

Structure du condensat dans un piège harmonique

① Introduction

- N bosons identiques dans un piège harmonique à $T = 0^\circ \text{K}$.
- A partir de l'équation de Gross-Pitaevskii, nous essayons de répondre dans ce cours à un certain nombre de questions
 - Comment les interactions entre atomes modifient-elle la forme du condensat?
 - Quel est le paramètre qui caractérise l'importance des interactions?
 - Un condensat stable peut-il exister quand la longueur de diffusion est négative, c-à-d quand des interactions effectives attractives existent entre atomes?
- Dans ce cours, nous supposons donc que les atomes sont piégés par un potentiel $V_{\text{ext}}(r)$ harmonique, que nous prendrons la plupart du temps isotrope

$$V_{\text{ext}}(r) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2 \quad (6.1)$$

Une longueur importante associée à $V_{\text{ext}}(r)$ est l'extension spatiale σ de l'état fondamental

$$\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \quad (6.2)$$

② Etude des diverses énergies caractéristiques

a - Calcul simple d'ordres de grandeur

- Supposons les N atomes répartis dans une sphère de rayon R centrée en O , et examinons comment les diverses énergies (cinétique, de piégeage, d'interaction) introduites dans le cours V , dépendent de R , de manière ensuite à pouvoir déterminer la valeur de R qui minimise $E[\psi] = E_{\text{cin}} + E_{\text{piège}} + E_{\text{int}}$.
- Nous repérerons R par rapport à la longueur σ définie en (6.2) et caractérisant l'extension du nuage en l'absence d'interactions

$$w = \frac{R}{\sigma} \quad (6.3)$$

w est un paramètre sans dimension

Energie cinétique E_{cin}

L'énergie cinétique de confinement dans un volume de rayon R est $\hbar^2/2mR^2$, de sorte qu'on obtient pour les N atomes

$$E_{cin} \approx N \frac{\hbar^2}{2mR^2} = N \frac{\hbar^2}{2m\sigma^2} \frac{\sigma^2}{R^2} = \frac{1}{2} N \hbar \omega_0 \frac{1}{w^2} \quad (6.4)$$

Energie de piégeage $E_{piège}$

$$E_{piège} \approx N \frac{1}{2} m \omega_0^2 R^2 = N \frac{1}{2} m \omega_0^2 \sigma^2 \frac{R^2}{\sigma^2} = \frac{1}{2} N \hbar \omega_0 w^2 \quad (6.5)$$

Energie d'interaction : E_{int}

- Les N atomes répartis dans la sphère de rayon R font apparaître une densité

$$n \approx \frac{3N}{4\pi R^3} \quad (6.6)$$

et une énergie d'interaction

$$E_{int} = \frac{1}{2} g \int d^3r n^2 \approx \frac{1}{2} g \left(\frac{3N}{4\pi R^3} \right)^2 \frac{4\pi R^3}{3} = \frac{1}{2} g \frac{3N^2}{4\pi R^3} \quad (6.7)$$

- En utilisant $g = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a$, on obtient

$$E_{int} = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{mR^3} a N^2 = \frac{1}{2} N \hbar \omega_0 \left[3 \frac{\hbar}{m\omega_0} \frac{aN}{R^3} \right] = \frac{1}{2} N \hbar \omega_0 \frac{3aN}{\sigma} \frac{1}{w^3} \quad (6.8)$$

b - Calcul variationnel plus précis

- Les calculs d'ordre de grandeur précédents peuvent être améliorés en prenant dans l'espace des fonctions d'onde produits [voir équation (5.2) du cours V], un sous-espace de fonctions d'ondes Gaussiennes normalisées, de "largeur" $R = w\sigma$

$$\varphi(x, y, z) = \frac{1}{\pi^{3/4} (w^3 \sigma^3)^{1/2}} e^{-(x^2 + y^2 + z^2)/2w^2\sigma^2} \quad (6.9)$$

- Le calcul des valeurs moyennes des énergies cinétique, de piégeage et d'interaction conduit alors à des intégrales gaussiennes qui peuvent être évaluées analytiquement et on obtient pour E_{cin} , $E_{piège}$, E_{int} des expressions ayant la même dépendance en N , w que (6.4), (6.5), (6.8), mais avec des coefficients légèrement différents :

$$E_{cin} = \frac{3}{4} N \hbar \omega_0 \frac{1}{w^2} \quad (6.10.a)$$

$$E_{piège} = \frac{3}{4} N \hbar \omega_0 w^2 \quad (6.10.b)$$

$$E_{int} = \frac{1}{\sqrt{2}\pi} N \hbar \omega_0 \frac{aN}{\sigma} \frac{1}{w^3} \quad (6.10.c)$$

- En ajoutant (6.10.a), (6.10.b) et (6.10.c), on obtient pour l'énergie moyenne totale

$$E_{\text{totale}} = N \hbar \omega_0 \left[\frac{3}{4} \frac{1}{w^2} + \frac{3}{4} w^2 + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{aN}{\sigma} \frac{1}{w^3} \right] \quad (6.11)$$

c - Paramètre sans dimension caractérisant les interactions

- En l'absence d'interactions ($a=0$), le dernier terme de (6.11) est nul et le minimum de la somme des 2 premiers termes (meilleur compromis possible entre énergie cinétique et énergie potentielle de piégeage) est réalisé pour $w=1$

- Supposons maintenant $a \neq 0$. Pour $w=1$, l'ordre de grandeur du dernier terme de (6.11) par rapport aux deux premiers est caractérisé par le paramètre sans dimension

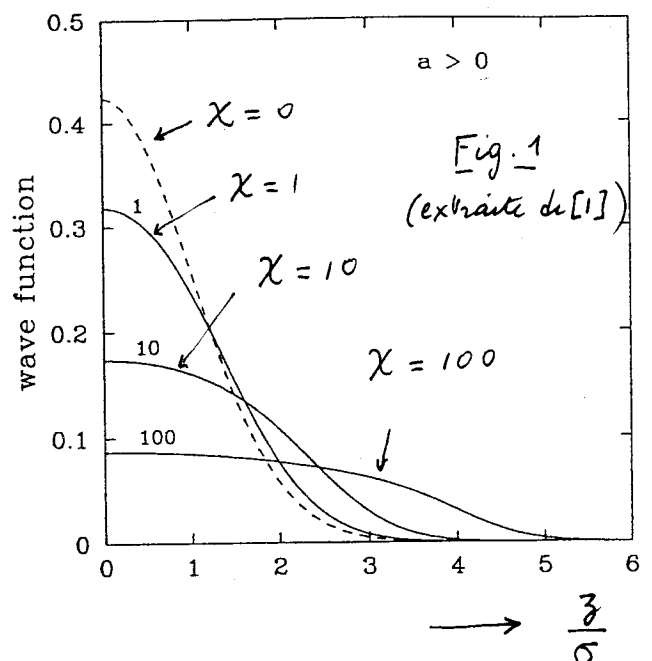
$$\chi = \frac{aN}{\sigma} \quad (6.12)$$

- Si $\chi \ll 1$ le dernier terme de (6.11) est négligeable par rapport aux 2 premiers au voisinage des valeurs de w (c'est-à-dire de R) qui minimisent la somme de ces 2 termes. On peut alors négliger les interactions en première approximation.
- Si $\chi \gg 1$, le dernier terme de (6.11) est prépondérant au voisinage de $w=1$. Les interactions jouent un rôle essentiel. Il faut déterminer l'éventuel nouveau minimum de (6.11) en distinguant les cas $a > 0$ (interactions effectives répulsives) et $a < 0$ (interactions effectives attractives).

③ Cas des longueurs de diffusion positives

a - Existence d'un condensat stable pour toute valeur de χ

- Les 1^{re} et le 3^{ème} termes de (6.11) sont des fonctions positives et décroissantes de w , alors que le 2^{ème} terme est une fonction croissante. Il existe donc toujours une valeur de w qui minimise E_{total} .
- Une telle prédiction est vérifiée par une résolution numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii. Voir Fig. 1 (extraite de [1]) qui donne l'évolution de $\varphi(z)$ pour des valeurs croissantes de χ



On constate que, par rapport à ce qui se passe en l'absence d'interaction (courbe en traits tiretés de la figure 1), la fonction d'onde $\varphi(z)$ caractérisant les atomes condensés le long de Oz s'élargit progressivement quand X croît : le condensat "gonfle".

b - Rayon du condensat aux fortes densités ($X \gg 1$)

- Si $X \gg 1$, le 1^{er} terme de (6.11) peut être négligé par rapport au 3^{ème} pour déterminer le minimum de (6.11). En fait, pour $w \gg 1$, le 1^{er} terme de (6.11) finit par l'emporter sur le 3^{ème} et il faudra vérifier a posteriori que pour la valeur $w_{\min}$ de w qui minimise (6.11), le 1^{er} terme est encore négligeable par rapport au 3^{ème}.
- A des coefficients numériques près, de l'ordre de 1, il faut rechercher le minimum de $w^2 + \frac{X}{w^3}$. On en déduit que $w_{\min} \propto X^{1/5}$ et donc

$$R \propto \sigma X^{1/5} \gg \sigma \quad \text{si } X \gg 1 \quad (6.13)$$

Le rayon du condensat croît donc comme la racine cinquième du nombre N d'atomes.

- Calculons maintenant le rapport $E_{\text{int}}/E_{\text{cin}}$ pour la valeur $w_{\min} \approx X^{1/5}$ qui minimise $E_{\text{piège}} + E_{\text{int}}$.

$$\left. \frac{E_{\text{int}}}{E_{\text{cin}}} \right|_{w=w_{\min}} \approx \frac{X/w_{\min}^3}{1/w_{\min}^2} \approx \frac{X}{w_{\min}} \approx X^{4/5} \gg 1 \quad (6.14)$$

Il était donc bien légitime (quand $X \gg 1$) de négliger le premier terme de (6.11) quand on étudie le minimum de E_{totale} en se limitant aux 2 derniers termes de (6.11).

- On déduit de ce qui précède que l'on peut, à la limite $X \gg 1$, négliger le 1^{er} terme de l'équation de G-P, $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi$, qui est associé à l'énergie cinétique de confinement. Une telle approximation, appelée "approximation de Thomas-Fermi", sera reprise plus en détail au § 5, après l'étude du cas $a < 0$. Elle a l'avantage de conduire à des prédictions analytiques pour plusieurs grandeurs physiques relatives au condensat.

c - Les interactions peuvent jouer un rôle important même si le milieu est dilué

- Pour voir si le milieu est dilué ou non, comparons la longueur de diffusion a qui caractérise les collisions à la

distance moyenne l entre atomes. Comme les N atomes sont dans un volume $R^3 \approx w^3 \sigma^3$, on a

$$l \approx R N^{-1/3} \quad (6.15)$$

Comme R est égal à σ pour $a \rightarrow 0$ et supérieure à σ quand a croît (voir Fig. 1), on a $l > \sigma N^{-1/3}$ et par suite

$$\frac{a}{l} < \frac{a}{\sigma} N^{1/3} \quad (6.16)$$

- Comme a/l ne croît au mieux que comme $N^{1/3}$ alors que χ croît comme N [voir (6.12)], on conçoit qu'on puisse avoir des situations où $\chi \gg 1$ (interactions fortes) alors que $a \ll l$ (milieu dilué).

Par exemple, pour les expériences du MIT sur le sodium, $a \approx 3 \text{ nm}$, $\sigma \approx 30 \mu\text{m}$, $N \approx 10^6$. On a alors

$$\chi = \frac{aN}{\sigma} = 10^{-4} \times 10^6 = 10^2 \gg 1 \quad (6.17)$$

$$\frac{a}{l} < \frac{a}{\sigma} N^{1/3} = 10^{-4} \times 10^2 = 10^{-2} \ll 1 \quad (6.18)$$

④ Cas des longueurs de diffusion négative - Critère de stabilité du condensat. (voir Références [1], [2], [5], [6], [7]).

a - Variation de l'énergie totale avec le rayon du condensat

- Pour $w \ll 1$, c'est le dernier terme de (6.11) qui est prépondérant. Comme $a < 0$, E_{totale} tend donc vers $-\infty$ quand $w \rightarrow 0$.

- Par contre, quand $w \gg 1$, c'est le deuxième terme qui l'emporte et E_{totale} tend vers $+\infty$.

E_{totale} ne présente plus alors nécessairement un minimum en fonction de w . Si N est trop grand, E_{totale} varie de manière monotone en croissant de $-\infty$ à $+\infty$. Voir Fig. 2 (extraite de [1]) qui donne la variation avec w de E_{totale}/N , E_{totale} étant donné par (6.11). Il y donc une valeur critique de χ au dessus de laquelle il n'y a pas de condensat stable.

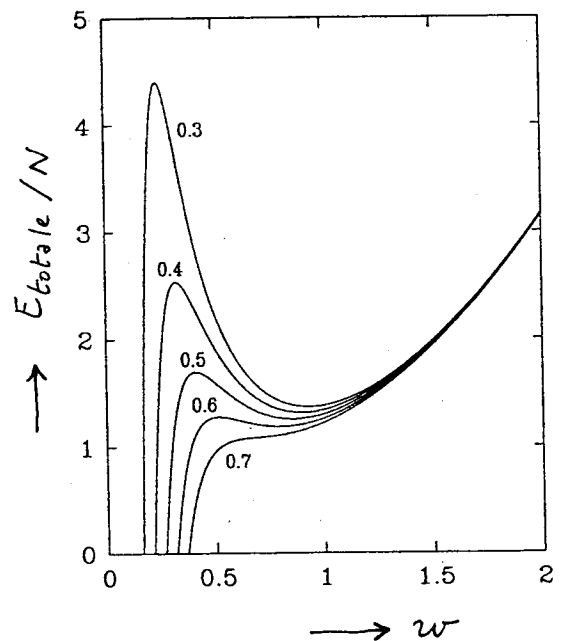


Fig. 2 (extraite de [1])
les chiffres indiqués auprès de chaque courbe sont les valeurs correspondantes de χ

b - Condition de stabilité - Régime critique.

- Pour $\chi = \chi_{\text{crit}}$, la courbe donnant E_{rotale} en fonction de w présente un point d'inflexion à tangente horizontale. Soit w_{crit} l'abscisse de ce point. On a en ce point

$$\frac{1}{N\hbar\omega_0} \frac{dE_{\text{rotale}}}{dw} = 0 \quad \frac{1}{N\hbar\omega_0} \frac{d^2E_{\text{rotale}}}{dw^2} = 0 \quad (6.19)$$

- Remplaçons $\frac{aN}{5}$ par χ_{crit} dans (6.11). Les 2 équations précédentes deviennent

$$\begin{cases} -\frac{6}{4} w_{\text{crit}}^{-3} + \frac{6}{4} w_{\text{crit}} + \frac{3}{\sqrt{2\pi}} \chi_{\text{crit}} w_{\text{crit}}^{-4} = 0 & (6.20.a) \\ \frac{18}{4} w_{\text{crit}}^{-4} + \frac{6}{4} - \frac{12}{\sqrt{2\pi}} \chi_{\text{crit}} w_{\text{crit}}^{-5} = 0 & (6.20.b) \end{cases}$$

- Multiplions la 1^{ère} équation par $\frac{4}{w_{\text{crit}}}$ et ajoutons la à la 2^{ème}. On obtient $-6w_{\text{crit}}^{-4} + 30 = 0$, ce qui donne

$$w_{\text{crit}} = 5^{-1/4} = 0.669 \quad (6.21)$$

En reportant cette valeur de w_{crit} dans l'une des 2 équations (6.20), on obtient enfin

$$\chi_{\text{crit}} = \frac{2\sqrt{2\pi}}{5} 5^{-1/4} = 0.671 \quad (6.22)$$

- Le calcul précédent repose sur l'équation (6.11) qui résulte elle-même d'un calcul variationnel utilisant le sous-espace des fonctions gaussiennes (6.9).

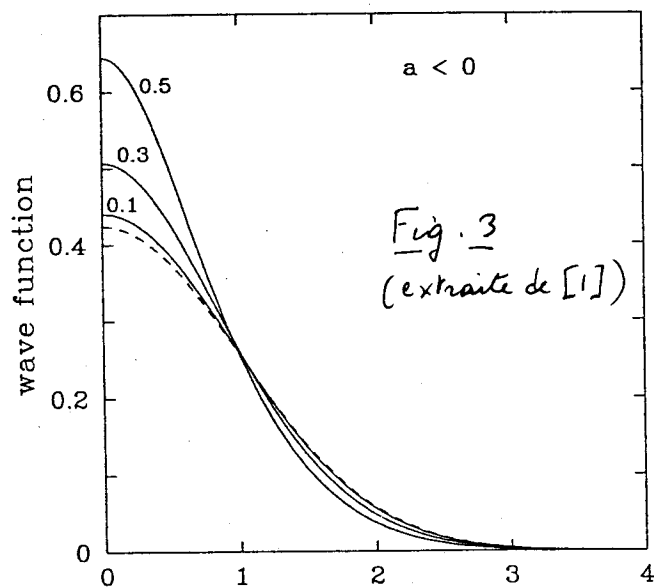
On peut s'affranchir de la restriction précédente en résolvant numériquement l'équation de Gross-Pitaevskii.

La figure 3 (extraite de [1]) représente la fonction d'onde du condensat ainsi calculée le long de Oz pour des valeurs croissantes de χ . Sous l'effet des interactions qui apparaissent comme attractives, le rayon du condensat décroît. Au delà d'une certaine valeur critique de χ trouvée égale à

$$\chi_{\text{crit}} = 0.575 \quad (6.23)$$

(voir Ref [2]), on trouve que l'équation de G-P n'a plus de solution. La valeur

exacte (6.23) de χ_{crit} n'est pas trop éloignée de la valeur approchée (6.22).



→ 3/6

⑤ Limite de Thomas-Fermi ($a > 0$)

VI-7

Nous supposons dans tout ce paragraphe $a > 0$ (interactions effectives répulsives) et $\chi \gg 1$ (interactions fortes).

a - Limite de l'équation de Gross-Pitaevskii pour $\chi \gg 1$

Forme du condensat

- Nous avons déjà mentionné dans le § 3 b, que le terme d'énergie cinétique devient négligeable devant le terme d'interactions à la limite $\chi \gg 1$, ce qui permet de négliger le terme $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi$ dans l'équation (5.12) qui devient alors, en remplaçant $V_{ext}(\vec{r})$ par $\frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2$, $N-1$ par N et λ par μ [$\varphi(\vec{r})$ étant réel] :

$$\frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2 \varphi(\vec{r}) + N g [\varphi(\vec{r})]^3 = \mu \varphi(\vec{r}) \quad (6.24)$$

- On en déduit

$$[\varphi(r)]^2 = \frac{1}{gN} \left[\mu - \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2 \right] \quad (6.25)$$

La densité de particules $n(r) = N [\varphi(r)]^2$ a donc la forme d'une parabole inversée [voir Fig. 4] qui part de la valeur μ/g en $r=0$ et qui s'annule au delà de $r_{\max}$ où

$$r_{\max} = \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega_0^2}} \quad (6.26)$$

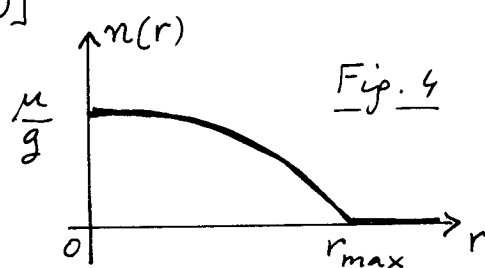


Fig. 4

- Notons que l'approximation de Thomas-Fermi n'est plus valable au voisinage de $r=r_{\max}$. Le fait de tenir compte du terme d'énergie cinétique au voisinage de ce point "arrondit les angles" et supprime la discontinuité de la dérivée de $n(r)$ en $r=r_{\max}$ [voir références [3] et [4]].

b - Potentiel chimique μ et énergie totale par particule

- La condition de normalisation de φ

$$\int d^3r [\varphi(r)]^2 = 1 \quad (6.27)$$

permet de calculer μ à partir de l'équation (6.25). En reportant (6.25) dans (6.27) on obtient

$$4\pi \int_0^{r_{\max}} dr r^2 \frac{1}{gN} \left[\mu - \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2 \right] = 1 \quad (6.28)$$

L'intégrale sur r de (6.28) se calcule sans difficulté. En utilisant l'expression (6.26) de $r_{\max}$ et $g = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a$, on obtient

$$\mu = \frac{\hbar \omega_0}{2} \left(15 \frac{a}{\sigma} \right)^{2/5} \quad (6.29)$$

- Soit $E(N)$ l'énergie totale moyenne du système de N particules. Par définition même de μ

$$\mu = \frac{\partial E(N)}{\partial N} \quad (6.30)$$

Comme ω_0, a, σ ne dépendent pas de N , on déduit alors par intégration de (6.29)

$$E(N) = \frac{\hbar \omega_0}{2} \left(15 \frac{a}{\sigma} \right)^{2/5} \frac{N^{7/5}}{7/5} \quad (6.31)$$

et par suite pour l'énergie totale par particule

$$\frac{E(N)}{N} = \frac{5}{7} \mu \quad (6.32)$$

- D'après (6.31), $E(N)$ varie comme $N^{7/5}$. Un raisonnement simpliste conduirait à une variation en N^2 (il y a $N(N-1)/2 \approx N^2/2$ paires de particules). L'erreur de ce raisonnement simpliste est qu'il néglige l'expansion du condensat. Au fur et à mesure qu'on ajoute des particules, le rayon du condensat croît, ce qui modifie les interactions entre particules. On peut retrouver la dépendance en $N^{7/5}$ de $E(N)$ à partir du résultat (6.13) sur le rayon du condensat qui croît en $\chi^{1/5}$ c-à-d en $N^{1/5}$. Le volume croît donc en $N^{3/5}$ et la densité de particules en $N/N^{3/5} = N^{2/5}$. L'énergie d'interaction par particule croît donc en $g N^{2/5}$ et l'énergie totale en $N^{7/5}$.

d - Energie libérée après coupure brutale du piège

- Avant la coupure du piège, l'énergie totale s'écrit

$$E_{\text{totale}}^{\text{avant}} = E_{\text{cin}}^{\text{avant}} + E_{\text{piège}}^{\text{avant}} + E_{\text{int}}^{\text{avant}} \quad (6.33)$$

Comme nous supposons ici $\chi \gg 1$, le 1^{er} terme, $E_{\text{cin}}^{\text{avant}}$, est négligeable. La coupure brutale du piège fait passer brutalement l'énergie de piégeage de $E_{\text{piège}}^{\text{avant}}$ à 0. Juste après la coupure du piège, on a donc

$$E_{\text{totale}}^{\text{après}} = E_{\text{int}}^{\text{avant}} \quad (6.34)$$

- Sous l'effet des interactions répulsives, le condensat va "exploser", les particules vont s'éloigner et toute l'énergie $E_{\text{totale}}^{\text{après}}$ va se transformer en énergie cinétique. C'est cette énergie cinétique qui est mesurée expérimentalement et qui est appelée énergie libérée. On a donc

$$E_{\text{libérée}} = E_{\text{int}}^{\text{avant}} = E_{\text{int}} \quad (6.35)$$

En effet $E_{\text{int}}^{\text{avant}}$ est l'énergie d'interaction du condensat en régime d'équilibre.

- Pour calculer E_{int} , utilisons les relations générales (5.26), (5.25) et (5.37) établies dans le cours V.

$$E_{\text{totale}} = E_{\text{cin}} + E_{\text{piège}} + E_{\text{int}} \quad (6.36)$$

$$\mu = \frac{1}{N} (E_{\text{cin}} + E_{\text{piège}} + 2E_{\text{int}}) \quad (6.37)$$

$$2E_{\text{cin}} - 2E_{\text{piège}} + 3E_{\text{int}} = 0 \quad (6.38)$$

Comme on peut négliger ici E_{cin} (car $\chi \gg 1$), l'équation (6.38) donne $E_{\text{piège}} = \frac{3}{2} E_{\text{int}}$, ce qui reporté dans (6.37) conduit à

$$E_{\text{int}} = \frac{2}{7} \mu N \quad (6.39)$$

L'énergie libérée par particule est donc, d'après (6.35), (6.39), (6.29)

$$\frac{E_{\text{libérée}}}{N} = \frac{2}{7} \mu = \frac{\hbar \omega_0}{7} \left(15 \frac{a N}{\sigma} \right)^{2/5} \quad (6.40)$$

Elle varie en $N^{2/5}$. C'est bien ce que confirme l'expérience (voir Fig. 1 du cours I).

e - Rayon du condensat et rapport d'aspect ("aspect ratio")

- Nous prendrons pour rayon du condensat la valeur maximale r_{max} de r citée en (6.26). En reportant la valeur (6.29) de μ dans cette expression, on obtient

$$r_{\text{max}} = \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega_0^2}} = \sigma \left(\frac{15 a N}{\sigma} \right)^{1/5} = \sigma (15 \chi)^{1/5} \quad (6.41)$$

- Nous avons supposé jusqu'ici le piège isotrope. Tous les calculs précédents se généralisent aisément au cas d'un piège anisotrope. Pour un piège de symétrie de révolution autour de Oz , caractérisé par les fréquences ω_z (axiale) et $\omega_{\perp}$ (radiale), il faut remplacer dans le membre de gauche de (6.24) $\frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2$ par $\frac{1}{2} m [\omega_z^2 z^2 + \omega_{\perp}^2 r^2]$. Les valeurs maximales z_{max} et r_{max} de z et r sont alors données par les équations

$$\begin{cases} \mu - \frac{1}{2} m \omega_z^2 z_{\text{max}}^2 = 0 \\ \mu - \frac{1}{2} m \omega_{\perp}^2 r_{\text{max}}^2 = 0 \end{cases} \quad (6.42)$$

ce qui conduit pour le rapport d'aspect du condensat en présence d'interactions

$$\frac{z_{\text{max}}}{r_{\text{max}}} = \frac{\omega_{\perp}}{\omega_z} \quad (6.43)$$

- En l'absence d'interactions, les dimensions du condensat sont données par $\sqrt{\hbar/m\omega_3}$ le long de Oz et $\sqrt{\hbar/m\omega_\perp}$ dans les directions radiales, ce qui conduit au rapport d'aspect

$$\frac{\sigma_3}{\sigma_\perp} = \sqrt{\frac{\omega_\perp}{\omega_3}} \quad (6.44)$$

- Comme $\omega_\perp/\omega_3 > \sqrt{\omega_\perp/\omega_3}$ (si $\omega_\perp > \omega_3$) on en déduit, en comparant (6.43) et (6.44) que les interactions augmentent l'allure anisotrope du condensat

f - Densité au centre du condensat

- Revenons à un piège isotrope. Pour $\chi=0$, la densité au centre se calcule à partir du carré de (6.9), évalué en $\vec{r}=\vec{0}$ avec $w=1$. Pour $\chi \gg 1$, on voit sur la figure 4 que $n(\vec{0}) = \mu/gN$. En utilisant la valeur (6.29) de μ , $g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}a$ on obtient

$$\frac{(n(\vec{0}))_{\chi \gg 1}}{(n(\vec{0}))_{\chi=0}} = \frac{15^{2/5} \pi^{1/2}}{8} \chi^{-3/5} \quad (6.45)$$

- La densité au centre décroît donc en $\chi^{-3/5}$ quand χ croît.

Références

- [1] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, S. Stringari, Article de revue à paraître dans Rev. Mod. Phys.
- [2] P. Ruprecht, M. Holland, K. Burnett, M. Edwards Phys. Rev. A 51, 4704 (1995)
- [3] G. Baym, C. Pethick, Phys. Rev. Lett 76, 6 (1996)
- [4] F. Dalfovo, L. Pitaevskii, S. Stringari, Phys. Rev. A 54, 4213 (1996)
- [5] L. Pitaevskii, Phys. Lett. A 221, 14 (1996)
- [6] Yu Kagan, G. Shlyapnikov, J. Walraven, Phys. Rev. Lett. 76, 2670 (1996)
- [7] C. Sacket, H. Stoof, R. Hulet, Phys. Rev. Lett. 80, 2031 (1998)