T-5

Pseudopotentiels

Potentiels d'expression mathématique plus simple que le vrai potentiel $V(r)$ et conduisant à la même longueur de diffusion a

Potentiel V_δ

$$V_\delta(r) = g\,\delta(\vec{r}) \qquad g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}\,a$$

Conduit aux mêmes résultats que $V(r)$ à l'ordre 1 inclus en a

Potentiel V_{pseudo}

$$V_{pseudo}(r) = g\,\delta(\vec{r})\,\frac{\partial}{\partial r}\,r \qquad g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}\,a$$

Développement de Born convergent qui se resomme pour donner

$$f_k = -\frac{a}{1+ika}$$

Même expression que celle correspondant à $V(r)$, mais avec $r_e = 0$

T-6

Hamiltonien

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + V_{ext}(\vec{r}_i)\right] + \frac{1}{2}\sum_i\sum_{j\neq i} V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

Calcul variationnel de l'état fondamental

- Toutes les particules dans le même état $|\varphi\rangle$

$$|\psi\rangle = |\varphi(1)\rangle|\varphi(2)\rangle \cdots |\varphi(i)\rangle \cdots |\varphi(N)\rangle$$

- Quel est le meilleur $|\varphi\rangle$?

Celui qui minimise $E(\varphi) = \dfrac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$

Calcul de $\langle\psi|H|\psi\rangle$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = N\int d^3r\,\varphi^*(\vec{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r})\right] + N\int d^3r\,\varphi^*(\vec{r})\,V_{ext}(\vec{r})\,\varphi(\vec{r}) + \frac{N(N-1)}{2}\iint d^3r\,d^3r'\,\varphi^*(\vec{r})\varphi^*(\vec{r}\,')\,V(|\vec{r}-\vec{r}\,'|)\,\varphi(\vec{r})\varphi(\vec{r}\,')$$

Minimum de $E(\varphi)$ obtenu quand $\varphi(\vec{r})$ obéit à l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r})\varphi(\vec{r}) + (N-1)\left[\int d^3r'\,V(|\vec{r}-\vec{r}\,'|)\,|\varphi(\vec{r}\,')|^2\right]\varphi(\vec{r}) = \lambda\,\varphi(\vec{r})$$

λ : Multiplicateur de Lagrange

T-7

Interprétation

Chaque particule se déplace dans le potentiel extérieur $V_{ext}(\vec{r})$ et dans le champ moyen créé par les $(N-1)$ autres

Equation de Gross-Pitaevskii

$$V(|\vec{r}|) = g\,\delta(\vec{r}) = \frac{4\pi\hbar^2}{m}\,a\,\delta(\vec{r})$$

Normalisation choisie pour φ : $\int d^3r\,|\varphi(\vec{r})|^2 = 1$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r})\,\varphi(\vec{r}) + Ng\,|\varphi(r)|^2\varphi(\vec{r}) = \lambda\,\varphi(\vec{r})$$

Interprétation de λ

$$\frac{dE(\varphi)}{dN} = \frac{\partial E(\varphi)}{\partial N} + \underbrace{\frac{\delta E}{\delta\varphi}\,\frac{\partial\varphi}{\partial N}}_{=0} = \lambda$$

λ est égal au potentiel chimique μ

Relations générales découlant de l'éq. de GP

$$E = E_{cin} + E_{piège} + E_{inter}$$

$$\mu = \frac{1}{N}\left(E_{cin} + E_{piège} + 2E_{inter}\right)$$

$$2E_{cin} - 2E_{piège} + 3E_{inter} = 0$$

si $V_{ext}(\vec{r})$ est harmonique

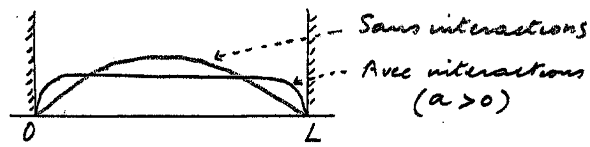
T-8

Longueur de relaxation ξ_0

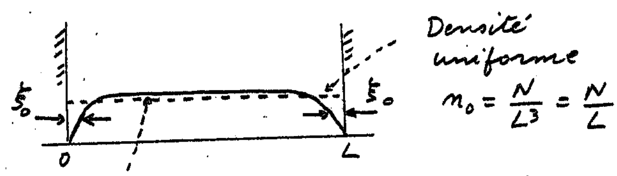
("Healing length")

N bosons dans une boite de côté L

Etude de l'état fondamental



Etude de φ au voisinage des parois



Densité réelle tenant compte des conditions aux limites

ξ_0 : Distance au bout de laquelle $n(\vec{r}) = N|\varphi(\vec{r})|^2$ atteint sa valeur constante

$$\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{8\pi a n_0}}$$

ξ_0 correspond au minimum de $E_{cin} + E_{inter}$