

Développement du viriel du gaz de Bose à la limite unitaire

Examen de physique statistique et évolution des systèmes quantiques

M1 PHYTEM 2012-2013

Alice Sinatra et Jérôme Beugnon

25 janvier 2013

Dans les gaz d'atomes froids, les interactions peuvent être modélisées par un potentiel de portée nulle caractérisé par un seul paramètre a , la longueur de diffusion dans l'onde s . À l'aide d'un champ magnétique extérieur, on peut changer la valeur de a et donc la force des interactions dans les gaz. Le gaz unitaire correspond à $a = \infty$. Dans ce sujet d'examen nous allons calculer les changements des grandeurs thermodynamiques par rapport au gaz parfait induits par ces interactions fortes, pour un gaz de bosons faiblement dégénéré.

Nous considérons le cas, correspondant aux expériences, d'un gaz piégé dans un potentiel harmonique. À la fin de l'exercice nous allons retrouver le cas d'un système homogène dans la limite d'une fréquence d'oscillation dans le piège qui tend vers zéro.

1 Développement du grand potentiel

Soit $\Omega = -k_B T \ln \Xi$ le grand potentiel, dans l'ensemble grand canonique donc. Soit Ξ la fonction de partition grand canonique et Z_N la fonction de partition canonique pour un système à N particules. Comme paramètres de l'ensemble grand canonique on introduira $z = e^{\beta\mu}$ la fugacité, et $\beta = 1/(k_B T)$ l'inverse de la température.

Dans la limite de faible dégénérescence on développe Ω en puissances de z

$$\Omega = -k_B T Z_1 \sum_{n \geq 1} B_n z^n \quad (1)$$

Le coefficient B_n est appelé "cumulant d'ordre n ".

1. Exprimer la fonction de partition grand canonique Ξ en fonction de la fugacité z et des fonctions de partition canoniques Z_N . Dans la somme sur les états on n'oubliera pas le vide (l'état avec zéro particule).

2. En identifiant ordre par ordre les puissances de z dans (1) et dans $\Omega = -k_B T \ln \Xi$, montrez que

$$B_1 = 1 \quad ; \quad B_2 = \frac{Z_2}{Z_1} - \frac{Z_1}{2} \quad (2)$$

Notre but est de calculer B_2 .

1.1 Gaz parfait

Dans cette sous-section on considère un gaz de bosons sans interaction. On nomme $|\lambda\rangle$ les états propres du Hamiltonien à une particule et ϵ_λ les énergies propres correspondantes. L'exposant "GP" pour les différentes quantités rappelle qu'il s'agit d'un gaz parfait.

3. Expliquer pourquoi $Z_1 = Z_1^{GP}$.
4. En partant de sa définition, écrire explicitement Z_2^{GP} comme une somme sur les états propres du Hamiltonien à une particule. On fera attention au fait que les particules sont indiscernables.
5. Exprimer Z_2^{GP} en fonction de $Z_1(\beta)$ et de $Z_1(2\beta)$
6. Calculez $Z_1(\beta)$ pour un atome piégé dans un potentiel harmonique isotrope à trois dimensions. La pulsation de l'oscillation de l'atome dans le potentiel est ω . On fera le calcul exact en gardant la somme.
7. Calculez B_2^{GP} , deuxième cumulant pour le gaz parfait piégé en fonction de $x \equiv \beta \hbar \omega$. On exprimera le résultat en termes de $\text{ch}(x/2)$.

1.2 Cas avec interactions

On considère dans cette sous-section le cas avec interaction. Le Hamiltonien pour un système de N particules est de la forme

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(\hat{r}_i - \hat{r}_j) + \frac{1}{2} m \omega^2 \sum_{i=1}^N \hat{r}_i^2 \quad (3)$$

Il convient d'introduire l'écart au gaz parfait des différentes quantités : $\Delta B_2 \equiv B_2 - B_2^{GP}$ et $\Delta Z_2 \equiv Z_2 - Z_2^{GP}$. Pour calculer ΔZ_2 et donc ΔB_2 , il nous faudra le spectre du système à deux particules.

8. Montrer que $\Delta B_2 = \frac{\Delta Z_2}{Z_1}$.
9. Dans le problème à deux corps, on introduit les variables du centre de masse \hat{R} et \hat{P} et les variables du mouvement relatif \hat{r} et \hat{p} :

$$\hat{R} = \frac{\hat{r}_1 + \hat{r}_2}{2} \quad \hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \quad (4)$$

$$\hat{r} = \hat{r}_1 - \hat{r}_2 \quad \hat{p} = \frac{\hat{p}_1 - \hat{p}_2}{2} \quad (5)$$

Pour un potentiel d'interaction symétrique $V(\hat{r}_i - \hat{r}_j) = V(\hat{r}_j - \hat{r}_i)$ réécrivez le Hamiltonien à deux corps en termes des nouvelles variables et montrer que le centre de masse se découple du mouvement relatif. On introduira $M = 2m$ la masse totale et $m_r = m/2$ la masse réduite.

10. Expliquer pourquoi on peut alors écrire Z_2 comme un produit $Z_2 \equiv Z_2^{CM} Z_2^{\text{rel}}$ avec Z_2^{CM} et Z_2^{rel} qui peuvent être calculés comme des fonctions de partition à une particule. Ici l'exposant "CM" dénote une quantité reliée au mouvement du centre de masse et l'exposant "rel" dénote une quantité reliée au mouvement relatif.
11. Montrer que $\Delta B_2 = \Delta Z_2^{\text{rel}}$.

2 Fonction d'onde du mouvement relatif, conditions aux limites pour $r \rightarrow 0$, et spectre

2.1 Équation de Schrödinger

On considère le Hamiltonien suivant pour le mouvement relatif

$$\hat{H}^{\text{rel}} = \frac{\hat{p}^2}{2m_r} + \hat{V} + \frac{1}{2}m_r\omega^2\hat{r}^2 \quad (6)$$

\hat{V} est le potentiel d'interaction de portée nulle régularisé que nous avons introduit en cours

$$(\hat{V}\psi)(\vec{r}) = g\delta(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}(r\psi(\vec{r})) \quad \text{avec} \quad g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (7)$$

a étant la longueur de diffusion dans l'onde s du potentiel modèle (égale à celle du vrai potentiel). On rappelle que $V(\vec{r})$ préserve la symétrie sphérique du Hamiltonien.

12. Soit $\psi(\vec{r})$ une solution de l'équation de Schrödinger $\hat{H}^{\text{rel}}\psi = E\psi$. En coordonnées sphériques on peut récrire l'équation comme

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{L}^2}{2m_r r^2} + \hat{V} + \frac{1}{2}m_r\omega^2 r^2 \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (8)$$

où $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ est le moment cinétique.

Expliquer pourquoi on peut considérer des solutions à moment cinétique fixé de la forme $\psi(\vec{r}) = R_l(r)Y_l^m(\theta, \phi)$ où les $Y_l^m(\theta, \phi)$ sont les harmoniques sphériques et la fonction radiale $R_l(r)$ dépend de l .

2.2 Conditions aux limites pour $l \neq 0$

Dans cette sous-section on considère les solutions de (8) avec un moment cinétique non nul $l \neq 0$.

2.2.1 Gaz parfait ($l \neq 0$)

13. On considère d'abord le système sans interaction. Montrer que pour $r \rightarrow 0$ la partie radiale de la fonction d'onde s'annule en r^l :

$$R_{l \neq 0}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} Cr^l \quad (9)$$

On posera $R_{l \neq 0}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} Cr^s$, avec s à déterminer, et on écrira l'équation de Schrödinger (8) dans la limite $r \rightarrow 0$. On rejettera les solutions qui divergent en $r = 0$.

2.2.2 Gaz en interaction ($l \neq 0$)

14. À partir du résultat (9) expliquer pourquoi les interactions n'ont pas d'effet sur les états propres du gaz parfait avec $l \neq 0$ et conclure que ces états restent états propres aussi dans le cas avec interaction.
15. En déduire que, dans le calcul de ΔZ_2^{rel} , on peut se restreindre aux états de moment cinétique nul.

2.3 Conditions aux limites et spectre pour $l = 0$

Dans cette sous-section on considère les solutions de (8) avec un moment cinétique nul $l = 0$, on parle dans ce cas d'onde s . On rappelle que $Y_0^0(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi}$.

2.3.1 Gaz parfait ($l = 0$)

Nous considérons dans cette sous-sous-section le système sans interaction. On introduit la fonction $u(r)$ telle que

$$R_0(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (10)$$

16. Ecrire l'équation satisfaite par $u(r)$ et montrer que l'on se ramène à un problème d'oscillateur harmonique à une dimension.
17. En considérant les conditions aux limites que doit satisfaire $u(r)$ quand $r \rightarrow 0$, montrer que le spectre du Hamiltonien (8), pour $l = 0$ et sans interaction, est donné par

$$\epsilon_n^{\text{GP}} = \hbar\omega \left(2n + \frac{3}{2} \right) \quad \text{avec } n \text{ entier naturel} \quad (11)$$

2.3.2 Gaz en interaction ($l = 0$)

18. Dans le cas avec interaction, pour $r \rightarrow 0$ la fonction radiale se comporte ainsi :

$$R_0(r) \underset{r \rightarrow 0}{=} \frac{A}{r} + B + o(1) \quad (12)$$

En utilisant pour $R_0(r)$ l'expression (12), calculer, au sens des distributions, l'action du laplacien et du potentiel d'interaction qui apparaissent dans (8), sur un état propre $\psi(\vec{r})$. On rappelle que $\Delta(\frac{1}{r}) = -4\pi\delta(\vec{r})$.

19. Montrer que, pour faire disparaître les delta de Dirac de l'équation précédente, il faut imposer $A = -aB$ où a est la longueur de diffusion dans l'onde s introduite dans l'équation (7) si bien que

$$R_0(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} A \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right) + o(1) \quad (13)$$

On remarquera que la relation (13) impose une condition aux limites à la fonction d'onde en $r = 0$. D'autre part, si ces conditions sont satisfaites, le potentiel d'interaction (qui agit seulement pour $r \rightarrow 0$) disparaît du problème. Autrement dit, le potentiel de portée nulle que nous avons introduit est équivalent à la condition aux limites (13).

20. On souhaite maintenant calculer le spectre, pour le cas avec interaction et $l = 0$ dans la limite unitaire $a = \infty$. Comme précédemment, on introduit la fonction $u(r)$ définie par la relation (10). Quelle condition aux limites doit alors satisfaire $u(r)$ en $r = 0$?
21. Montrer que le spectre du Hamiltonien (8), pour $l = 0$ et en présence d'interactions à la limite unitaire $a = \infty$, est donné par

$$\epsilon_n = \hbar\omega \left(2n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{avec } n \text{ entier naturel} \quad (14)$$

3 Calcul de B_2 pour le gaz unitaire piégé

22. En utilisant les résultats (11) et (14) montrer que

$$\Delta Z_2^{\text{rel}} = \frac{e^{x/2}}{e^x + 1} \quad \text{avec } x = \beta\hbar\omega \quad (15)$$

23. En utilisant le fait que $\Delta B_2 = \Delta Z_2^{\text{rel}}$ et le résultat pour B_2^{GP} obtenu à la question 7, écrire B_2 en fonction de x .

4 Calcul de B_2 pour le gaz unitaire homogène et lien avec l'équation d'état

On appelle b_n le cumulatif d'ordre n pour le système spatialement homogène si bien que

$$\Omega^{(\text{hom})} = -k_B T Z_1^{(\text{hom})} \sum_{n \geq 1} b_n z^n \quad (16)$$

Comme le raisonnement de section 1 est général, on a $b_1 = 1$. On peut déduire b_2 de B_2 en prenant la limite dite "de densité locale" pour une raideur du piège tendant vers zéro.

Dans cette limite, on considère le système inhomogène (ici le système piégé) comme un ensemble de petits systèmes localement homogènes de volume δV et de potentiel chimique local

$$\mu_{\text{loc}}(\vec{r}) = \mu - \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad (17)$$

Dans cette formule μ est le vrai potentiel chimique du système piégé.

Pour le système δV localement homogène on écrit donc

$$\delta\Omega_{\text{loc}}(\vec{r}) = -k_B T Z_1^{(\text{hom})} \sum_{n \geq 1} b_n e^{\beta \mu_{\text{loc}}(\vec{r}) n} \quad (18)$$

24. Calculer $Z_1^{(\text{hom})}$ pour une particule dans une boîte cubique de volume δV avec conditions aux limites périodiques, en remplaçant la somme sur les états par une intégrale. On introduira la longueur d'onde de de Broglie thermique

$$\lambda_{dB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} \quad (19)$$

25. Déterminer le comportement pour $\beta\hbar\omega \rightarrow 0$ du Z_1 du système piégé.
 26. En égalisant le grand potentiel (1) du système piégé avec la somme des contributions infinitésimales $\delta\Omega_{\text{loc}}(\vec{r})$ montrer que

$$b_n = n^{3/2} \lim_{\beta\hbar\omega \rightarrow 0} B_n \quad (20)$$

27. Calculer b_2 pour le gaz homogène avec $a = \infty$.
 28. Pour le cas homogène, on va faire le lien avec l'équation d'état et les coefficients du viriel. En se limitant à l'ordre deux inclus en z , écrire le produit PV , où P est la pression et V le volume, en fonction de $k_B T$, V , λ_{dB} , b_2 , et z .
 29. Sachant que

$$N = z \frac{\partial}{\partial z} \ln \Xi \quad (21)$$

et en se limitant à l'ordre deux inclus en z , écrire N en fonction de V , λ_{dB} , b_2 et z

30. En déduire qu'au premier ordre en z

$$PV = Nk_B T(1 - b_2 z) = Nk_B T(1 - b_2 \rho \lambda_{dB}^3) \quad (22)$$

avec $\rho = N/V$. La relation (22) représente le développement du viriel à l'ordre deux d'un gaz de Bose.

31. Donner la valeur de b_2 pour le gaz parfait. Comparer la relation (22) correspondante à un résultat du cours.