Examen final : Transition de phases

Correction

Équation de Gross-Pitaevski

Fonctionnelle de l'énergie [9]

1. [**3**] On applique le calcul de la valeur moyenne

$$E_c = -\frac{\hbar^2}{2m}\int\cdots\int \phi^*(\vec{r}_1)\cdots\phi^*(\vec{r}_N)\sum_{i=1}^{N}\Delta_{\vec{r}_i}\phi(\vec{r}_1)\cdots\phi(\vec{r}_N)\,d\vec{r}_1\,\cdots\,d\vec{r}_N \tag{1}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\int\cdots\int\prod_{j\neq i}d\vec{r}_j\,|\phi(\vec{r}_j)|^2\int\phi^*(\vec{r}_i)\Delta\phi(\vec{r}_i)\,d\vec{r}_i \tag{2}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}N\left\{\int_\partial \vec{n}(\vec{s})\cdot\phi^*(\vec{s})\vec{\nabla}\phi(\vec{s})d\vec{s} - \int\vec{\nabla}\phi^*(\vec{r})\cdot\vec{\nabla}\phi(\vec{r})\,d\vec{r}\right\} = N\frac{\hbar^2}{2m}\int\left|\vec{\nabla}\phi(\vec{r})\right|^2 d\vec{r} \tag{3}$$

en utilisant la normalisation de ϕ et des termes de bords nuls. De même, pour le partie potentielle, on obtient

$$E_p = N\int V(\vec{r})|\phi(\vec{r})|^2 d\vec{r}\,. \tag{4}$$

2. [**2**] Il y a $N(N-1)$ termes dans la double somme

$$E_i = \frac{g}{2}\int\cdots\int\phi^*(\vec{r}_1)\cdots\phi^*(\vec{r}_N)\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N}\delta(\vec{r}_i-\vec{r}_j)\phi(\vec{r}_1)\cdots\phi(\vec{r}_N)\,d\vec{r}_1\,\cdots\,d\vec{r}_N \tag{5}$$

$$= \frac{g}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N}\int\cdots\int\prod_{k\neq i,j}d\vec{r}_k\,|\phi(\vec{r}_k)|^2\int\phi^*(\vec{r}_i)\phi^*(\vec{r}_j)\delta(\vec{r}_i-\vec{r}_j)\phi(\vec{r}_i)\phi(\vec{r}_j)\,d\vec{r}_i d\vec{r}_j \tag{6}$$

$$= \frac{g}{2}N(N-1)\int|\phi(\vec{r})|^4\,d\vec{r} \simeq \frac{g}{2}N^2\int|\phi(\vec{r})|^4\,d\vec{r} \tag{7}$$

3. [**1**] Il s'agit d'un multiplicateur de Lagrange qui permet de prendre en compte la contrainte de normalisation pour ϕ. Dans l'énergie extensive, on prend ce paramètre extensif, de la forme μN. On peut montrer que μ est bien le potentiel chimique
4. [**2**] On applique la minimisation fonctionnelle par rapport à ϕ^* en écrivant

$$E[\phi,\phi^*] = N\int\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\phi^*\nabla\phi + V(\vec{r})\phi^*\phi + N\frac{g}{2}{\phi^*}^2\phi^2\right\}d\vec{r} \quad \text{et} \quad \mu N\int\phi^*\phi d\vec{r} \tag{8}$$

ce qui donne (la minimisation $\frac{\delta G}{\delta\phi} = 0$ donne l'équation conjuguée)

$$\frac{\delta G}{\delta\phi^*} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi + V(\vec{r})\phi + gN\phi^*\phi^2 - \mu\,\phi = 0 \tag{9}$$

en introduisant $\psi(\vec{r}) = \sqrt{N}\phi(\vec{r})$ pour faire disparaître N, on obtient

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) + g|\psi(\vec{r})|^2\right]\psi(\vec{r}) = \mu\,\psi(\vec{r}) \tag{10}$$

5. **[1]** Physiquement, toutes les particules sont dans le même état et la probabilité pour une particule d'être en $\vec{r}$ est donnée par $|\phi|^2$ donc en additionnal les probabilités de chaque particule on obtient

$$n(\vec{r}) = N|\phi(\vec{r})|^2 = |\psi(\vec{r})|^2 \tag{11}$$

Par le calcul

$$n(\vec{r}) = \int \cdots \int \phi^*(\vec{r}_1) \cdots \phi^*(\vec{r}_N) \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \phi(\vec{r}_1) \cdots \phi(\vec{r}_N)\, d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N = \sum_{i=1}^{N} |\phi(\vec{r})|^2 = N|\phi(\vec{r})|^2 \tag{12}$$

Approche variationnelle pour un piège harmonique [9]

6. **[3]** Pour la partie cinétique, les trois termes sont identiques selon x, y et z et $\dfrac{\partial \phi}{\partial x} = -\dfrac{x}{\eta^2\sigma^2}\phi$, d'où

$$E_c(\eta) = \frac{\hbar^2}{2m} N \times 3 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2}{(\eta^2\sigma^2)^2} g_{\eta\sigma}(x)dx \times \int_{-\infty}^{+\infty} g_{\eta\sigma}(x)dx \times \int_{-\infty}^{+\infty} g_{\eta\sigma}(x)dx = N \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{2} \frac{1}{\eta^2\sigma^2} \tag{13}$$

Pour la partie potentielle

$$E_p(\eta) = N\frac{1}{2}m\omega^2 \times 3 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 g_{\eta\sigma}(x)dx = N\frac{3}{2}m\omega^2 \frac{\eta^2\sigma^2}{2} \tag{14}$$

et la partie interaction

$$E_{\text{int}}(\eta) = N\frac{g}{2}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} g_{\eta\sigma}^2(x)dx\right)^3 = N^2 \frac{g}{2(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\eta^3\sigma^3} \tag{15}$$

Puis en utilisant $\sigma^2 = \hbar/m\omega$ et $g = 4\pi\hbar^2 a/m$, on obtient

$$E(\eta) = \frac{3}{4} N\hbar\omega\, f(\eta) \quad \text{avec} \quad f(\eta) = \frac{1}{\eta^2} + \eta^2 + \frac{\chi}{\eta^3} \tag{16}$$

avec $\chi = \dfrac{4}{3\sqrt{2\pi}} \dfrac{aN}{\sigma}$.

7. **[1]** la minimisation donne $f'(\eta) = \dfrac{-2}{\eta^3} + 2\eta - 3\dfrac{\chi}{\eta^4} = 0$, ou encore l'équation

$$\eta(\eta^4 - 1) = \frac{3}{2}\chi \tag{17}$$

8. **[1] Cas** $a = \chi = 0$: On trouve $\eta = 1$ comme solution acceptable physiquement, et $f(1) = 2$ donne $E_0 = \frac{3}{2}N\hbar\omega$. On retrouve le fondamental d'un oscillateur harmonique à trois dimensions.
9. **[2] Cas répulsif** $a > 0$: On observe graphiquement que pour $\chi > 0$ la courbe $y = \eta(\eta^4 - 1)$ coupe toujours la droite $y = 3/2\chi$ si bien qu'il existe toujours une solution. Dans la limite $\chi \gg 1$, on obtient $\eta \sim \chi^{1/5}$ qui donne une largeur de gaussienne $R = \eta\sigma$

$$R \sim \sigma \left(\frac{aN}{\sigma}\right)^{1/5} . \tag{18}$$

10. **[2] Cas attractif** $a < 0$: Dans ce cas, l'équation devient $\eta(1 - \eta^4) = \frac{3}{2}|\chi|$. La courbe en cloche montre qu'il n'y a de solution possible que si $|\chi| \leq |\chi_c| = \dfrac{2}{3} \max\limits_{\eta > 0}[\eta(1 - \eta^4)]$. On trouve que le maximum est atteint pour $\eta_c = 5^{-1/4}$, soit $|\chi_c| = 8/15 \times 5^{-1/4} = -\dfrac{4}{3\sqrt{2\pi}} \dfrac{a_c N}{\sigma}$. Finalement, la valeur critique de l'interaction est

$$a_c = -\frac{2\sqrt{2\pi}}{5^{5/4}} \frac{\sigma}{N} \simeq -0.671 \frac{\sigma}{N} \tag{19}$$

Pour de trop fortes interactions attractives, toutes les particules vont cherche à condenser au même de l'espace malgré l'énergie cinétique, il y a alors effondrement du condensat. On remarque que cette valeur tend rapidement vers 0 avec le nombre de particules.

Approximation de Thomas-Fermi [7]

11. **[1+0.5]** L'équation GP devient $V(\vec{r})\psi(\vec{r}) + gn(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \mu\,\psi(\vec{r})$ qui donne un profil de densité

$$n(\vec{r}) = \begin{cases} (\mu - V(\vec{r}))\,/g & \text{si } \mu \geq V(\vec{r}) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{20}$$

12. **Cas du potentiel harmonique** :

a) **[1]** on obtient en utilisant la définition de σ, pour $\mu \geq V(\vec{r})$:

$$n(\vec{r}) = \left(\mu - \frac{1}{2}m\omega^2\vec{r}^{\,2}\right)/g = \left(\mu - \frac{\hbar\omega}{2}\frac{r^2}{\sigma^2}\right)/g \tag{21}$$

c'est une parabole inversée.

b) **[0.5]** On a $R = \sqrt{2\mu/m\omega^2}$.

c) **[2]** In tire μ de la conservation du nombre de particules (ce qui revient à utiliser la contrainte de normalisation pour ϕ :

$$N = \int_{\text{Spère de rayon } R} d\vec{r}\, n(\vec{r}) = 4\pi\int_0^R r^2 n(r) = \frac{4\pi}{g}\int_0^R r^2\left(\mu - \frac{\hbar\omega}{2}\frac{r^2}{\sigma^2}\right)dr \tag{22}$$

$$= \frac{4\pi\sigma^3}{g}\left(\frac{2}{\hbar\omega}\right)^{3/2}\int_0^{\sqrt{\mu}} u^2\left(\mu - u^2\right)du = \frac{4\pi\sigma^3}{g}\left(\frac{2}{\hbar\omega}\right)^{3/2}\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{5}\right)\sqrt{\mu}^5 \tag{23}$$

$$= \frac{\sigma}{a}\left(\frac{2}{\hbar\omega}\right)^{5/2}\frac{\mu^{5/2}}{15} \quad \Rightarrow \quad \mu = \frac{\hbar\omega}{2}\left(15\frac{a}{\sigma}\right)^{2/5} N^{2/5} \tag{24}$$

d) **[2]** On extrait juste la dépendance en μ en utilisant $|\phi(r)|^2 = n(r)/N$

$$E_{\text{int}} = \frac{N^2 g}{2}4\pi\int_0^R r^2|\phi(r)|^4 dr \propto \int_0^{\sqrt{\mu}} u^2\left(\mu - u^2\right)^2 du \propto \mu^{7/2} \propto N^{7/5} \propto \mu N \tag{25}$$

soit $p = 7/5$.

Longueur de cicatrisation et interface unidimensionnelle [7]

On se place à une dimension pour des interactions répulsives ($g > 0$) et on considère une interface imposant comme conditions aux limites $\psi(0) = 0$ et $\psi(\infty) = \sqrt{n_0}$ avec annulation des dérivées à l'infini (profils plats).

13. **[1]** L'équation de Gross-Pitaevski pour ce problème se simplie en

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + g\psi^3(x) = \mu\,\psi(x) \tag{26}$$

14. **[1]** On se place en $x = +\infty$ où $\psi''(\infty) = 0$ et $\psi^2(\infty) = n_0$ qui donne $\mu = gn_0$.

15. **[1]** On écrit $\psi'' + \dfrac{2mgn_0}{\hbar^2}\left[1 - \dfrac{\psi^2}{n_0}\right]\psi = 0$ qui donne $\xi = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2mgn_0}} = \dfrac{1}{\sqrt{8\pi a n_0}}$.

16. **[2]** On multiplie la précédente équation par ψ' et on intégre entre 0 et x l'équation ce qui donne

$$\frac{1}{2}(\psi'(x)^2 - \psi'(0)^2) + \frac{1}{\xi^2}\left[\frac{1}{2}(\psi(x)^2 - \psi(0)^2) - \frac{1}{4n_0}(\psi(x)^4 - \psi(0)^4)\right] = 0$$

que l'on peut déjà simplifier avec $\psi(0) = 0$. En se plaçant en $x = \infty$, avec $\psi(\infty)^2 = n_0$, on trouve $\psi'(0)^2 = n_0/2\xi^2$.

17. **[2]** On réécrit l'équation en

$$\psi'^2 = \frac{1}{\xi^2}\left(-\psi^2 + \frac{\psi^4}{2n_0} + \frac{n_0}{2}\right) = \frac{1}{2n_0\xi^2}\left(\psi^2 - n_0\right)^2$$

On choisit la solution croissante de 0 à $\sqrt{n_0}$, il reste à intégrer entre 0 et x

$$\frac{\sqrt{n_0}d\psi}{\psi^2 - (\sqrt{n_0})^2} = \frac{dx}{\sqrt{2}\xi}$$

comme en cours et en TD, on trouve un profil an tangente hyperbolique :

$$\psi(x) = \sqrt{n_0}\tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi}\right) \tag{27}$$

Spectre des excitations de Bogoliubov [7]

18. **[1+0.5]** On voit que $\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\vec{r},t) = -\frac{i\mu}{\hbar}\Phi(\vec{r},t)$. En injectant cela dans l'équation, et en simplifiant par $e^{-i\mu t/\hbar}$, on voit que ψ doit satisfaire l'équation de Gross-Pitaevski (10) associée à μ pour que cet état stationnaire Φ soit effectivement solution de l'équation dépendant du temps. Pour une solution uniforme de l'équation indépendante du temps, le laplacien s'annule et on retrouve comme à la partie précédente la condition $\mu = gn_0$.

19. **[2.5]** On injecte la solution $\Phi(\vec{r},t) = \left[\sqrt{n_0} + \varphi(\vec{r},t)\right] e^{-i\mu t/\hbar}$ dans l'équation et on utilise $\varphi \ll 1$ pour le terme en interaction. On trouve

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\vec{r},t) = \mu\Phi(\vec{r},t) + i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}e^{-i\mu t/\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi \times e^{-i\mu t/\hbar} + g(n_0 + \sqrt{n_0}(\varphi+\varphi^*))\Phi(\vec{r},t)$$

En utilisant $\mu = gn_0$ et en simplifiant par $e^{-i\mu t/\hbar}$ et au premier ordre en φ, on aboutit à

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi + gn_0(\varphi+\varphi^*)$$

L'équation complexe conjuguée donne

$$i\hbar\frac{\partial\varphi^*}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi^* - gn_0(\varphi+\varphi^*)$$

d'où le système différentiel suivant

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\varphi\\ \varphi^*\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + gn_0 & gn_0\\ -gn_0 & \frac{\hbar^2}{2m}\Delta - gn_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi\\ \varphi^*\end{pmatrix} = \hat{H}_{\mathrm{GP}}\begin{pmatrix}\varphi\\ \varphi^*\end{pmatrix} \tag{28}$$

20. **[2]** Le passage en transformée de Fourier ou base des ondes planes revient à recherche les valeurs propres de l'opérateur $\hat{H}_{\mathrm{GP}}$ dont on a l'expression dans l'espace réel. Dans l'espace de Fourier, le système différentiel devient

$$\hbar\omega\begin{pmatrix}\varphi\\ \varphi^*\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{\hbar^2\vec{k}^{\,2}}{2m} + gn_0 & gn_0\\ -gn_0 & -\frac{\hbar^2\vec{k}^{\,2}}{2m} - gn_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi\\ \varphi^*\end{pmatrix} \tag{29}$$

Il reste donc à diagonaliser la matrice 2×2 pour $\vec{k} \neq 0$ (elle est singulière sinon). On aboutit à l'équation

$$\det\begin{pmatrix}\frac{\hbar^2\vec{k}^{\,2}}{2m} + gn_0 - \hbar\omega & gn_0\\ -gn_0 & -\frac{\hbar^2\vec{k}^{\,2}}{2m} - gn_0 - \hbar\omega\end{pmatrix} = \left(\frac{\hbar^2\vec{k}^{\,2}}{2m} + gn_0 - \hbar\omega\right)\left(-\frac{\hbar^2\vec{k}^{\,2}}{2m} - gn_0 - \hbar\omega\right) + (gn_0)^2 \tag{30}$$

$$= \frac{\hbar^2\vec{k}^{\,2}}{2m}\left(\frac{\hbar^2\vec{k}^{\,2}}{2m} + 2gn_0\right) - (\hbar\omega)^2 = 0 \tag{31}$$

On en tire la relation de dispersion de Bogoliubov

$$\hbar\omega(k) = \sqrt{\frac{\hbar^2k^2}{2m}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + 2gn_0\right)} \tag{32}$$

21. **[1]** Dans la limite $k \to 0$, la relation de dispersion se simplifie en

$$\omega(k) \simeq \sqrt{\frac{gn_0}{m}}k$$

Il s'agit d'excitations collectives de type onde sonore médiées par les interactions et se propageant à la célérité $c = \sqrt{\frac{gn_0}{m}}$. Remarquons que dans la limite $k \to \infty$, on retrouve le spectre des particules libres.