

① Introduction

- On considère N bosons identiques piégés dans un potentiel extérieur $V_{\text{ext}}(\vec{r})$, en équilibre à la température $T=0^\circ\text{K}$.
- Si les bosons n'interagissaient pas, il seraient tous dans l'état fondamental du piège.
- En présence d'interactions, la structure d'un tel condensat est modifiée. En principe, il faudrait calculer l'état fondamental du Hamiltonien H .

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \quad (5.1)$$

Le dernier terme de (5.1) représente les interactions entre particules. Le facteur $1/2$ est dû au fait qu'il ne faut pas tenir compte 2 fois de l'interaction entre les particules i et j .

- La détermination exacte de l'état fondamental de (5.1) n'est en général pas possible. Nous allons ici rechercher un état fondamental approché en considérant une famille variationnelle d'états et en minimisant $\langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$ à l'intérieur de cette famille.

- Considérons l'état

$$|\Psi\rangle = |\varphi(1)\rangle |\varphi(2)\rangle \dots |\varphi(i)\rangle \dots |\varphi(N)\rangle \quad (5.2)$$

correspondant à une situation où tous les bosons sont dans le même état $|\varphi\rangle$. Le ket (5.2) est visiblement complètement symétrique et est donc acceptable pour décrire des bosons identiques.

- Considérons maintenant le sous-espace formé par les états (5.2) correspondant à tous les $|\varphi\rangle$ possibles. Dans ce sous-espace, l'état qui approxime le mieux l'état fondamental de H est obtenu pour le $|\varphi\rangle$ qui minimise la quantité

$$E[\varphi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (5.3)$$

$E[\varphi]$ est une fonctionnelle de φ qui, à chaque φ , associe un nombre $E[\varphi]$.

- La méthode dont nous venons d'exposer le principe est analogue à la méthode de Hartree-Fock en physique atomique. Comme l'état (5.2) est un produit tensoriel, il ne peut pas

décrire les corrélations entre particules. l'équation obtenue pour $|\psi\rangle$ en minimisant (5.3) décrira le mouvement de chaque particule dans le champ moyen des $N-1$ autres

② Dérivation de l'équation de Gross-Pitaevskii

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

Contributions des termes d'énergie cinétique et d'énergie de piégeage

$$N \int d^3r \left[\psi^*(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta \psi(\vec{r}) + \psi^*(\vec{r}) V_{\text{ext}}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \right] \quad (5.4)$$

En écrivant que l'intégrale de $\vec{\nabla} [\psi^* \vec{\nabla} \psi] = \psi^* \Delta \psi + (\vec{\nabla} \psi)^2$ est nulle si ψ s'annule à l'infini (théorème de la divergence), on peut transformer le 1^{er} terme de (5.4) en

$$N \int d^3r \frac{\hbar^2}{2m} [\vec{\nabla} \psi(\vec{r})]^2 \quad (5.5)$$

Contribution du terme d'interaction

$$\frac{N(N-1)}{2} \iint d^3r d^3r' \psi^*(\vec{r}) \psi^*(\vec{r}') V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \psi(\vec{r}) \psi(\vec{r}') \quad (5.6)$$

b - Equations variationnelles

- Au lieu de minimiser (5.3), il est plus commode de minimiser $\langle \psi | H | \psi \rangle$ avec la contrainte $\langle \psi | \psi \rangle = 1$. L'utilisation des multiplicateurs de Lagrange conduit alors à annuler la variation

$$\delta \langle \psi | H | \psi \rangle - \lambda \delta \langle \psi | \psi \rangle = 0 \quad (5.7)$$

- Le calcul de $\delta \langle \psi | H | \psi \rangle$ et $\delta \langle \psi | \psi \rangle$ fait intervenir des intégrales contenant $\delta \psi$ et $\delta \psi^*$. Comme on peut faire varier indépendamment $\text{Re } \delta \psi$ et $\text{Im } \delta \psi$, il est possible de considérer $\delta \psi$ et $\delta \psi^*$ comme des variations indépendantes. L'équation (5.7) donne:

$$N \int d^3r \delta \psi^*(\vec{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + V_{\text{ext}}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) + (N-1) \left[\int d^3r' V(|\vec{r} - \vec{r}'|) |\psi(\vec{r}')|^2 \right] \psi(\vec{r}) - \lambda \psi(\vec{r}) \right\} + \text{c.c.} = 0 \quad (5.8)$$

Notons que le facteur $\frac{1}{2}$ apparaissant dans (5.6) a disparu dans le terme en $V(|\vec{r} - \vec{r}'|)$ de (5.8). Il y a en effet deux ψ^* dans (5.6). La variation de ψ^* donne donc 2 termes qui se révèlent être égaux par permutation des variables muettes $\vec{r}$ et $\vec{r}'$.

- Comme $\delta \psi^*$ peut être quelconque, la solution de (5.7) s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V_{\text{ext}}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) + (N-1) \left[\int d^3r' V(\vec{r}-\vec{r}') |\varphi(\vec{r}')|^2 \right] \varphi(\vec{r}) = \lambda \varphi(\vec{r}) \quad (5.9)$$

Le dernier terme du membre de gauche représente le potentiel moyen exercé sur une particule par les $(N-1)$ autres. L'équation (5.9) a la structure d'une équation de Schrödinger, chaque particule de masse m évoluant dans la somme du potentiel extérieur et du potentiel moyen créé par les autres.

- Si $N \gg 1$, on peut remplacer $N-1$ par N dans (5.9)

- Normalisation

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \longrightarrow \langle \varphi | \varphi \rangle = 1 \quad (5.10)$$

c - Remplacement du vrai potentiel d'interaction par V_{pseudo}

- La méthode variationnelle utilisée ici néglige les corrélations à courte distance entre atomes. Comme le gaz est supposé dilué, les atomes sont la plupart du temps loins les uns des autres et c'est alors le comportement asymptotique des fonctions d'onde qui est important pour décrire leurs interactions. On sait alors que l'on peut utiliser V_{pseudo} à la place de $V(r)$, si toutefois $kr_e \ll 1$, r_e étant la portée effective (voir cours IV).

- L'élément de matrice de V qui intervient ici est écrit en (5.6)

Remplaçons V par V_{pseudo} dans cet élément de matrice. Les fonctions d'onde $\varphi(\vec{r})$ qui seront déterminées plus loin ne conduisent à aucune singularité de $\varphi(\vec{r})\varphi(\vec{r}')$ en $\vec{r}=\vec{r}'$. L'élément de matrice (5.6) de V_{pseudo} est donc égal à celui de V_g où

$$V_g = g \delta(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a \delta(\vec{r}-\vec{r}') \quad (5.11)$$

- Si l'on reporte (5.11) dans (5.9) et si on suppose $N \gg 1$, on obtient

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V_{\text{ext}}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) + N g |\varphi(\vec{r})|^2 \varphi(\vec{r}) = \lambda \varphi(\vec{r}) \end{cases} \quad (5.12)$$

$$\begin{cases} \int d^3r |\varphi(\vec{r})|^2 = 1 \end{cases} \quad (5.13)$$

- Il arrive souvent qu'on choisisse pour $\varphi(r)$ une normalisation différente de (5.13) :

$$\int d^3r |\varphi(\vec{r})|^2 = N \quad (5.14)$$

$|\varphi(\vec{r})|^2$ représente alors la densité $n(\vec{r})$ de particules au point $\vec{r}$

$$|\varphi(\vec{r})|^2 = n(\vec{r}) \quad (5.15)$$

V-4

L'équation (5.12) devient alors (si $N \gg 1$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V_{\text{ext}}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) + g n(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) = \lambda \varphi(\vec{r}) \quad (5.16)$$

d - Interprétation du multiplicateur de Lagrange λ

- Si l'on choisit la normalisation (5.13), $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, et la fonctionnelle $E[\varphi]$ écrite en (5.3), qui représente la valeur moyenne de H , s'écrit compte tenu de (5.4) et (5.6) (où V est remplacé par V_δ)

$$E[\varphi] = N \int d^3r \left[\varphi^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta \varphi(\vec{r}) + \varphi^*(\vec{r}) V_{\text{ext}}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \right] + \frac{N(N-1)}{2} g \int d^3r |\varphi(\vec{r})|^4 \quad (5.17)$$

- $E[\varphi]$ dépend de N , explicitement par les coefficients N et $\frac{N(N-1)}{2}$ apparaissant dans (5.17), implicitement à travers φ , puisque l'équation (5.12) donnant φ dépend de N . On en déduit

$$\begin{aligned} \frac{\partial E[\varphi]}{\partial N} &= \int d^3r \left[\varphi^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta \varphi(\vec{r}) + \varphi^*(\vec{r}) V_{\text{ext}}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \right] \\ &\quad + \left(N - \frac{1}{2} \right) g \int d^3r |\varphi(\vec{r})|^4 \\ &\quad + \frac{\delta E}{\delta \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial N} \end{aligned} \quad (5.18)$$

Dans la dernière ligne de (5.18), $\partial \varphi / \partial N$ est la variation $\delta \varphi$ de φ quand on fait varier N d'une unité. La dérivée fonctionnelle $\delta E / \delta \varphi$ est la variation de $E[\varphi]$ quand on fait varier φ de $\delta \varphi$. Mais φ est obtenu précisément en écrivant que $E[\varphi]$ est stationnaire pour toute variation $\delta \varphi$ de φ . On a donc pour la solution φ de (5.12) $\delta E / \delta \varphi = 0$ et la 3^{ème} ligne de (5.18) s'annule.

- Par ailleurs, en multipliant les 2 membres de (5.12) par $\varphi^*(\vec{r})$ et en intégrant sur $\vec{r}$, on obtient, compte tenu de (5.13)

$$\lambda = \int d^3r \left[\varphi^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta \varphi(\vec{r}) + \varphi^*(\vec{r}) V_{\text{ext}}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) + (N-1) g |\varphi(\vec{r})|^4 \right] \quad (5.19)$$

En comparant (5.19) à (5.18) (où la 3^{ème} ligne est remplacée par 0), on constate que $\lambda = \partial E[\varphi] / \partial N$, à la limite $N \gg 1$ où $N - \frac{1}{2} \simeq N - 1 \simeq N$.

λ est donc la variation de l'énergie moyenne du système quand on lui ajoute une particule. Comme cette transformation se fait à entropie S constante (on reste à $T=0$ de sorte que $S=0$), $\partial E[\varphi] / \partial N$ n'est autre que le potentiel chimique μ [voir Eq. (2.38) du cours 97-98]

$$\lambda = \frac{\partial E[\varphi]}{\partial N} = \text{Potentiel chimique } \mu \quad (5.20)$$

En remplaçant λ par μ dans (5.12) ou (5.16), on obtient l'équation de Gross-Pitaevskii.

③ Etablissement de quelques relations générales

a - Diverses énergies contribuant à l'énergie de l'état fondamental

Les 3 termes apparaissant dans (5.17) correspondent respectivement à l'énergie cinétique, l'énergie de piégeage, l'énergie d'interaction

Energie cinétique E_{cin}

$$E_{cin} = N \int d^3r \varphi^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta \varphi(\vec{r}) = N \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r |\vec{\nabla} \varphi(\vec{r})|^2 \quad (5.21)$$

On a utilisé (5.5).

Très souvent $\varphi(\vec{r})$ est réel. La normalisation (5.13) donne alors $\varphi^2(\vec{r}) = \frac{1}{N} n(\vec{r})$ où $n(\vec{r})$ est la densité de particules en r c'est à dire encore $\varphi(\vec{r}) = \sqrt{n(\vec{r})} / N$. On a alors

$$E_{cin} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \left(\vec{\nabla} \sqrt{n(\vec{r})} \right)^2 \quad (5.22)$$

Ce terme, proportionnel à $\hbar^2$, est appelé parfois "pression quantique" car il représente l'énergie cinétique de confinement

Energie de piégeage $E_{piège}$

$$E_{piège} = N \int d^3r |\varphi(r)|^2 V_{ext}(\vec{r}) = \int d^3r n(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) \quad (5.23)$$

On a remplacé $N |\varphi(\vec{r})|^2$ par $n(\vec{r})$

Energie d'interaction E_{int}

$$E_{int} = \frac{N(N-1)}{2} g \int d^3r |\varphi(\vec{r})|^4 \simeq \frac{N^2}{2} g \int d^3r |\varphi(\vec{r})|^4 = \frac{1}{2} g \int d^3r n^2(\vec{r}) \quad (5.24)$$

b - Expression du potentiel chimique

- En remplaçant dans (5.19) λ par μ et $(N-1)$ par N , on obtient, compte tenu de (5.21), (5.23), (5.24)

$$\mu = \frac{1}{N} (E_{cin} + E_{piège} + 2 E_{int}) \quad (5.25)$$

alors que l'énergie totale E est, d'après le § a précédent

$$E = E_{cin} + E_{piège} + E_{int} \quad (5.26)$$

- Interprétation du facteur 2 qui apparaît avec E_{int} dans (5.25) alors qu'il n'apparaît pas avec E_{int} dans (5.26)

Dans le système de N bosons, il y a $N(N-1)/2$ paires distinctes de particules et il est donc normal que E_{int} dans (5.24) contienne un facteur $N(N-1)/2$, multipliant l'énergie d'interaction par paire.

Si l'on amène maintenant 1 particule supplémentaire, il faut

maintenant lutter contre les forces d'interaction entre la particule qu'on amène et les N qui sont déjà là. Il faut donc fournir une énergie égale à N fois l'énergie d'interaction par paire. Si E_{int} est l'énergie d'interaction par paire, on doit donc avoir dans E un terme $E_{int} N(N-1)/2 \approx N^2 E_{int}/2$ alors que dans p on a un terme en $N E_{int}$, d'où le facteur 2 de différence.

N'oublions pas en le fait d'amener une particule de plus change légèrement φ , mais que cette modification de φ ne change pas $E[\varphi]$ au 1^{er} ordre (voir discussion du § 2 d plus haut).

c - Théorème du viriel pour un potentiel de piégeage harmonique

- Nous allons considérer une transformation consistant à dilater φ le long de chaque axe, Ox, Oy, Oz , puis calculer les variations de E_{cin} , $E_{piège}$, E_{int} au cours de cette transformation. En considérant ensuite une transformation infinitésimale et en écrivant que $E[\varphi]$ ne change pas au cours de cette transformation (puisque $E[\varphi]$ est stationnaire), nous en déduisons une nouvelle relation entre E_{cin} , $E_{piège}$ et E_{int} .

- A la fonction $\varphi(x, y, z)$ solution de l'équation de G-P, associons une autre fonction $\tilde{\varphi}(x, y, z)$

$$\varphi(x, y, z) \rightarrow \tilde{\varphi}(x, y, z) = (1+\nu)^{1/2} \varphi[(1+\nu)x, y, z] \quad (5.27)$$

où ν est un nombre réel. La transformation (5.27) est bien une dilatation le long de Ox . Notons que si $\varphi(x, y, z)$ est normé, il en est bien de même pour $\tilde{\varphi}$. En effet,

$$\begin{aligned} \int dx dy dz |\tilde{\varphi}(x, y, z)|^2 &= (1+\nu) \int dx dy dz |\varphi[(1+\nu)x, y, z]|^2 \\ &= (1+\nu) \frac{1}{1+\nu} \int dx' dy dz |\varphi(x', y, z)|^2 = 1 \end{aligned} \quad (5.28)$$

- Calculons la nouvelle valeur $\tilde{E}_{cin}$ de E_{cin} dans $\tilde{\varphi}$

Seule la composante $\tilde{E}_{cin}^x$ de $\tilde{E}_{cin}$ le long de Ox change -

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial x} = (1+\nu)^{1/2} \frac{\partial \varphi[(1+\nu)x, y, z]}{\partial x} = (1+\nu)^{3/2} \frac{\partial \varphi(x', y, z)}{\partial x'} \quad (5.29)$$

où l'on a posé $x' = (1+\nu)x$. On en déduit

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{cin}^x &= N \frac{\hbar^2}{2m} \int dx dy dz \left| \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial x} \right|^2 = N \frac{\hbar^2}{2m} (1+\nu)^3 \int dx dy dz \left| \frac{\partial \varphi(x', y, z)}{\partial x'} \right|^2 \\ &= N \frac{\hbar^2}{2m} (1+\nu)^2 \int dx' dy dz \left| \frac{\partial \varphi(x', y, z)}{\partial x'} \right|^2 = (1+\nu)^2 E_{cin}^x \end{aligned} \quad (5.30)$$

- Supposons le potentiel de piégeage harmonique

$$V_{ext}(x, y, z) = \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (5.31)$$

La nouvelle énergie de piégeage le long de Ox , $\tilde{E}_{\text{piège}}^x$, peut être calculée en fonction de l'ancienne

$$\begin{aligned}\tilde{E}_{\text{piège}}^x &= N \frac{1}{2} m \omega_x^2 \int dx dy dz x^2 |\tilde{\varphi}(x, y, z)|^2 \\ &= N \frac{1}{2} m \omega_x^2 (1+\nu) \int dx dy dz x^2 |\varphi(x', y, z)|^2 \\ &= N \frac{1}{2} m \omega_x^2 (1+\nu) \frac{1}{(1+\nu)^3} \int dx' dy dz x'^2 |\varphi(x', y, z)|^2 = \frac{1}{(1+\nu)^2} E_{\text{piège}}^x\end{aligned}\quad (5.32)$$

- Enfin, pour la nouvelle énergie d'interaction $\tilde{E}_{\text{int}}$, on obtient

$$\begin{aligned}\tilde{E}_{\text{int}} &= \frac{N}{2} g \int dx dy dz |\tilde{\varphi}(x, y, z)|^4 \\ &= \frac{N}{2} g (1+\nu)^2 \int dx dy dz |\varphi(x', y, z)|^2 \\ &= \frac{N}{2} g (1+\nu)^2 \frac{1}{1+\nu} \int dx' dy dz |\varphi(x', y, z)|^2 = (1+\nu) E_{\text{int}}\end{aligned}\quad (5.33)$$

- En regroupant (5.30), (5.32) et (5.33), on obtient :

$$E[\tilde{\varphi}] - E[\varphi] = [(1+\nu)^2 - 1] E_{\text{cin}}^x + \left[\frac{1}{(1+\nu)^2} - 1 \right] E_{\text{piège}}^x + [(1+\nu) - 1] E_{\text{int}} \quad (5.34)$$

Considérons alors une variation infinitésimale $d\nu$ de ν autour de $\nu=0$. L'équation (5.34) devient à l'ordre le plus bas en $\delta\nu$

$$\delta E[\varphi] = E[\tilde{\varphi}] - E[\varphi] = d\nu [2E_{\text{cin}}^x - 2E_{\text{piège}}^x + E_{\text{int}}] \quad (5.35)$$

Comme $E[\varphi]$ est stationnaire autour de φ et que $\tilde{\varphi} - \varphi$ est infinitésimal si $d\nu$ l'est aussi, on en déduit que le coefficient de $d\nu$ doit être nul, ce qui donne

$$2E_{\text{cin}}^x - 2E_{\text{piège}}^x + E_{\text{int}} = 0 \quad (5.36)$$

On peut faire des dilatations analogues le long de Oy et Oz et obtenir 2 autres équations semblables à (5.36), x étant remplacé par y et z . En sommant ces 3 équations, on obtient finalement

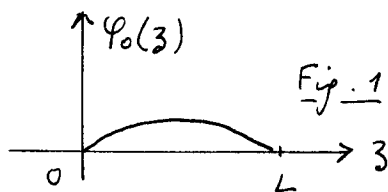
$$2E_{\text{cin}} - 2E_{\text{piège}} + 3E_{\text{int}} = 0 \quad (5.37)$$

④ Une application simple - Forme du condensat dans une boîte

a - Importance des interactions

- Considérons N bosons identiques enfermés dans une boîte à la température $T = 0^\circ \text{K}$. Le potentiel de piégeage V_{ext} est constitué alors par des barrières infinies séparées par une distance L . Le long de l'axe Oz , la fonction d'onde des particules doit donc s'annuler en $z=0$ et $z=L$.

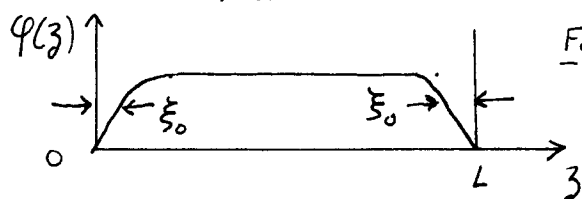
- En l'absence d'interactions, toutes les particules sont dans l'état fondamental de la boîte. Le long de l'axe Oz , la fonction d'onde $\varphi_0(z)$ s'écrit :



$$\varphi_0(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi z}{L} \quad (5.38)$$

La densité de particules varie dans ce cas en $\sin^2 \frac{\pi z}{L}$ faisant apparaître une concentration de particules au centre de la boîte.

- En présence d'interactions, une telle situation ne peut subsister. La densité va avoir tendance à s'uniformiser sous l'effet de collisions entre particules. Si l'on approxime la fonction d'onde de l'état fondamental par un produit de fonctions d'onde individuelles $\varphi(z)$, comme dans (5.2), $\varphi(z)$ doit s'annuler en $z=0$ et



$z=L$ et garder une amplitude constante suffisamment loin des parois (voir Fig. 2)

- Nous nous proposons dans ce paragraphe de voir si les solutions de l'équation de Gross-Pitaevskii sont bien de cette forme et si elles permettent d'évaluer la distance typique ξ_0 au bout de laquelle $\varphi(z)$, partant de 0 en $z=0$ ou $z=L$, atteint une valeur constante.

La longueur ξ_0 est appelée "longueur de relaxation" ("healing length" en anglais). C'est la distance au bout de laquelle la perturbation introduite par la paroi s'atténue et disparaît.

b - Détermination qualitative de la longueur de relaxation

Valeur minimale de l'énergie d'interaction E_{int}

- Si la densité de particules était uniforme dans tout le volume V de la boîte, elle vaudrait

$$n_0 = \frac{N}{V} \quad (5.39)$$

ce qui donnerait pour l'énergie d'interaction E_{int} , d'après (5.24)

$$E_{int}^0 = \frac{1}{2} g \int d^3r n^2(\vec{r}) = \frac{1}{2} g n_0^2 V \quad (5.40)$$

- Montrons que, pour toute répartition non uniforme $n(\vec{r})$, $E_{int} > E_{int}^0$. On a en effet, compte tenu de

$$\int d^3r n(\vec{r}) = N = n_0 V \quad (5.41)$$

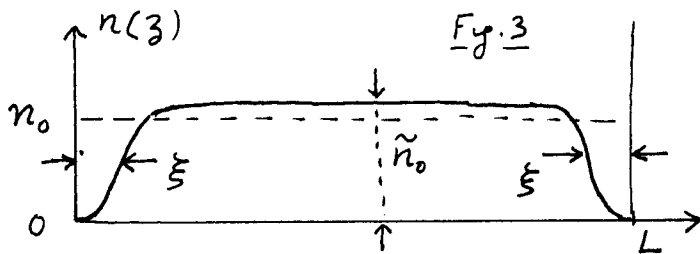
$$E_{int} - E_{int}^0 = \frac{1}{2} g \int d^3r [n^2(\vec{r}) - n_0^2] = \frac{1}{2} g \int d^3r [n(\vec{r}) - n_0]^2 > 0 \quad (5.42)$$

Problème à une dimension

Nous supposons la boîte infinie dans les directions Ox et Oy et de longueur L le long de Oz . Le problème est alors à 1 dimension.

Nous noterons $E[\varphi]$ l'énergie de la fraction du condensat contenue dans un cylindre d'axe parallèle à Oz , de surface S et de longueur L .

Compromis entre énergie cinétique et énergie d'interaction.



- Sur la figure 3, la droite en trait tiré est la densité uniforme n_0 donnée en (5.39); la courbe en trait plein est la densité $n(z)$ qui atteint une valeur constante $\tilde{n}_0$ quand on s'éloigne des parois.

d'une distance de l'ordre de ξ . Quelle est la valeur optimale ξ_0 de ξ qui minimise $E[\varphi]$? Ici $E[\varphi]$ se réduit à $E_{cin} + E_{int}$ puisque E_{pote} est nul à l'intérieur de la boîte [le seul effet de V_{ext} est de forcer $\varphi(z)$ à s'annuler en $z=0$ et $z=L$].

- Pour avoir E_{cin} aussi petit que possible, il faut avoir un gradient de $n(z)$ aussi petit que possible au voisinage des parois [voir (5.22)], et donc ξ aussi grand que possible. Mais les particules enlevées dans les zones de largeur ξ en $z=0$ et $z=L$ se retrouvent dans le plateau de $n(z)$ et sont responsables du fait que $\tilde{n}_0 > n_0$. Plus ξ est grand, plus $\tilde{n}_0 - n_0$ est grand et plus E_{int} est grand [voir (5.42)]. E_{cin} et E_{int} varient donc en sens inverse avec ξ et on conçoit qu'il existe une valeur optimale ξ_0 de ξ qui minimise $E[\varphi]$.

Ordre de grandeur de E_{cin}

- Nous utilisons dans ce qui suit la normalisation (5.15)

- D'après la figure 3, au voisinage des parois de la boîte

$$\frac{d\varphi}{dz} \approx \frac{\sqrt{\tilde{n}_0}}{\xi} \approx \frac{\sqrt{n_0}}{\xi} \quad (\text{si } \xi \ll L) \quad (5.43)$$

- La contribution à E_{cin} provient de 2 régions de surface S , de longueur ξ , au voisinage de $z=0$ et $z=L$. En utilisant (5.21), on obtient :

$$E_{cin} \approx S \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L dz \left| \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|^2 \approx 2S \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\sqrt{n_0}}{\xi} \right)^2 \xi = \frac{\hbar^2}{m} S n_0 \frac{1}{\xi} \quad (5.44)$$

Ordre de grandeur de E_{int}

- Si $\xi \ll L$, on a d'après la figure 3

$$\frac{\tilde{n}_0 - n_0}{n_0} \approx \frac{2\xi}{L} \quad (5.45)$$

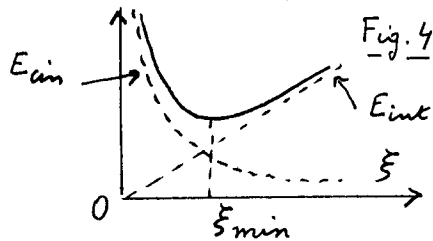
- On obtient alors, compte tenu de (5.24) et (5.45)

$$\begin{aligned} E_{int} &\approx \frac{1}{2} g S \int_0^L n^2(z) dz \approx \frac{1}{2} g S (L - 2\xi) \tilde{n}_0^2 \\ &\approx \frac{1}{2} g S L n_0^2 \left(1 - \frac{2\xi}{L}\right) \left(1 + \frac{2\xi}{L}\right)^2 \approx E_{int}^0 + g S n_0^2 \xi \end{aligned} \quad (5.46)$$

Value optimale ξ_0 de ξ d'après (5.44) et (5.46)

$$E_{\text{cin}} + E_{\text{int}} \approx E_{\text{int}}^0 + \frac{A}{\xi} + B\xi \quad (5.47)$$

$$A = \frac{\hbar^2}{m} S n_0 \quad B = g S n_0^2 \quad (5.48)$$



$\frac{A}{\xi} + B\xi$ est minimal pour $\xi_{\text{min}} = \sqrt{2} \xi_0$
 où $\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{8\pi a n_0}} \quad (5.49)$

ξ_0 est la longueur de relaxation

C - Solution de l'équation de Gross-Pitaevskii à une dimension

- Avec la normalisation (5.15), cette équation s'écrit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi(z) + g |\varphi(z)|^2 \varphi(z) = \mu \varphi(z) \quad (5.50)$$

Lois des parois, on peut négliger $\partial^2 \varphi / \partial z^2$, et on en déduit

$$\mu = g |\varphi(\frac{L}{2})|^2 = g \tilde{n}_0 \approx g n_0 = g \frac{N}{V} \quad (5.51)$$

Finalement, comme φ est réel, on peut récrire (5.50) sous la forme

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi(z) - 8\pi a [\varphi(z)]^3 + 8\pi a n_0 \varphi(z) = 0 \quad (5.52)$$

On a utilisé $g = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a$.

- Si l'on pose $\xi = \frac{z}{\xi_0} \quad (5.53)$

où ξ_0 est donné en (5.49), on peut récrire (5.52) sous la forme

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \varphi(\xi) - \frac{1}{n_0} (\varphi(\xi))^3 + \varphi(\xi) = 0 \quad (5.54)$$

On vérifie aisément que

$$\varphi(\xi) = \sqrt{n_0} \operatorname{th} \frac{\xi}{\sqrt{2}} \quad (5.55)$$

est une solution de cette équation. $\varphi(z) = \sqrt{n_0} \operatorname{th} \frac{z}{\sqrt{2} \xi_0}$ est donc

une solution de l'équation de G.P, qui part de 0 en $z=0$ et atteint une valeur constante, égale à $\sqrt{n_0}$, au bout de quelques ξ_0 .

Références

- (1) F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, S. Stringari
Article de revue à paraître dans Rev. Mod. Phys.
- (2) E. Gross, Nuovo Cimento 20, 454 (1961); J. Math. Phys. 4, 195 (1963)
- (3) L. Pitaevskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz, 40, 646 (1961); Sov. Phys. JETP, 13, 451 (1961)
- (4) V. Ginzburg, L. Pitaevskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz, 34, 1240 (1958); Sov. Phys. JETP, 7, 858 (1958)
- (5) R. Pathria, Statistical Mechanics, Pergamon 1972, § 10.5.