*Fluides quantiques de basse dimension et transition de Kosterlitz-Thouless* 

# Gaz quantique en dimension deux : du cas idéal aux interactions binaires

Jean Dalibard

Chaire Atomes et rayonnement

Année 2016-17



## La physique en basse dimension

Cours précédent : à température non nulle, il n'y a pas d'ordre cristallin (ordre à longue portée) en dimension 1 ou 2



$$\langle (\boldsymbol{u_j} - \boldsymbol{u}_0)^2 
angle \ o \infty$$
 quand  $R_j 
ightarrow \infty$ 

Peierls, Mermin-Wagner-Hohenberg

But des cours qui vont suivre :

Y a-t-il un ordre ou un quasi-ordre dans un gaz de Bose, l'ordre étant caractérisé dans ce cas par une cohérence macroscopique ou un comportement superfluide ?

#### Transition BKT (Berezinskii - Kosterlitz - Thouless)

## Les buts du cours d'aujourd'hui

#### **Traiter le problème du gaz parfait en dimension 2**

• Comment l'argument d'Einstein (1924) sur *le gaz parfait saturé* est-il modifié ?

Gaz uniforme vs. gaz confiné dans un piège harmonique

 Discuter une implémentation a priori inattendue : *Une assemblée de photons dans une cavité Bonn, groupe de Martin Weitz*

#### Un premier pas au delà du gaz parfait

 Comment traiter le problème d'une collision binaire en dimension 2 dans le cadre de la mécanique quantique ?



Klaers et al Nature **468** 545 (2010)

#### La statistique de Bose-Einstein

Particules dans une boîte de côté L

- Fonctions d'onde :  $\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) \stackrel{\text{2D}}{=} \frac{1}{\sqrt{L^2}} e^{i \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{r} / \hbar}$
- Impulsion quantifiée :  $oldsymbol{p}=rac{2\pi\hbar}{L}oldsymbol{n}, \quad oldsymbol{n}=(n_x,n_y)\in\mathbb{Z}^2$

• Energie : 
$$E_{p} = \frac{p^2}{2m}$$

Nombre moyen de particules dans un état d'impulsion p à l'équilibre thermique :

$$N_{p} = \frac{1}{e^{(E_{p}-\mu)/k_{B}T} - 1}$$
Température *T*, potentiel chimique  $\mu$ 

$$= \frac{1}{\frac{1}{\frac{1}{Z}}e^{E_{p}/k_{B}T} - 1}$$

$$Z = e^{\mu/k_{B}T} : \text{fugacité}$$

## La densité d'états

Nous serons amenés à effectuer des moyennes ou des sommes sur les états p

$$\sum_{\boldsymbol{p}} F(\boldsymbol{p}) \qquad \longrightarrow \qquad \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^2 \int F(\boldsymbol{p}) \, \mathrm{d}p_x \, \mathrm{d}p_y$$

Si la quantité  $F(\mathbf{p})$  ne dépend que  $|\mathbf{p}|$ , donc de l'énergie  $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ , on obtient

$$\sum_{\boldsymbol{p}} F(\boldsymbol{p}) \qquad \longrightarrow \qquad \int_{0}^{+\infty} F(E) \ D(E) \ \mathrm{d}E$$

D(E) : densité d'états autour de l'énergie E, provenant du décompte du nombre d'états dans la tranche d'énergie comprise entre E et E+dE

Dans une boîte à deux dimensions, D(E) est une quantité indépendante de E

Pour rappel, à trois dimensions :  $D(E) \propto \sqrt{E}$ 

## Pourquoi la densité d'états est constante dans une boîte 2D

$$\boldsymbol{p} = \frac{2\pi\hbar}{L}\boldsymbol{n}, \quad \boldsymbol{n} = (n_x, n_y) \in \mathbb{Z}^2$$

Points uniformément répartis dans le plan  $(p_x, p_y)$ 

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} \quad : \text{équation d'un cercle}$$



D(E) dE: nombre de points dans l'anneau compris entre  $\sqrt{2mE}$  et  $\sqrt{2m(E + dE)}$ Aire de cet anneau:  $\pi \left(\sqrt{2m(E + dE)}\right)^2 - \pi \left(\sqrt{2mE}\right)^2 = 2m\pi dE$  $\longrightarrow$  indépendante de E

On arrive ainsi à : 
$$D(E) = 2m\pi \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^2 = \frac{mL^2}{2\pi\hbar^2}$$

### La saturation des états excités d'Einstein

A température fixée, le nombre de particules que l'on peut placer dans les états excités est borné.

En effet, la loi de Bose-Einstein :

$$N_{p} = \frac{1}{e^{(E_{p} - \mu)/k_{\rm B}T} - 1}$$

n'a de sens que si  $\ \mu < E_0 = 0$ 

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

$$<\sum_{\boldsymbol{p}\neq 0}\frac{1}{\mathrm{e}^{E_{\boldsymbol{p}}/k_{\mathrm{B}}T}-1}$$

correspondant à  $\mu \rightarrow 0$ 

Passage à une intégrale : 
$$N_{\text{exc}}(T,\mu) < \int_{0}^{+\infty} \frac{D(E)}{e^{E/k_{\text{B}}T} - 1} dE$$

Cette intégrale a-t-elle un sens, i.e., converge-t-elle en 0 et  $+\infty$  ?



### La saturation des états excités d'Einstein (suite)

$$N_{\rm exc}(T,\mu) < \int_0^{+\infty} \frac{D(E)}{{\rm e}^{E/k_{\rm B}T}-1} \, {\rm d}E$$

Convergence en  $E = +\infty$ ? Pas de problème car D(E) varie doucement avec E



Convergence en E=0 ? Tout dépend du comportement de D(E) :

A 3D: 
$$D(E) \propto \sqrt{E}$$
 et  $\frac{1}{e^{E/k_{\rm B}T} - 1} \approx \frac{1}{\left(1 + \frac{E}{k_{\rm B}T}\right) - 1} = \frac{k_{\rm B}T}{E}$   
 $\longrightarrow k_{\rm B}T \int_0 \frac{1}{\sqrt{E}} dE$  est convergente en  $E=0$ 

#### La saturation des états excités d'Einstein à 3D

A 3D, l'intégrale qui majore la population des états excités est convergente Son calcul exact donne

$$N_{\rm exc}(T,\mu) < 2.612 \ \frac{L^3}{\lambda_T^3} \qquad \text{avec} \qquad \lambda_T = \frac{\hbar\sqrt{2\pi}}{\sqrt{mk_{\rm B}T}} \qquad 2.612 = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n^{3/2}}$$

Une quantité sans dimension utile : la densité dans l'espace des phases



#### La non-saturation des états excités à 2D

$$N_{\rm exc}(T,\mu) < \int_0^{+\infty} \frac{D(E)}{{\rm e}^{E/k_{\rm B}T}-1} \, {\rm d}E$$

La densité d'états à deux dimensions est indépendante de E. L'intégrale ne converge donc pas en E = 0:

$$\frac{1}{\mathrm{e}^{E/k_{\mathrm{B}}T}-1} \approx \frac{k_{\mathrm{B}}T}{E} \qquad \text{et} \quad k_{\mathrm{B}}T \int_{0}^{1} \frac{1}{E} \,\mathrm{d}E \quad \text{diverge}$$

A T fixée, on peut mettre un nombre arbitrairement élevé de particules dans les états excités quand  $\mu \to 0$ 

Pas de saturation, ni de population macroscopique dans l'état fondamental

## Distribution en impulsion du gaz de Bose à 2D

Les effets de statistique quantique sont toujours présents, même sans condensation : accumulation d'une majorité des particules dans la zone de petites impulsions

On varie la densité dans l'espace des phases d'une valeur << 1 à une valeur >>1



$$\lambda_T = \frac{\hbar\sqrt{2\pi}}{\sqrt{mk_{\rm B}T}}$$

$$\frac{p\lambda_T}{\hbar} = 1 \iff \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{4\pi}k_{\rm B}T$$

$$N(\mathbf{p}) = \frac{1}{e^{(p^2/2m - \mu)/k_{\rm B}T)} - 1} \approx \frac{k_{\rm B}T}{\frac{p^2}{2m} + |\mu|}$$

distribution Lorentzienne

## Cohérence spatiale du gaz de Bose à 2D

La cohérence spatiale est caractérisée par la fonction de corrélation à un corps :

$$G_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \langle \boldsymbol{r} | \hat{\rho}_1 | \boldsymbol{r}' \rangle$$

qui est la transformée de Fourier de la distribution en impulsion



Transformée de Fourier d'une lorentzienne en impulsion :

$$G_1(r,0) \propto \mathrm{e}^{-r/\ell}$$

avec la longueur de cohérence  $\ell$  qui augmente très vite avec  $\mathcal{D}$ 

## 2.

# Le gaz de Bose dans un piège harmonique 2D

## La densité d'état dans un piège harmonique 2D



Oscillateur isotrope de pulsation  $\omega$ 

$$E_{\boldsymbol{n}} = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega$$

Densité d'états :  $D(E) \propto E$ 

Cette densité d'états vient assurer la convergence de

$$\int_0^{+\infty} \frac{D(E)}{\mathrm{e}^{E/k_{\rm B}T} - 1} \,\mathrm{d}E$$

La population des états excités sature donc dans un piège harmonique 2D :

$$N_{\rm exc} < 1.64 \, \left(\frac{k_{\rm B}T}{\hbar\omega}\right)^2 \qquad \qquad 1.64... = \frac{\pi^2}{6}$$

On retrouve un condensat comme à 3D quand  $\mu \rightarrow 0$  mais...

### Ce condensat est « singulier »

Description du gaz piégé à l'approximation semi-classique  $(k_{\rm B}T \gg \hbar\omega)$ :

$$N(E) = \frac{1}{\frac{1}{Z} e^{E/k_{\rm B}T} - 1} \longrightarrow W(r, p) \propto \frac{1}{\frac{1}{Z} e^{\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right)/k_{\rm B}T} - 1}$$

Approximation valable tant qu'on ne cherche pas à en extraire des informations avec une résolution en position et en impulsion qui serait telle que  $\Delta r \ \Delta p \lesssim \hbar$ 

Densité spatiale dans le piège à la limite  $~\mu \rightarrow 0$  , c'est-à-dire  $~Z \rightarrow 1~$  :

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \int W(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) \, \mathrm{d}^2 p \quad = -\frac{1}{\lambda_T^2} \, \ln\left(1 - \mathrm{e}^{-m\omega^2 r^2/(2k_\mathrm{B}T)}\right)$$

c'est-à-dire au voisinage du fond du piège  $r \rightarrow 0$  :

$$ho(\mathbf{r}) \approx -rac{1}{\lambda_T^2} \ln(r^2) + ext{constante} \quad \text{diverge en } r = 0$$

## Ce condensat 2D est « singulier » (suite)

Même si la divergence  $\rho(\mathbf{r}) \approx -\frac{1}{\lambda_T^2} \ln(r^2) + \text{constante}$  est compatible avec un nombre total de particules fini car  $\int \rho(\mathbf{r}) d^2 r$  converge, elle sera problématique dès qu'il y aura des interactions répulsives entre atomes

A titre de comparaison, un gaz de Bose dans un piège harmonique 3D condense quand la densité centrale atteint la valeur :

$$r \to 0$$
  $\rho(\mathbf{r}) \to \frac{2.612}{\lambda_T^3}$ 

Ce « critère central » est alors équivalent au critère trouvé pour une boîte cubique

Il n'y avait pas de condensation dans une boîte à 2D, d'où le caractère singulier du cas piégé

## 3.

## Un gaz 2D presque idéal : les photons en cavité

## Des photons massifs et piégés qui condensent ???

- Les photons ne sont pas des particules massives dans l'espace 3D.
   Comment peuvent-ils acquérir une masse à 2D ?
- Pour avoir un condensat à 2D, il faut confiner les particules, par exemple dans un piège harmonique. Comment obtient ce piégeage harmonique pour les photons?
- On pose généralement μ = 0 pour les photons (nombre non conservé).
   Comment obtenir μ non nul dans cette expérience ?
- S'agissant de photons, comment distinguer condensation de Bose-Einstein et effet laser ?

## Le dispositif de l'expérience de Bonn



Cavité optique de finesse 10<sup>5</sup>

Entre les deux miroirs, méthanol + colorant (Rhodamine 6G) milieu d'indice  $n_0 = 1.33$ 

Les photons « utiles » ont une longueur d'onde (dans le vide) dans la gamme 500-580 nm

$$L \approx N \frac{\lambda}{2n_0}$$
 avec  $N = 7$ 

Les modes longitudinaux N = 6 ou N = 8 correspondent à des longueurs d'onde non atteintes par la fluorescence des molécules de colorant

Le degré de liberté selon z est figé pour les photons de la cavité

## Une masse pour les photons ?

Selon l'axe z de la cavité :  $k_z = N\pi/L$  avec N=7

Degrés de liberté transverses (*xy*):  $E = \hbar \omega = \frac{\hbar c |\mathbf{k}|}{n_0}$  avec  $|\mathbf{k}| = \sqrt{k_z^2 + k_\perp^2}$ 

Approximation paraxiale :  $|{m k}_{\perp}| \ll k_z$ 

$$E \approx \frac{\hbar c}{n_0} k_z \left( 1 + \frac{\boldsymbol{k}_{\perp}^2}{2k_z^2} \right) \qquad \approx \hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_{\perp}^2}{2m_{\rm ph}}$$

où l'on a posé :  $\hbar\omega_0 = \frac{N\pi\hbar c}{n_0 L}$ 

$$m_{\rm ph} = \frac{\hbar n_0 k_z}{c}$$

 $m_{\rm ph} \approx 0.7 \times 10^{-35} \,\mathrm{kg}$ 

100 000 fois moins lourd qu'un électron





## Un potentiel harmonique pour les photons





$$L(r) = L_0 - 2\left(R - \sqrt{R^2 - r^2}\right)$$
$$\approx L_0 - \frac{r^2}{R}$$

que l'on injecte dans le résultat précédent :  $\hbar\omega_0 = \frac{N\pi\hbar c}{n_0L}$ 

d'où l'énergie d'un photon écarté de r de l'axe optique

$$\hbar\omega_0(r) = \hbar\omega_0(0) + \frac{1}{2}m_{\rm ph}\Omega^2 r^2$$

avec: 
$$\Omega = \frac{c}{n_0 \sqrt{L_0 R/2}}$$
  $\Omega/(2\pi) \approx 40 \,\mathrm{GHz}$ 

Bilan de cette analyse « corpusculaire » :  $E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}_{\perp}) = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_{\perp}^2}{2m_{\rm ph}} + \frac{1}{2}m_{\rm ph}\Omega^2 \boldsymbol{r}^2$ 

## Thermodynamique du colorant



La relaxation rovibrationnelle très rapide (femtoseconde) garantit un équilibre thermique entre sous-niveaux de g d'une part, entre sous-niveaux de e d'autre part

$$\frac{N_e(E+\hbar\omega)}{N_g(E)} = Z \,\mathrm{e}^{-\hbar\omega/k_\mathrm{B}T} \qquad T \approx 300 \,\mathrm{K}$$

En revanche, le rapport entre les populations des deux continua associés à *e* et à *g* n'est pas thermique, mais imposé par la puissance du laser de pompage.

Rapport caractérisé par le paramètre Z

## Thermodynamique des photons



 $\mathcal{N}(\omega)$  : nombre de photons dans un mode d'énergie  $\hbar\omega$ 

Analyse simplifiée fondée sur le bilan détaillé :

$$\mathcal{N}(\omega) \ N_g(E) = \begin{bmatrix} 1 + \mathcal{N}(\omega) \end{bmatrix} N_e(E + \hbar \omega)$$

$$\uparrow$$
absorption
$$f$$
émission spontanée + stimulée

A l'équilibre :  $\frac{\mathcal{N}(\omega)}{1 + \mathcal{N}(\omega)} = \frac{N_e(E + \hbar\omega)}{N_e(E)} = Z e^{-\hbar\omega/k_B T}$ 

ou encore : 
$$\mathcal{N}(\omega) = \frac{1}{\frac{1}{Z} e^{\hbar \omega / k_{\rm B}T} - 1}$$

Loi de Bose-Einstein avec une fugacité différente de 1, donc un potentiel chimique non nul, dépendants de la puissance du laser de pompage

## La différence avec le rayonnement du corps noir



Dans le formalisme conduisant à la formule de Planck, on impose  $\mu = 0$  pour les photons

Cela est motivé par l'existence de processus tels que :



Non conservation du nombre d'excitations :  $\mu = 2\mu \Rightarrow \mu = 0$ 

Dans l'expérience de Bonn, il y a conservation du nombre d'excitations :

1 photon + 1 molécule g 1 molécule e

Le potentiel chimique non nul rend compte de cette conservation

Sur le plan mathématique, description à l'approximation RWA

## La condensation 2D observée à Bonn





Spectre de la lumière sortant de la cavité pour des puissance de pompage croissante

Ajustement des courbes par une loi de Bose-Einstein avec T=300 K et un potentiel chimique variable

Condensation attendue pour

$$N = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_{\rm B}T}{\hbar\Omega}\right)^2$$
$$\approx 60\,000$$

Bon accord avec les observations !

## Condensat ou laser ?



 La distribution énergétique fait apparaître un pic étroit au dessus d'un piédestal thermique, généralement absent pour un laser

 Les fluctuations du nombre de photons dans le mode d'un laser sont souvent poissoniennes. Elles sont ici nettement plus importantes et correspondent au résultat attendu dans le cadre de l'ensemble grand-canonique.

• Il s'agit d'un régime forcé plutôt que d'un équilibre thermodynamique au sens strict

Un critère plus contraignant pourrait consister à vérifier certaines relations fluctuation - dissipation (Chiochetta et al.)

## Bilan à ce stade

Gaz parfait de bosons à la limite thermodynamique

• Condensation dans un piège harmonique, mais singulier densité centrale  $ightarrow\infty$  pour un piège de fréquence  $\omega
ightarrow0$ 

• Pas de condensation dans une boîte à la limite thermodynamique

Peut-il y avoir une transition de phase sans que la densité devienne infinie ?

Oui, mais cette transition est fondamentalement due aux interactions !

Mécanisme BKT

## 4.

# Collisions binaires à deux dimensions

## Collisions entre deux particules



$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + U(\hat{r}_1 - \hat{r}_2)$$

On supposera que  $U(\mathbf{r})$  ne dépend que de  $|\mathbf{r} = |\mathbf{r}|$ 

Séparation des variables : 
$$\hat{H} = \hat{H}_{CM} + \hat{H}_{rel}$$

Centre de masse : 
$$\hat{H}_{CM} = \frac{\hat{P}^2}{2M}$$
  $R = \frac{1}{2}(r_1 + r_2)$   $P = p_1 + p_2$   
 $M = 2m$ 

Variable relative : 
$$\hat{H}_{rel} = \frac{\hat{p}^2}{2m_r} + U(r)$$
  $r = r_1 - r_2$   $p = \frac{1}{2}(p_1 - p_2)$   
 $m_r = m/2$ 

La physique de la collision est décrite par  $\hat{H}_{
m rel}$ 

#### Barrière centrifuge et collision en onde s

On cherche les états propres de  $\hat{H}_{rel} = \frac{\hat{p}^2}{2m_r} + U(\hat{r})$  d'énergie positive avec par exemple  $U(r) = -C_6/r^6$  + un coeur dur

Etat propre commun à  $\dot{H}_{
m rel}$  et au moment cinétique, de partie angulaire connue.



Pour un état de moment cinétique non nul, il apparaît un terme de barrière centrifuge  $1/r^2$  dans l'hamiltonien radial

A basse énergie, le potentiel d'interaction ne joue un rôle que pour le canal de collision de moment cinétique nul

#### **Collision en onde s, donc isotrope**

### Etat stationnaire de diffusion

On cherche un état propre  $\hat{H}_{rel} \psi_k(\mathbf{r}) = E_k \psi_k(\mathbf{r})$  avec  $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ 

et le comportement asymptotique

$$\psi_{k}(r) \sim e^{ik \cdot r} + f(k) \frac{e^{ikr}}{\sqrt{kr}}$$
  
onde plane onde cylindrique incidente sortante

On cherche le comportement de l'amplitude de diffusion f(k) dans la limite  $k \rightarrow 0$ 

### Le cas tri-dimensionnel

Potentiel U(r) de portée b, limite de basse énergie :  $kb \ll 1$ Il existe donc une région de l'espace telle que  $b < r \ll k^{-1}$ 



La valeur de la longueur de diffusion a est imposée par la régularité de la fonction d'onde en r = 0 et dépend de U(r)

Amplitude de diffusion :  $a = -\lim_{k \to 0} f(k)$ 

## Le cas bi-dimensionnel



Ne marche pas car  $\frac{e^{\pm ikr}}{\sqrt{r}}$  n'est pas une solution exacte dans le cas U = 0, mais simplement une limite asymptotique

En revanche à 3D,  $\frac{e^{\pm ikr}}{r}$  est bien une solution exacte quand U=0

## Le cas bi-dimensionnel (suite)



Solutions exactes pour U = 0: fonctions de Bessel de 1<sup>ère</sup> et 2<sup>ème</sup> espèce

 $J_0(kr) \qquad Y_0(kr)$ 

## Le cas bi-dimensionnel (fin)



 $k \to 0$  Fonction radiale :  $R(r) = C_1 \ln(r) + C_2 = C_1 \ln(r/a_2)$ 

*a*<sub>2</sub> : longueur de diffusion à deux dimension

Amplitude de diffusion : 
$$f(k) \approx \frac{1}{-\frac{1}{2\pi}\ln(ka_2) + \frac{i}{4}}$$

## Collision dans une géométrie quasi-bidimensionnelle

Petrov - Holzmann - Shlyapnikov



Confinement harmonique selon l'axe z:

$$a_{\rm oh} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_z}}$$

Résultat du même type que celui trouvé pour le problème strictement 2D :

$$f(k) \approx \frac{1}{\frac{1}{\tilde{g}} - \frac{1}{2\pi} \ln(ka_{\rm oh}) + \frac{i}{4}} \qquad \text{avec} \quad \tilde{g} = \sqrt{8\pi} \frac{a}{a_{\rm oh}}$$
$$a : \text{longueur de diffusion 3D}$$

Dans la plupart des cas, le terme  $1/ ilde{g}$  domine le dénominateur, ce qui donne

$$\tilde{g} \lesssim 1 \longrightarrow f(k) \approx \tilde{g}$$

mais il faudra se rappeler que cela ne peut pas être correct si  $\tilde{g}$  devient grand

## Bilan

Le gaz parfait à deux dimensions peut être vu comme un cas particulier du théorème de Mermin -Wagner -Hohenberg

#### Pas d'ordre à longue portée à la limite thermodynamique

Mais il est « pauvre » au sens où il ne présente pas non plus de transition de phase topologique à la BKT

#### Les interactions sont indispensables pour faire émerger cette transition de phase

La description de ces interactions peut se faire dans les cas simples en terme d'un nombre sans dimension  $\tilde{g}$  qui caractérise l'amplitude de diffusion

$$\tilde{g} = \sqrt{8\pi} \frac{a}{a_{\rm oh}}$$
  $f(k) \approx \tilde{g}$  si  $\tilde{g} \lesssim 1$