



UNIVERSITÉ DE NICE SOPHIA ANTIPOLIS
PROJET TUTEURÉ DE LICENCE DE PHYSIQUE

ANNÉE 2017

Corrélations et propriétés statistiques de particules quantiques

Auteurs :

Thomas JUSBERT
Florian CRONFALT

Encadrants :

Frédéric HÉBERT
Mathias ALBERT

Projet réalisé à l'*Institut de physique de Nice*



2 avril 2017

Table des matières

1	Indiscernabilité et postulat de symétrisation	2
1.1	Particules identiques en physique classique	2
1.2	Concept d'indiscernabilité	2
1.3	Le postulat de symétrisation	3
2	Statistiques de Bose-Einstein et Fermi-Dirac	4
2.1	Description de particules identiques	4
2.2	Fonction de partition	4
3	Effets de la dimensionnalité	6
3.1	Condensat de Bose-Einstein	6
3.2	Fermionisation de bosons	7
4	Description succincte du projet	8
4.1	Corrélations classiques	8
4.2	Corrélations quantiques	9

Remerciements

Nous tenons à remercier nos tuteurs de stage M. Mathias Albert, Maître de Conférences, et M. Frédéric Hébert, Directeur du département de physique de l'Université de Nice Sophia Antipolis, pour leurs explications, leur disponibilité et pour la confiance qu'ils nous ont accordée dans l'élaboration de notre travail. Ils ont su, à travers leurs conseils et leur expérience, nous guider tout au long de nos recherches bibliographiques et ont rendu possible la rédaction de ce rapport.

Nous souhaitons également adresser nos sincères remerciements aux chercheurs, aux techniciens et au personnel de l'Institut de Physique de Nice, pour leur accueil et pour nous avoir permis d'occuper leurs locaux.

Introduction

Depuis sa naissance, la mécanique quantique s'oppose couramment à la physique classique et perturbe le sens commun. Malgré les nombreuses théories alternatives développées, telles que les théories à variables cachées, elle n'a pour lors jamais été mise en défaut et répond aux résultats expérimentaux. Elle repose sur une série d'axiomes, à l'égard de la structure hilbertienne des états, leurs évolutions temporelles régies par l'équation de Schrödinger, ainsi que la "réduction du paquet d'onde" qui décrit le résultat d'une mesure.

Ceux-ci sont néanmoins insuffisants lorsque l'on s'intéresse à un concept intrinsèquement quantique, l'indiscernabilité. Ce problème n'a pas d'équivalent au sens classique, la description de particules identiques étant toujours discernable. Il est par conséquent nécessaire d'envisager une approche physique différente, qui sera énoncée sous la forme d'un nouveau postulat, ouvrant ainsi un nouveau pan de cette discipline. Il en émerge des statistiques particulières, telles que les statistiques de Fermi-Dirac et de Bose-Einstein, qui donnent lieu à un nombre certain de phénomènes aux conséquences extraordinaires. En outre, ce postulat établit les fondements de l'explication des propriétés de la matière, de sa stabilité et de ses interactions.

Notre objectif est de pouvoir décrire, de manière théorique puis numérique, la statistique de particules indiscernables dans un environnement à une dimension. Dans un premier temps, nous exposerons les bases théoriques de ces systèmes et nous nous intéresserons à leurs statistiques. Dans un second temps, nous nous soucierons des répercussions du choix des dimensions dans ce type de problème quantique. Enfin, nous établirons les procédés choisis afin de décrire numériquement ces statistiques.

1 Indiscernabilité et postulat de symétrisation

On s'intéresse premièrement aux différences fondamentales entre particules classiques et particules quantiques et aux conséquences qu'elles impliquent. Nous verrons que ces dernières donnent lieu à des résultats qui heurtent la logique commune et qui furent éminemment décriés. Il faudra attendre le début des années 1980 pour que les équipes d'Alain Aspect puissent expérimenter et valider ce modèle de la mécanique quantique. Aujourd'hui ce modèle fait corps dans la communauté scientifique bien que certains de ses détracteurs cherchent encore des failles le discréditant, au profit de théories alternatives.

1.1 Particules identiques en physique classique

On définit deux particules identiques si la totalité de leurs grandeurs intrinsèques sont les mêmes. Supposons un système composé de particules identiques classiques, il est toujours possible de numéroter chacune d'entre elles. De plus, on peut connaître leurs positions à chaque instant, et, suivant de proche en proche leurs déplacements, on établit une trajectoire pour chaque particule, les rendant *de facto* discernables [8]. On peut connaître la trajectoire, la position finale et la vitesse de chaque particule au temps voulu. Ainsi, tout système de particules classiques est discernable, sans avoir à se soucier du caractère identique ou non des particules considérées.

1.2 Concept d'indiscernabilité

En mécanique quantique, l'identité de deux particules se définit comme en mécanique classique, par l'identité de leurs grandeurs. En l'absence d'interaction, les seules variables pertinentes sont les nombres d'occupation des états quantiques. On notera pour exemple qu'un proton ne pourra, de fait, jamais être dans le même état qu'un électron, puisque caractérisé par des grandeurs différentes - masse, charge, spin, *et cetera*. A l'inverse, deux électrons seront considérés comme deux particules identiques.

Contrairement au cas classique, l'identité des particules mises en jeu au sein d'un système quantique est d'une importance primordiale. S'il est possible de mesurer la position d'une particule à un instant donné, il n'est néanmoins généralement pas permis de la suivre individuellement au cours du temps. La disparition de la notion de trajectoire caractérise, entre autres, la mécanique quantique. Elle est une conséquence directe de l'incompatibilité de certaines mesures exprimées par les relations d'indéterminations d'Heisenberg. Ceci amène à un résultat immédiat, à savoir que des particules quantiques et identiques sont indiscernables. Du point de vue ondulatoire, la notion d'indiscernabilité intervient lorsqu'il y a enchevêtrement des paquets d'ondes. C'est ce principe d'indiscernabilité, inédit dans la physique classique, qui ouvre la voie vers un nouveau raisonnement, vers une nouvelle physique.

Considérons deux particules identiques, qui se localisent dans deux régions bien distinctes de l'espace - il est alors possible de les suivre par leur centre de masse. Cependant, si elles se rapprochent suffisamment, ou de manière plus générale, que les conditions favorisent l'entremêlement de leurs paquets d'onde, leur distinction devient impossible. Il en résulte une zone floue, diffuse, qui nous contraint alors à évaluer le système dans sa globalité et non comme la simple addition des comportements individuels.

Les conséquences premières de cette particularité peuvent s'illustrer dans une expérience de pensée, où l'on collisionne deux particules identiques, observées dans leur centre de masse. On numérote 1 la particule venant de gauche et 2 celle venant de droite. Après la collision, la détection de l'une d'entre elles n'est réduite qu'à la mesure des grandeurs qu'elle porte (énergie, impulsion, etc...), mais il sera impossible d'en déterminer sa provenance. "S'agit-il de la particule 1 ou de la particule 2 ?" est une question qui se retrouve dénuée de sens [2]. On définit l'espace des états comme le produit tensoriel des états individuels, que l'on note $|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \equiv |\alpha ; \beta\rangle$. Supposons que post-collision, les particules aient des impulsions finales p_f et $-p_f$. Dans un système classique, les seuls états finaux physiquement acceptables sont :

$$|1 : p_f ; 2 : -p_f\rangle \quad |1 : -p_f ; 2 : p_f\rangle. \quad (1)$$

A contrario, pour des particules quantiques, puisqu'indiscernables, ces deux états sont rigoureusement équivalents. Comment peut-on définir l'état total du système dans ce cas ? Doit-on les additionner, les retrancher ? Quoi qu'il advienne, celui-ci est constitué d'une combinaison linéaire de ces états, tels que :

$$|\Psi\rangle = a |1 : p_f ; 2 : -p_f\rangle + b |1 : -p_f ; 2 : p_f\rangle. \quad (2)$$

Où a et b sont deux nombres a priori complexes, tels que $|a|^2 + |b|^2 = 1$ [4]. La connaissance de ces valeurs est essentielle dans la prévision des phénomènes, et il est nécessaire d'introduire un postulat afin de lever cette indétermination.

1.3 Le postulat de symétrisation

L'adoption d'un postulat supplémentaire devient indispensable si l'on veut décrire des phénomènes physiques. Le cas échéant, cette mécanique est une formulation purement mathématique, dépourvue de tout intérêt réel. Ce dernier stipule que pour un système contenant N particules indiscernables, les seuls vecteurs d'état physiques sont :

- symétriques, pour des particules de type Boson,
- antisymétriques, pour des particules de type Fermion,

Plus précisément, si on considère $\Psi(1, 2, \dots, N)$ la fonction d'onde d'un tel système, où i indique l'ensemble des degrés de liberté d'une particule, les seuls états acceptables sont tels que :

$$\Psi(\dots, i, \dots, j, \dots) = \epsilon \Psi(\dots, j, \dots, i, \dots) \quad (3)$$

Où $\epsilon = +1$ pour les bosons et $\epsilon = \pm 1$ pour les fermions. Dans le cas des particules fermioniques, ϵ caractérise la nature de la permutation, symétrique ($\epsilon = +1$) ou antisymétrique ($\epsilon = -1$). En effet, une permutation peut toujours se décomposer en une succession de transpositions. Ainsi, on appelle symétriques les permutations qui requièrent un nombre pair de transpositions, et antisymétriques celles qui requièrent un nombre impair de transpositions.

D'une manière générale, on parle de fermions pour des particules de spin demi-entier (électrons, protons, neutrons, quarks, ...) et de bosons pour des particules de spin entier (photons, gluons, gravitons, bosons de Higgs, ...) ¹. Il est souvent admis que les fermions sont les particules qui constituent la matière et que les bosons sont celles qui régissent les interactions. On remarque qu'une association paire de fermions donne un spin total entier, et que la particule composite adopte les propriétés d'un boson. Ainsi, l'hélium 3 a un comportement fermionique, alors que l'hélium 4 a un comportement bosonique. De même, les protons et les neutrons sont des particules composites constitués de trois fermions - les quarks.

Soit une fonction $\Phi(\alpha, \beta, \gamma)$ une fonction quelconque, la fonction symétrique qu'elle engendre s'écrit :

$$\Psi_S = C_S [\Phi(\alpha, \beta, \gamma) + \Phi(\beta, \alpha, \gamma) + \Phi(\gamma, \beta, \alpha) + \Phi(\alpha, \gamma, \beta) + \Phi(\beta, \gamma, \alpha) + \Phi(\gamma, \alpha, \beta)], \quad (4)$$

et antisymétrique :

$$\Psi_S = C_A [\Phi(\alpha, \beta, \gamma) - \Phi(\beta, \alpha, \gamma) - \Phi(\gamma, \beta, \alpha) - \Phi(\alpha, \gamma, \beta) + \Phi(\beta, \gamma, \alpha) + \Phi(\gamma, \alpha, \beta)]. \quad (5)$$

Où C_S et C_A sont des constantes de normalisation [7]. Dans le cas fermionique, on voit immédiatement que la fonction $\Phi(\alpha, \beta, \gamma)$ ne peut pas être symétrique, puisqu'elle provoquerait un état total Ψ_S nul. Cette antisymétrie exige qu'à l'état fondamental, deux fermions sans interaction ne peuvent se placer dans le même état quantique. En conséquence, afin de créer ce type de vecteur, on place un seul fermion dans chaque état propre du Hamiltonien. Il en résulte que les fermions sont classés dans un ordre croissant d'énergie, où chacun n'occupe qu'une seule case quantique, c'est le *principe d'exclusion de Pauli*. On note que c'est l'état de plus basse énergie possible pour une telle structure.

A l'inverse, la symétrie imposée à la fonction d'onde bosonique ne présente pas ce type de restrictions. Pour un système de bosons sans interaction, l'état à température nulle est un état où tous les bosons sont dans leur état fondamental ². Nous verrons que cette remarquable propriété donne lieu au célèbre *condensat de Bose-Einstein*.

1. Le fait que des particules de spin demi-entier adoptent des comportements antisymétriques et que celles de spin entier des comportements symétriques est totalement non trivial. On considérera comme acquis cette notion bien qu'il soit possible de la prouver rigoureusement en théorie quantique du champ.

2. La notion de température nulle mérite d'être précisée. On peut considérer qu'une température est nulle si l'énergie à laquelle elle correspond est inférieure à la différence entre l'énergie du fondamental et du premier niveau excité. Dans un puits de potentiel harmonique, cette énergie vaut $\frac{\hbar\omega}{2}$. Si T est inférieure à $\frac{\hbar\omega}{2k_B}$, alors on peut parler de température nulle. Dans ce cas, les niveaux excités ne sont statistiquement pas peuplés par les bosons, c'est une condensation triviale.

2 Statistiques de Bose-Einstein et Fermi-Dirac

2.1 Description de particules identiques

Les différents concepts quantiques exprimés précédemment donnent naissance à des propriétés particulières pour des particules identiques et indiscernables. On cherche à décrire les comportements de telles particules d'une manière statistique. Ce procédé tend à exprimer les phénomènes d'une façon plus globale, sans avoir à s'atteler au formalisme de la mécanique quantique, souvent complexe et fastidieux.

On connaît la statistique qui régit des particules classiques, discernables. Il s'agira donc d'adapter ce modèle à des particules indiscernables, en accord avec le postulat de symétrisation.

Dans cette section, on considérera uniquement les systèmes composés de particules identiques sans interaction.

Soit un système S composé de N particules identiques. Le hamiltonien total H se compose de la somme des hamiltoniens individuels h_i des particules. Dans ce cas précis, chaque hamiltonien individuel est identique. On note λ un état propre de l'hamiltonien h_i et ϵ_λ l'énergie propre associée à cet état [5]. Soit r l'état total d'un tel système. On peut alors définir r comme l'ensemble des états de chaque particule

$$r = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_N). \quad (6)$$

L'énergie totale du système réside en la somme des énergies de chaque particule telle que $E_r = \epsilon_{\lambda_1} + \epsilon_{\lambda_2} + \dots + \epsilon_{\lambda_N}$.

Dans le cas de particules discernables, un état $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)$ est différent d'un état $(\lambda_2, \lambda_1, \dots, \lambda_N)$. Inversement, pour un système de particules indiscernables, il n'est plus possible d'attribuer chaque état individuel à une particule bien déterminée; l'état total reste inchangé quel que soit l'ordre dans lequel on identifie les états individuels.

$$(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = (\lambda_2, \lambda_1, \dots, \lambda_N) \quad (7)$$

Ainsi, décrire un état total par une liste d'états individuels n'est plus un choix judicieux. Ce qui est pertinent en revanche, c'est de décrire le système par le nombre de particules qui occupe chaque état. On écrit désormais l'état r comme l'ensemble des nombres d'occupation N_λ de chaque état λ

$$r = \{N_\lambda\}. \quad (8)$$

On a évidemment :

$$N = \sum_{\lambda} N_\lambda, \quad (9)$$

et l'énergie totale du système :

$$E_r = \sum_{\lambda} N_\lambda \epsilon_\lambda. \quad (10)$$

Le postulat de symétrisation nous indique les états de r physiquement acceptables. Nous nous plaçons ici dans un système sans interaction, ce qui nous donne les contraintes suivantes :

- pour les fermions, N_λ ne peut valoir que 0 ou 1;
- pour les bosons, N_λ peut prendre n'importe quelle valeur.

2.2 Fonction de partition

Dans la majorité des problèmes de physique statistique, on cherche l'expression de la fonction de partition qui décrit le système³. En effet, elle contient les propriétés statistiques (énergie, température, entropie, ...) d'un système à l'équilibre.

Pour des particules identiques mais discernables, l'expression de la fonction de partition canonique \mathcal{Z} du système S s'écrit comme

$$\mathcal{Z} = \sum_r e^{-\beta E_r} = \sum_{(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)} e^{-\beta(\epsilon_{\lambda_1} + \epsilon_{\lambda_2} + \dots + \epsilon_{\lambda_N})}. \quad (11)$$

Où $\beta = \frac{1}{k_B T}$, avec k_B la constante de Boltzmann et T la température du système. Puisque les particules sont indépendantes et que chacune est assignée à son propre état, il est possible de factoriser cette expression

$$\mathcal{Z} = \sum_{\lambda_1} e^{-\beta \epsilon_{\lambda_1}} \sum_{\lambda_2} e^{-\beta \epsilon_{\lambda_2}} \dots \sum_{\lambda_N} e^{-\beta \epsilon_{\lambda_N}}, \quad (12)$$

3. Sauf pour l'ensemble micro-canonique qui n'a besoin que du nombre de micro-états pour une énergie, un volume et un nombre de particules donnés.

c'est-à-dire :

$$\mathcal{Z} = \zeta^N. \quad (13)$$

Avec $\zeta = \sum_{\lambda} e^{-\beta\epsilon_{\lambda}}$, car tous les états individuels sont identiques.

Lorsqu'on étudie un système de particules indiscernables, cette simplification n'est plus permise. Afin de pallier cette difficulté, il convient donc de se placer dans l'ensemble grand canonique. A la limite thermodynamique, soit quand $N \gg 1$, l'ensemble canonique et grand-canonique deviennent équivalents. Par définition, la fonction grand canonique Ξ s'écrit :

$$\Xi = \sum_{\{N_{\lambda}\}} \exp\left[-\beta \sum_{\lambda} N_{\lambda}(\epsilon_{\lambda} - \mu)\right]. \quad (14)$$

Contrairement à l'expression canonique, celle-ci peut se factoriser. En effet, il n'existe plus aucune contrainte sur le nombre de particules dans un état donné. Or l'état total n'est uniquement décrit que par le nombre de particules dans un certain état⁴. Ici, on somme sur tous les nombres d'occupations possibles.

$$\Xi = \prod_{\lambda} \sum_{N_{\lambda}} \exp[-\beta N_{\lambda}(\epsilon_{\lambda} - \mu)] = \prod_{\lambda} \zeta_{\lambda} \quad (15)$$

Avec ζ_{λ} la fonction de partition relative à un état individuel. On en déduit les valeurs d'énergie moyenne $\bar{E} = -\partial \ln(\Xi)/\partial\beta + \mu\bar{N}$ avec le nombre moyen de particules du système $\bar{N} = 1/\beta\partial \ln(\Xi)/\partial\mu$, formules bien connues en physique statistique. Si on s'intéresse au nombre moyen de particule \bar{N}_{λ} dans un état particulier λ , il ne faut traiter que la fonction de partition ζ_{λ} .

On a :

$$\bar{N}_{\lambda} = 1/\beta\partial \ln(\zeta_{\lambda})/\partial\mu \quad (16)$$

Nous avons précédemment exprimé les contraintes auxquelles était soumis le nombre d'occupation N_{λ} d'un état. Dans le cas fermionique, il ne peut valoir que 0 ou 1. La fonction de partition d'un état dans la statistique de Fermi-Dirac s'écrit alors $\zeta_{\lambda} = 1 + \exp[-\beta(\epsilon_{\lambda} - \mu)]$. L'expression de \bar{N}_{λ} se déduit immédiatement

$$\bar{N}_{\lambda} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\lambda} - \mu)} + 1}. \quad (17)$$

En ce qui concerne les bosons, il n'y a pas de restriction quant au nombre d'occupation N_{λ} des cases quantiques. Il s'agit donc d'une suite géométrique telle que :

$$\zeta_{\lambda} = \sum_{N_{\lambda}=0}^{\infty} [e^{-\beta(\epsilon_{\lambda} - \mu)}]^{N_{\lambda}} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_{\lambda} - \mu)}}. \quad (18)$$

On remarque qu'une condition est nécessaire à l'existence de cette fonction - il faut que le potentiel chimique μ soit inférieur à l'énergie de tout état ϵ_{λ} . Nous détaillerons l'importance de cette condition dans la partie 3. Ainsi, on trouve pour la statistique de Bose-Einstein :

$$\bar{N}_{\lambda} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\lambda} - \mu)} - 1}. \quad (19)$$

4. C'est pour cette raison que le formalisme de l'ensemble grand canonique est adéquat.

3 Effets de la dimensionnalité

Cette partie aura pour objectif que l'on puisse saisir, de manière heuristique et non exhaustive, le rôle déterminant que jouent les dimensions dans un problème quantique et plus spécifiquement dans un système de particules indiscernables. Nous verrons que selon le choix de l'environnement, les propriétés peuvent s'avérer diamétralement différentes.

3.1 Condensat de Bose-Einstein

Nous avons précédemment exposé que la vision classique de la description d'un gaz n'est permise que pour des particules que l'on considère discernables. Cette approximation se trouve néanmoins être très juste lorsque l'on traite un gaz dans des conditions communes, allant même jusqu'à négliger les interactions interparticulaires - c'est la théorie cinétique des gaz [1]. Ceci étant dit, on peut tout de même concevoir un environnement où les conditions sont telles que les fonctions d'ondes qui décrivent les particules du gaz se recouvrent - concrètement, que la distance moyenne entre particules soit inférieure à la longueur d'onde thermique de De Broglie (20).

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}} \quad (20)$$

Dans ce cas, le système est alors formé de particules quantiques indiscernables que l'on ne peut décrire que par les lois et les statistiques énoncées dans les parties 1 et 2.

Afin de débiter cette partie, on étudiera un gaz de bosons indépendants, qui obéissent par définition à la statistique de Bose-Einstein (19). Supposons désormais qu'ils évoluent dans une boîte de volume V , c'est-à-dire à trois dimensions. Il est possible d'extraire la densité d'états d'un tel système

$$\rho(\epsilon) = AV\sqrt{\epsilon}, \quad (21)$$

avec $A = 2\pi(\frac{2m}{h^2})^{3/2}$ et où l'énergie fondamentale $\epsilon_0 = 0$.

Si on utilise la conservation du nombre de particules dans la boîte on a

$$N = \int_0^\infty d\epsilon \rho(\epsilon) \overline{N}_\lambda = AV \int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\epsilon} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}. \quad (22)$$

Et on a comme contrainte que $\mu < 0$. On pose $x = \beta\epsilon$ et $\phi = e^{\beta\mu}$, il vient

$$\frac{N}{AV} = (k_B T)^{3/2} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \frac{1}{\frac{1}{\phi} e^x - 1}. \quad (23)$$

Ainsi si on prend la valeur maximale de l'intégrale, soit quand $\mu = 0$, on s'aperçoit que l'intégrale est bornée, et qu'il y a donc paradoxe lorsque les conditions sont telles que :

$$\frac{N}{AV(k_B T)^{3/2}} > 2,315. \quad (24)$$

Ces conditions sont réalisables pour une densité de particules très élevée ou pour une température inférieure à une température critique dite de Bose.

Le paradoxe implique que l'on ne peut plus définir de potentiel chimique, ce qui est un réel problème. Cependant, on peut remarquer que cette méthode statistique de conservation des particules ne prend pas en compte la population de l'énergie fondamentale ϵ_0 . On en déduit donc que toutes les particules se condensent dans ce même état - c'est le *condensat de Bose-Einstein*. Ce qui est surprenant, c'est que ce phénomène se produit pour des températures supérieures à celles que l'on considère comme nulles pour un gaz.

Fort de cette expérience à trois dimensions, on suppose désormais que les bosons évoluent sur une surface S à deux dimensions. On extrait aisément la densité d'états du système

$$\rho(\epsilon) = AS, \quad (25)$$

avec $A = (\frac{2\pi m}{h^2})^2$. On applique la conservation du nombre de particules

$$N = AS \int_0^\infty d\epsilon \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}, \quad (26)$$

5. On observe que dans un environnement à deux dimensions, la densité d'états de bosons indépendants ne dépend pas de l'énergie.

et en effectuant le même changement de variables que pour l'équation 23 on en déduit

$$\frac{N}{AS} = k_B T \int_0^\infty dx \frac{1}{\frac{1}{\phi} e^x - 1}. \quad (27)$$

Ici, l'intégrale n'est pas bornée, elle diverge pour tout potentiel chimique. En d'autres termes, cela signifie qu'il n'y a aucun paradoxe et donc, que le condensat de Bose-Einstein n'existe pas à deux dimensions pour un gaz de bosons indépendants.

Il est possible de montrer de la même façon qu'un gaz de bosons indépendants dans un espace à une dimension ne présente pas de tel phénomène de condensation.

En restant à 2D, si on soumet maintenant ce gaz de bosons à un potentiel harmonique $V(\vec{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2\vec{x}^2$, la densité d'états s'écrit de la manière suivante

$$\rho(\epsilon) = \frac{\epsilon}{(\hbar\omega)^2}. \quad (28)$$

En reproduisant la démarche précédente, on obtient

$$N(\hbar\omega)^2 = (k_B T)^2 \int_0^\infty dx \frac{x}{\frac{1}{\phi} e^x - 1}, \quad (29)$$

et à nouveau, avec $\mu < 0$, l'intégrale est bornée, déclenchant un paradoxe lorsque

$$\frac{N(\hbar\omega)^2}{(k_B T)^2} > 1,645. \quad (30)$$

On peut donc en déduire que le condensat de Bose-Einstein se produit à 2D si les particules sont soumises à un potentiel harmonique. En usant du même procédé, il est possible de montrer que même avec un potentiel harmonique, un ensemble de bosons évoluant à une dimension ne peut pas donner lieu à un condensat.

Ces quelques exemples sur le condensat de Bose-Einstein illustrent l'importance primordiale de la dimension dans les propriétés d'un système. On peut désormais s'intéresser à un autre phénomène où l'influence de la dimension n'est pas négligeable.

3.2 Fermionisation de bosons

On se propose de s'intéresser aux états de deux bosons se déplaçant en une dimension à $T = 0$. Ils sont soumis à un potentiel de contact de type $U\delta(x_1 - x_2)$. L'équation de Schrödinger pour ce système s'écrit pour des états stationnaires

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + U\delta(x_1 - x_2) \right] \psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2). \quad (31)$$

On peut résoudre ce problème analytiquement en utilisant quelques conditions limites acceptables et en se servant de l'Ansatz de Bethe, qui propose d'écrire la solution sous la forme

$$\psi(x_1, x_2) = Ae^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + Be^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}. \quad (32)$$

Ce modèle est exactement soluble et nous nous sommes attelés, lors de nos recherches, à sa résolution analytique. Dans ce qui suit, nous mèneront une approche qualitative des phénomènes décelés.

Si on considère que le potentiel d'interaction est nul, les deux bosons évoluent "sans se voir". Si au contraire, on considère le potentiel d'interaction $U \rightarrow \infty$, alors les états des particules ne peuvent plus "s'entremêler". Plus précisément, les bosons se "repoussent" et ne peuvent aucunement se retrouver dans la même zone, dans le même état. Ces deux bosons adoptent alors des comportements de fermions - on parle de fermionisation des bosons.

Dans la réalité, quand bien même un potentiel infini n'a pas de sens, il existe un potentiel non nul et on perçoit déjà clairement la particularité d'un tel système de bosons. En effet, des bosons évoluant à une dimension ne peuvent pas échanger de place. Il en résulte un système hybride qui ne se comporte pas totalement comme un système bosonique, ni un système fermionique, aussi appelé gaz de Tonks-Girardeau.

Ce phénomène semble raisonnablement propre à l'environnement à une dimension du problème. Si on imagine un système de bosons à deux dimensions par exemple, on peut facilement comprendre que, bien que le potentiel d'interaction entre les bosons soit non nul, ils peuvent tout de même s'éviter et que le comportement global de la structure restera bosonique.

4 Description succincte du projet

L'objectif premier du projet est celui d'étudier les propriétés statistiques de l'état fondamental de N bosons ou fermions sans interaction à une dimension. En particulier, nous voulons mettre en évidence des corrélations spatiales indépendantes de toute interaction, uniquement dûes au postulat de symétrisation. Ces corrélations sont de nature quantique.

4.1 Corrélations classiques

Afin de débiter, on s'intéresse à la répartition spatiale de particules dans un milieu classique quelconque. Pour faire simple, on imagine un système à une dimension de particules classiques sous trois états différents :

- gaz parfait : les particules ne sont pas en interaction, leur disposition sur l'axe est totalement aléatoire⁶ - aucune corrélation spatiale.
- liquide : les particules sont dans un état désordonné, mais il existe des interactions de courte portée qui permettent la cohésion du milieu - les corrélations entre particules existent, mais elles s'estompent rapidement.
- solide : le système est totalement ordonné - toutes les particules sont corrélées entre elles, même pour de grandes distances.

Cette analyse est purement qualitative, mais nous espérons trouver un moyen de quantifier ces phénomènes. On cherche donc une fonction qui donne des informations quantitatives sur les corrélations des particules et sur le nombre de premiers voisins au sein d'un milieu.

D'une manière mathématique, on peut exprimer la densité des particules par

$$\rho(x) = \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) \right\rangle, \quad (33)$$

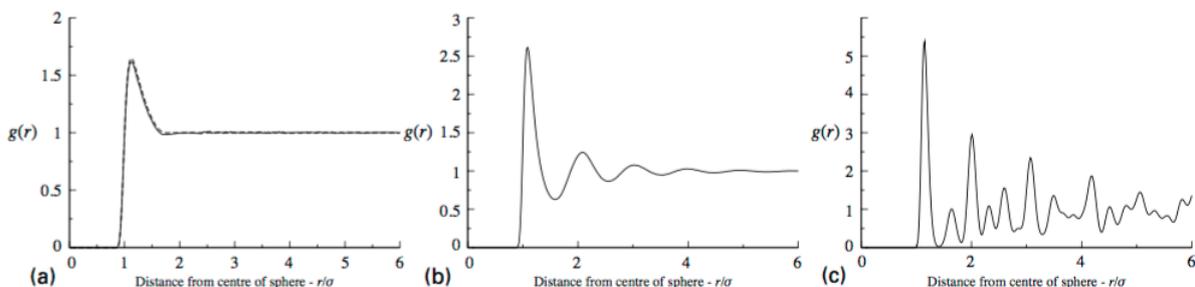
avec x_i la position des particules dans le milieu. De même, la densité de paires est définie comme la densité de présence relative entre deux particules placées en x et en x' , elle s'écrit :

$$\rho_2(x, x') = \left\langle \sum_{i \neq j}^N \delta(x - x_i) \delta(x' - x_j) \right\rangle. \quad (34)$$

On définit la fonction de corrélation de paires comme

$$g(x) = \frac{\rho_2(x)}{\rho^2(x)}. \quad (35)$$

Cette fonction nous renseigne sur les corrélations spatiales entre particules.⁷



6. On notera toutefois que pour un environnement à une dimension, les particules ne peuvent pas échanger de place, les permutations ne sont pas permises même sans interaction.

7. Fréquemment, la densité ρ d'un milieu ne dépend pas de x , $\rho_2(x, x')$ ne dépend que de $x - x'$.

Les graphiques nous montrent les courbes de fonctions de corrélations de paires $g(x)$ dans un milieu gazeux (a), liquide (b) et solide (c), réalisées par simulations numériques [3]. Pour un gaz, on observe que $g(x)$ est globalement constante, ce qui traduit la non corrélation entre les particules. On l'observe cependant nulle en 0, puisque deux particules ne peuvent se trouver exactement au même endroit. Pour un liquide, les particules sont dans un premier temps véritablement corrélées entre elles, mais décroît très rapidement vers le désordre. Au contraire, pour un milieu solide, les particules sont fortement corrélées, et ce pour des distances importantes.

4.2 Corrélations quantiques

L'exemple classique nous a permis de déceler quels étaient les paramètres pertinents afin de décrire les corrélations spatiales interparticulaires. Dans un milieu quantique, ce problème devient réellement non trivial. Il faut donc adopter d'autres méthodes pour parvenir à un résultat.

Notre but est de déterminer la fonction $g(x)$ grâce à la fonction d'onde Ψ du système. On se place à l'état fondamental ($T = 0$). Nous devons premièrement calculer la fonction d'onde du système. Pour les bosons, le postulat de symétrisation nous indique que Ψ est le produit de toutes les fonctions d'ondes individuelles $\phi(x_i)$:

$$\Psi = \phi(x_1)\phi(x_2)\dots\phi(x_N). \quad (36)$$

Pour les fermions, sa détermination est beaucoup plus complexe et nécessite le calcul d'un déterminant de matrice, appelé *déterminant de Slater*, ce qui n'est souvent pas évident. Une question demeure : "Comment extraire $g(x)$ de Ψ ?".

Il est possible d'envisager une résolution analytique pour les bosons - relativement facile pour quelques-uns, les calculs deviennent rapidement très lourds plus le nombre de particules augmente. Cependant, une telle stratégie est à éviter en ce qui concerne les fermions - les calculs sont véritablement trop compliqués.

Il est davantage préconisé d'user de procédés numériques, et en particulier, de la méthode de *Monte-Carlo Metropolis*. Cette technique permet l'estimation de grandeurs moyennes physiques et est adaptée à notre système. Toutes ces grandeurs seront obtenues pour un système à l'équilibre. De manière générale, on génère tout d'abord une séquence aléatoire d'états accessibles au système, appelée *chaîne de Markov*[6]. Dans notre cas, il s'agira de proposer de légères modifications dans une configuration préalablement choisie, d'évaluer sa probabilité, puis, de l'accepter ou non. Le critère d'acceptabilité se construit du caractère stationnaire du système. Il implique que le nombre de déplacements acceptés quittant l'état i doit être exactement égal au nombre de déplacements qui conduisent à l'état i en partant de tous les autres états j .

Concrètement, la probabilité d'une configuration particulière étant donnée par $|\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2$, on propose à chaque étape une configuration $|\Psi(x'_1, x_2, \dots, x_N)|^2$ par exemple, avec $x'_1 = x_1 + \delta$. On soumet cette configuration nouvelle au critère d'acceptabilité et on répète l'opération. On comprend que plus le nombre d'itérations est grand, plus la constitution du système étudié dans son état d'équilibre devient précise⁸.

A partir de là, il faut élaborer un algorithme qui vient extraire les positions relatives des particules, afin de déterminer la densité $\rho(x)$, la densité de paire $\rho_2(x, x')$, pour pouvoir finalement calculer la fonction de corrélation de paires, $g(x)$ ⁹.

Grâce aux résultats, nous tenterons de mieux comprendre la distribution de bosons et de fermions à une dimension et espérons déduire, sinon conjecturer de certaines conséquences physiques d'un tel milieu.

8. La précision porte sur les valeurs moyennes des positions, c'est donc une précision statistique.

9. On remarque que la méthode numérique ne nous contraint pas à déterminer la fonction d'onde du système Ψ et que nous avons uniquement besoin de la probabilité d'une configuration $|\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2$.

Conclusion

Finalement, la notion d'indiscernabilité, véritablement novatrice dans la physique, accorde des propriétés mathématiques inédites à un système de particules identiques. Le postulat de symétrisation permet de leur donner un sens physique en caractérisant les phénomènes bosoniques et fermioniques. Ces nouvelles règles bousculent l'ordre classique établi - les dynamiques, les statistiques et les corrélations communément admises se retrouvent obsolètes. Dans certaines conditions, des phénomènes remarquables se produisent, à l'instar du *condensat de Bose-Einstein* et du *principe d'exclusion de Pauli*. Ceux-ci rendent possible des applications extraordinaires, telles que la superconductivité ou la superfluidité, nous accordant une meilleure compréhension de la matière.

Le principal enjeu réside dans la formulation mathématique de cette théorie. S'il est souvent possible de poser l'équation qui régit le système, il n'est néanmoins généralement pas permis de la résoudre simplement. Il faut donc faire appel à des outils numériques pour parvenir à extraire l'information désirée, à la manière de la méthode Monte-Carlo de Metropolis.

Dans la suite de notre projet, nous tâcherons d'utiliser la modélisation informatique afin de décrire la densité de présence de particules indiscernables à une dimension. La section 3 nous a montré que les effets de la dimensionnalité ne sont pas négligeables lorsque l'on décrit un système. Nous garderons donc à l'esprit que les futurs résultats seront uniquement valides pour des systèmes à une dimension.

Références

- [1] Mathias Albert. *Superfluidité et localisation quantique dans les condensats de Bose-Einstein unidimensionnels*. PhD thesis, Université Paris XI, 2009.
- [2] Claude Aslangul. Application de la mécanique quantique, de l'atome au solide. <<http://www.phys.ens.fr/cours/cours-mip/MagCh02.pdf>>, 2005-2006.
- [3] Jean-Louis Barrat and Jean-Pierre Hansen. Basic concepts for simple and complex liquids. 2003.
- [4] Jean Dalibard. Mécanique quantique avancée. <<https://hal.archives-ouvertes.fr/ce1-00092950/document>>, 2006.
- [5] Institut d'Optique. Statistiques quantiques. limite classique. <<http://paristech.institutoptique.fr/site.php?id=274&fileid=851>>.
- [6] Marc Hayoun. La méthode de monte-carlo. <http://www.insp.jussieu.fr/jsnum/01d/MC_Metropolis.pdf>, 2002.
- [7] John A. Vaccaro. H.M. Wiseman. The entanglement of indistinguishable particles shared between two parties. <<https://arxiv.org/pdf/quant-ph/0210002.pdf>>, 2003.
- [8] Jean Dalibard. Jean-Louis Basdevant. Mécanique quantique, cours de l'école polytechnique. <https://www.phys.ens.fr/~dalibard/Notes_de_cours/X_MQ_2003.pdf>, 2002.