Cohérence et superfluidité dans les gaz atomiques

Jean Dalibard Chaire *Atomes et rayonnement* Année 2015-16



Refroidissement et condensation de Bose-Einstein

Refroidissement lumineux (mélasses optiques) + évaporation



Si le gaz est assez dense, on observe le phénomène de condensation pour des atomes régis par la statistique de Bose-Einstein



1995 : Boulder & MIT

Cohérence et superfluidité

Cohérence : conséquence directe de la condensation

Accumulation d'atomes dans un état donné : onde de matière macroscopique

Superfluidité : conséquence de la condensation et des interactions entre atomes Absence de chauffage quand le gaz est traversé par une impureté mobile Existence de courants permanents métastables « Rigidité » du fluide que l'on cherche à mettre en mouvement

Le cours de cette année

Systèmes homogènes

Modèle à deux fluides Equation de Gross-Pitaevskii Formalisme de Bogoliubov Critère de Landau

Gaz sur réseau

Instabilité dynamique Transition vers un état isolant Ansatz de Gutzwiller Transition de phase quantique et mode de Higgs

Nous étudierons uniquement le cas de bosons « sans spin » : nous n'aborderons pas le cas des fermions, ni des mélanges bosons-fermions

Cours 1

Statistique de Bose-Einstein et condensation

Jean Dalibard Chaire *Atomes et rayonnement* Année 2015-16



Le but de ce premier cours

Un problème simple : quel est l'état d'équilibre d'un gaz parfait dont les composants sont identiques ?

De Boltzmann à Bose & Einstein

Une nouvelle statistique, régie par l'émission stimulée

La condensation du gaz parfait

Système de taille finie et saturation des états excités, limite thermodynamique

Au delà du gaz parfait

Ordre à longue portée et critère de Penrose & Onsager

Bose (1924) et le rayonnement du corps noir



Lettre de Bose à Einstein :

In all cases it appears to me that the derivations have not been sufficiently justified from a logical point of view. As opposed to these the light quantum hypothesis combined with statistical mechanics ...appears sufficient for the derivation of the law independent of classical theory.

Bose propose une nouvelle manière pour compter les modes du champ électromagnétique, en divisant l'espace des phases en cellules de taille h^3 et en évaluant le nombre de façons de placer les quanta de lumière dans ces cellules.

Les trois idées essentielles du travail de Bose

Idées essentielles (mais implicites) [Pais 1979]:

- Nombre de photons non conservé
- Dénombrement fait pour répondre à la question

 « Combien de particules dans une cellule donnée? » au lieu de « Quelles particules dans une cellule donnée ? »
- Cellules indépendantes, mais on perd l'indépendance statistique des particules

Einstein 1924-25

« Note du traducteur :

Je considère que la dérivation de la formule de Planck par Bose constitue une avancée importante. La méthode utilisée ici conduit également à une théorie du gaz parfait quantique, que je discuterai en détail ailleurs. »

Mais aussi dans une lettre à Ehrenfest:

« La dérivation de Bose est élégante, mais son essence demeure obscure »

Remarque de Bose (cité par Pais):

« I had no idea that what I had done was really novel... I was not a statistician to the extent of really knowing that I was doing something that was really different from what Boltzmann would have done from Boltzmann statistics."

Einstein 1924-25

Un problème de dénombrement : combien de façons de mettre N particules dans M boîtes ?

Prenons N=3 particules et M=2 boîtes :



Statistique de BE: revient à compter le nombre de positions pour les cloisons intermédiaires:



Boltzmann: 8=
$$2^3 \rightarrow M^N$$

Bose-Einstein : $4 \rightarrow \frac{(N+M-1)!}{N! (M-1)!}$

Vers le condensat

Ce nouveau comptage favorise les états « condensés »

N particules à répartir entre deux boîtes A et B

Quelle est la probabilité d'avoir toutes les particules dans la boîte A ?

Boltzmann : une chance sur deux par particule $p = \frac{1}{2^N}$ exponentiellement petit

Bose-Einstein : une cloison intermédiaire à positionner parmi N + 1 cases possibles

$$p = \frac{1}{N+1}$$

Perte de « l'indépendance » entre particules ? Echange entre Einstein et Schrödinger :

La différence entre statistique de Boltzmann et statistique de Bose-Einstein « exprime de manière indirecte une certaine hypothèse sur une influence mutuelle des molécules qui reste pour le moment d'une nature mystérieuse »

A quel type de particules appliquer ce comptage ?

Einstein 1925 : « il y a un cas où la nature a peut-être réalisé, pour l'essentiel, le gaz parfait saturé : c'est celui des électrons de conduction d'un métal »

Dirac 1926 : « The solution with symmetrical eigenfunctions must be the correct one when applied to light quanta, since it is known that the Einstein—Bose statistical mechanics leads to Planck's law of black-body radiation. The solution with antisymmetrical eigenfunctions, though, is probably the correct one for gas molecules, since it is known to be the correct one for electrons in an atom, and one would expect molecules to resemble electrons more closely than light quanta. »

Les atomes sont des objets composites et leur statistique (Bose-Einstein ou Fermi-Dirac) dépend de leur spin total (entier ou demi-entier)

atome neutre : Z électrons + Z protons + N_n neutrons

Bosons : nombre pair de neutrons Fermions : nombre impair de neutrons

La loi statistique de Bose-Einstein pour un gaz parfait



Le nombre moyen de particules occupant l'état ψ_j s'écrit en fonction de la température T et du potentiel chimique μ

$$N_j = \frac{1}{e^{(E_j - \mu)/k_{\rm B}T} - 1}$$

On va justifier ici cette loi à partir de :

- l'émission stimulée
- une équation bilan pour les collisions binaires

L'émission stimulée

On suppose qu'une particule peut passer de l'état $|\phi_k\rangle$ à l'état $|\phi_l\rangle$ sous l'effet d'une perturbation donnée. Que se passe-t-il si l'état $|\phi_l\rangle$ est déjà occupé par N particules ?



Bilan détaillé pour une collision (Boltzmann)

On se donne des états à une particule j_1, j_2 . Les collisions qui conduisent à l'équilibre thermique sont du type:

 $j_1 + j_2 \rightleftharpoons j_3 + j_4$ si $E_1 + E_2 = E_3 + E_4$

Statistique de Boltzmann : équilibre si $N_{j_1} N_{j_2} = N_{j_3} N_{j_4}$

On suppose que l'occupation moyenne ne dépend que de l'énergie : $N_j = N(E_j)$

La fonction N(E) doit donc vérifier la propriété mathématique suivante

$$N(E_1) N(E_2) = N(E_3) N(E_4)$$
 si $E_1 + E_2 = E_3 + E_4$

Solution : on pose $g(E) = \log [N(E)]$ et on a donc $g(E_1) + g(E_2) = g(E_3) + g(E_4)$

Seules les fonctions affines g(E) = aE + b ont cette propriété

Donc:
$$N(E) = e^{aE+b} \equiv e^{(\mu-E)/k_{\rm B}T}$$
 avec $k_{\rm B}T = -1/a$ $\mu = -b/a$

Bilan détaillé pour une collision (Bose-Einstein)

On reprend la même collision en prenant en compte l'émission stimulée

$$j_1 + j_2 \rightleftharpoons j_3 + j_4$$
 si $E_1 + E_2 = E_3 + E_4$

Equilibre si : $N_{j_1} N_{j_2} [1 + N_{j_3}] [1 + N_{j_4}] = N_{j_3} N_{j_4} [1 + N_{j_1}] [1 + N_{j_2}]$

ou encore :
$$\frac{N_{j_1}}{1+N_{j_1}} \frac{N_{j_2}}{1+N_{j_2}} = \frac{N_{j_3}}{1+N_{j_3}} \frac{N_{j_4}}{1+N_{j_4}}$$

On pose cette fois-ci $g(E) = \log \left[\frac{N(E)}{1+N(E)}\right]$ et on retrouve

$$g(E_1) + g(E_2) = g(E_3) + g(E_4) \longrightarrow g(E) = aE + b$$

ce qui entraine
$$\frac{N(E)}{1+N(E)} = e^{aE+b}$$
 ou encore : $N(E) = \frac{1}{e^{-(aE+b)}-1}$

Loi de Bose-Einstein avec
$$k_{\rm B}T=-1/a$$
 $\mu=-b/a$

2.

La condensation de Bose-Einstein du gaz parfait

La saturation des états excités



Gaz parfait dans une boîte de taille *L* avec des conditions aux limites périodiques :

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \qquad E_{\boldsymbol{p}} = \frac{p^2}{2m} \qquad \boldsymbol{p} = \frac{2\pi\hbar}{L}\boldsymbol{n}$$

Occupation de l'état d'impulsion \boldsymbol{p} : $N(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{e^{(E_{\boldsymbol{p}}-\mu)/k_{\mathrm{B}}T}-1}$

Pour que cette expression ait un sens pour toutes les impulsions, il faut $\ \mu < E_0 = 0$

 $\text{Comme chaque } N(\boldsymbol{p}) \text{ est une fonction croissante de } \mu \text{ , on a pour } \boldsymbol{p} \neq 0 \text{: } N(\boldsymbol{p}) < \frac{1}{\mathrm{e}^{E_{\boldsymbol{p}}/k_{\mathrm{B}}T}-1}$

Borne supérieure pour la population de l'ensemble des états excités :

$$N_{\rm exc} < N_{\rm exc}^{(\rm max)}(T) = \sum_{p \neq 0} \frac{1}{\mathrm{e}^{E_p/k_{\rm B}T} - 1}$$

valable en toute dimension

La saturation des états excités (2)



$$N_{\rm exc} < N_{\rm exc}^{(\rm max)}(T)$$

Si on met dans la boîte un nombre d'atomes N qui dépasse $N_{
m exc}^{(
m max)}(T)$, on est certain qu'au moins $N-N_{
m exc}^{(
m max)}(T)$

vont s'accumuler dans l'état fondamental d'énergie $E_0 = 0$

Expérience de Cambridge : atomes de ⁸⁷Rb dans une boîte lumineuse cylindrique



La condensation dans une boîte (Cambridge 2013)



Le cas d'un gaz piégé

Les ingrédients nécessaires pour la saturation du nombre d'atomes occupant les états excités

• Un spectre en énergie discret $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$

assuré si le potentiel de confinement tend vers l'infini à grande distance



• La convergence à grande énergie de la somme discrète

$$N_{\rm exc}^{(\rm max)} = \sum_{j \neq 0} \frac{1}{e^{(E_j - E_0)/k_{\rm B}T} - 1}$$

qui apparaît quand le potentiel chimique se rapproche de sa borne supérieure $\mu \rightarrow E_0$

en pratique, toujours vérifié

Le cas d'un potentiel harmonique



Etats d'énergie discrets en $E_j = (j + 1/2) \hbar \omega$ $\mu \rightarrow E_0 = \hbar \omega/2$

Borne supérieure pour l'occupation des états excités :

$$N_{\rm exc}^{\rm (max)}(T) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{{\rm e}^{j\,\hbar\omega/k_{\rm B}T} - 1}$$



 $k_{\rm B}T = 40 \ \hbar \omega \,$: ce n'est pas un simple effet de désactivation thermique !

La saturation dans un piège harmonique est-elle observable?

En pratique, à la différence de la boîte, cette saturation n'a pas été observée :

- L'état fondamental est localisé dans l'espace, au fond du puits de potentiel
- Si un nombre significatif de particules s'accumulent dans cet état fondamental, elles créent un potentiel répulsif qui augmente le nombre de saturation $N_{\rm exc}^{(\max)}$



3.

La condensation à la limite thermodynamique

La limite d'une boîte infinie



On prend la limite $L \to \infty$ et $N \to \infty$ en gardant une densité spatiale constante $3D: \rho = N/L^3$ plus généralement en d dimensions: $\rho^{(d)} = N/L^d$

La « survie » du phénomène de condensation dépend du comportement de $\frac{N_{\rm exc}^{({
m max})}}{L^d}$

- tend vers une limite finie : la CBE survit au passage à la limite
- tend vers l'infini : la CBE ne se produit pas à la limite thermodynamique

La réponse à cette question dépend de la dimension *d* de l'espace accessible

Condensation de Bose-Einstein en dimension 3

Si aucun des états excité n'introduit une singularité (à vérifier a posteriori) :

$$\rho_{\text{exc}} = \frac{N_{\text{exc}}}{L^3} = \frac{1}{L^3} \sum_{\boldsymbol{p} \neq 0} N(\boldsymbol{p}) \qquad \longrightarrow \qquad \rho_{\text{exc}} = \frac{1}{L^3} \frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3} \int N(\boldsymbol{p}) \, \mathrm{d}^3 p$$

Quand on prend pour $N(\pmb{p})$ la valeur maximale possible $~\frac{1}{{\rm e}^{E_{\pmb{p}}/k_{\rm B}T}-1}$, on obtient une intégrale convergente

$$\rho_{\rm exc}^{\rm max} = \frac{2.612}{\lambda_T^3} \qquad \qquad \lambda_T = \frac{\sqrt{2\pi} \ \hbar}{\sqrt{mk_{\rm B}T}} \qquad \qquad 2.612 = \zeta(3/2)$$

La longueur d'onde thermique λ_T représente la taille typique d'un paquet d'ondes à la température T. La densité maximale correspond au point où le recouvrement entre paquets d'ondes devient significatif

Autre écriture en terme de la densité dans l'espace des phases $\mathcal{D} = \rho \lambda_T^3$:

$$\mathcal{D}_{\rm exc}^{\rm max} = 2.612$$

Le point de condensation

La densité maximale autorisée pour les états excités varie comme

$$\rho_{\rm exc}^{\rm max} = \frac{2.612}{\lambda_T^3} \propto T^{3/2} \qquad \qquad \lambda_T = \frac{\sqrt{2\pi} \ \hbar}{\sqrt{mk_{\rm B}T}}$$

Loi bien vérifiée expérimentalement dans le piège uniforme de Cambridge



A 30 nK, la densité critique est de 2 atomes/microns³ Energie d'interaction inférieure à 1nK (cf. chap. 3)

Formulation en terme de densité d'états

Utilisation de l'énergie plutôt que l'impulsion pour paramétrer le problème

$$\frac{1}{L^d} \sum_{p} \dots \longrightarrow \frac{1}{L^d} \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^d \int \mathrm{d}^d p \dots \longrightarrow \frac{1}{L^d} \int \mathrm{d} E \ \rho^{(d)}(E) \ \dots$$

avec à 3D:
$$\rho^{(3)}(E) = \frac{L^3}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{+1/2}$$

L'existence de la condensation se ramène à la convergence de l'intégrale en E = 0

$$\rho_{\rm ex}^{(d)} = \frac{1}{L^d} \int_0^{+\infty} dE \ \rho(E) \underbrace{\left(\frac{1}{e^{E/k_{\rm B}T} - 1}\right)}_{e^{E/k_{\rm B}T} - 1} \Longrightarrow \approx \frac{k_{\rm B}T}{E}$$

Cas fréquent :
$$ho(E) \propto E^{lpha}$$
 \longrightarrow condensation si et seulement si $lpha > 0$

Le cas des dimensions réduites

Boite uniforme à une et deux dimensions :
$$\begin{cases} \rho(E) \propto E^{-1/2} & \text{1D} \\ \rho(E) \propto E^0 & \text{2D} \end{cases}$$

pas de condensation à la limite thermodynamique pour le gaz parfait



Le cas du piège harmonique

Limite thermodynamique :

 $N \to +\infty, \ \omega \to 0 \longrightarrow N \omega^d \text{ constant}$

revient à garder la densité centrale constante

Le piège harmonique 1D : niveaux équidistants, non dégénérés

$$E_j = (j+1)\hbar\omega$$
 \longrightarrow $\rho^{(1)}(E) = \frac{1}{\hbar\omega} \propto E^0$ pas de condensation à la limite thermodynamique

Le piège harmonique 2D ou 3D : niveaux équidistants avec une dégénéres cence qui croît comme j ou j^2

$$ho^{(2)}(E) \propto E$$
 $ho^{(3)}(E) \propto E^2$: condensation à la limite thermodynamique



4.

La condensation de Bose-Einstein au delà du gaz parfait

Le rôle des interactions

Les interactions peuvent déformer considérablement l'état d'équilibre du gaz par rapport à l'état fondamental à une particule

Quand c'est le cas, rechercher l'accumulation de la population dans l'état fondamental à une particule ne présente pas d'intérêt particulier.

Boîte à une dimension avec des conditions aux limites de Dirichlet : $\psi(0) = \psi(L) = 0$

Etat fondamental à une particule : $\psi_0(x) \propto \sin(\pi x/L)$



L'opérateur densité à un corps

L'état du gaz en interaction est caractérisé par son opérateur densité $\hat{
ho}$

On définit l'opérateur densité à un corps en prenant la trace partielle sur N - 1 particules

$$\hat{\rho}_1 = N \operatorname{Tr}_{2,\dots,N} \left(\hat{\rho} \right)$$

Par exemple, en point de vue position :

$$\langle \boldsymbol{r}'|\hat{\rho}_1|\boldsymbol{r}\rangle = N \int \mathrm{d}^3 r_2 \, \dots \mathrm{d}^3 r_N \, \langle \boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_N | \hat{\rho} | \boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_N \rangle$$

Expression dans le formalisme de la seconde quantification :

 $\langle \boldsymbol{r}' | \hat{
ho}_1 | \boldsymbol{r}
angle = \operatorname{Tr} \left(\hat{\Psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \ \hat{\Psi}(\boldsymbol{r}') \ \hat{
ho}
ight) \qquad \hat{\Psi}(\boldsymbol{r}) \ \mathsf{d}\mathsf{\acute{e}\mathsf{truit}} \ \mathsf{une} \ \mathsf{particule} \ \mathsf{au} \ \mathsf{point} \ \boldsymbol{r}$

Cet opérateur permet de calculer la moyenne de toutes les observables à une particule : *distribution spatiale, fluctuations de phase, distribution en impulsion*

Il ne donne pas accès aux corrélations entre particules, comme les fluctuations de densité

Le critère de Penrose-Onsager

L'opérateur densité à un corps $\hat{
ho}_1$ est hermitien et positif

- Il est diagonalisable
- Ses valeurs propres Π_j sont réelles, positives ou nulles
- La trace de l'opérateur est égale à N , donc : $\operatorname{Tr}\left(\hat{
 ho}_{1}
 ight)=\sum_{j}\Pi_{j}=N$

On note Π_0 la plus grande valeur propre

If y a condensation si et seulement si : $\Pi_0 \sim \mathcal{O}(N)$ quand $N \to \infty$

Π_0 : fraction condensée

La fonction d'onde du condensat

On note $\psi_0(r)$ la fonction propre de $\hat{
ho}_1$ associée à sa plus grande valeur propre Π_0

 $\hat{
ho}_1 \ \psi_0(oldsymbol{r}) = \Pi_0 \ \psi_0(oldsymbol{r})$

 $\psi_0(\boldsymbol{r})$: fonction d'onde du condensat

Il peut arriver que quelques valeurs propres $\Pi_0, \Pi_1, \Pi_2, \ldots$ soient d'ordre Nà la limite thermodynamique

Plusieurs états ψ_0, ψ_1, ψ_2 sont alors macroscopiquement peuplés

Situation que l'on rencontre rarement en pratique (possible avec des gaz spineurs)

Ordre à longue portée

Revenons à la boîte avec des conditions aux limites périodiques

L'invariance par translation entraîne que la fonction du condensat (quand il existe) est toujours la fonction d'onde uniforme même en présence d'interactions

$$\psi_0(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}$$

Dém:
$$[\hat{\rho}, \hat{P}] = 0$$
 avec \hat{P} impulsion totale : $\hat{P} = \sum_{j=1}^{N} \hat{p}_j$
 $\langle p'_1, \dots, p'_N | \hat{\rho} | p_1, \dots, p_N \rangle \neq 0$ seulement si $\sum_{j=1}^{N} p_j = \sum_{j=1}^{N} p'_j$

Quand on prend la trace partielle sur N-1 particules :

$$\langle \boldsymbol{p}' | \hat{\rho}_1 | \boldsymbol{p} \rangle = \delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}') N(\boldsymbol{p})$$

Ordre à longue portée (2)

Evaluons alors les éléments de matrice de $\hat{\rho}_1$ en point de vue position

$$G_1(m{r}'-m{r}) = \langlem{r}'|\hat{
ho}_1|m{r}
angle \quad ext{avec} \quad \hat{
ho}_1 = \sum_j \Pi_j \; |\psi_j
angle \langle\psi_j|$$

En isolant la contribution de la seule valeur propre peuplée macroscopiquement, on trouve

Fonction G_1 et distribution en impulsion

Dans le cas uniforme, $G_1({m r},{m r}')=\langle {m r}'|\hat
ho_1|{m r}
angle$ ne dépend que de la différence ${m u}={m r}'-{m r}$

$$N(\boldsymbol{p}) = \langle \boldsymbol{p} | \hat{\rho}_1 | \boldsymbol{p} \rangle$$

=
$$\iint \langle \boldsymbol{p} | \boldsymbol{r}' \rangle \langle \boldsymbol{r}' | \hat{\rho}_1 | \boldsymbol{r} \rangle \langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{p} \rangle d^3 r' d^3 r$$

=
$$\int G_1(\boldsymbol{u}) e^{-i\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{p}/\hbar} d^3 u$$

 $N(\mathbf{p})$ et $G_1(\mathbf{u})$ sont transformées de Fourier l'une de l'autre (même en présence d'interactions)

L'ordre non diagonal à longue portée entraîne qu'il y a un pic de Dirac $\,\delta({m p})\,$ dans $\,N({m p})$

Dans le cas général, on obtient une relation similaire avec une double intégrale :

$$N(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{L^3} \iint G_1\left(\boldsymbol{R} - \frac{\boldsymbol{u}}{2}, \boldsymbol{R} + \frac{\boldsymbol{u}}{2}\right) \,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{p}/\hbar} \,\mathrm{d}^3\boldsymbol{u} \,\mathrm{d}^3\boldsymbol{R}$$

En résumé

Cas du gaz parfait

Origine de la statistique de Bose-Einstein ۲

Saturation des états excités
 Saturation des états excités
 Control de la dimensionalité et du confinement à la limite thermodynamique

Premier jalon pour l'étude d'un gaz en interaction

Lien entre l'ordre à longue portée et la distribution en impulsion