

Gaz Quantiques

Félix Werner

15 octobre 2004

Directeur de thèse : Yvan Castin
Laboratoire Kastler-Brossel, Ecole Normale Supérieure
Département de physique

1 Préliminaires

Bien que nous vivions dans \mathbb{R}^3 , nous allons nous placer dans une boîte cubique de côté L , discrétisée par un réseau de pas l ($\frac{L}{l} \in \mathbb{N}$), avec des conditions aux bords périodiques (Fig.1) :

$$\mathcal{R} = \{R = (R_1, R_2, R_3) \in \mathbb{R}^3 : R_i = n_i l, n_i \in \mathbb{Z} / \left(\frac{L}{l}\right) \mathbb{Z}\}$$

1.1 Définitions de base

• Soit \mathcal{H}_1 l'espace de Hilbert des fonctions de \mathcal{R} dans \mathbb{C} muni du produit scalaire

$$\langle \phi, \psi \rangle = \sum_{R \in \mathcal{R}} \phi^*(R) \psi(R).$$

On l'appelle espace des états à une particule.

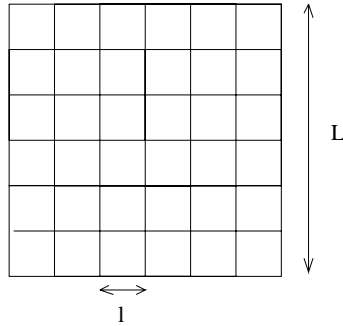


FIG. 1 – Le réseau

• Pour $R \in \mathcal{R}$ soit $|R\rangle$ la fonction de \mathcal{H}_1 :

$$|R\rangle(R') = \delta_{R,R'}.$$

$(|R\rangle)_{R \in \mathcal{R}}$ est une base orthonormée (B.O.N.) de \mathcal{H}_1 .

• Posons $D = \left] -\frac{\pi}{L}, \frac{\pi}{L} \right] \cap \left(\frac{\pi}{L} \mathbb{Z} \right)^3$.

Pour $k \in D$ soit $|k\rangle$ la fonction de \mathcal{H}_1 :

$$|k\rangle(R) = e^{i(k,R)} \left(\frac{l}{L} \right)^{\frac{3}{2}}$$

où (\cdot, \cdot) est le produit scalaire sur \mathbb{R}^3 .

$(|k\rangle)_{k \in D}$ est une B.O.N. de \mathcal{H}_1 .

Remarque :

Lorsqu'une particule se trouve dans l'état $\psi \in \mathcal{H}_1$ (avec $\langle \psi, \psi \rangle = 1$) la probabilité de la trouver au site R est donnée par $|\psi(R)|^2$. Ainsi dans l'état $|R\rangle$ la particule se trouve au site R avec probabilité 1, alors que dans un état $|k\rangle$ elle se trouve avec une probabilité égale sur chaque site du réseau.

• Soit \mathcal{B} l'espace des fonctions ψ de \mathcal{R}^N dans \mathbb{C} telles que pour toute permutation $\sigma \in S_N$,

$$\psi(R_{\sigma(1)}, \dots, R_{\sigma(N)}) = \psi(R_1, \dots, R_N).$$

On l'appelle espace des états à N bosons.

• Soit \mathcal{F} l'espace des fonctions ψ de \mathcal{R}^N dans \mathbb{C} telles que pour toute permutation $\sigma \in S_N$ laissant stables $\{1, \dots, \frac{N}{2}\}$ et $\{\frac{N}{2} + 1, \dots, N\}$,

$$\psi(R_{\sigma(1)}, \dots, R_{\sigma(N)}) = \epsilon(\sigma) \psi(R_1, \dots, R_N).$$

On l'appelle espace des états à $\frac{N}{2}$ fermions de spin \uparrow et $\frac{N}{2}$ fermions de spin \downarrow .

• Soit \mathcal{H} l'espace des fonctions ψ de \mathcal{R}^N dans \mathbb{C} .

Posons pour $\psi \in \mathcal{H}$:

$$(S\psi)(R_1, \dots, R_N) = \sum_{\sigma \in S_N} \psi(R_{\sigma(1)}, \dots, R_{\sigma(N)})$$

$$(A\psi)(R_1, \dots, R_{N/2}, S_1, \dots, S_{N/2}) = \sum_{\sigma, \eta \in S_{N/2}} \epsilon(\sigma) \epsilon(\eta) \psi(R_{\sigma(1)}, \dots, R_{\sigma(N/2)}, S_{\eta(1)}, \dots, S_{\eta(N/2)})$$

Alors $\mathcal{B} = S(\mathcal{H})$ et $\mathcal{F} = A(\mathcal{H})$.

• Soit $(|u_i\rangle)_{i \in I}$ une B.O.N. de \mathcal{H}_1 .

Posons $|u_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |u_{i_N}\rangle(R_1, \dots, R_N) = |u_{i_1}\rangle(R_1) \dots |u_{i_N}\rangle(R_N)$.

Alors $(|u_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |u_{i_N}\rangle, i_1 \dots i_N \in I)$ est une B.O.N. de \mathcal{H} .

• Soit $(n_i) = (n_i, i \in I)$ une famille d'entiers. Posons

$$|(n_i)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_i n_i!}} S \bigotimes_{i \in I} |u_i\rangle^{\otimes n_i}.$$

Alors $(|(n_i)\rangle, n_i \in \{0, \dots, N\}, \sum_{i \in I} n_i = N)$ est une B.O.N. de \mathcal{B} .

Physiquement, dans cet état, n_i bosons sont dans chaque état $|u_i\rangle$.

• Soit $(n_{i\sigma}) = (n_{i\sigma}, i \in I, \sigma \in \{\uparrow, \downarrow\})$ une famille d'entiers. Posons

$$|(n_{i,\sigma})\rangle = \frac{1}{(N/2)!} A \bigotimes_{i \in I} |u_i\rangle^{\otimes n_{i,\uparrow}} \bigotimes_{i \in I} |u_i\rangle^{\otimes n_{i,\downarrow}}$$

(le produit étant ordonné par une relation d'ordre fixée sur I).

Alors $(|(n_{i,\sigma})\rangle, n_{i,\sigma} \in \{0, 1\}, \sum_{i \in I} n_{i,\sigma} = N/2)$ est une B.O.N. de \mathcal{F} .

Physiquement, dans cet état, $n_{i,\uparrow}$ fermions de spin \uparrow et $n_{i,\downarrow}$ fermions de spin \downarrow sont dans chaque état $|u_i\rangle$.

• Pour $i \in I$ soit \hat{n}_i l'opérateur sur \mathcal{B} tel que

$$\hat{n}_i |(n_i)\rangle = n_i |(n_i)\rangle.$$

Cela définit les opérateurs $\hat{n}_R, R \in \mathcal{R}$ et $\hat{n}_k, k \in D$.

On définit de même les opérateurs sur \mathcal{F} : $\hat{n}_{R,\sigma}$ et $\hat{n}_{k,\sigma}$.

• L'opérateur Hamiltonien sur \mathcal{B} est défini comme

$$H = \sum_{k \in D} \epsilon_k \hat{n}_k + \frac{U}{2} \sum_{R \in \mathcal{R}} \hat{n}_R (\hat{n}_R - 1) \quad (1)$$

où $\epsilon_k = k^2/2$

(dans des unités où $\hbar = m = 1$).

L'opérateur Hamiltonien sur \mathcal{F} est défini comme

$$H = \sum_{k \in D, \sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} \epsilon_k \hat{n}_{k,\sigma} + U \sum_{R \in \mathcal{R}} \hat{n}_{R\uparrow} \hat{n}_{R\downarrow} \quad (2)$$

On appelle énergies les valeurs propres de H . On appelle état fondamental le vecteur propre de H de plus petite énergie.

Pour un opérateur \hat{A} on note $\langle \hat{A} \rangle$ pour $\langle \psi_0, \hat{A} \psi_0 \rangle$, où ψ_0 désigne l'état fondamental.

Comme d'habitude en physique statistique, on appelle limite thermodynamique la limite : $N, L \rightarrow \infty$ pour une densité $\frac{N}{L^3}$ fixée.

1.2 Gaz parfaits

La physique à température nulle est déterminée par les propriétés de l'état fondamental. A la limite thermodynamique il faut utiliser des méthodes approchées, sauf dans le cas simple du gaz sans interactions ($U = 0$).

• Bosons :

Le Hamiltonien $H = \sum_k \epsilon_k \hat{n}_k$ est clairement diagonal dans la base $|(n_k)\rangle$.

L'état fondamental correspond à

$$n_k = \begin{cases} N & \text{si } k = 0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On dit qu'on a un condensat de Bose-Einstein (CBE) avec une fraction condensée f lorsque

$$\frac{1}{N} \langle \hat{n}_{k=0} \rangle \rightarrow f > 0$$

à la limite thermodynamique.

On a donc un CBE de fraction condensée $f = 1$ pour le gaz parfait.

Cela reste vrai à température non nulle, comme l'a montré Einstein dès 1924. Le phénomène a été observé expérimentalement en 1995, notamment grâce aux techniques de refroidissement par laser.

La superfluidité de l'hélium 4 liquide a par contre été observée dès 1937. (Dans ce cas, on a montré expérimentalement la présence d'un CBE, avec une fraction condensée d'environ $f \simeq 0.1$. Les interactions sont fortes et différent du modèle considéré ici.)

• Fermions :

Le Hamiltonien $H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k \hat{n}_{k,\sigma}$ est diagonal dans la base $|(n_{k\sigma})\rangle$. L'état fondamental correspond à

$$n_{k\sigma} = \begin{cases} 1 & \text{si } \|k\| < k_F \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

(où $k_F = (3\pi^2\rho)^{1/3}$ est tel que $\sum n_{k\sigma} = 1$).

On n'a donc pas de CBE. Cependant un comportement superfluide apparaît en présence d'interactions (2.2.2).

L'énergie de l'état fondamental est (à la limite thermodynamique) :

$$E_F = \frac{3}{5} N \epsilon_{k_F} = \frac{3}{5} N \frac{1}{2} (3\pi^2\rho)^{2/3} \quad (3)$$

2 Rôle des interactions

Dans le cadre du modèle défini ci-dessus sur un réseau de pas l , on peut soit garder l fixé, soit faire tendre l vers 0.

2.1 Systèmes sur réseau

Fixons $l = 1$. A la limite thermodynamique la densité $\frac{N}{L^3}$ est fixée et donc le nombre de particules par site du réseau $n = \frac{N}{(L/l)^3}$ est fixé. Considérons le cas $n = 1$.

Dans cette partie les interactions sont répulsives : $U > 0$.

On prend les hamiltoniens précédents (1), (2) avec

$$\epsilon_k = -2t \cos k.$$

2.1.1 Bosons : transition de Mott

Pour $U = 0$ nous avons vu qu'on a un CBE de fraction condensée $f = 1$. Lorsque la force de l'interaction U augmente, la fraction condensée diminue continument. Lorsque U/t dépasse une valeur critique U_c on a $f = 0$. Le CBE disparaît au profit d'un état dit isolant de Mott.

Dans la limite $U \gg t$ cet état est simple : le hamiltonien se réduit à

$$H \simeq \frac{U}{2} \sum_{R \in \mathcal{R}} \hat{n}_R (\hat{n}_R - 1)$$

qui est diagonal dans la base $|n_R\rangle$.
L'état fondamental correspond à

$$n_R = 1, \forall R \in \mathcal{R}.$$

Ainsi on a une particule localisée sur chaque site du réseau. Par contre dans un CBE, une fraction f des particules se trouve dans l'état $|k=0\rangle$ et sont donc délocalisées sur tout le réseau.

La valeur critique de U est, dans l'approximation dite de champ moyen : $U_c \simeq 35t$ [1].

Cette transition a été observée expérimentalement en 2002 dans un gaz froid, le réseau étant créé physiquement par un potentiel optique.

Pour un nombre de particules par site n non entier, la CBE a par contre lieu pour toute valeur de U . La seule preuve mathématique de CBE pour ce modèle [3] est dans le cas de $n = 1/2$ particule par site, avec $U = \infty$ (i.e. l'espace de Hilbert est engendré par les seuls états $|n_R\rangle$ où $n_R \leq 1$).

2.1.2 Fermions : antiferromagnétisme

Lorsque $t = 0$, $\epsilon_k = 0$ et le hamiltonien fermionique (2) est diagonal dans la base $|n_{i\sigma}\rangle$. L'état fondamental est cette fois dégénéré : sur chaque site R on a soit une particule de spin \uparrow (i.e. $n_{R,\uparrow} = 1, n_{R,\downarrow} = 0$) soit une particule de spin \downarrow (i.e. $n_{R,\uparrow} = 0, n_{R,\downarrow} = 1$).

Pour $t \ll U$ on peut encore considérer qu'il y a une particule par site, mais que leurs spin interagissent par un hamiltonien effectif. Cela favorise les états du type :

$$\begin{array}{ccc} \uparrow & \downarrow & \uparrow \\ \downarrow & \uparrow & \downarrow \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{array}$$

On parle d'état antiferromagnétique (par opposition au ferromagnétisme, où les spins ont tendance à s'aligner). Un tel état existe pour toute valeur de $\frac{t}{U}$. Ce phénomène pourrait être observé pour un gaz d'atomes fermioniques dans un réseau optique (voir mon mémoire de DEA).

2.2 Fermions dans l'espace continu

2.2.1 Deux modèles

Le modèle sur réseau peut également décrire des particules se déplaçant dans \mathbb{R}^3 . Il faut pour cela faire tendre le pas du réseau l vers 0. On fait simultanément tendre la constante de couplage U vers l'infini comme

$$U = -\frac{4\pi a}{l^2(2.442 a - l)}.$$

On peut montrer [5] que les collisions entre particules à basse énergie sont alors correctement décrites. Elles sont caractérisées par le seul paramètre a , appelé longueur de diffusion.

Cependant cette limite $l \rightarrow 0$ pose problème dans le cas des bosons. Considérons l'état à N bosons sur le même site :

$$\phi = |n_R\rangle \quad \text{avec } n_R = \begin{array}{ll} N & \text{si } R = 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{array}$$

Alors $\langle \phi, H\phi \rangle \simeq -2.6 N(N - 2.9) / l^2$. Donc l'énergie de l'état fondamental diverge quand $l \rightarrow 0$ dès que $N \geq 3$.

Dans la suite nous allons donc considérer des fermions. (Pour les bosons, on peut cependant se demander s'il existe des états propres du Hamiltonien, autres que l'état fondamental, dont l'énergie converge).

Pour les fermions les valeurs propres du Hamiltonien semblent converger quand $l \rightarrow 0$. Cela a été vérifié par diagonalisation numérique pour $N = 3$ fermions.

Mais il n'existe pas encore de preuve, ne serait-ce que du fait que l'énergie de l'état fondamental est bornée quand $l \rightarrow 0$.

On attend de plus que le comportement obtenu pour le modèle sur réseau dans cette limite soit le même que pour d'autres modèles.

Ces modèles sont définis directement dans l'espace continu. L'espace des états à une particule est alors l'espace des fonctions L^2 de $[0, L]^3$ dans \mathbb{C} . Les états à N particules sont alors des fonctions de $([0, L]^3)^N$ dans \mathbb{C} .

Pour le modèle du pseudo-potentiel de Fermi, le Hamiltonien est

$$(H\psi)(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \Delta_{r_i} \psi + 4\pi a \sum_{i<j} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \psi_{ij}^{reg}$$

Ici Δ_{r_i} est le Laplacien par rapport à la coordonnée \vec{r}_i , et

$$\psi_{ij}^{reg}(\{\vec{r}_k, k \neq i, j\}, \vec{R}_{ij}) = \lim_{r_{ij} \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r_{ij}} (r_{ij} \psi)$$

où r_{ij} est la norme de $\vec{r}_i - \vec{r}_j$ et où la limite et la dérivée partielle sont prises pour $\{\vec{r}_k, k \neq i, j\}$ et $\vec{R}_{ij} = (\vec{r}_i + \vec{r}_j)/2$ fixés. Le domaine de H est alors restreint par la condition au bord :

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \psi_{ij}^{reg}(\{\vec{r}_k, k \neq i, j\}, \vec{R}_{ij}) \cdot [r_{ij}^{-1} - a^{-1}] + O(r_{ij}).$$

Dans ce modèle on voit (plus aisément que pour le modèle sur réseau) que si $a > 0$ il existe un état lié à deux particules, i.e. un état propre de H d'énergie négative. Cet état est appelé molécule. Son énergie est $\epsilon = -\frac{1}{a^2}$ et son extension spatiale de l'ordre de a . On a également pu calculer la longueur de diffusion pour les collisions entre une molécule et un atome [6], et entre deux molécules : $a_m \simeq 0.6 a$ [7].

On suppose que le spectre de H dans ce modèle est le même que celui du modèle sur réseau (pour $l \rightarrow 0$). Cela a été vérifié pour $N = 2$.

2.2.2 Superfluidité des fermions

Finalement, quel que soit le choix du modèle on souhaite décrire la situation physique suivante : N fermions interagissent par une interaction à courte portée caractérisée par le seul paramètre a . A la limite thermodynamique les seuls paramètres sont donc a et la densité ρ . Le seul nombre sans dimension est ρa^3 .

• Pour $-\frac{1}{\rho a^3} \rightarrow -\infty$: on a un CBE de molécules. En effet la taille des molécules a est alors petite devant la distance moyenne entre particules $\rho^{-\frac{1}{3}}$, de sorte que l'on peut oublier leur structure interne. Les molécules étant composées deux deux

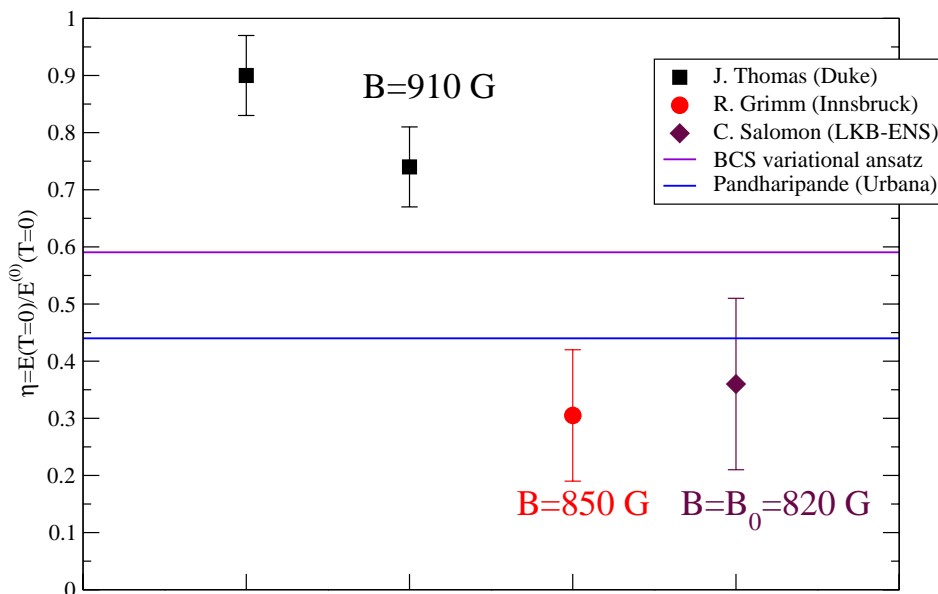


FIG. 2 – Energie E du gaz dans la limite unitaire : bornes supérieures théoriques (lignes droites) et valeurs expérimentales (points).

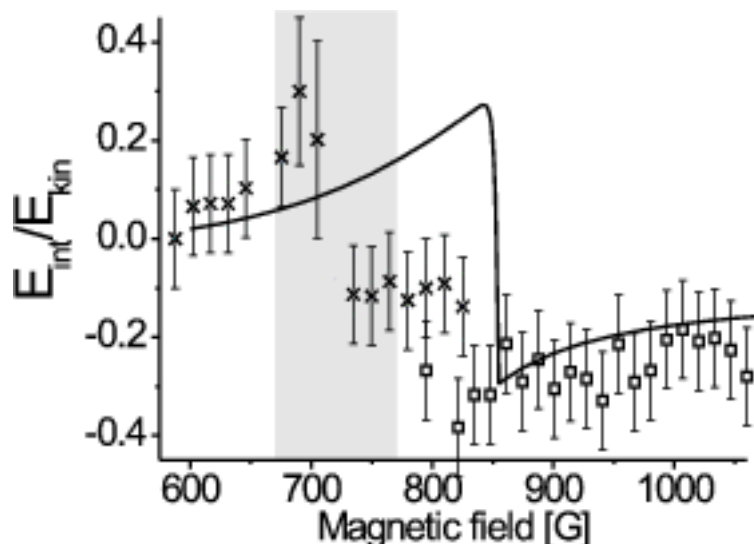
fermions, ce sont des bosons. Comme ils interagissent faiblement ($\rho a_m^3 \ll 1$), ils forment un CBE presque pur.

Notons qu'il a été démontré mathématiquement que N bosons forment un CBE pur dans la limite $N \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$, Na constant, pour un modèle différent de ceux considérés ici (avec un potentiel extérieur harmonique et des interactions répulsives) [4]. Cela était déjà apparent dans les expériences sur des atomes bosoniques.

• Pour $-\frac{1}{\rho a^3} \rightarrow +\infty$: On est dans le domaine de validité de la théorie BCS (développée par Bardeen, Cooper et Schrieffer pour expliquer la supraconductivité). Les atomes forment également des paires, non pas dans l'espace des positions mais dans l'espace des vecteurs d'ondes (on a un état lié formé des états $|k\rangle$ et $|-k\rangle$). Ces paires forment l'analogue d'un CBE. Entre ces deux limites, on est dans un régime d'interactions fortes qui est encore assez peu compris. Le cas $\frac{1}{\rho a^3} = 0$ est appelé limite unitaire. Notons que les deux modèles précédents sont parfaitement définis dans ce cas où $a = \infty$. On a alors plus qu'un seul paramètre ρ , et l'énergie de l'état fondamental s'écrit $E = \eta E^{(0)}$, où $E^{(0)} = E_F$ est l'énergie sans interaction (3), et η est une constante sans dimension. Comme $E \leq \langle \psi, H \psi \rangle, \forall \psi$, on peut de cette façon obtenir des bornes supérieures pour η . En utilisant la fonction d'onde ψ donnée par la théorie BCS on obtient $\eta < 0.59$ [8]. Une théorie plus développée donne $\eta < 0.44$. Les valeurs expérimentales récentes donnent une valeur encore inférieure (Fig.2).

Dans ces expériences, la longueur de diffusion varie en fonction du champ magnétique extérieur B en raison d'une résonance de Feshbach. Au voisinage du champ résonnant B_0 , $-\frac{1}{a}$ varie proportionnellement à $B - B_0$. Ainsi en diminuant B on passe du régime BCS ($-\frac{1}{\rho a^3} \rightarrow +\infty$) au CBE de molécules

FIG. 3 – Mesures expérimentales du rapport entre énergie d'interaction et énergie cinétique en fonction du champ magnétique [9]. Croix : gaz préparé à bas champ. En gris, zone de pertes de particules. Carrés : gaz préparé à haut champ.



($-\frac{1}{\rho a^3} \rightarrow -\infty$) en passant par la limite unitaire. La Fig. 3 montre des mesures de l'énergie du gaz en fonction de B . Pour les faibles valeurs de B , on a un gaz d'atomes en interaction faible. Lorsque l'on augmente B l'énergie d'interaction devient négative ce qui indique la présence de molécules. Elles sont formées par la réaction : 3 atomes \rightarrow 1 molécule + 1 atome. L'énergie libérée par la formation de la molécule conduit à une énergie cinétique élevée des produits de cette réaction, qui peuvent alors quitter le piège optique dans lequel le gaz est enfermé. Ces pertes de particules peuvent être évitées si l'on part au contraire d'une valeur de B supérieure à B_0 . En diminuant B on passe alors par le régime BCS, puis pour $B < B_0$ des molécules sont formées. Ce passage se fait de manière adiabatique : dans le cadre des modèles introduits ci-dessus, le système suit simplement l'état fondamental. C'est ainsi qu'en partant d'un gaz suffisamment froid on a pu produire un condensat de molécules.

Références

- [1] K.Sheshadri *et al*, Europhys.Lett. **22**, 257 (1993)
- [2] M.Greiner, O.Mandel, T.Esslinger, T.W.Hänsch, I.Bloch, Nature **415**, 39 (2002)
- [3] T.Kennedy, E.Lieb, B.Sriram Shastry, Phys.Rev.Lett. **61**,22 (1988)
- [4] E.Lieb, R.Seiringer, Phys.Rev.Lett. **88**(17), 170409 (2002)
- [5] Y.Castin, Cours de l'Ecole d'été des Houches 2003, cond-mat/0407118
- [6] D.S.Petrov, Phys.Rev.A **67**, 010703 (2003)
- [7] D.S.Petrov, C.Salomon, G.V.Shlyapnikov, Phys.Rev.Lett.**93**(9), 090404 (2004)
- [8] M.Randeria dans *Bose-Einstein Condensation*, Cambridge University Press (1995)
- [9] T.Bourdel *et al*, Phys.Rev.Lett. **91**(2), 020402 (2003)