

Opérateur de Boltzmann et pertes à 3 corps d'un gaz de boson ultra-froid

Ducatez Raphael

Professeurs encadrant : Frédéric Chevy et Laure Saint-Raymond

Table des matières

1	Un aperçu de l'expérience	2
1.1	Dispositif expérimental	2
1.2	Interactions entre particules	2
2	Présentation du problème	3
3	Outils pour l'étude mathématique de l'opérateur de Boltzmann	5
3.1	opérateur de collision	5
3.2	Opérateur linéaire de collision	6
4	Calculs semi analytiques	7
5	Modèle non isotrope	8

1 Un aperçu de l'expérience

J'ai réalisé mon stage au laboratoire Kastler Brossel de l'ENS dans une équipe travaillant sur des gaz de bosons et de fermions ultra-froid. A la différence de la plupart des expériences de condensat de Bose-Einstein où les interaction entre atomes sont faibles, cette équipe travaille dans un régime de forte interaction et étudie en particulier la thermodynamique du gaz dans ce régime.

1.1 Dispositif expérimental

Le dispositif expérimental est constitué d'un ralentisseur à effet Zeeman, puis d'une série de pièges magnéto-optiques, magnétiques ou optiques. Le gaz d'atomes (environ 10^9 atomes de lithium 6 ou lithium 7) y est refroidi jusqu'à une température d'environ $10 \mu\text{K}$. La première étape consiste à diriger un laser à "contre courant" d'un jet d'atomes. En absorbant la quantité de mouvement des photons, les atomes sont ralentis. Un champ magnétique variable est utilisé pour compenser l'effet Doppler grâce à l'effet Zeeman de tel sorte que le laser soit en permanence en résonance avec l'atome. La technique suivante est appelée évaporation. les atomes sont placés dans un piège dont la forme est telle que les atomes à haute énergie puisse s'échapper. Les collisions produisent au hasard des atomes à basse énergie et à haute énergie, ces derniers sont éliminés. Le reste du gaz est déplacé dans un piège optique où sont réalisées les expériences.

1.2 Interactions entre particules

A très basse température, les interactions entre particules sont décrites par un potentiel de portée nulle caractérisé par une unique valeur a appelée longueur de diffusion. Les expériences ont été réalisées dans un régime appelé limite unitaire dans lequel cette longueur a est infinie.

A $10 \mu\text{K}$, le gaz est dans un état métastable, l'état stable étant l'état solide. les atomes ont donc tendance à s'associer pour former des molécules. Cela se produit lors de collisions entre au moins trois particules, la troisième particule étant nécessaire pour "emporter" l'énergie libérée durant la formation de la molécule. Le gaz perd ses atomes (Figure 1). Ce phénomène que l'on nommera pertes à trois corps devient important dans la limite unitaire. (figure 2).

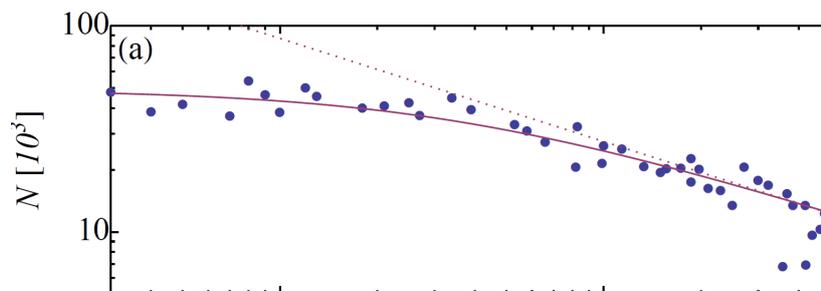


FIGURE 1 – décroissance du nombre de particules en fonction du temps(ms)

Le quantité de collisions entre trois particules varie en $\langle n^3 \rangle$ (densité caractéristique de particule) , aussi on suppose une loi de la forme suivante

$$\langle \dot{n} \rangle = -L_3 \langle n^3 \rangle \quad (1)$$

ou L_3 dépendant de la température (Figure 3) et de la longueur de diffusion (Figure 2).

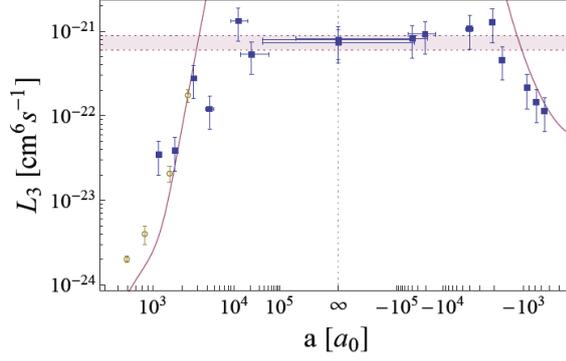


FIGURE 2 – importance des pertes à trois corps en fonction de la longueur de diffusion

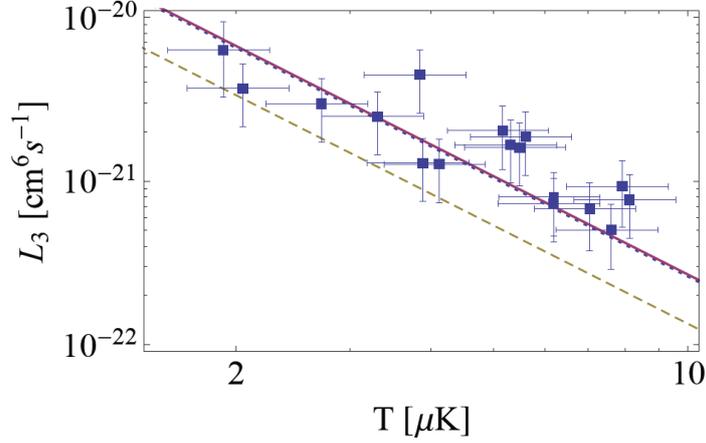


FIGURE 3 – importance des pertes à trois corps en fonction de la température, on observe une dépendance en $1/T^2$

2 Présentation du problème

Notation : $F(p, r, t)$ est la densité dans l'espace des phases, représente le nombre d'atomes par petit volume $d^3p d^3r$

$I[F]$ est l'opérateur décrivant les collisions à entre 2 particules dans la répartition F (ou opérateur de Boltzmann).

$P_3[F]$ est l'opérateur décrivant les pertes à trois corps dans la répartition F .

a longueur de diffusion

σ section efficace

n densité dans l'espace des position.

λ longueur de De Broglie

k_{12} vecteur d'onde lors de collisions à deux particules. Dans le référentiel barycentrique, les impulsions des deux particules peuvent être décrite par un unique vecteur de dimension 3.

k_{123} vecteur d'onde lors de collisions à trois particules. (le vecteur est de dimension 6)

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}} \quad (2)$$

$$p = \hbar k \quad (3)$$

Dans un système homogène sans force extérieure, la dynamique du gaz peut être décrite par l'équation de Boltzmann, L'inconnue est la densité $F(r, p, t)$ dans l'espace des phases. Ici on suppose que le gaz est homogène et on néglige la dépendance en r . La dynamique est régie par les collisions binaires élastiques et les collisions inélastiques à trois corps, selon l'équation.

$$\partial_t F = I[F] - P_3[F] \quad (4)$$

$$P_3[F](p_1) = \int F(p_1)F(p_2)F(p_3)\sigma_{k_{123}}\frac{k_{123}}{m}dp_2dp_3 \quad (5)$$

La théorie quantique des collisions donne la formule suivante pour la section efficace des collisions binaire :

$$\sigma_{k_{12}} = \frac{8\pi a^2}{1 + k_{12}^2 a^2} \quad (6)$$

qui devient dans la limite unitaire

$$\sigma_{k_{12}} = \frac{8\pi}{k_{12}^2} \quad (7)$$

Il existe également une formule théorique pour les collisions inélastiques à trois corps, En accord avec les résultats expérimentaux, on suppose cette limite atteinte

$$\sigma_{k_{123}} \leq \frac{32\pi^2}{k_{123}^5} \quad (8)$$

Les sections efficaces caractérisent l'importance relative des deux phénomènes. On définit en effet deux échelles de temps caractéristiques : le temps de relaxation τ_2 de l'opérateur de Boltzmann et le temps $\tau_3 = (L_3 < n^2 >)^{-1}$ nécessaire pour faire disparaître un nombre significatif d'atome par les pertes à trois corps. Ces temps découlent directement du calcul de section efficaces.

$$\frac{1}{\tau_2} \approx n \frac{h\lambda}{m} \quad (9)$$

$$\frac{1}{\tau_3} \approx n^2 \frac{h\lambda^4}{m} \quad (10)$$

On remarque que

$$\frac{\tau_2}{\tau_3} \approx n\lambda^3 \quad (11)$$

Aussi on n'étudiera pas le gaz dans le domaine de dégénérescence quantique ($n\lambda^3 > 1$).

On se placera dans les limites hautes températures ($n\lambda^3 \ll 1$) où le terme de collisions à 2 corps domine. On linéarise l'équation de Boltzmann autour d'une position de la position d'équilibre $F_0(N, E, p)$ au nombre d'atomes et à l'énergie fixés.

$$F(p, t) = F_0(N(t), E(t), p) + f(p, t) \quad (12)$$

$$I'_{F_0}[f] = P_3[F_0] + \dot{N}\partial_N F_0 + \dot{E}\partial_E F_0 \quad (13)$$

Une bonne partie de mon travail a été de "trouver" une solution approchée de cette équation

3 Outils pour l'étude mathématique de l'opérateur de Boltzmann

Cette partie mathématique est une brève introduction à l'opérateur de collisions de Boltzmann. Outre quelques petites propriétés qui m'ont permis de me familiariser avec cet opérateur, elle explicitera des résultats fondamentaux sur l'opérateur linéaire qui seront utilisés par la suite.

3.1 opérateur de collision

notation :

v, v_1 : les vitesses avant collision

v', v'_1 vitesse après collision

S^{D-1} , la sphère unité plongé en dimension D, (ici D=3)

Durant la collision il y a conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique

$$v + v_1 = v' + v'_1 \quad (14)$$

$$v^2 + v_1^2 = v'^2 + v'_1{}^2 \quad (15)$$

on a alors

$$|v - v_1| = |v' - v'_1|$$

On peut ainsi paramétrer v' et v'_1

$$v' = (v + v_1)/2 + |v - v_1|/2 * \omega \quad (16)$$

$$v'_1 = (v + v_1)/2 - |v - v_1|/2 * \omega \quad (17)$$

avec ω appartenant à S^{D-1} qui indique la direction des molécules sortante

L'opérateur de collision est défini par

$$I[F] = I[F]_+ - I[F]_- \quad (18)$$

$$I[F]_-(v) = \int_{R^D} \int_{S^{D-1}} F(v)F(v_1)|v - v_1|\sigma(|v - v_1|, \omega)dv_1d\omega \quad (19)$$

$$I[F]_+(v) = \int_{R^D} \int_{S^{D-1}} F(v'_1)F(v')|v - v_1|\sigma(|v - v_1|, \omega)d\omega dv_1 \quad (20)$$

notation :

$I[F]$: opérateur de collision

$I[F]_-$ terme de perte de l'opérateur de diffusion

$I[F]_+$ terme de gain de l'opérateur de diffusion

G : une gaussienne

ϕ : une fonction quelconque. σ : dans notre problème correspond à la section efficace.

Propriété 1 : les gaussiennes annulent l'opérateur de collisions (il faut utilisé le théorème H de Boltzmann pour montrer que ce sont les seules)

Propriété 2 : lors d'une intégration sur tout l'espace des vitesses, les vitesses v, v', v_1, v'_1 ont un rôle symétrique

$$\int_{R^D} -I[F](v)\phi(v) = \frac{1}{2} \int_{R^D} \int_{R^D} \int_{S^{D-1}} F(v)F(v_1)|v - v_1|\sigma(|v - v_1|, \omega)(\phi(v) + \phi(v_1) - \phi(v') - \phi(v'_1))dv dv_1 d\omega \quad (21)$$

Propriété 3 : Lemme d'unicité Le nombre de particules la quantité de mouvement et l'énergie sont les seuls moments qui soient toujours conservés (à combinaison linéaire près).

(Je marque cette démonstration car elle est de mon cru et qu'elle est plus simple que la démonstration originale). Démonstration : une fonction $\phi \in C^\infty$ ayant cette propriété doit vérifier

$$\forall v, v_1 \int_{S^{D-1}} (\phi(v) + \phi(v_1) - \phi(v') - \phi(v_1')) \sigma(|v - v_1|, \omega) d\omega = 0 \quad (22)$$

cela signifie d'après la symétrie de l'intégrale qu'il existe une fonction ψ

$$\phi(v) + \phi(v_1) = \psi(v + v_1, v^2 + v_1^2) \quad (23)$$

en dérivant par rapport à v_1 en 0, la dérivée de ψ en fonction du premier terme est constant.

$$\phi(v) + \phi(0) + d\phi(0)(v_1) = \psi(v, v^2) + \partial_1 \psi(v, v^2)(v_1) \quad (24)$$

donc $\forall v \ d_1 \psi(v, v^2) = d\phi(0)$ Les dérivés secondes de ϕ en fonction de la première variable sont nulles (Schwartz), en prolongeant le développement à l'ordre 2 en v_1 , la dérivé seconde de ψ est constante (notation :H est la Hessienne)

$$H\phi(0)(v_1, v_1) = \partial_2 \psi(v, v^2)(v_1^2) \quad (25)$$

conclusion

$$\phi(v) = \psi(0, 0) + \partial_1 \psi(0, 0)(v) + \partial_2 \psi(0, 0)(v^2) \quad (26)$$

3.2 Opérateur linéaire de collision

Soit F une répartition proche d'une gaussienne G, écrite sous la forme $G(1 + h)$ avec $h \ll 1$

$$I[G(1 + h)](v) \approx \int_{R^D} \int_{S^{D-1}} G(v)G(v_1)(-h(v) - h(v_1) + h(v') + h(v_1'))|v - v_1| \sigma(|v - v_1|, \omega) dv d\omega \quad (27)$$

On définit

$$L_G(h) = \frac{I'[Gh]}{G} \quad (28)$$

On étudiera L_G dans $L^2(G(v)dv)$ avec le produit scalaire :

$$\langle h|g \rangle = \int_{R^D} h(v)g(v)G(v)dv \quad (29)$$

Propriété 1 L_G est symétrique pour ce produit scalaire

$$\langle h|L_G(g) \rangle = \langle g|L_G(h) \rangle \quad (30)$$

Démonstration

$$\begin{aligned} & \int_{R^D} h(v)L_G(g)G(v)dv = \\ & \frac{1}{4} \int_{R^D} \int_{R^D} \int_{S^{D-1}} G(v)G(v_1)(-g(v) - g(v_1) + g(v') + g(v_1'))(h(v) + h(v_1) - h(v') - h(v_1'))|v - v_1| \\ & \sigma(|v - v_1|, \omega) dv d\omega \quad (31) \end{aligned}$$

Propriété 2 L_G est positive

$$\langle h | L_G(h) \rangle \geq 0 \quad (32)$$

Démonstration : on utilise la forme symétrique

Propriété 3 Le noyau de L_G est engendré par $(1, v_1, v^2)$

Démonstration : on utilise le lemme d'unicité.

Théorème de compacité l'opération linéarisé peut se décomposer en deux parties : un premier terme

$$\int_{R^D} \int_{S^{D-1}} G(v_1)(-f(v))|v - v_1|\sigma(|v - v_1|, \omega) dv_1 d\omega \quad (33)$$

qui peut être écrit sous la forme $f(v)h(v)$, et le reste

$$\int_{R^D} \int_{S^{D-1}} G(v_1)(-f(v_1) + f(v') + f(v'_1))|v - v_1|\sigma(|v - v_1|, \omega) dv_1 d\omega \quad (34)$$

Théorème la deuxième partie de l'opérateur est un opérateur compact dans $L^2(Gdv)$

4 Calculs semi analytiques

Dans cette partie on cherchera une solution approchée de l'équation

$$L_G[h] = \frac{1}{G} P_3[G] + \dot{N} \partial_N \ln(G) + \dot{E} \partial_E \ln(G) \quad (35)$$

La partie pratique de mon stage a été essentiellement tournée vers cet objectif.

On va utiliser les polynômes de Hermite sphérique (H_n) qui forme un base orthogonale dans $L^2(Gdp)$. Les deux premiers polynômes engendrent le noyau de L_G et la condition d'énergie nulle et de nombre de particule nulle de f revient à dire que f n'admet pas de projection sur H_0 et H_1 . On projette l'équation sur l'orthogonal, ce qui donne une équation linéaire

$$\sum_{j=2}^{\infty} [L_G]_{i,j} [h]_j = [P]_i \quad (36)$$

notation :

$$[L_G]_{i,j} = \langle H_i | L_G | H_j \rangle$$

$$[h]_i = \langle h | H_i \rangle$$

$$[P]_i = \langle P_3[G] | H_i \rangle$$

h_n : solution de l'équation lorsque de l'on tronque la matrice à la dimension $n \times n$

Pour résoudre le problème, on tronque à un ordre suffisamment élevé et on inverse la matrice avec Mathematica. Cette méthode a soulevé quelques questions, la matrice tronquée est-elle toujours inversible ? y a t il convergence des solutions ?

La démonstration de première question nécessite d'utiliser les résultats de noyau, symétrie et de positivité de la partie précédente. En effet, la matrice tronquée est toujours symétrique définie positive.

Je n'ai pas trouvé de démonstration de la deuxième question, mais je pense qu'il faut utiliser le théorème de compacité, et discuter de la continuité et du spectre de L_G .

On souhaite évaluer l'écart de la solution par rapport à la répartition d'équilibre. D'un point de

vue thermodynamique cet écart est matérialisé par le calcul de l'entropie.

$$S = - \int_{R^D} \ln(F) F dp \quad (37)$$

ce qui donne au deuxième ordre

$$S = \int_{R^D} \ln(G) G dp - \int_{R^D} \frac{f^2}{2G} = S_0 - N \frac{\langle h|h \rangle}{2} \quad (38)$$

Voici les 10 premiers termes de la suite $\langle h_n|h_n \rangle$

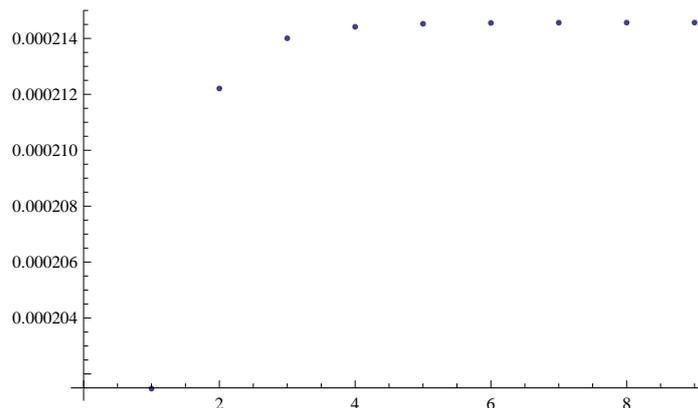


FIGURE 4 – $\langle h_n|h_n \rangle$ en fonction de la taille n de la matrice tronquée

(les calculs ont été effectués sans dimension)

Empiriquement, la méthode semble bien fonctionner.

5 Modèle non isotrope

Le but de cette partie est d'affiner le modèle précédent en prenant en compte la géométrie de l'expérience. Le piège optique n'est pas isotrope, on le modélise avec un potentiel harmonique de fréquence assez faible suivant z (17Hz) et relativement plus important suivant x et y (600 Hz).

$$\partial_t F + v \cdot \partial_r F + \frac{\partial_r E_p}{m} \partial_v F = I[F] - P_3[F] \quad (39)$$

notation :

E_p est l'énergie potentiel dans le piège.

$$E_p = \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$$

On pourra s'intéresser à la dissymétrie de la solution de notre problème en définissant des températures différentes entre la direction z et les directions x, y . (Les températures sont définies suivant la variance des gaussiennes)

Lors de notre étude avec les polynômes de Hermite, nous avons remarqué que le premier terme donnait déjà une bonne approximation de la solution. (à quelque pour-cent du résultat

asymptotique) . aussi on s'est permis de ne considérer dans cette étude que les polynômes de degré inférieur ou égal à 2.

Si on considère dans un premier temps que le piège est isotrope ($\omega_x = \omega_z = \omega_y = \omega_0$), sans collisions à deux ou trois corps, les moments suivant forment un système d'équation différentielles fermé

$$\partial_t \langle\langle Fr^2 \rangle\rangle = 2 \langle\langle Fr.v \rangle\rangle \quad (40)$$

$$\partial_t \langle\langle Fv.r \rangle\rangle = -\omega_0^2 \langle\langle Fr^2 \rangle\rangle + \langle\langle Fv^2 \rangle\rangle \quad (41)$$

$$\partial_t \langle\langle Fv^2 \rangle\rangle = -2\omega_0^2 \langle\langle Fr.v \rangle\rangle \quad (42)$$

notation : « $\rangle\rangle$ intégrale sur tout l'espace des phases (vitesse et position)

On remplace ∂_t par le terme de droite de notre l'équation, puis on linéarise ce système pour obtenir un système linéaire en les moments de f . il suffit alors de calculer les moments du terme de pertes à trois corps et de résoudre ce système.

$$\sum_{i=0}^T M_{i,j} \langle\langle f\chi_i \rangle\rangle = \langle\langle I'_G[f]\chi_j \rangle\rangle - \langle\langle P_3[G]\chi_j \rangle\rangle - \langle\langle \dot{N}\partial_N G\chi_j \rangle\rangle - \langle\langle \dot{E}\partial_E G\chi_j \rangle\rangle \quad (43)$$

notation T est la taille du système (dans l'exemple $T = 3$)

Dans le cas non isotrope, on considèrera les moments :

$$\chi_1 = r^2 \quad (44)$$

$$\chi_2 = 2 * z^2 - r_X^2 \quad (45)$$

$$\chi_3 = r.v \quad (46)$$

$$\chi_4 = 2z.v_z - r_X.v_X \quad (47)$$

$$\chi_5 = v^2 \quad (48)$$

$$\chi_6 = 2v_z^2 - v_X^2 \quad (49)$$

La méthode est la même, la matrice du système linéaire se trouve dans l'annexe. On trouve après calculs, comme différence température :

$$\delta T = \left(\frac{2A\beta_0 n^2 \tau_2}{9\sqrt{3}m} + \frac{2A\beta_0 n^2 \tau_2 w t^2}{9\sqrt{3}m w z^2} - \frac{4A\beta_0 n^2 \tau_2 w z^2}{9\sqrt{3}m w t^2} \right) * m/k_b;$$

Qui dans les conditions de l'expérience donnait $2,4nK$ ce qui reste assez petit par rapport à la température moyenne 10μ K. En conclusion la dissymétrie entre z et x,y n'est pas trop importante.

Remerciements Je remercie très chaleureusement Frédéric Chevy et Laure Saint-Raymond pour m'avoir encadré durant ce stage, ainsi que toute l'équipe du laboratoire Kastler Brossel.

bibliographie "Boltzmann equation and its hydrodynamic limits" FRANCOIS GOLSE
"Is there such a thing as unitary Bose gas?" P.Stibbons, E. Smith. J.Hix and M Ridcully
"irréversibilité et entropie" Cédric Villani
"particules indiscernables en mécanique quantique" Frédéric Chevy
"Collective oscillations of a classical gas confined in harmonic traps" David Guery-Odelin, Francesca Zambelli, Jean Dalibard, Sandro Stringari

ANNEXE

Théorème H l'entropie augmente.

Démonstration :

$$\begin{aligned}
 & - \int_{R^D} I(F)(v) \ln(F(v)) dv = \\
 & \frac{1}{4} \int_{R^D} \int_{R^D} \int_{S^{D-1}} (F(v)F(v1) - F(v')F(v1')) |v - v1| \sigma(|v - v1|, \omega) (\ln(F(v)) + \ln(F(v1)) \\
 & \qquad \qquad \qquad - \ln(F(v')) - \ln(F(v1'))) dv dv_1 d\omega \quad (50)
 \end{aligned}$$

et $(\ln(F(v)F(v1)) - \ln(F(v')F(v1')))(F(v)F(v1) - F(v')F(v1')) \geq 0$

Seules les répartitions gaussiennes permettent une valeur nulle (on utilise le lemme d'unicité.)

Matrice $[L_G]_{i,j}$ tronquée à $n = 6$

$$\begin{pmatrix}
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -\frac{256\sqrt{\pi}}{45} & -\frac{64\sqrt{2\pi}}{15} & -\frac{32\sqrt{\pi}}{15} & -\frac{8\sqrt{10\pi}}{9\sqrt{231}} \\
 0 & 0 & -\frac{64\sqrt{2\pi}}{15} & -\frac{288\sqrt{\pi}}{35} & -\frac{8\sqrt{2\pi}}{5} & -\frac{428\sqrt{\frac{\pi}{55}}}{63} \\
 0 & 0 & -\frac{32\sqrt{\pi}}{15} & -\frac{8\sqrt{2\pi}}{5} & -\frac{14908\sqrt{\pi}}{1575} & -\frac{533\sqrt{2\pi}}{35\sqrt{55}} \\
 0 & 0 & -\frac{8\sqrt{10\pi}}{9\sqrt{231}} & -\frac{428\sqrt{\frac{\pi}{55}}}{63} & -\frac{533\sqrt{2\pi}}{35\sqrt{55}} & -\frac{209863\sqrt{\pi}}{20790}
 \end{pmatrix}$$

Vecteur des pertes à trois corps n=10

$$\left\{ \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{35}}{6}, \frac{5}{6\sqrt{2}}, \frac{\sqrt{10349}}{54}, \frac{\sqrt{93841}}{162}, \frac{\sqrt{73183}}{54}, \frac{\sqrt{35601973}}{972}, \frac{\sqrt{8654482639}}{26244}, \frac{\sqrt{8655707863}}{26244}, \frac{\sqrt{856962107237}}{78732} \right\}$$

Matrice donnant le système linéaire des moments

$$M2 = \begin{pmatrix}
 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\
 (2wt^2 + wz^2)/3 & -(wt^2 - wz^2)/3 & 0 & 0 & -1 & 0 \\
 (-2wt^2 + 2wz^2)/3 & (wt^2 + 2wz^2)/3 & 0 & 0 & 0 & -1 \\
 0 & 0 & (4wt^2 + 2wz^2)/3 & (-2wt^2 + 2wz^2)/3 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & (-4wt^2 + 4wz^2)/3 & (2wt^2 + 4wz^2)/3 & 0 & -1/\tau_2
 \end{pmatrix}$$