit par un opérateur densité de la forme

$$\hat{\rho}_{\text{Bog}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta\sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}} \epsilon_k \hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}}} \tag{20}$$

(t) À l'aide de $\hat{\rho}_{\text{Bog}}$, calculer la moyenne des nombres d'occupation des quasiparticules en fonction de leur énergie propre ϵ_k.

(u) Montrer que, pour tout $s \in \mathbb{N}^*$, $\langle(\hat{b}_{\mathbf{k}})^s\rangle = 0$, la moyenne étant prise dans l'état $\hat{\rho}_{\text{Bog}}$. On pourra prendre la trace dans la base de Fock $|\{n_{\mathbf{k}}\}\rangle$ (on rappelle que $\hat{b}_{\mathbf{k}}|n_{\mathbf{k}}\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}}}|n_{\mathbf{k}} - 1\rangle$). Exprimer la valeur moyenne de $\hat{N}_\perp$ en fonction des $\bar{n}_{\mathbf{k}}$.

(v) Montrer que la variance de $\hat{N}_\perp$ vaut :

$$(\Delta N_\perp)^2 = \sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}} (U_k^2 + V_k^2)^2 \bar{n}_{\mathbf{k}}(\bar{n}_{\mathbf{k}} + 1) + 2U_k^2 V_k^2 \left[\bar{n}_{\mathbf{k}}^2 + (1 + \bar{n}_{\mathbf{k}})^2\right] \tag{21}$$

On pourra utiliser le résultat suivant (théorème de Wick) qui dit que, pour un opérateur densité de la forme (20), où les $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ sont des opérateurs bosoniques, et pour des opérateurs $\hat{A}_i$ égaux à $\hat{b}_{\mathbf{k}_i}$ ou à $\hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}_i}$, on a

$$\langle \hat{A}_1\hat{A}_2\hat{A}_3\hat{A}_4\rangle = \langle \hat{A}_1\hat{A}_2\rangle\langle \hat{A}_3\hat{A}_4\rangle + \langle \hat{A}_1\hat{A}_3\rangle\langle \hat{A}_2\hat{A}_4\rangle + \langle \hat{A}_1\hat{A}_4\rangle\langle \hat{A}_2\hat{A}_3\rangle \tag{22}$$

(w) On introduit la variable sans dimension q définie par

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 2\rho g q^2 \qquad \text{ou, de façon équivalente} \qquad \hbar c k = 2\rho g q \tag{23}$$

où $c = \sqrt{\rho g/m}$ est la vitesse du son dans le condensat. Montrer qu'à faible k, pour $k_B T \gg \epsilon_k$, on a

$$U_k \simeq \frac{1}{2}\frac{1}{q^{1/2}} \qquad ; \qquad V_k \simeq -\frac{1}{2}\frac{1}{q^{1/2}} \qquad \text{et} \qquad \bar{n}_k \simeq \frac{k_B T}{2\rho g}\frac{1}{q} \tag{24}$$

On approximera à cette fin la relation de dispersion $k \mapsto \epsilon_k$ par son expression à faible k.

(x) Montrer que si l'on remplace la somme (21) par une intégrale sur $\mathbf{k}$ à la limite thermodynamique, on obtient une intégrale divergente.

(y) On garde la somme discrète mais en retenant seulement les termes dominants dans le développement du sommande à faible k. Montrer que

$$(\Delta N_\perp)^2 \simeq \frac{1}{2}\left(\frac{k_B T}{\Delta}\right)^2 \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^{3*}} \frac{1}{(n_x^2+n_y^2+n_z^2)^2} \tag{25}$$

(z) En déduire la valeur de $(\Delta n_0)^2$, comparer avec le cas du gaz parfait et conclure.

2 Refroidissement de fermions par une transformation adiabatique

Une technique très efficace pour refroidir un gaz de bosons bien en dessous de la température de dégénéréscence est le refroidissement par évaporation. Cette technique, consistant à tronquer la distribution en énergie en éliminant les particules les plus énergétiques, repose sur les collisions élastiques entre atomes pour rétablir l'équilibre thermique dans le gaz à une température inférieure. Malheureusement, appliqué à un gaz d'atomes fermioniques, le refroidissement par évaporation se révèle inefficace, si bien qu'en pratique l'on est souvent limité à des températures $T \geq 0.2\,T_F$ où T_F est la température de Fermi du gaz. Le but de cet exercice est d'illustrer une autre méthode qui permettrait de franchir cette limite et de refroidir un gaz de fermions dans deux états de spin $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ jusqu'à des températures très basses.

L'idée centrale de la méthode est d'utiliser une résonance de Feshbach pour changer la longueur de diffusion en onde s, a, de positive à négative. Pour $a > 0$, le gaz forme des molécules $\uparrow\downarrow$ d'extension bien inférieure à la distance moyenne entre molécules. Ces molécules peuvent alors être considérées comme des bosons. On peut les refroidir très efficacement par évaporation et les condenser. Ensuite, on change adiabatiquement (ici à entropie constante) a vers des valeurs négatives. Les molécules se dissocient et l'on transforme alors le condensat de molécules en un gaz dégénéré de fermions très froids.

2.1 Entropie d'un gaz parfait de fermions piégés

Considérons un ensemble de fermions de masse m dans deux états de spin $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$. Les fermions sont piégés dans un potentiel harmonique isotrope à trois dimensions, si bien que le Hamiltonien à une particule est

$$h_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \tag{26}$$

avec $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ et $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$. On néglige ici les interactions entre atomes. Pour décrire le gaz on utilisera l'ensemble grand canonique de température $T = 1/(k_B\beta)$ (k_B est la constante de Boltzmann) et potentiel chimique μ. Le grand potentiel est

$$J = -k_B T \sum_\lambda \ln\left(1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_\lambda)}\right) \tag{27}$$

où la somme porte sur tous les états propres du hamiltonien à une particule h_0.

(a) Écrire les énergies propres ϵ_λ de h_0, et donner l'ensemble des nombres quantiques qui caractérisent chaque état propre ϕ_λ. Dans toute la suite, pour simplifier, on choisit l'origine des énergies de façon à ce que l'énergie propre minimale ϵ_0 soit nulle.

(b) Calculer la densité d'états dans le piège harmonique $\rho(\epsilon)$ et montrer qu'elle est de la forme

$$\rho(\epsilon) = A\epsilon^2 \tag{28}$$

où A est une constante que l'on exprimera en fonction de ω.

(c) Monter que dans la limite $k_B T \gg \hbar\omega$, on peut écrire

$$J = k_B T \int_0^\infty d\epsilon\, \rho(\epsilon) \ln(1 - n(\epsilon)) \tag{29}$$

où $n(\epsilon)$ est le nombre d'occupation moyen (fermionique) d'un état à une particule d'énergie ϵ, et $\rho(\epsilon)$ est la densité d'états calculée au point précédent.

(d) Intégrer J par parties et effectuer un développement à basse température de J jusqu'à l'ordre quatre en T inclus. On utilisera la relation :

$$\int_0^\infty \frac{g(\epsilon)d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1} \simeq \int_0^\mu g(\epsilon)d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} g'(\mu)(k_B T)^2 + \frac{7\pi^4}{360} g'''(\mu)(k_B T)^4 + \ldots \tag{30}$$

où $g(\epsilon)$ est une fonction régulière (continue et dérivable) de l'énergie ϵ.

(e) En utilisant la relation $S = -\partial_T J|_{\mu,\omega}$, calculer l'entropie S du gaz en fonction de μ, A et T.

(f) En utilisant la relation $N = -\partial_\mu J|_{T,\omega}$, où N est le nombre de fermions, exprimer à l'ordre le plus bas (ordre zéro en T) le potentiel chimique μ en fonction de A et de N.

(g) Calculer l'énergie de Fermi ϵ_F dans le piège harmonique en fonction de N et de A, et montrer que

$$S = k_B N \pi^2 \left(\frac{T}{T_F}\right) + \mathcal{O}(T^3) \tag{31}$$

où $T_F = \epsilon_F / k_B$.

2.2 Entropie d'un gaz parfait de bosons

Considérons un gaz parfait de bosons sans spin. Les bosons sont piégés et condensés ($T \ll T_c$ où T_c est la température critique). Le but de cette partie est de calculer l'entropie du gaz en fonction de la température. Le Hamiltonien à une particule est toujours h_0 (voir (26)). Le grand potentiel est, cette fois,

$$J = k_B T \sum_{\lambda} \ln\left(1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_\lambda)}\right) \tag{32}$$

où la somme porte sur tous les états propres du Hamiltonien à une particule h_0.

(h) Calculer la densité d'états dans le piège harmonique $\rho(\epsilon)$ pour le gaz de bosons. Montrer qu'elle est de la forme

$$\rho(\epsilon) = A_B \epsilon^2 \tag{33}$$

où $A_B = A/2$ et A est la constante calculée au point (b).

(i) Donner la valeur du potentiel chimique μ en présence d'un condensat pour $T \ll T_c$.

(j) Expliquer pourquoi l'état fondamental de h_0 peut être négligé dans le calcul de l'entropie.

(k) Montrer que pour $k_B T \gg \hbar\omega$, on peut écrire

$$J = k_B T \int_0^\infty d\epsilon\, \rho(\epsilon) \ln\left(1 - e^{-\beta\epsilon}\right) . \tag{34}$$

(l) Intégrer J par parties et exprimer l'entropie S du gaz en fonction de A_B, T et de $g_4(1) = \zeta(4)$, où g est la fonction de Bose

$$g_\alpha(z) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty dy\, y^{\alpha-1} \frac{z e^{-y}}{1 - z e^{-} y} \tag{35}$$

et ζ est la fonction Zeta de Riemann. On rappelle que $\Gamma(n+1) = n!$ pour n entier.

(m) Calculer la température critique T_c dans le piège harmonique en fonction du nombre de bosons N_B, de ω et de $\zeta(3)$.

(n) Sachant que $\zeta(4) = \pi^4/90$, montrer que

$$S = N_B k_B \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \frac{2\pi^4}{45\,\zeta(3)} . \tag{36}$$

2.3 Transformation à entropie constante

Nous voulons maintenant calculer l'efficacité de notre procédé de refroidissement de fermions.

(o) On commence avec un condensat de molécules ($a > 0$) refroidi à $T = 0.25\,T_c$, et on transforme le système en gaz de fermions en changeant le signe de a à entropie constante. Calculer la température finale des fermions en unités de T_F ($\zeta(3) = 1.202...$).