M1 Physique Fondamentale — Université Paris-Saclay
Année 2019-2020

Examen final : Transitions de phase

Vendredi 17 Janvier 2020 – 3h

Seules les notes de cours et de TD sont autorisées. Lisez bien l'énoncé, il y a beaucoup de questions indépendantes et de résultats intermédiaires donnés. Le sujet est très long et varié, le barème sera sur bien plus de 20 points, c'est normal de ne pas finir le sujet.

Équation de Gross-Pitaevski

On considère un gaz d'atomes froids contenant N bosons à température nulle. Dès lors, en l'absence d'interaction, toutes les particules se placent dans l'état fondamental $\phi(\vec{r})$ du problème à une particule (phénomène de condensation de Bose-Einstein). La fonction d'onde totale du système est alors donnée par

$$\Psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \phi(\vec{r}_1)\phi(\vec{r}_2)\cdots\phi(\vec{r}_N) \tag{1}$$

En présence d'interactions entre particules, l'approximation de champ moyen correspond à conserver la forme (1) avec une fonction d'onde effective $\phi(\vec{r})$ modifiée par la présence des interactions, tout en conservant la propriété de normalisation :

$$\int |\phi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1 \, . \tag{2}$$

Fonctionnelle de l'énergie

L'Hamiltonien du système s'écrit sous la forme

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}_i} + V(\vec{r}_i) \right\} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} U(\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|) \tag{3}$$

avec m la masse des particules, $\Delta_{\vec{r}_i}$ l'opérateur laplacien agissant sur la position de la i^{e} particule, $V(\vec{r})$ un potentiel extérieur et $U(\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|)$ un potentiel d'interaction locale à deux corps qui prend la forme

$$U(\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|) = g\,\delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad \text{avec} \quad g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}a \tag{4}$$

avec $\delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ la fonction de Dirac et a une longueur caractéristique appelée longueur de diffusion. On rappelle que la valeur moyenne d'un opérateur dans un état $|\Psi\rangle$ s'écrit

$$\langle\Psi|\, O\,|\Psi\rangle = \int\cdots\int \Psi^*(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)\hat{O}\Psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)\, d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \tag{5}$$

Nous allons montrer que, dans la limite thermodynamique $N \gg 1$, l'énergie associée à la fonction d'onde (1) correspond à une fonctionnelle de la fonction complexe $\phi(\vec{r})$ de la forme

$$E[\phi, \phi^*] = N \int \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(\vec{r})|^2 + V(\vec{r})|\phi(\vec{r})|^2 + N\frac{g}{2}|\phi(\vec{r})|^4 \right\} d\vec{r} \,, \tag{6}$$

dans laquelle on utilise le jeu de variables indépendantes (ϕ, ϕ^*) plutôt que parties réelle et imaginaire. Les conditions aux limites sont prises nulles sur les bords du domaine d'intégration.

1. Démontrer la forme du terme d'énergie cinétique et du terme associé au potentiel extérieur.
2. Démontrer la forme associée au terme d'énergie d'interactions.

La fonctionnelle que l'on doit minimiser pour déterminer l'équation dont ϕ est solution est donnée par

$$G[\phi, \phi^*] = E[\phi, \phi^*] - \mu N \int |\phi(\vec{r})|^2 d\vec{r} \tag{7}$$

où le choix du préfacteur $\mu \times N$ est conventionnel. Physiquement, μ est le potentiel chimique du système.

3. Expliquer l'origine du terme proportionnel à μ.
4. Montrer que la minimisation de la fonctionnelle puis l'introduction de la fonction $\psi(\vec{r}) = \sqrt{N}\phi(\vec{r})$ conduit à **l'équation de Gross-Pitaevski** statique :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) + g|\psi(\vec{r})|^2 \right] \psi(\vec{r}) = \mu \, \psi(\vec{r}) \tag{8}$$

5. Exprimer la densité locale $n(\vec{r})$ de particules en fonction de N et $\phi(\vec{r})$ puis en fonction de $\psi(\vec{r})$, soit par des arguments physiques soit en utilisant l'opérateurs $\hat{n}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$.

Approche variationnelle pour un piège harmonique

Dans le cas d'un potentiel de confinement harmonique $V(\vec{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2\vec{r}^{\,2}$ à trois dimensions $\vec{r} = (x, y, z)$, nous allons rechercher une solution sous la forme d'une gaussienne

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\pi^{3/4}(\eta^3\sigma^3)^{1/2}} e^{-\vec{r}^{\,2}/(2\eta^2\sigma^2)} \quad \text{avec} \quad \sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \,. \tag{9}$$

et $\eta > 0$ un paramètre variationnel, si bien que $\phi^2(\vec{r}) = g_{\eta\sigma}(x)g_{\eta\sigma}(y)g_{\eta\sigma}(z)$, avec $g_a(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2}} e^{-x^2/a^2}$. On rappelle les intégrales gaussiennes suivantes :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_a(x) dx = 1 \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \, g_a(x) dx = \frac{a^2}{2} \,. \tag{10}$$

6. Montrer que l'énergie variationnelle à minimiser prend la forme

$$E(\eta) = \frac{3}{4} N\hbar\omega \, f(\eta) \quad \text{avec} \quad f(\eta) = \frac{1}{\eta^2} + \eta^2 + \frac{\chi}{\eta^3} \tag{11}$$

avec un paramètre $\chi \propto a$ dont on donnera l'expression en fonction de a, N et σ.

7. Déterminer l'équation satisfaite par le paramètre variationnel.
8. **Cas** $a = 0$: Que vaut l'énergie en l'absence d'interaction ? Commenter.

9. **Cas répulsif** $a > 0$: Discuter graphiquement l'existence de solutions $\eta > 0$ et montrer que, dans la limite d'interaction forte, le rayon caractéristique R du condensat suit une loi de puissance

$$R \sim \sigma \left(\frac{aN}{\sigma} \right)^{\alpha} \tag{12}$$

avec α un exposant à déterminer.

10. **Cas attractif** $a < 0$: Discuter graphiquement l'existence de solutions $\eta > 0$. Montrer en particulier, qu'il existe une valeur critique de l'interaction

$$a_c = -\kappa \frac{\sigma}{N} \tag{13}$$

avec κ une constante à déterminer, en dessous de laquelle il n'y a pas de solution. D'après vous, quelle instabilité se produit en dessous de cette valeur critique ?

Approximation de Thomas-Fermi

On se place dans la limite où l'on peut négliger le terme cinétique devant le potentiel extérieur et les interactions et dans le cas répulsif $g > 0$.

11. À quelle condition sur μ, l'équation pour $n(\vec{r})$ a-t-elle une solution ? Déterminer l'expression de la densité locale de particules $n(\vec{r})$ en fonction du potentiel chimique μ donné, du potentiel $V(\vec{r})$ ainsi que de N et g.
12. **Cas du potentiel harmonique** : on considère le potentiel harmonique $V(\vec{r}) = \frac{1}{2} m\omega^2 \vec{r}^{\,2}$.
    a) Donner l'expression de $n(\vec{r})$ en fonction de N, g, $\hbar\omega$ et σ et faire un graphique pour representer cette courbe.
    b) Que vaut le rayon R du condensat, défini par le rayon au-delà duquel $n(\vec{r}) = 0$?
    c) Expliquer comment déterminer la valeur de μ pour un nombre de particules donné N. Faites le calcul pour exprimer μ en fonction de $\hbar\omega$, a, σ et N.
    d) Montrer que l'énergie d'interaction E_{int} croit comme N^p avec p un exposant à déterminer.

Longueur de cicatrisation et interface unidimensionnelle

On se place à une dimension pour des interactions répulsives ($g > 0$), en l'absence de potentiel extérieur V. On impose des conditions aux limites $\psi(0) = 0$ et $\psi(\infty) = \sqrt{n_0}$ avec annulation des dérivées à l'infini (profils plats) ce qui correspond à étudier l'effet d'un bord. On prendra $\psi(x)$ une fonction réelle.

13. Écrire l'équation de Gross-Pitaevski pour ce problème.
14. Déterminer la valeur du potentiel chimique en fonction de n_0 et g.
15. Montrer que l'équation peut se réécrire sous la forme

$$\psi''(x) + \frac{1}{\xi^2} \left[1 - \psi^2(x)/n_0 \right] \psi(x) = 0 \tag{14}$$

avec ξ la longueur de cicatrisation que l'on exprimera en fonction de m, $\hbar$, n_0 et g.

16. Identifier une intégrale première de l'équation puis en déduire la valeur de $\psi'(0)$.
17. Trouver l'expression du profil $\psi(x)$ en fonction de n_0 et ξ.

Spectre des excitations de Bogoliubov

On se place dans l'espace libre en l'absence de potentiel externe V. On admet que la dynamique temporelle est gouvernée par l'équation de Gross-Pitaevski dépendant du temps donnée par

$$i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + g|\Phi(\vec{r},t)|^2\right]\Phi(\vec{r},t) \tag{15}$$

aussi appelée équation de Schrödinger non-linéaire.

18. À quelle condition l'état de la forme $\Phi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-i\mu t/\hbar}$ est-il stationnaire ? Pour une solution uniforme de densité locale n_0, donner l'expression de μ en fonction de g et n_0.
19. Dans la limite des petites perturbations, on recherche une solution autour de la solution uniforme sous la forme $\Phi(\vec{r},t) = \left[\sqrt{n_0} + \varphi(\vec{r},t)\right] e^{-i\mu t/\hbar}$ avec $\varphi \ll 1$ ce qui revient à linéariser l'équation en φ. Montrer que, en considérant φ et φ^* comme variables indépendantes, nous devons résoudre le système différentiel suivant

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\varphi\\ \varphi^*\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + gn_0 & gn_0\\ -gn_0 & \frac{\hbar^2}{2m}\Delta - gn_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi\\ \varphi^*\end{pmatrix} = \hat{H}_{\mathrm{GP}}\begin{pmatrix}\varphi\\ \varphi^*\end{pmatrix} \tag{16}$$

20. On recherche des solutions type ondes planes $\varphi(\vec{r},t) = Ae^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$. Quelles sont les valeurs propres $\hbar\omega(\vec{k}\,)$ de l'opérateur différentiel $\hat{H}_{\mathrm{GP}}$ pour $\vec{k} \neq 0$? Tracer alors qualitativement la relation de dispersion $\omega(k)$ où $k = \|\vec{k}\|$ pour le gaz.
21. Comment qualifier les excitations de grandes longueurs d'onde $k \to 0$? Exprimer leur vitesse en fonction de g, n_0 et m.

Fin.