

# Chapitre 1

## Statistique de Bose–Einstein et condensation

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>De Boltzmann à Bose–Einstein</b>	<b>2</b>
1-1	La proposition de Bose	2
1-2	Le passage aux particules matérielles	2
1-3	Le phénomène d’émission stimulée	4
1-4	Un autre éclairage sur les lois statistiques	5
<b>2</b>	<b>La condensation du gaz de Bose parfait</b>	<b>7</b>
2-1	Saturation des états excités	7
2-2	L’expérience de Cambridge	8
2-3	Le cas d’un gaz piégé	9
<b>3</b>	<b>La CBE à la limite thermodynamique</b>	<b>10</b>
3-1	Limite thermodynamique en dimension réduite	11
3-2	La saturation de la densité à 3D	12
3-3	Le point de condensation	12
3-4	Utilisation de la densité d’états en énergie	14
3-5	Limite thermodynamique pour un piège	14
<b>4</b>	<b>La condensation de BE au delà du gaz parfait</b>	<b>16</b>
4-1	Le critère de Penrose–Onsager	16
4-2	L’ordre à longue portée dans un fluide homogène	17
4-3	Distribution en impulsion et fonction $G_1$	18

---

Le premier chapitre de ce cours va être consacré à un problème simple, l’étude de l’état d’équilibre d’un gaz parfait composé de particules indiscernables. Nous partirons du travail de Bose (1924), qui s’est le premier posé ce problème dans le cadre de ses études sur le rayonnement du corps noir, c’est-à-dire un gaz thermique de photons. La généralisation par Einstein à un gaz de particules matérielles fut presque immédiate et permit d’introduire le concept de saturation des états excités : pour un système de taille finie et à température donnée, le nombre de particules que l’on peut placer dans l’ensemble des niveaux d’énergie de l’hamiltonien en dehors du niveau fondamental est borné. Les particules en excès de cette borne ne peuvent donc occuper que le niveau fondamental, formant ainsi un *condensat de Bose–Einstein*.

Une fois cette saturation acquise, à la fois pour un gaz confiné dans une boîte et dans un piège harmonique, nous étudierons comment prendre la limite thermodynamique du système, en faisant tendre la taille du gaz vers l’infini et en gardant les paramètres intensifs (densité, température) constants. Nous verrons que la « survie » de la saturation dépend à la fois de la dimensionnalité de l’espace de travail et de la forme du confinement du gaz. Nous illustrerons ces différents concepts par des résultats expérimentaux récents, obtenus notamment avec des pièges « à fond plat » pour les gaz atomiques. Nous terminerons ce chapitre par une toute première discussion de la description de la condensation de Bose–Einstein (CBE) au delà du gaz parfait, avec le critère proposé par Penrose et Onsager.

L’étude du gaz parfait obéissant à la statistique de Bose–Einstein est

décrite dans de nombreux ouvrages de physique [voir par exemple Diu, Guthmann, et al. (1989) ainsi que Cohen-Tannoudji (1997-1998)]. Il n'est pas question de dupliquer ici ce traitement, mais plutôt d'insister sur quelques points saillants comme l'importance de l'émission stimulée, ou encore l'universalité du concept de saturation en dehors de toute limite thermodynamique.

## 1 De Boltzmann à Bose–Einstein

### 1-1 La proposition de Bose

En juin 1924, le jeune physicien bengali Satyendra Nath Bose qui travaillait à l'Université de Dhaka (désormais au Bangladesh) envoya une lettre à Einstein, accompagnée d'un manuscrit. Le manuscrit en anglais avait été refusé par le *Philosophical Magazine* ; Bose demandait donc son avis et éventuellement son aide à Einstein pour publier son travail. Le manuscrit de Bose proposait une nouvelle dérivation de la formule du rayonnement du corps noir de Planck. Bose passait d'abord en revue quelques méthodes connues à l'époque pour justifier cette formule et écrivait :

*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 (as it was formulated to meet the needs of the quantum theory) appears sufficient for the derivation of the law independent of classical theory.*

Einstein, trouvant l'approche de Bose très prometteuse, traduisit lui-même l'article et le soumit à *Zeitschrift für Physik*. L'article fut publié (Bose 1924) avec cette note d'Einstein :

*Anmerkung des Übersetzers. Boses Ableitung der Planckschen Formel bedeutet nach meiner Meinung einen wichtigen Fortschritt. Die hier benutzte Methode liefert auch die Quantentheorie des idealen Gases, wie ich an anderer Stelle ausführen will.*<sup>1</sup>

1. « 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. »

Pour Einstein, le point important du travail de Bose était la proposition d'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. Plus précisément, comme l'analyse en détail Pais (1979), l'article de Bose contient trois idées radicalement nouvelles :

- Le nombre de photons n'est pas conservé.
- Le dénombrement se fait en répondant à la question : « Combien de particules se trouvent dans une cellule donnée ? » et non plus « Quelles particules se trouvent dans une cellule donnée ? »
- Les cellules sont indépendantes, mais l'indépendance statistique des particules a disparu.

Pais (1979) remarque (un peu ironiquement) que Bose ne commente aucun de ces trois points cruciaux et cite cette phrase ultérieure de Bose :

*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 which was really different from what Boltzmann would have done from Boltzmann statistics.*

Quant à Einstein, son fort intérêt pour le travail de Bose ne l'empêchait pas de conserver une certaine distance puisqu'il écrivit à Ehrenfest en 1924 (Pais 1979) : *La dérivation de Bose est élégante mais son essence demeure obscure.*

### 1-2 Le passage aux particules matérielles

Comme annoncé dans sa « note du traducteur », Einstein transposa l'approche de Bose au cas du gaz parfait en une série de trois articles (Einstein 1924; Einstein 1925a; Einstein 1925b). Einstein remplaça le multiplicateur de Lagrange introduit par Bose pour le nombre de cellules – d'une utilité discutable puisque le nombre de cellules est fixé – par un multiplicateur de Lagrange exprimant la conservation du nombre de particules ; il remarqua au passage que ne pas mettre ce multiplicateur pour les particules revient à supposer que leur nombre n'est pas conservé, ce qui était implicite chez Bose.

Einstein arriva ainsi au dénombrement bien connu qui est la base de la statistique pour des particules indiscernables (au sens de Bose–Einstein) :

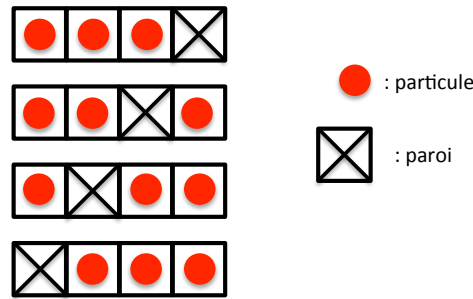


FIGURE 1. Les  $W(N, M) = \frac{(M+N-1)!}{N!(M-1)!}$  possibilités pour mettre  $N$  particules dans  $M$  boîtes, avec ici  $N = 3$  particules,  $M = 2$  boîtes (soit  $M - 1 = 1$  paroi intermédiaire) et donc  $W(3, 2) = 4$  possibilités.

si l'on dispose de  $M$  boîtes dans lesquelles on doit placer  $N$  particules indiscernables, le nombre de combinaisons possibles est

$$W(N, M) = \frac{(M + N - 1)!}{N! (M - 1)!}, \tag{1}$$

alors que ce nombre est  $M^N$  pour des particules discernables. Rappelons (cf. figure 1) que le résultat (1) s'obtient en considérant  $M + N - 1$  cases vides et en remplissant ces cases soit par une particule, soit par une paroi commune à deux boîtes (il y a  $M$  boîtes, donc  $M - 1$  parois). Une fois que l'on a disposé les  $N$  particules dans les  $M + N - 1$  cases [soit  $W(N, M)$  possibilités], les positions des parois sont également fixées et la configuration parfaitement déterminée. Rappelons qu'une fois ce dénombrement effectué, on peut en déduire la loi de Bose–Einstein, donnant le taux d'occupation moyen d'un état  $j$  d'énergie  $E_j$  pour une assemblée d'atomes de température  $T$  et de potentiel chimique  $\mu$  [voir par exemple Diu, Guthmann, et al. (1989)] :

$$N_j = \frac{1}{e^{(E_j - \mu)/k_B T} - 1}. \tag{2}$$

Le point crucial dans ce dénombrement est que l'on traite les particules non seulement comme *identiques*, mais également comme *indiscernables* [pour plus de détails, voir par exemple Cohen-Tannoudji, Dalibard, et al. (2005)]. Considérons par exemple la deuxième ligne de la figure 1,

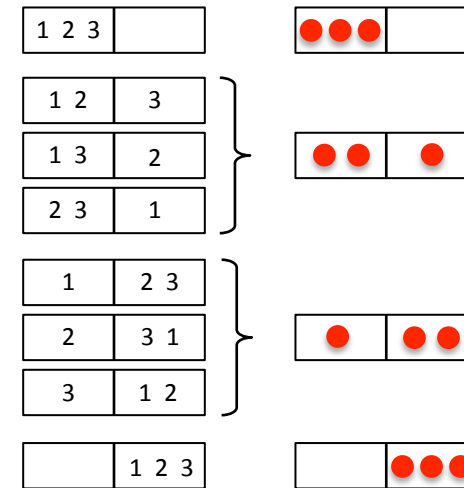


FIGURE 2. Différence entre statistique de Boltzmann et statistique de Bose–Einstein : dans le premier cas, il y a  $2^N$  manières de répartir  $N$  particules dans deux boîtes (avec ici  $N = 3$ ). Dans le deuxième cas, ce nombre est beaucoup plus petit :  $1/(N + 1)$ . Si on attribue une probabilité égale à chaque configuration, la statistique de Bose-Einstein favorise les configurations « condensées », c'est-à-dire la première et la dernière ligne de ce dessin.

que Bose et Einstein comptent comme une seule éventualité possible. Si les particules étaient *discernables* et donc numérotées par les entiers 1, 2 et 3, il y aurait en fait trois configurations microscopiques conduisant à cette ligne (cf. figure 2) :

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & | & 3 \\ 1 & 3 & | & 2 \\ 2 & 3 & | & 1 \end{bmatrix}$$

correspondant aux trois choix possibles de la particule isolée dans la boîte de droite.

Soulignons également que l'aspect « grégaire » des particules indiscernables est manifeste sur le dénombrement (1). Considérons  $N$  particules et  $M = 2$  boîtes, appelées  $A$  et  $B$  (figure 2). Supposons par ailleurs que

chaque éventualité de remplissage se produit avec la même probabilité et intéressons-nous à la situation « condensée », où les  $N$  particules occupent toutes la boîte  $A$ . Dans la nouvelle statistique introduite par Bose et expliquée par Einstein, cette éventualité se réalisera avec une probabilité

$$\text{Bose–Einstein : } p = \frac{1}{W(N, 2)} = \frac{1}{N + 1}. \quad (3)$$

C'est la ligne du haut des figures 1 et 2, avec la paroi disposée dans la case la plus à droite possible. La statistique de Boltzmann, pour des particules discernables, donne quant à elle le résultat exponentiellement plus petit

$$\text{Boltzmann : } p = \frac{1}{2^N}, \quad (4)$$

puisque chaque particule a une probabilité  $1/2$  de se trouver dans la boîte  $A$  et que la probabilité totale est le produit des probabilités si les placements de chacune des particules sont indépendants.

L'exemple ci-dessus illustre bien le fait que la nouvelle statistique entraîne une « perte d'indépendance » des particules. Ce point avait été « reproché » à Einstein par des collègues, Schrödinger par exemple, suite à la publication de son premier article de 1924. Einstein le reprend donc de manière explicite dans l'article suivant : 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 ». La nature de cette influence n'est autre que la nécessité de restreindre l'espace de Hilbert à des fonctions d'onde complètement symétriques par échange de deux particules, contrainte dont découle le phénomène d'émission stimulée comme nous allons le voir dans le paragraphe suivant.

Pour finir ce paragraphe, mentionnons que le champ d'application de cette nouvelle statistique n'était à l'époque pas encore bien établi. Dans son article de 1925, Einstein suggèrait qu'elle pourrait s'appliquer aux électrons : « 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 ». Un an plus tard, la statistique de Fermi–Dirac avait été découverte et Dirac (1926), prenant le contre-pied d'Einstein, écrivait dans sa discussion du gaz parfait quantique :

*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.*

La notion d'objet composite, dont la nature statistique (Bose–Einstein ou Fermi–Dirac) ne dépend que du spin total (entier ou demi-entier), n'était manifestement pas encore comprise ! Rappelons que cette notion est pertinente tant qu'on travaille dans un domaine d'énergie bien inférieure à l'énergie caractéristique de la composition de cet objet. Pour un gaz d'atomes froids, cette condition est très largement remplie puisque les énergies internes atomiques sont de l'ordre de l'électron-volt, alors que les énergies cinétiques typiques des gaz sont inférieures par dix ordres de grandeur. La nature statistique d'un atome neutre (avec un nombre égal d'électrons et de protons) est donc déterminée par son nombre de neutrons. Si ce nombre est pair, le spin total de l'atome sera entier et l'atome sera un boson. Si le nombre de neutrons est impair, l'atome sera au contraire un fermion.

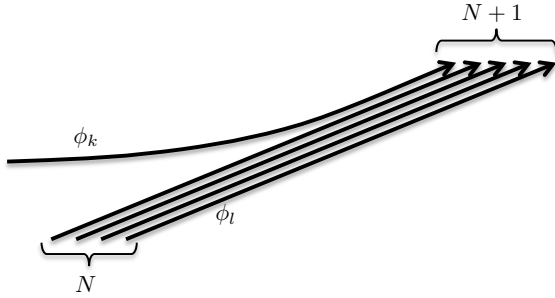
### 1-3 Le phénomène d'émission stimulée

Pour prendre en compte l'indiscernabilité des particules obéissant à la statistique de Bose–Einstein, on pose en physique quantique que la fonction d'onde ou le vecteur d'état d'un système à  $N$  particules doit être totalement symétrique par échange de deux particules. Nous allons montrer que ce postulat entraîne immédiatement le phénomène d'émission stimulée, à partir duquel on peut retrouver la loi de Bose–Einstein (§ 1-4).

Considérons  $N$  particules identiques au sens de Bose–Einstein et n'interagissant pas les unes avec les autres. L'hamiltonien du système est donc une somme d'hamiltoniens à un corps :

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \hat{h}^{(j)}. \quad (5)$$

Pour modéliser le phénomène d'émission stimulée, supposons qu'on ap-



**FIGURE 3.** Principe de l'émission stimulée : la probabilité pour qu'une particule dans un état  $\phi_k$  subisse une transition vers un état  $\phi_l$  est multipliée par  $N + 1$  si l'état  $\phi_l$  est déjà occupé par  $N$  particules.

plique à ces particules pendant une durée donnée le potentiel à un corps :

$$\hat{V} = \sum_{j=1}^N \hat{v}^{(j)}. \quad (6)$$

Le potentiel  $\hat{v}^{(j)}$  agit seulement sur la particule  $j$  et peut induire des transitions entre les différents états propres de  $\hat{h}^{(j)}$ . Nous allons montrer que la probabilité pour qu'une particule atteigne un état final donné  $|\phi_l\rangle$  est augmentée si cet état est déjà occupé.

Considérons d'abord le cas où une seule particule est présente et se trouve initialement dans l'état  $|\phi_k\rangle$ . Si nous supposons que l'effet de  $\hat{v}$  est faible, la probabilité pour que la particule atteigne l'état  $|\phi_l\rangle$  sous l'action de  $\hat{v}$  est proportionnelle à l'élément de matrice au carré de  $\hat{v}$  :

$$|v_{kl}|^2 = |\langle \phi_k | \hat{v} | \phi_l \rangle|^2, \quad (7)$$

ce résultat apparaissant par exemple dans le cadre de la théorie des perturbations dépendant du temps.

Supposons maintenant que l'état  $|\phi_l\rangle$  soit déjà occupé par  $N$  particules (figure 3), et qu'il y ait une seule particule dans l'état  $|\phi_k\rangle$ . L'état initial

correctement symétrisé s'écrit :

$$|\Psi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \left( \begin{aligned} &|1 : \phi_k ; 2 : \phi_l ; \dots ; N : \phi_l ; N+1 : \phi_l\rangle \\ &+ |1 : \phi_l ; 2 : \phi_k ; \dots ; N : \phi_l ; N+1 : \phi_l\rangle + \dots \\ &+ |1 : \phi_l ; 2 : \phi_l ; \dots ; N : \phi_l ; N+1 : \phi_k\rangle \end{aligned} \right) \quad (8)$$

et nous recherchons la probabilité d'atteindre l'état final :

$$|\Psi_f\rangle = |1 : \phi_l ; 2 : \phi_l ; \dots ; N : \phi_l ; N+1 : \phi_l\rangle. \quad (9)$$

La probabilité de transition est maintenant proportionnelle à :

$$\begin{aligned} |V_{if}|^2 &= |\langle \Psi_i | \hat{V} | \Psi_f \rangle|^2 \\ &= \left| \frac{1}{\sqrt{N+1}} (N+1) \langle 1 : \phi_k ; 2 : \phi_l ; \dots | \hat{v}^{(1)} | 1 : \phi_l ; 2 : \phi_l ; \dots \rangle \right|^2 \\ &= (N+1) |v_{kl}|^2 \end{aligned} \quad (10)$$

où l'on a utilisé le fait que les  $N+1$  éléments de matrice émanant des  $N+1$  termes de la somme (8) sont tous égaux.

La présence de  $N$  particules dans l'état  $|\phi_l\rangle$  augmente donc par un facteur  $N+1$  la probabilité que la particule initialement dans l'état  $|\phi_k\rangle$  atteigne cet état  $|\phi_l\rangle$ . Plus précisément, la probabilité de transition est la somme du taux pour une transition spontanée, proportionnel à  $|v_{kl}|^2$  et indépendant de  $N$ , et du taux de la transition stimulée par la présence des  $N$  bosons initialement dans l'état  $|\phi_l\rangle$ , proportionnel à  $N |v_{kl}|^2$ .

#### 1-4 Un autre éclairage sur les lois statistiques

À partir du comptage (1) appliqué aux différentes cellules de l'espace des phases, Einstein a établi dans ses articles la loi donnant pour un gaz parfait la population d'un état individuel  $j$  d'énergie  $E_j$  :

$$N_j = \frac{1}{e^{(E_j - \mu)/k_B T} - 1} \quad (11)$$

pour un système de température  $T$  et de potentiel chimique  $\mu$ . La dérivation de cette loi est faite dans tous les traités de physique statistique et nous

n'allons pas la reprendre ici. En revanche, il peut être utile de savoir la retrouver à partir d'arguments simples, utilisant la notion de bilan détaillé et d'émission stimulée.

Commençons par expliquer comment retrouver la statistique de Maxwell–Boltzmann à partir d'un bilan d'équilibre entre différents processus de collision. Considérons une paire de particules dans les états  $j_1$  et  $j_2$ , d'énergies respectives  $E_1$  et  $E_2$ . Ces particules peuvent entrer en collision élastique et sortir de la collision dans deux autres états,  $j_3$  et  $j_4$ , la conservation de l'énergie imposant :

$$j_1 + j_2 \longrightarrow j_3 + j_4 \quad \text{si} \quad E_1 + E_2 = E_3 + E_4. \quad (12)$$

Le processus inverse

$$j_3 + j_4 \longrightarrow j_1 + j_2 \quad (13)$$

est également possible et à l'équilibre, le nombre de transitions dans le sens (12) doit être égal au nombre de transitions dans le sens (13) : c'est la condition de *bilan détaillé*. Cette condition impose

$$N_{j_1} N_{j_2} = N_{j_3} N_{j_4} \quad \text{si} \quad E_1 + E_2 = E_3 + E_4. \quad (14)$$

Supposons pour simplifier que la population d'un état  $j$  ne dépend que de l'énergie  $E_j$  de cet état :

$$N_j = N(E_j). \quad (15)$$

La relation (14) s'écrit donc :

$$N(E_1) N(E_2) = N(E_3) N(E_4) \quad \text{si} \quad E_1 + E_2 = E_3 + E_4. \quad (16)$$

Quelles sont les fonctions  $f(E)$  satisfaisant cette équation ?

La réponse à cette question est simple. Considérons la fonction

$$g(E) = \log [N(E)] \quad (17)$$

qui vérifie donc :

$$g(E_1) + g(E_2) = g(E_3) + g(E_4) \quad \text{si} \quad E_1 + E_2 = E_3 + E_4. \quad (18)$$

Cette relation a pour seules solutions les fonctions affines

$$g(E) = aE + b, \quad (19)$$

soit pour la fonction de départ  $N(E)$  :

$$N(E) = e^{aE+b} \equiv e^{(\mu-E)/k_B T} \quad \text{avec} \quad a = -1/k_B T, \quad b = \mu/k_B T. \quad (20)$$

On retrouve donc bien la statistique de Maxwell–Boltzmann à partir de la condition de bilan détaillé.

Passons maintenant au cas d'un gaz de bosons. La différence avec le cas du gaz de Boltzmann est que la probabilité de la transition (12) est augmentée du fait de l'émission stimulée si les états  $j_3$  et/ou  $j_4$  sont déjà occupés :

$$\text{Boltzmann : } N_{j_1} N_{j_2} \longrightarrow \text{Bose : } N_{j_1} N_{j_2} [1 + N_{j_3}] [1 + N_{j_4}] \quad (21)$$

et de même pour la transition (13)

$$\text{Boltzmann : } N_{j_3} N_{j_4} \longrightarrow \text{Bose : } N_{j_3} N_{j_4} [1 + N_{j_1}] [1 + N_{j_2}] \quad (22)$$

Le bilan détaillé s'écrit donc en présence d'émission stimulée :

$$N_{j_1} N_{j_2} [1 + N_{j_3}] [1 + N_{j_4}] = N_{j_3} N_{j_4} [1 + N_{j_1}] [1 + N_{j_2}], \quad (23)$$

qui peut se réécrire

$$\frac{N_{j_1}}{1 + N_{j_1}} \frac{N_{j_2}}{1 + N_{j_2}} = \frac{N_{j_3}}{1 + N_{j_3}} \frac{N_{j_4}}{1 + N_{j_4}} \quad (24)$$

pour tout quadruplet d'états tel que  $E_1 + E_2 = E_3 + E_4$ .

Faisons là aussi l'hypothèse que  $N_j$  ne dépend que de l'énergie  $E_j$  de l'état  $j$  et posons

$$g(E) = \log \left[ \frac{N(E)}{1 + N(E)} \right]. \quad (25)$$

Nous sommes conduits pour  $g(E)$  à la même équation que dans le cas de la statistique de Boltzmann

$$g(E_1) + g(E_2) = g(E_3) + g(E_4) \quad \text{si} \quad E_1 + E_2 = E_3 + E_4. \quad (26)$$

dont on a vu que les solutions sont les fonctions affines  $g(E) = (\mu - E)/k_B T$ , ce qui conduit à

$$\frac{N(E)}{1 + N(E)} = e^{(\mu-E)/k_B T} \Rightarrow N(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} - 1}. \quad (27)$$

Nous retrouvons donc bien la statistique de Bose–Einstein<sup>2</sup> à partir de ces considérations de bilan détaillé, couplées à l'émission stimulée.

**Cas où le nombre de particules n'est pas conservé.** Il existe des situations où le nombre de particules n'est pas constant dans un processus élémentaire. Par exemple, on peut modéliser les parois d'un corps noir comme un système où deux photons d'énergie  $E_1$  et  $E_2$  peuvent disparaître pour donner naissance à un seul photon d'énergie  $E_3 = E_1 + E_2$  :

$$j_1 + j_2 \longleftrightarrow j_3 \quad \text{si} \quad E_1 + E_2 = E_3. \quad (28)$$

Le bilan détaillé s'écrit alors en présence d'émission stimulée :

$$\frac{N_{j_1}}{1 + N_{j_1}} \frac{N_{j_2}}{1 + N_{j_2}} = \frac{N_{j_3}}{1 + N_{j_3}} \quad (29)$$

soit, en définissant  $g(E)$  comme en (25) :

$$g(E_1) + g(E_2) = g(E_3) \quad \text{si} \quad E_1 + E_2 = E_3. \quad (30)$$

Les solutions à cette équation sont les seules fonctions linéaires (et non plus affines comme dans ce qui précède) :

$$g(E) = aE \equiv -E/k_B T, \quad (31)$$

ce qui est équivalent à prendre un potentiel chimique nul dans (27)

$$\frac{N(E)}{1 + N(E)} = e^{-E/k_B T} \quad \Rightarrow \quad N(E) = \frac{1}{e^{E/k_B T} - 1}. \quad (32)$$

## 2 La condensation du gaz de Bose parfait

Nous allons considérer dans ce paragraphe un gaz parfait et homogène de  $N$  particules bosoniques de masse  $m$ . Nous supposons ces particules

2. On pourra vérifier que l'on peut également retrouver la statistique de Fermi–Dirac en remplaçant  $[1 + N_j]$  par  $[1 - N_j]$  dans (23), pour prendre en compte le blocage lié au principe d'exclusion de Pauli.

confinées dans une boîte cubique de côté  $L$  et nous prendrons des conditions aux limites périodiques pour écrire les états propres de l'énergie cinétique. Ces états propres sont donc des ondes planes repérées par leur vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  ou leur impulsion  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  :

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad \mathbf{p} = \frac{2\pi\hbar}{L}\mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{Z}^3. \quad (33)$$

L'énergie de l'onde plane d'impulsion  $\mathbf{p}$  est

$$E_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m}, \quad (34)$$

l'état fondamental  $\mathbf{p} = 0$  d'énergie  $E_0 = 0$  étant non dégénéré.

### 2-1 Saturation des états excités

La loi de Bose–Einstein nous donne, pour une température  $T$  et un potentiel chimique  $\mu$ , le nombre moyen de particules occupant l'état  $\mathbf{p}$  :

$$N(\mathbf{p}) = \frac{1}{e^{(E_{\mathbf{p}} - \mu)/k_B T} - 1}. \quad (35)$$

Le nombre total de particules dans le système s'écrit donc

$$N = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{e^{(E_{\mathbf{p}} - \mu)/k_B T} - 1}. \quad (36)$$

Pour que chaque  $N_{\mathbf{p}}$  soit défini et positif, il faut que le potentiel chimique  $\mu$  soit strictement plus petit que l'énergie de l'état fondamental, en l'occurrence

$$\mu < E_0 = 0 \quad (37)$$

Il est alors utile de décomposer cette somme en deux contributions, la première concernant l'état fondamental  $\mathbf{p} = 0$ , la seconde tous les états excités  $\mathbf{p} \neq 0$  :

$$N = N_0 + N_{\text{exc}}, \quad N_0 = \frac{Z}{1 - Z}, \quad N_{\text{exc}} = \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{Z}{e^{E_{\mathbf{p}}/k_B T} - Z} \quad (38)$$

où l'on a introduit la fugacité

$$Z = \exp(\mu/k_B T). \quad (39)$$

Du fait de la contrainte  $\mu < 0$ , la fugacité est un nombre compris entre 0 et 1 strictement. L'inégalité  $Z < 1$  permet de donner immédiatement une borne supérieure à la population totale des états excités :

$$N_{\text{exc}} < N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T) = \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{1}{e^{E_{\mathbf{p}}/k_B T} - 1}. \quad (40)$$

La notion de condensation de Bose–Einstein dans sa version la plus simple se dégage directement de l'existence de cette borne supérieure : si pour une température  $T$  donnée, on place dans la boîte un nombre de particules strictement supérieur à  $N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T)$ , alors on est sûr qu'au moins  $N - N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T)$  particules s'accumuleront dans l'état fondamental  $\mathbf{p} = 0$ . En prenant pour fixer les idées  $N = 2N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T)$ , on trouve donc qu'au moins 50% des particules occuperont l'état individuel  $\mathbf{p} = 0$ .

Il est essentiel de bien différencier ce phénomène d'un simple effet « d'activation thermique ». Dans le cadre de la statistique de Boltzmann, on sait bien que si la température est inférieure à l'écart énergétique entre l'état fondamental et le premier état excité, on peut également observer une forte accumulation de particules dans le fondamental<sup>3</sup>. L'accumulation que nous trouvons ici est nettement plus subtile : elle se produit quelle que soit la température, en particulier si  $k_B T$  est bien supérieur à l'écart  $2\pi^2 \hbar^2 / (mL^2)$  entre état fondamental et premier état excité [cf. (34)]. Bien sûr, la valeur de  $N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T)$  est une fonction croissante de  $T$  et il faudra mettre d'autant plus de particules que la température sera élevée pour être certain d'avoir dépassé le seuil de condensation, c'est-à-dire un point où  $N_0/N$  devient significativement non nul.

## 2-2 L'expérience de Cambridge

Parmi les très nombreuses expériences qui ont été réalisées au cours des vingt dernières années sur la condensation de Bose–Einstein des gaz ato-

3. La valeur précise de cette accumulation dépend de la position de tous les niveaux d'énergie et nous ne la précisons donc pas davantage ici.

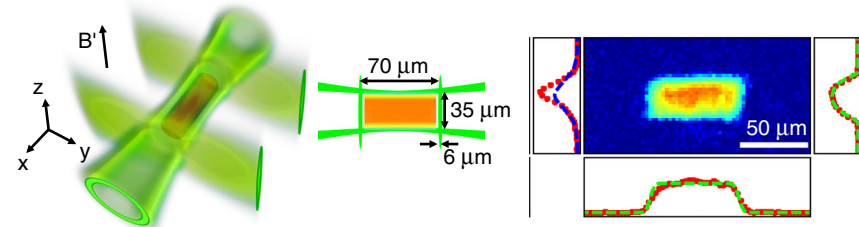


FIGURE 4. « Boîte lumineuse » utilisée à Cambridge pour étudier la condensation de Bose–Einstein d'un gaz uniforme de  $^{87}\text{Rb}$  (Gaunt, Schmidutz, et al. 2013; Schmidutz, Gotlibovych, et al. 2014).

miques, celle qui illustre notre propos de la manière la plus directe est celle réalisée à Cambridge dans le groupe de Z. Hadzibabic (Gaunt, Schmidutz, et al. 2013; Schmidutz, Gotlibovych, et al. 2014).

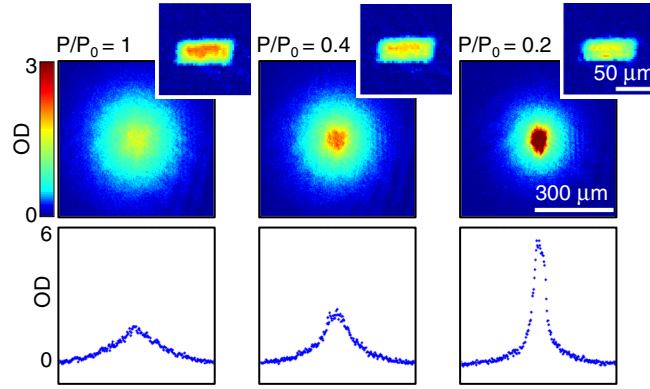
Avec un dispositif holographique, on réalise de fines nappes de lumière désaccordées sur le bleu de la transition de résonance des atomes ( $^{87}\text{Rb}$ ). Pour ce choix de désaccord, les atomes sont repoussés par les régions de haute intensité lumineuse. On dispose les différentes nappes de manière à former les parois d'une boîte cylindrique de diamètre 35 microns et de longueur 70 microns (figure 4).

Pour s'assurer que les atomes ressentent bien un potentiel uniforme à l'intérieur de la boîte en dépit de la gravité, on prépare les atomes dans un sous-niveau magnétique donné ; on applique un gradient de champ magnétique de sorte que la force magnétique pour ce sous-niveau compense le poids des atomes. La température des atomes est ajustée en changeant la puissance des faisceaux formant la boîte, ce qui permet de varier l'équilibre atteint après refroidissement par évaporation.

Bien qu'on ne réalise pas des conditions aux limites périodiques dans une boîte de ce type, l'analyse qui précède reste *grosso modo* valable. On peut déterminer la distribution en impulsion des atomes par une méthode de *temps de vol* : on éteint brusquement la lumière formant les parois de la boîte et on mesure l'étalement balistique du nuage en une durée donnée, les atomes dans l'état fondamental de la boîte ne bougeant quasiment pas.

Pour cette étude, il y a un avantage certain à travailler avec un poten-

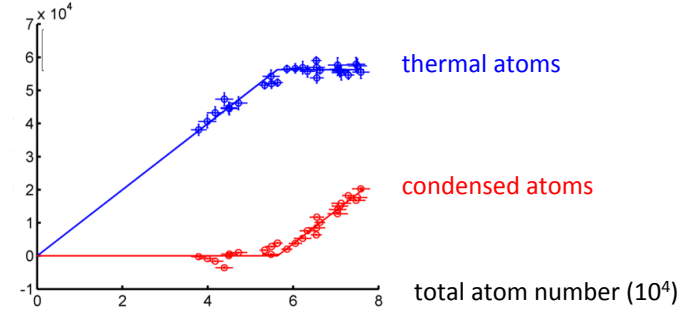




**FIGURE 5.** Expansion ballistique d'un gaz de  $^{87}\text{Rb}$  confiné dans la boîte représentée en figure 4. Le paramètre de contrôle  $P/P_0$  mesure le rapport entre la puissance  $P$  des faisceaux lumineux formant la boîte et la puissance totale disponible  $P_0$  [ $P_0 = 0.7 \text{ W}$ , correspondant à une hauteur de barrière  $k_B \times 2 \mu\text{K}$ ]. Le nombre d'atome est inférieur au nombre de saturation pour l'image de gauche, et supérieur pour les deux autres images (Gaunt, Schmidutz, et al. 2013; Schmidutz, Gotlibovych, et al. 2014).

tiel uniforme plutôt qu'avec le potentiel harmonique utilisé dans la vaste majorité des expériences d'atomes froids; en effet, les interactions entre atomes jouent ici un rôle quasi-négligeable dans la structure du condensat et lors du temps de vol. Nous reviendrons en détail sur ce point plus tard, mais indiquons d'ores et déjà que pour les densités réalisées ici, de l'ordre de deux atomes par  $\mu\text{m}^3$ , l'énergie d'interaction par particule est inférieure au nanokelvin, alors que les températures explorées sont de plusieurs dizaines de nanokelvins.

Un exemple de temps de vol est montré en figure 5. On voit comment une fraction notable d'atomes avec une impulsion très faible apparaît pour un gaz suffisamment dense et froid. En faisant cette expérience pour différents nombres d'atomes et une même température, on peut vérifier la saturation prédite par Einstein (figure 6). En dessous du seuil évalué plus haut, un nouvel atome va rejoindre avec une probabilité proche de 1 la fraction thermique formée par l'ensemble des états excités : aucune singularité n'apparaît donc dans la population de l'état fondamental. Quand le



**FIGURE 6.** Saturation du nombre d'atomes occupant les états excités de la boîte de la figure 4. Figure communiquée par Zoran Hadzibabic à partir de données extraites de Gaunt, Schmidutz, et al. 2013; Schmidutz, Gotlibovych, et al. 2014.

nombre d'atomes excède une certaine valeur, de l'ordre de 60 000 pour la température ( $\sim 30 \text{ nK}$ ) et la boîte utilisées ici, la fraction thermique sature et tout atome en excédent vient occuper l'état fondamental.

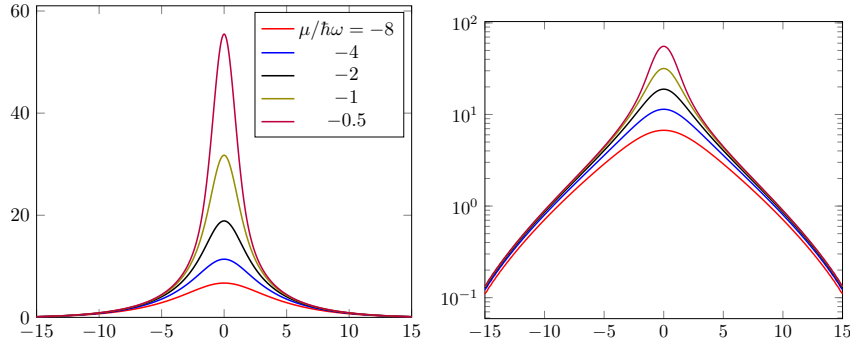
### 2-3 Le cas d'un gaz piégé

Le résultat obtenu au paragraphe précédent, conséquence de la loi de Bose–Einstein, s'applique en fait à de très nombreux types de potentiel de confinement  $V_{\text{trap}}(\mathbf{r})$  d'un gaz parfait de bosons. Tant que l'on ne considère pas la limite thermodynamique (que nous étudierons en § 3), les seuls ingrédients nécessaires pour que la borne  $N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T)$  soit pertinente sont :

- un spectre en énergie discret,  $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$ , assuré si le potentiel de confinement tend vers l'infini quand  $|\mathbf{r}|$  tend vers l'infini ; c'est en particulier le cas d'une boîte de taille  $L$  finie ;
- l'hypothèse que la somme discrète :

$$N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T) = \sum_{j \neq 0} \frac{1}{e^{(E_j - E_0)/k_B T} - 1}, \quad (41)$$

obtenue en donnant au potentiel chimique sa valeur maximale  $\mu = E_0$ , converge aux grandes énergies, hypothèse raisonnable pour un potentiel de confinement réaliste.



**FIGURE 7.** Saturation de la population des états excités pour un gaz parfait placé dans un piège harmonique unidimensionnel. On trace ici le profil de densité spatiale pour un gaz de température  $T = 40 \hbar\omega/k_B$ . L'unité de position est  $a_{\text{oh}} = \sqrt{\hbar/m\omega}$  et l'unité de densité est arbitraire. Quand le potentiel chimique se rapproche de l'énergie du fondamental (prise ici nulle par convention), on voit la densité spatiale saturer dans les ailes, les atomes en excès se disposant dans l'état fondamental du piège, c'est-à-dire la gaussienne  $\psi_0(x) = \exp(-x^2/2)$ .

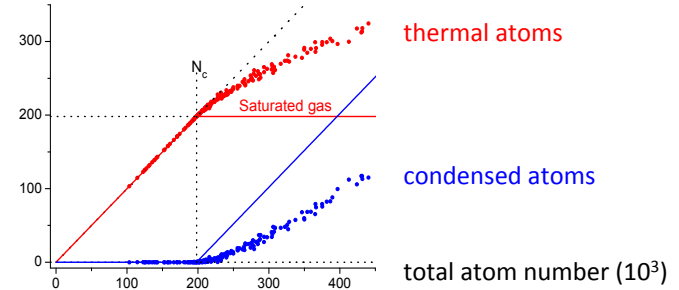
Par exemple, si les particules sont placées dans un piège harmonique unidimensionnel de pulsation  $\omega$ , on sait que les niveaux d'énergie sont non dégénérés et repérés par un nombre entier  $j$

$$E_j = (j + 1/2) \hbar\omega, \quad j \in \mathbb{N} \quad (42)$$

le potentiel chimique  $\mu$  devant rester inférieur à l'énergie  $\hbar\omega/2$  du fondamental  $j = 0$ . On en déduit la borne supérieure pour la population des états excités :

$$N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{e^{j \hbar\omega/k_B T} - 1}. \quad (43)$$

On a représenté sur la figure 7 l'évolution du profil de densité dans ce piège harmonique en fonction du nombre d'atomes, pour la température  $k_B T = 40 \hbar\omega$ . On voit clairement que lorsque le potentiel chimique  $\mu$  s'approche de l'énergie de l'état fondamental, toutes les nouvelles particules s'accumulent dans cet état fondamental, localisé au voisinage de  $x = 0$ . Les ailes de la distribution quant à elles n'évoluent quasiment pas puis-



**FIGURE 8.** « Non-saturation » des états excités pour un gaz d'atomes de  $^{39}\text{K}$ , confiné dans un piège harmonique de fréquence  $\omega/2\pi \approx 70$  Hz à une température de  $T \approx 180$  nK. Figure extraite de Tammuz, Smith, et al. (2011).

qu'elles correspondent essentiellement à des particules occupant les niveaux d'énergies excités.

Sur le plan expérimental, il est nettement plus difficile de mettre en évidence cette saturation du nombre d'atomes dans les états excités avec un piège harmonique qu'avec une boîte. La raison en est simple : une fois que le nombre d'atomes atteint  $N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T)$ , l'accumulation dans l'état fondamental du piège débute. Comme cet état fondamental est localisé dans l'espace, cette accumulation conduit rapidement à une densité importante au centre du piège et donc à un rôle accru des interactions entre atomes. En particulier, les atomes non condensés interagissent avec ce condensat localisé et ressentent donc un potentiel déformé par rapport au potentiel harmonique de départ. Dans ce potentiel déformé, le nombre  $N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T)$  est augmenté, ce qui entraîne une non-saturation. La figure 8, extraite de Tammuz, Smith, et al. (2011), illustre ce phénomène.

### 3 La CBE à la limite thermodynamique

Notre étude du paragraphe précédent reposait sur l'hypothèse d'un spectre discret, conséquence du confinement dans une boîte de taille  $L$ . Une question importante à ce stade est de déterminer si notre conclusion

de l'existence d'une borne supérieure  $N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T)$  est un simple effet de taille finie ou si elle « survit » au passage à la limite thermodynamique. En effet, quand on fait tendre la taille de la boîte vers l'infini, l'écart entre niveaux d'énergie tend vers 0 et on peut mettre de plus en plus de particules sur les niveaux excités. Deux scénarios sont donc possibles :

- L'augmentation de  $N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T)$  avec la taille de la boîte est plus rapide que cette taille elle-même. Dans ce cas, pour une température et une densité données, il existera une taille au dessus de laquelle les états excités se « désatureront », et la population de l'état fondamental ne sera pas très différente de celle de ses voisins immédiats.
- Le nombre de saturation n'augmente pas plus vite que la taille de la boîte : la densité correspondant aux états excités restera donc bornée et la condensation survivra au passage à la limite thermodynamique.

Le scénario effectivement réalisé dépend fortement de la dimension de l'espace. Nous allons voir qu'à une ou deux dimensions, le phénomène de condensation disparaît quand on prend la limite thermodynamique :

$$L \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty, \rho^{(d)} = \frac{N}{L^d} : \text{constante}, \quad d : \text{dimension d'espace} \quad (44)$$

alors qu'il subsiste à trois dimensions.

### 3-1 Limite thermodynamique en dimension réduite

Intéressons-nous ici au cas 2D pour lequel le calcul de  $N_{\text{exc}}$  à la limite thermodynamique peut être fait analytiquement. Ce passage se fait en remplaçant la somme discrète sur  $\mathbf{p}$  par une intégrale

$$\sum_{\mathbf{p}} \dots \longrightarrow \left( \frac{L}{2\pi\hbar} \right)^2 \int d^2p \dots \quad (45)$$

soit

$$\rho_{\text{exc}}^{(2)} = \frac{N_{\text{exc}}}{L^2} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int \frac{Z}{e^{p^2/(2mk_{\text{B}}T)} - Z} d^2p. \quad (46)$$

Ceci donne après un calcul simple l'expression de la densité dans l'espace des phases à deux dimensions

$$\mathcal{D}^{(2)} = -\ln(1 - Z) \quad \text{avec} \quad \mathcal{D}^{(2)} = \rho_{\text{exc}}^{(2)} \lambda_T^2, \quad (47)$$

où l'on a introduit la longueur d'onde thermique

$$\lambda_T = \frac{\hbar\sqrt{2\pi}}{\sqrt{mk_{\text{B}}T}}. \quad (48)$$

Le résultat (47) nous indique que la borne supérieure (40) trouvée dans le cas d'un spectre discret ne survit pas au passage à la limite thermodynamique :

$$\rho_{\text{exc}}^{(2)} \lambda_T^2 \rightarrow \infty \quad \text{quand} \quad Z \rightarrow 1. \quad (49)$$

Quand le potentiel chimique varie continument entre  $-\infty$  et 0, ou en d'autres termes quand la fugacité varie continument entre 0 et 1, la loi de Bose-Einstein permet d'obtenir n'importe quelle valeur pour la densité spatiale bi-dimensionnelle  $\rho_{\text{exc}}^{(2)}$  associée aux états excités.

Pour un gaz 2D infini, on ne s'attend donc pas à voir la densité spatiale  $\rho_0^{(2)}$  associée à l'état fondamental  $\mathbf{p} = 0$  devenir significative par rapport à la densité spatiale totale. Cette conclusion est effectivement confirmée une analyse numérique du rapport  $\rho_0^{(2)}/\rho^{(2)}$ , pour des tailles croissantes de boîtes, à température donnée. Dans la limite  $L \rightarrow \infty$ , la relation (40) se simplifie donc pour donner

$$\rho^{(2)} \approx \rho_{\text{exc}}^{(2)}, \quad \rho_0^{(2)} \ll \rho^{(2)}. \quad (50)$$

Le niveau  $\mathbf{p} = 0$  en tant qu'état fondamental reste bien sûr le plus peuplé de tous les états individuels, mais la densité spatiale qui lui est associée ne devient jamais macroscopique. La même conclusion est atteinte pour un gaz uni-dimensionnel.

**Invariance d'échelle.** L'expression (47) constitue une *équation d'état* pour le gaz de Bose parfait à deux dimensions. Elle relie une quantité thermodynamique, ici la densité dans l'espace des phases  $\mathcal{D}^{(2)}$ , aux deux variables thermodynamiques du problème, à savoir la température  $T$  et le potentiel chimique  $\mu$ . Dans le cas général d'un gaz en interaction en dimension  $d$ , la densité dans l'espace des phases  $\mathcal{D}^{(d)}$  est *a priori* une fonction qui dépend séparément de  $T$  et  $\mu$ . Dans le cas rencontré ici,  $\mathcal{D}^{(d)}$  ne dépend que du rapport  $\mu/T$ . Cette simplification signale l'*invariance d'échelle* de ce système particulier.

### 3-2 La saturation de la densité à 3D

Un calcul similaire à celui du paragraphe précédent, mais à trois dimensions, conduit à un résultat radicalement différent. Ce calcul, initialement mené par Einstein (1925a) dans son deuxième article sur le sujet, est un grand classique des cours de physique statistique et nous nous contenterons donc de le résumer.

Le passage de la somme discrète (40) à une intégrale donne ici <sup>4</sup>

$$\rho_{\text{exc}} \equiv \frac{N_{\text{exc}}}{L^3} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{Z}{e^{p^2/(2mk_B T)} - Z} d^3p, \quad (51)$$

intégrale qui contrairement au cas 2D ne se calcule pas analytiquement en termes de fonctions simples. Toutefois, la densité dans l'espace des phases correspondant aux états excités,  $\mathcal{D}_{\text{exc}} = \rho_{\text{exc}} \lambda_T^3$ , peut s'exprimer comme un polylogarithme <sup>5</sup>  $\text{Li}_\alpha$  de la fugacité :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{\text{exc}} = \rho_{\text{exc}} \lambda_T^3 &= \frac{\lambda_T^3}{(2\pi\hbar)^3} \int \left[ \sum_{n=1}^{+\infty} \left( Z e^{-p^2/(2mk_B T)} \right)^n \right] d^3p \\ &= \text{Li}_{3/2}(Z) \end{aligned} \quad (52)$$

avec

$$\text{Li}_\alpha(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{x^n}{n^\alpha}. \quad (53)$$

Le point crucial mis en avant par Einstein est que ce polylogarithme d'indice 3/2, contrairement à son analogue à deux dimensions  $\text{Li}_1(Z) = -\log(1 - Z)$  [cf. (47)], reste borné quand la fugacité approche sa valeur maximale  $Z = 1$ . On en déduit que la densité dans l'espace des phases associée à l'ensemble des états excités à une particule ne peut pas dépasser la valeur critique <sup>6</sup>

$$\mathcal{D}_{\text{exc}}^{\text{max}} = \text{Li}_{3/2}(1) = 2.612 \dots \quad (54)$$

4. Dans la mesure où il n'y a pas d'ambiguïté, nous omettons ici l'exposant <sup>(3)</sup> indiquant que nous nous sommes placés à trois dimensions.

5. également connu sous le nom de fonction de Jonquière.

6. La constante  $\text{Li}_{3/2}(1)$  est également égale à la valeur de la fonction  $\zeta(x)$  de Riemann en  $x = 3/2$  :  $\zeta(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} n^{-x}$ .

Que se passe-t-il si on cherche à mettre une densité dans l'espace des phases totale  $\mathcal{D}$  plus grande que cette valeur critique ? La réponse est la même qu'au paragraphe § 2-1 : on accumule dans l'état fondamental, c'est-à-dire l'état d'impulsion nulle, une densité dans l'espace des phases au moins égale à l'excès par rapport à  $\mathcal{D}_{\text{exc}}^{\text{max}}$

$$\mathcal{D}_0 \gtrsim \mathcal{D} - \mathcal{D}_{\text{exc}}^{\text{max}}. \quad (55)$$

En pratique, on peut vérifier numériquement que cette inégalité devient une égalité à la limite thermodynamique  $N, L^3 \rightarrow \infty, N/L^3 = \rho$  constant. C'est le phénomène de condensation de Bose-Einstein, dans sa version originale.

**En résumé :** à trois dimensions et pour un gaz de Bose idéal, deux situations sont possibles à la limite thermodynamique selon la valeur de la densité dans l'espace des phases totale  $\mathcal{D} = \rho \lambda_T^3$  :

$$\begin{aligned} \mathcal{D} \leq 2.612 : \quad \mathcal{D} &\approx \mathcal{D}_{\text{exc}} = \text{Li}_{3/2}(Z), \quad \mathcal{D}_0 \ll \mathcal{D}, \\ \mathcal{D} > 2.612 : \quad \mathcal{D} &= \mathcal{D}_0 + \mathcal{D}_{\text{exc}}^{\text{max}} \quad \text{avec} \quad \mathcal{D}_{\text{exc}}^{\text{max}} = 2.612. \end{aligned} \quad (56)$$

Notons que l'on retrouve là aussi une invariance d'échelle, puisque la densité dans l'espace des phases s'exprime uniquement en fonction de  $Z$ , c'est-à-dire du rapport  $\mu/T$ .

### 3-3 Le point de condensation

Le point de condensation correspond à la situation où l'on a placé dans le piège un nombre d'atomes tel que la densité dans l'espace des phases atteint la valeur critique (54). En ce point, le nombre d'atomes dans l'état fondamental reste microscopique, mais il augmente ensuite rapidement quand le nombre d'atomes dépasse la valeur critique, cette transition devenant une transition de phase à la limite thermodynamique.

Le point critique de la transition correspond donc à

$$\mathcal{D}_c = \rho_c \lambda_T^3 = 2.612 \quad \text{ou encore} \quad \rho_c = 0.166 \frac{(mk_B T)^{3/2}}{\hbar^3}, \quad (57)$$

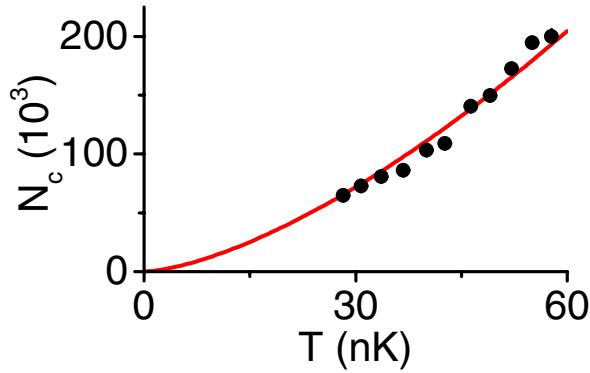


FIGURE 9. Vérification de la loi (57) donnant le nombre d’atomes au point critique en fonction de la température,  $N_c \propto T^{3/2}$  (courbe continue rouge). Figure extraite de Schmidutz, Gotlibovych, et al. (2014).

soit une densité critique de 2 atomes de rubidium par microns-cube pour une température de 30 nK. Cette loi  $\rho_c \propto T^{3/2}$  est remarquablement bien vérifiée dans l’expérience de Cambridge de Schmidutz, Gotlibovych, et al. (2014) (figure 9). Dans cette expérience, les interactions jouent un rôle suffisamment faible pour que la valeur de la densité critique ne soit pas affectée par ces interactions, à la précision de mesure près (de l’ordre de 10 % sur le nombre d’atomes et 20 % sur le volume).

**Température au seuil de condensation.** Quand on prend la limite thermodynamique dans une boîte, l’écart  $\hbar^2/(mL^2)$  (à un facteur numérique près) entre l’état fondamental et le premier état excité tend vers 0. La condensation peut quant à elle se produire à une température arbitrairement plus grande que cet écart, pourvu que la densité spatiale  $\rho$  soit suffisante. Ceci illustre bien le point déjà mentionné que la condensation n’est pas l’effet trivial consistant à annuler la population des états excités par un simple poids de Boltzmann  $e^{-E/k_B T}$ .

**Potentiel chimique au seuil de condensation.** Intéressons-nous maintenant au potentiel chimique  $\mu$  pour lequel une fraction condensée impor-

tante apparaît, c’est-à-dire  $\mathcal{D}_0 \sim \mathcal{O}(1)$ . On a en utilisant (38)

$$\mathcal{D}_0 = \frac{N_0}{L^3} \lambda_T^3 = \frac{Z}{1-Z} \frac{\lambda_T^3}{L^3} \quad (58)$$

et cette quantité devient d’ordre 1 quand la fugacité  $Z = e^{\mu/k_B T}$  est elle-même très proche de 1, soit  $\mu$  très proche de 0. Plus précisément, la relation (58) entraîne que  $\mathcal{D}_0 \gtrsim 1$  si

$$|\mu| \lesssim \frac{\hbar^2}{mL^2} \frac{\lambda_T}{L}. \quad (59)$$

Comme  $\lambda_T \ll L$ , cette condition est satisfaite pour un potentiel chimique beaucoup plus petit (à la limite thermodynamique) que l’écart  $2\pi^2\hbar^2/(mL^2)$  entre état fondamental et premier état excité.

**Rôle singulier de  $p = 0$ .** Quand on écrit la densité dans l’espace des phases totale

$$\mathcal{D} = \frac{\lambda_T^3}{L^3} \sum_{\mathbf{p}} \frac{Z}{e^{E_{\mathbf{p}}/k_B T} - Z} \quad (60)$$

sous la forme

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_0 + \mathcal{D}_{\text{exc}} \quad (61)$$

et qu’on évalue  $\mathcal{D}_{\text{exc}}$  par une intégrale, on fait jouer un rôle particulier – et singulier – à l’état  $\mathbf{p} = 0$ . On peut légitimement s’interroger sur ce caractère particulier; ne devrait-on pas traiter de manière équivalente les tout premiers états excités? La remarque précédente sur la valeur du potentiel chimique au seuil de condensation permet de répondre par la négative à cette interrogation. Utilisons la valeur trouvée pour  $\mu$  pour comparer les populations de l’état fondamental d’énergie  $E_0 = 0$  et du premier niveau excité, d’énergie  $E_1 = 2\pi^2\hbar^2/mL^2$  (six fois dégénéré pour une boîte cubique) :

$$\frac{N_1}{N_0} = \frac{1-Z}{e^{E_1/k_B T} - Z} \approx \frac{|\mu|}{E_1 + |\mu|}, \quad (62)$$

ce qui est d’ordre  $\lambda_T/L \ll 1$  d’après (59). Il n’y a donc pas de population macroscopique singulière associée aux états excités individuels et il est légitime de les prendre en compte dans le cadre de l’intégrale sur  $\mathbf{p}$ .

### 3-4 Utilisation de la densité d'états en énergie

Dans la mesure où la population moyenne d'un état individuel  $p$  ne dépend que de son énergie, on peut paramétrer toutes les intégrales sur  $p$  rencontrées ci-dessus par l'énergie  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  plutôt que par l'impulsion  $p$ . Le changement de variable  $p \rightarrow E$  se fait de la manière suivante

$$\sum_p \dots \rightarrow \left( \frac{L}{2\pi\hbar} \right)^d \int d^d p \dots \rightarrow \int dE \rho^{(d)}(E) \dots \quad (63)$$

où  $\rho^{(d)}(E)$  représente la densité d'états à  $d$  dimensions, soit pour une boîte de côté  $L$  :

$$\rho^{(1)}(E) = \frac{L}{2\pi} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} E^{-1/2} \quad (64)$$

$$\rho^{(2)}(E) = \frac{L^2}{4\pi} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right) \quad (65)$$

$$\rho^{(3)}(E) = \frac{L^3}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{+1/2}. \quad (66)$$

La densité spatiale associée aux états excités (51) s'écrit dans ces conditions en dimension  $d$

$$\rho_{\text{exc}}^{(d)} = \frac{1}{L^d} \int_0^{+\infty} dE \rho^{(d)}(E) \frac{Z}{e^{E/k_B T} - Z} \quad (67)$$

et l'existence éventuelle d'un phénomène de condensation se ramène à la question : l'intégrale

$$\frac{1}{L^d} \int_0^{+\infty} dE \rho(E) \frac{1}{e^{E/k_B T} - 1} \quad (68)$$

converge-t-elle ? Puisque la densité d'états  $\rho(E)$  est une loi de puissance, la convergence en  $E = +\infty$  est garantie par la fonction exponentielle  $e^{-E/k_B T}$ . En revanche, la convergence en  $E = 0$  dépend la dimension d'espace puisqu'elle fait apparaître le développement limité

$$\rho^{(d)}(E) \frac{1}{e^{E/k_B T} - 1} \approx \rho^{(d)}(E) \frac{k_B T}{E}. \quad (69)$$



FIGURE 10. Énergie des 100 premiers états à une particule dans une boîte à une dimension (gauche) et à trois dimensions (droite) [unité arbitraire en énergie].

Si la densité d'états tend vers 0 comme une loi de puissance quand  $E$  tend vers 0, alors l'intégrale sera convergente en  $E = 0$ ; la densité associée aux états excités (67) sera donc bornée supérieurement et le phénomène de condensation se produira si la densité totale dépasse cette borne. C'est le cas à trois dimensions [cf. (66)]. En dimension réduite en revanche, la densité d'états diverge en  $E = 0$  (1D) ou bien elle reste constante (2D) : l'intégrale (68) est alors divergente. Il n'y a donc pas de borne supérieure à la densité des états excités (67) et il n'y a pas de condensation.

Cette différence entre la densité d'états en dimension 1 et dimension 3 est illustrée sur la figure 10. En dimension 1, la divergence de  $\rho(E)$  comme  $1/\sqrt{E}$  [cf. (64)] signifie qu'il y a une accumulation d'états au voisinage de  $E = 0$ . Même quand le potentiel chimique est arbitrairement proche de 0, la population totale peut donc se répartir sans singularité macroscopique sur les niveaux les plus bas. En revanche à 3D, la variation de la densité d'états comme  $\sqrt{E}$  [cf. (66)] correspond à une raréfaction des états au voisinage de  $E = 0$ , ce qui conduit à la condensation dans l'état  $p = 0$ .

### 3-5 Limite thermodynamique pour un piège

L'utilisation du concept de densité d'états permet également de conclure facilement sur l'existence possible de condensation à la limite thermodynamique dans un piège harmonique (Groot 1950; Bagnato, Prit-

chard, et al. 1987). Rappelons tout d’abord comment cette limite est prise et considérons pour cela un gaz de Boltzmann, avec  $N$  atomes confinés dans le potentiel isotrope  $V(r) = m\omega^2 r^2/2$ . Le profil de densité spatiale s’écrit en dimension  $d$  :

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \frac{N}{\sigma^d} e^{-r^2/2\sigma^2} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{2}m\omega^2\sigma^2 \equiv \frac{1}{2}k_B T. \quad (70)$$

La limite thermodynamique est prise telle que

$$N \rightarrow +\infty, \quad \omega \rightarrow 0 \quad \text{avec} \quad T = \text{constante}, \quad n(0) = \text{constante}, \quad (71)$$

ce qui revient à garder constant  $N/\sigma^d$ , et donc  $N\omega^d$ .

Comme pour le cas d’une boîte, la densité d’état dans un piège harmonique dépend de la dimensionalité. Pour un piège 1D, les niveaux  $(j + 1/2)\hbar\omega$  sont non dégénérés ( $\xi_j = 1$ ), équidistants et séparés de  $\hbar\omega$ , soit

$$\rho^{(1)}(E) = \frac{1}{\hbar\omega}. \quad (72)$$

En dimension 2, le niveau d’énergie  $E_j = (j + 1)\hbar\omega$  est dégénéré  $\xi_j = j + 1$  fois ; en dimension 3, le niveau  $E_j = (j + 3/2)\hbar\omega$  est dégénéré  $\xi_j = (j + 1)(j + 2)/2$  fois, de sorte que

$$\rho^{(2)}(E) = \frac{E}{(\hbar\omega)^2}, \quad \rho^{(3)}(E) = \frac{E^2}{2(\hbar\omega)^3}, \quad (73)$$

soit la formule générale (Pitaevskii & Stringari 2016)

$$\rho^{(d)}(E) = \frac{1}{(d-1)!} \frac{E^{d-1}}{(\hbar\omega)^d}. \quad (74)$$

En partant de la somme discrète en dimension  $d$

$$N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\xi_j}{e^{E_j/k_B T} - 1}, \quad (75)$$

on obtient en passant à une intégrale

$$N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T) = \frac{1}{(d-1)!} \frac{1}{(\hbar\omega)^d} \int_0^{+\infty} \frac{E^{d-1}}{e^{E/k_B T} - 1} dE. \quad (76)$$

ou encore

$$(\hbar\omega)^d N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T) = \frac{1}{(d-1)!} \int_0^{+\infty} \frac{E^{d-1}}{e^{E/k_B T} - 1} dE. \quad (77)$$

Deux cas de figure sont alors possibles :

- Si l’intégrale ci-dessus diverge en  $E = 0$ , le remplacement de la somme discrète (75) par une intégrale n’est pas légitime : le nombre d’atomes dans les états excités est bien sûr borné pour un piège de fréquence finie, mais cette saturation ne survit pas à la limite thermodynamique (71).
- Si l’intégrale qui est écrite ci-dessus est convergente, on a alors condensation à la limite thermodynamique dans le piège harmonique. En effet, quand on prend la limite (71) avec une valeur suffisante de  $N\omega^d$ , une fraction macroscopique des particules devra s’accumuler dans l’état fondamental, puisque la quantité  $N_{\text{exc}}\omega^d$  est bornée.

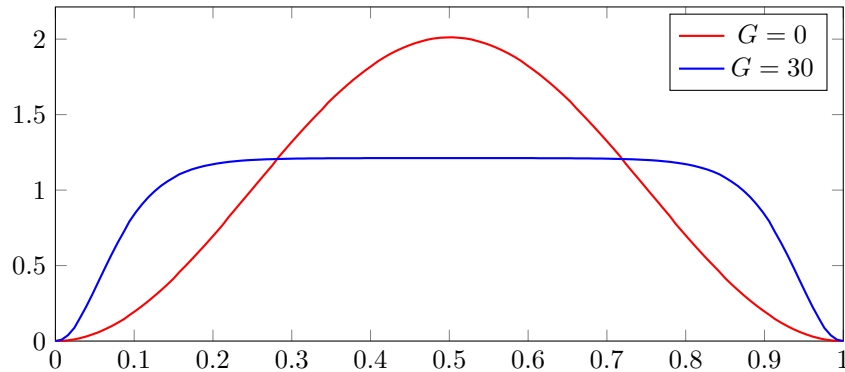
Revenons maintenant aux densités d’états (74). On constate immédiatement qu’à la limite thermodynamique à une dimension, la densité d’états constante ne permet pas d’assurer la convergence de l’intégrale, et on est alors dans le premier cas (Bagnato & Kleppner 1991; Ketterle & Druten 1996). En dimensions 2 et 3 en revanche, la variation comme  $E$  ou  $E^2$  de la densité d’états garantit la convergence de l’intégrale et donc l’existence d’un condensat à la limite thermodynamique. Plus précisément, le calcul de l’intégrale donne

$$2\text{D} : \quad N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T) = \text{Li}_2(1) \left( \frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^2 \quad \text{avec} \quad \text{Li}_2(1) = \frac{\pi^2}{6}, \quad (78)$$

et

$$3\text{D} : \quad N_{\text{exc}}^{(\text{max})}(T) = \text{Li}_3(1) \left( \frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 \quad \text{avec} \quad \text{Li}_3(1) = 1.202. \quad (79)$$

En particulier la loi à 3D donnant un nombre d’atomes critiques variant comme  $(T/\omega)^3$  a été vérifiée dans de nombreuses expériences, et les déviations à cette loi dues aux interactions entre atomes ont été étudiées expérimentalement [voir par exemple Gerbier, Thywissen, et al. (2004) et Smith, Campbell, et al. (2011)].



**FIGURE 11.** Distribution spatiale d'un gaz de Bose à une dimension confiné sur un segment de longueur  $L = 1$  (conditions aux limites de Dirichlet). En rouge, distribution en absence d'interaction. En bleu, solution de l'équation de Gross-Pitaevski (cf. chapitre 3) avec  $G = 30$  et  $\hbar = m = 1$ .

## 4 La condensation de BE au delà du gaz parfait

Pour un gaz parfait, nous avons vu au paragraphe précédent que la condensation de Bose–Einstein se manifeste par une accumulation macroscopique de particules dans un état propre de l'hamiltonien à une particule, en l'occurrence l'état fondamental.

En présence d'interactions, ce critère n'est plus pertinent car les états propres à une particule n'ont aucune raison de jouer un rôle privilégié. Prenons par exemple le cas de l'état fondamental dans une boîte 1D de taille  $L$ , avec des conditions aux limites de Dirichlet :  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ . L'état fondamental à une particule est l'arche de sinus  $\psi_0(x) \propto \sin(\pi x/L)$ . Ceci correspond à la densité

$$\text{Pas d'interaction : } \quad \rho(x) \propto \sin^2(\pi x/L) \quad (80)$$

variant sur une échelle spatiale de l'ordre de la taille de la boîte. En présence d'interactions répulsives assez fortes entre particules, on attend intuitivement que l'état fondamental du fluide corresponde à une répartition très différente de (80), avec une densité quasi-uniforme sur la plus grande partie de l'espace accessible et une décroissance de la densité uniquement

au voisinage immédiat des parois. Cette intuition est bien confirmée par le calcul (cf. figure 11).

### 4-1 Le critère de Penrose–Onsager

Il faut donc se donner un critère différent pour caractériser une possible condensation de Bose–Einstein dans un fluide en interaction. La proposition de Penrose & Onsager (1956) consiste à partir de l'opérateur densité à  $N$  particules  $\hat{\rho}$  décrivant l'état du fluide, et à considérer l'opérateur densité à un corps

$$\hat{\rho}_1 = N \text{Tr}_{2,\dots,N}(\hat{\rho}) \quad (81)$$

obtenu en prenant la trace partielle sur  $N - 1$  particules. Rappelons que cette opération de trace partielle s'écrit en point de vue position

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r} \rangle = N \int d^3 r_2 \dots d^3 r_N \langle \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}', \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | \hat{\rho} | \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N \rangle \quad (82)$$

ou en point de vue impulsion

$$\langle \mathbf{p}' | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p} \rangle = N \int d^3 p_2 \dots d^3 p_N \langle \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}', \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N | \hat{\rho} | \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N \rangle. \quad (83)$$

Notons que même si la particule 1 semble jouer un rôle particulier dans cette définition, ce n'est en réalité pas un problème puisque  $\hat{\rho}$  est complètement symétrique par échange de deux particules.

Le calcul des éléments de matrice est simplifié si on adopte le point de vue de la *seconde quantification*. L'élément de matrice de  $\hat{\rho}_1$  entre deux états à une particule  $|\psi_a\rangle$  et  $|\psi_b\rangle$  s'exprime alors à l'aide des opérateurs création et annihilation d'une particule dans l'état  $a$  ou  $b$  :

$$\langle \psi_b | \hat{\rho}_1 | \psi_a \rangle = \text{Tr} [ (|\psi_a\rangle\langle\psi_b|) \hat{\rho}_1 ] = \text{Tr} \left( \hat{a}^\dagger \hat{b} \hat{\rho} \right). \quad (84)$$

En particulier, pour les éléments de matrice dans la base continue  $|\mathbf{r}\rangle$ , on a

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r} \rangle = \text{Tr} \left( \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\rho} \right), \quad (85)$$

où l'opérateur champ  $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$  détruit une particule au point  $\mathbf{r}$ .



L'opérateur  $\hat{\rho}_1$  est hermitien et positif, on peut donc le diagonaliser et toutes ses valeurs propres  $\Pi_j$ ,  $j = 0, 1, \dots$  sont positives ou nulles. L'opérateur densité à  $N$  corps  $\hat{\rho}$  étant de trace unité, on a

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_1) = \sum_j \Pi_j = N. \quad (86)$$

Notons  $\Pi_0$  la plus grande de ces valeurs propres. Suivant Penrose & Onsager (1956), on dit que le système est condensé si  $\Pi_0/N$  est non nulle à la limite thermodynamique, obtenue en faisant tendre  $N$  vers l'infini, en gardant les variables intensives (la densité par exemple) constantes :

$$\text{Condensation si et seulement si } \Pi_0 \sim \mathcal{O}(N) \text{ quand } N \rightarrow \infty. \quad (87)$$

Au contraire, si  $\Pi_0/N$  tend vers zéro quand  $N \rightarrow \infty$ , par exemple comme une loi de puissance  $N^{-\alpha}$ , on dit que le fluide ne présente pas de condensation de Bose–Einstein.

Dans la suite, nous appellerons  $\Pi_0$  la *fraction condensée* dans le cas où cette quantité est non nulle. La fonction d'onde à une particule  $\psi_0(\mathbf{r})$ , état propre normalisé de  $\hat{\rho}_1$  pour la valeur propre  $\Pi_0$ , est appelée *fonction d'onde du condensat* :

$$\hat{\rho}_1 \psi_0(\mathbf{r}) = \Pi_0 \psi_0(\mathbf{r}). \quad (88)$$

Dans le cas du gaz parfait homogène à température  $T$ , l'opérateur densité est diagonal en point de vue impulsion. Ses valeurs propres sont égales aux populations des différentes impulsions possibles dans la boîte de volume  $L^3$  :

$$\Pi_{\mathbf{p}} = N_{\mathbf{p}}, \quad (89)$$

de sorte que le critère de Penrose-Onsager redonne bien le critère de condensation vu plus haut : il y accumulation d'une fraction macroscopique  $\Pi_0 = N_0$  de particules dans l'état  $\mathbf{p} = 0$ , la fonction d'onde du condensat étant  $\psi_0(\mathbf{r}) = 1/L^{3/2}$ .

**Condensat fragmenté.** On peut trouver des situations où plusieurs valeurs propres  $\Pi_j$  sont macroscopiques (Castin & Herzog 2001; Mueller, Ho, et al. 2006). C'est par exemple le cas pour un gaz homogène de particules

de spin 1, avec une interaction effective antiferromagnétique  $\alpha \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$  et  $\alpha > 0$ . L'énergie d'interaction de spin s'écrit

$$\hat{V} = \alpha \sum_{i,j \neq i} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j = \frac{\alpha}{2} \hat{\mathbf{S}}_{\text{tot}}^2 - \alpha N \hbar^2 \quad (90)$$

où  $\hat{\mathbf{S}}_{\text{tot}} = \sum_j \hat{\mathbf{S}}_j$  représente l'opérateur spin total. Pour minimiser l'énergie, les particules s'accumulent dans l'état d'impulsion nulle  $\mathbf{p} = 0$  et leurs spins s'intriquent pour former un état de spin total nul. Quand on prend la trace partielle sur  $N - 1$  particules, on trouve que le spin individuel de chaque atome apparaît dépolarisé, correspondant à trois valeurs propres égales pour la matrice densité à un corps :  $\Pi_0 = \Pi_1 = \Pi_2 = \frac{N}{3}$ . Nous reviendrons plus tard (chapitre 3) sur un argument proposé par Nozières (1995) sur le rôle des interactions d'échange, qui préservent un condensat scalaire de la fragmentation.

## 4-2 L'ordre à longue portée dans un fluide homogène

Nous considérons dans ce paragraphe le cas d'un gaz homogène confiné dans une boîte dont le volume tend vers l'infini, avec des conditions aux limites périodiques. L'opérateur densité du gaz à l'équilibre thermique à température  $T$  s'écrit

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\hat{H}/k_B T} \quad \text{avec} \quad \mathcal{Z} = \text{Tr} \left( e^{-\hat{H}/k_B T} \right) \quad (91)$$

où l'hamiltonien  $\hat{H}$  contient à la fois l'énergie cinétique des  $N$  particules et l'énergie d'interaction entre elles  $V_{\text{int}}(\hat{\mathbf{r}}_1, \dots, \hat{\mathbf{r}}_N)$ . Du fait de l'invariance par translation du problème, l'hamiltonien  $\hat{H}$  et donc l'opérateur densité  $\hat{\rho}$  commutent avec l'opérateur *impulsion totale*

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{j=1}^N \hat{\mathbf{p}}_j. \quad (92)$$

On en déduit que l'opérateur densité  $\hat{\rho}$  exprimé dans la base des impulsions  $|\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N\rangle$  n'a un élément de matrice non nul entre  $|\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N\rangle$  et  $|\mathbf{p}'_1, \dots, \mathbf{p}'_N\rangle$  que si

$$\sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j = \sum_{j=1}^N \mathbf{p}'_j. \quad (93)$$

Quand on prend la trace partielle sur  $N - 1$  particules, on somme les éléments de matrice avec  $\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_2, \dots, \mathbf{p}_N = \mathbf{p}'_N$  [cf. (83)], de sorte que les seuls éléments de matrice non nuls de  $\hat{\rho}_1$  sont les éléments diagonaux

$$\langle \mathbf{p}' | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p} \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') N(\mathbf{p}). \quad (94)$$

La base propre de l'opérateur densité à une particule  $\hat{\rho}_1$  reste donc la base des ondes planes pour un gaz homogène à l'équilibre, même en présence d'interactions.

En particulier, on s'attend<sup>7</sup> à ce que l'état correspondant à la plus grande valeur propre  $\Pi_0$  soit l'état  $|\mathbf{p} = 0\rangle$ , décrit par la fonction d'onde uniforme sur toute l'étendue du gaz :

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}. \quad (95)$$

Partant maintenant de la décomposition de l'opérateur densité à un corps sur la base de ses états propres :

$$\hat{\rho}_1 = \sum_j \Pi_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \quad (96)$$

ou encore

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r} \rangle = \sum_j \Pi_j \psi_j(\mathbf{r}') \psi_j^*(\mathbf{r}), \quad (97)$$

nous pouvons isoler la contribution de l'état le plus peuplé  $\psi_0$  et écrire :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}' | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r} \rangle &= \Pi_0 \psi_0(\mathbf{r}') \psi_0^*(\mathbf{r}) + \sum_{j \neq 0} \Pi_j \psi_j(\mathbf{r}') \psi_j^*(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\Pi_0}{L^3} + \sum_{j \neq 0} \Pi_j \psi_j(\mathbf{r}') \psi_j^*(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (98)$$

Le deuxième terme du membre de droite contient une infinité de fonctions oscillant toutes avec des fréquences spatiales différentes quand on varie  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{r}'$ . Quand on fait tendre la distance  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$  vers l'infini, on s'attend donc

7. Ce point n'est pas toujours correct ; en présence d'un potentiel vecteur ou d'un couplage spin-orbite par exemple, l'état fondamental à une particule peut différer de l'état  $\mathbf{p} = 0$ .

à ce que ces oscillations se brouillent, de sorte qu'il ne reste plus que la contribution de l'état  $\mathbf{p} = 0$  :

$$\lim_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \langle \mathbf{r}' | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r} \rangle = \frac{\Pi_0}{L^3}. \quad (99)$$

Pour un fluide présentant une condensation de Bose-Einstein,  $\Pi_0 = \mathcal{O}(N)$  de sorte que cette limite est égale à une fraction significative de la densité totale  $N/L^3$ .

La relation (99) correspond à *un ordre non diagonal à longue portée*. L'adjectif *non diagonal* décrit le fait que l'on considère l'élément de matrice de  $\hat{\rho}_1$  entre deux points distincts  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{r}'$  de l'espace. L'aspect *longue portée* est lié au fait que cet élément de matrice reste macroscopiquement non nul même quand les points  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{r}'$  sont arbitrairement éloignés.

**Remarque.** Dans leur article introduisant ce concept d'ordre non diagonal à longue portée, Penrose & Onsager (1956) prennent la relation

$$\lim_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \langle \mathbf{r}' | \hat{\rho} | \mathbf{r} \rangle = \Psi(\mathbf{r}') \Psi^*(\mathbf{r}) \quad (100)$$

comme point de départ pour définir la fonction d'onde du condensat. Cette relation est plus générale que celle écrite en (99), puisqu'elle s'applique au cas d'un fluide non uniforme placé par exemple dans un potentiel périodique (cf. chapitre 4). La fraction condensée est définie par

$$f_0 \equiv \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r. \quad (101)$$

Penrose & Onsager (1956) montrent ensuite que  $f_0$  est très proche de la valeur propre maximale de  $\hat{\rho}_1$ ,  $\Pi_0$ , et que la fonction d'onde  $\Psi(x)$  est quasiment colinéaire avec  $\psi_0(x)$ .

### 4-3 Distribution en impulsion et fonction $G_1$

Revenons au cas d'un gaz uniforme, obtenu dans le cas d'une boîte avec des conditions aux limites périodiques. Nous avons vu que dans ce cas, l'opérateur densité réduit  $\hat{\rho}_1$  est diagonal dans la base des impulsions. Ses

éléments de matrice donnent la distribution en impulsion qui est une *observable à un corps*, donc effectivement calculable à partir de  $\hat{\rho}_1$  :

$$N(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p} \rangle, \quad (102)$$

et le nombre total de particules est donné par

$$N = \sum_{\mathbf{p}} N(\mathbf{p}) = \frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3} \int N(\mathbf{p}) d^3p. \quad (103)$$

On peut relier cette distribution en impulsion aux éléments de matrice de  $\hat{\rho}$  dans la base des positions. Pour cela, remarquons d'abord que l'invariance par translation du système entraîne que  $\langle \mathbf{r} | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r}' \rangle$  ne dépend en fait que de la distance  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ . Introduisons donc la fonction  $G_1(\mathbf{u})$  :

$$G_1(\mathbf{u}) = \langle \mathbf{r}' | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r} \rangle \quad \text{avec} \quad \mathbf{u} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}. \quad (104)$$

En utilisant la relation de fermeture, on trouve :

$$\begin{aligned} N(\mathbf{p}) &= \langle \mathbf{p} | \hat{\rho}_1 | \mathbf{p} \rangle \\ &= \iint \langle \mathbf{p} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle d^3r' d^3r \\ &= \frac{1}{L^3} \iint e^{i(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\mathbf{p}/\hbar} \langle \mathbf{r}' | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r} \rangle d^3r' d^3r \\ &= \int G_1(\mathbf{u}) e^{-i\mathbf{u}\cdot\mathbf{p}/\hbar} d^3u \end{aligned} \quad (105)$$

où l'intégrale porte sur le volume  $L^3$ .

La distribution en impulsion et la fonction  $G_1$  sont donc reliées par une transformation de Fourier, qui peut s'inverser pour donner

$$G_1(\mathbf{u}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int N(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{u}\cdot\mathbf{p}/\hbar} d^3p. \quad (106)$$

Cette relation étroite entre la distribution en impulsion  $N(\mathbf{p})$  et la fonction  $G_1(\mathbf{u})$  qui caractérise la cohérence quantique entre deux points de l'espace séparés de  $\mathbf{u}$  est bien illustrée par les deux facettes utilisées plus haut pour caractériser la condensation :

— Une valeur propre macroscopique  $\Pi_0$  (§ 4-1) correspondant à une fraction macroscopique des atomes qui s'accumulent dans le pic d'impulsion nulle, soit une composante

$$\Pi_0 \delta(\mathbf{p}) \quad (107)$$

en distribution de Dirac dans la distribution d'impulsion à la limite continue.

— Un ordre non diagonal à longue portée (§ 4-2), correspondant à une limite finie non nulle  $\Pi_0/L^3$  pour la fonction  $G_1(\mathbf{u})$  quand  $|\mathbf{u}| \rightarrow \infty$ .

Ces deux critères sont bien entendu équivalents, puisque la transformée de Fourier de la fonction constante  $\Pi_0/L^3$ , calculée comme indiqué en (105), fait apparaître la distribution de Dirac  $\Pi_0 \delta(\mathbf{p})$ .

**Cas non uniforme.** Dans le cas d'un gaz non uniforme, on dispose d'une relation équivalente à (105), avec une complexité légèrement plus grande due au caractère non homogène du gaz. On commence par se donner un point  $\mathbf{R}$  dans le gaz et on caractérise l'ordre non diagonal autour de ce point par l'élément de matrice :

$$G_1\left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{u}}{2}, \mathbf{R} + \frac{\mathbf{u}}{2}\right) = \left\langle \mathbf{R} + \frac{\mathbf{u}}{2} \left| \hat{\rho}_1 \right| \mathbf{R} - \frac{\mathbf{u}}{2} \right\rangle. \quad (108)$$

Comme ci-dessus, on prend la transformée de Fourier vis-à-vis de la distance  $\mathbf{u}$  séparant les deux points :

$$\int \left\langle \mathbf{R} + \frac{\mathbf{u}}{2} \left| \hat{\rho}_1 \right| \mathbf{R} - \frac{\mathbf{u}}{2} \right\rangle e^{-i\mathbf{u}\cdot\mathbf{p}/\hbar} d^3u, \quad (109)$$

puis on prend la moyenne de ce résultat sur le point  $\mathbf{R}$  situé au milieu des deux points  $\mathbf{R} \pm \mathbf{u}/2$  qui ont servi de référence :

$$\frac{1}{L^3} \iint \left\langle \mathbf{R} + \frac{\mathbf{u}}{2} \left| \hat{\rho}_1 \right| \mathbf{R} - \frac{\mathbf{u}}{2} \right\rangle e^{-i\mathbf{u}\cdot\mathbf{p}/\hbar} d^3u d^3R. \quad (110)$$

En utilisant la relation de fermeture sur les ondes planes d'impulsion  $\mathbf{p}$  quantifiées dans la boîte de volume  $L^3$ ,

$$\sum_{\mathbf{p}'} |\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}'| = \hat{1} \quad \text{avec} \quad \int e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{u}} d^3u = L^3 \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}, \quad (111)$$

on arrive à

$$\frac{1}{L^3} \iint G_1 \left( \mathbf{R} - \frac{\mathbf{u}}{2}, \mathbf{R} + \frac{\mathbf{u}}{2} \right) e^{-i\mathbf{u} \cdot \mathbf{p}/\hbar} d^3u d^3R = N(\mathbf{p}). \quad (112)$$

On conserve donc une relation entre distribution en impulsion  $N(\mathbf{p})$  et transformée de Fourier de  $G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  même si le fluide n'est pas uniforme, à condition de prendre la moyenne de la transformée de Fourier (109) sur l'étendue du gaz.

## Références

- Bagnato, V., D. E. Pritchard & D. Kleppner (1987), « Bose–Einstein condensation in an external potential », in *Phys. Rev. A* 35, p. 4354.
- Bagnato, V. S. & D. Kleppner (1991), « Bose–Einstein condensation in low-dimensional traps », in *Phys. Rev. A* 44.11, pp. 7439–7441.
- Bose, S. N. (1924), « Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese », in *Z. Phys.* 26, p. 178.
- Castin, Yvan & Christopher Herzog (2001), « Bose–Einstein condensates in symmetry breaking states », in *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series IV-Physics* 2.3, pp. 419–443.
- Cohen-Tannoudji, C. (1997-1998), *Condensation de Bose–Einstein des gaz atomiques ultra-froids*, Cours du Collège de France, disponible sur <http://www.phys.ens.fr/cours/college-de-france/index.html>.
- Cohen-Tannoudji, C., J Dalibard & F Laloë (2005), « La condensation de Bose–Einstein dans les gaz », in , ed. by Leduc M. & Le Bellac M., vol. Einstein aujourd'hui, EDP Sciences.
- Dirac, Paul AM (1926), « On the theory of quantum mechanics », in *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 112, 762, The Royal Society, , pp. 661–677.
- Diu, B., C. Guthmann, D. Lederer & B. Roulet (1989), *Physique Statistique*, Hermann.
- Einstein, A. (1924), « Quantentheorie des einatomigen idealen Gases », in *Sitzungsberichte/Physikalische Klasse, Preussische Akademie der Wissenschaften* 22, p. 261.
- (1925a), « Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. II », in *Sitzungsberichte/Physikalische Klasse, Preussische Akademie der Wissenschaften* 1, p. 3.
- (1925b), « Zur Quantentheorie des idealen Gases », in *Sitzungsberichte/Physikalische Klasse, Preussische Akademie der Wissenschaften* 3, p. 18.
- Gaunt, Alexander L., Tobias F. Schmidutz, Igor Gotlibovych, Robert P. Smith & Zoran Hadzibabic (2013), « Bose-Einstein Condensation of Atoms in a Uniform Potential », in *Phys. Rev. Lett.* 110 (20), p. 200406.
- Gerbier, F., J. H. Thywissen, S. Richard, M. Hugbart, P. Bouyer & A. Aspect (2004), « Critical Temperature of a Trapped, Weakly Interacting Bose Gas », in *Phys. Rev. Lett.* 92.3, 030405, p. 030405.
- Groot G. J. Hooyman, C. A. ten Seldam S. R. de (1950), « On the Bose-Einstein Condensation », in *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 203.1073, pp. 266–286.
- Ketterle, W. & N. J. van Druten (1996), « Bose–Einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions », in *Phys. Rev. A* 54, pp. 656–660.
- Mueller, Erich J., Tin-Lun Ho, Masahito Ueda & Gordon Baym (2006), « Fragmentation of Bose-Einstein condensates », in *Phys. Rev. A* 74 (3), p. 033612.
- Nozières, P. (1995), « Some comments on Bose–Einstein Condensation », in *Bose–Einstein Condensation*, ed. by A. Griffin, D. W. Snoke & S. Stringari, Cambridge: Cambridge University Press.
- Pais, A. (1979), « Einstein and the quantum theory », in *Rev. Mod. Phys.* 51 (4), pp. 863–914.
- Penrose, O. & L. Onsager (1956), « Bose–Einstein condensation and liquid helium », in *Phys. Rev.* 104, p. 576.
- Pitaevskii, L. & S. Stringari (2016), *Bose–Einstein Condensation and Superfluidity*, Oxford: Oxford University Press.
- Schmidutz, Tobias F., Igor Gotlibovych, Alexander L. Gaunt, Robert P. Smith, Nir Navon & Zoran Hadzibabic (2014), « Quantum Joule-Thomson Effect in a Saturated Homogeneous Bose Gas », in *Phys. Rev. Lett.* 112 (4), p. 040403.
- Smith, Robert P., Robert L. D. Campbell, Naaman Tammuz & Zoran Hadzibabic (2011), « Effects of Interactions on the Critical Temperature of a Trapped Bose Gas », in *Phys. Rev. Lett.* 106 (25), p. 250403.
- Tammuz, Naaman, Robert P. Smith, Robert L. D. Campbell, Scott Beattie, Stuart Moulder, Jean Dalibard & Zoran Hadzibabic (2011), « Can a Bose Gas Be Saturated ? », in *Phys. Rev. Lett.* 106 (23), p. 230401.