Equation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps

(1) Introduction

- Dans de nombreuses expériences, le potentiel extérieur dans lequel est piégé le condensat de Bose-Einstein est modulé dans le temps de manière à exciter les modes propres de vibration du condensat et à mesurer les fréquences propres de ces modes.
- Dans d'autres expériences, ce potentiel est brusquement coupé et on observe l'expansion balistique du condensat, expansion qui est souvent essentiellement déterminée par les interactions entre les divers atomes du condensat.
- Le but de ce chapitre est de montrer qu'on peut généraliser l'équation de Gross-Pitaevskii du cours V à de telles situations dépendant du temps. La forme que prend cette équation dans diverses limites (faibles excitations, forte densité) est également analysée. Les équations ainsi introduites seront ensuite utilisées dans le cours X pour interpréter divers résultats expérimentaux.

(2) Dérivation de l'équation de G-P dépendant du temps

a - Principe du calcul

- L'équation de Schrödinger dépendant du temps de N particules identiques en interaction, piégées dans un potentiel extérieur dépendant du temps s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}_1 \ldots \vec{r}_N, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N} \Delta_i \, \psi(\vec{r}_1 \ldots \vec{r}_N, t) + \sum_{i=1}^{N} V_{ext}(\vec{r}_i, t)\, \psi(\vec{r}_1 \ldots \vec{r}_N, t) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\, \psi(\vec{r}_1 \ldots \vec{r}_N, t) \qquad (9.1)$$

- Quand V_{ext} ne dépend pas de t, nous avons obtenu au cours V l'état fondamental de H en utilisant le fait que $\langle\psi|H|\psi\rangle / \langle\psi|\psi\rangle$ est minimal quand $|\psi\rangle$ coïncide avec cet état fondamental. Au lieu de faire varier $|\psi\rangle$ dans tout l'espace de Hilbert, nous avons obtenu une solution approchée en faisant varier $|\psi\rangle$ dans le sous-espace des états produits
- Nous allons suivre ici une démarche analogue : obtenir l'équation de Schrödinger (9.1) à partir d'un principe variationnel, ψ variant dans tout l'espace (§ 2c) ; puis simplifier le problème en se contentant de faire varier ψ dans le sous-espace

des états produits (§ 2d). Auparavant, nous rappelons très brièvement les équations de Lagrange pour un champ ψ satisfaisant à un principe variationnel (§ 2b).

b - Equations de Lagrange pour un champ satisfaisant à un principe de moindre action (voir par exemple [1], § A et Complément A_{II})

- Champ scalaire complexe $\psi(\vec{r},t)$
- Densité de Lagrangien $\mathcal{L}$ - Fonction (réelle) de ψ, ψ^*, $\vec{\nabla}\psi$, $\vec{\nabla}\psi^*$, $\dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial t}$, $\dot{\psi}^* = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}$

$$\mathcal{L}(\psi, \psi^*, \vec{\nabla}\psi, \vec{\nabla}\psi^*, \dot{\psi}, \dot{\psi}^*) \tag{9.2}$$

- Action S

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r\, \mathcal{L} \tag{9.3}$$

- Principe de moindre action : S doit être extremal, c-à-d s'annuler pour toute variation infinitésimale $\delta\psi$, $\delta\psi^*$ satisfaisant

$$\delta\psi(\vec{r},t_1) = \delta\psi(\vec{r},t_2) = 0 \qquad \forall\ \vec{r} \tag{9.4}$$

Comme $\delta\psi$ a une partie réelle et une partie imaginaire qui peuvent être variées indépendamment, on peut varier indépendamment $\delta\psi$ et $\delta\psi^*$. Calculons la variation δS de S correspondant à des variations $\delta\psi$ et $\delta\psi^*$. En utilisant

$$\delta(\vec{\nabla}\delta\psi) = \vec{\nabla}\,\delta\psi \qquad\qquad \delta\dot{\psi} = \frac{\partial}{\partial t}\delta\psi \tag{9.5}$$

et en effectuant un certain nombre d'intégrations par parties, on obtient, compte tenu de (9.4)

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \left\{ \delta\psi^* \left[-\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} - \vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla}\psi^*}\right)\right] + \text{Terme analogue en } \delta\psi \right\} \tag{9.6}$$

On en déduit que le ψ qui rend S extrémal satisfait à l'équation de Lagrange

$$-\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} - \vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla}\psi^*}\right) = 0 \tag{9.7}$$

c - L'équation de Schrödinger dépendant du temps déduite d'un principe de moindre action (voir [1], exercice corrigé D_{II}-7)

Cas d'une particule unique soumise à un potentiel extérieur V_{ext}

- Densité de Lagrangien pour le champ $\psi(\vec{r},t)$

$$\mathcal{L} = i\frac{\hbar}{2}\left[\psi^*\dot{\psi} - \dot{\psi}^*\psi\right] - \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}\psi^*)\cdot(\vec{\nabla}\psi) - V_{ext}(\vec{r})\,\psi^*\psi \tag{9.8}$$

- Equation de Lagrange associée à (9.8)

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot\psi^*} = -i\frac{\hbar}{2}\psi \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} = i\frac{\hbar}{2}\dot\psi - V_{ext}\psi \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec\nabla\psi^*} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla\psi \quad (9.9)$$

En reportant (9.9) dans (9.7), on obtient l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V_{ext}\psi \quad (9.10)$$

Généralisation à N particules identiques en interaction

- Il faut prendre maintenant

$$\begin{aligned}\mathcal{L} = {} & i\frac{\hbar}{2}\left[\psi^*(\vec r_1,\cdots \vec r_N,t)\,\dot\psi(\vec r_1,\cdots \vec r_N,t) - \dot\psi^*(\vec r_1,\cdots \vec r_N,t)\,\psi(\vec r_1,\cdots \vec r_N,t)\right] \\ & -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^N\left(\vec\nabla_{r_i}\psi^*(\vec r_1,\cdots,\vec r_N,t)\right)\cdot\left(\vec\nabla_{r_i}\psi(\vec r_1,\cdots \vec r_N,t)\right) \\ & -\left[\sum_{i=1}^N V_{ext}(\vec r_i,t) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^N\sum_{j\neq i}V(\vec r_i-\vec r_j)\right]\psi^*(\vec r_1,\cdots r_N,t)\,\psi(\vec r_1,\cdots \vec r_N,t)\end{aligned} \quad (9.11)$$

- On vérifie alors que l'équation de Lagrange associée à (9.11) coincide avec l'équation de Schrödinger (9.1)

d - Approximation de la fonction d'onde de N bosons identiques par un produit de N fonctions d'ondes identiques

- Au lieu de faire varier ψ dans tout l'espace de Hilbert, on se restreint maintenant au sous espace engendré par

$$\psi(\vec r_1,\cdots \vec r_N,t) = \varphi(\vec r_1,t)\,\varphi(\vec r_2,t)\cdots\varphi(\vec r_N,t) \quad (9.12)$$

Pour obtenir la meilleure fonction d'onde individuelle $\varphi(\vec r,t)$, il faut maintenant reporter (9.12) dans (9.11), puis le $\mathcal{L}$ ainsi obtenu dans S donné par (9.3), puis chercher le φ qui minimise S.

- De (9.12), on déduit

$$\dot\psi(\vec r_1,\cdots \vec r_N,t) = \sum_{i=1}^N\dot\varphi(\vec r_i,t)\prod_{j\neq i}\varphi(\vec r_j,t) \quad (9.13)$$

- En reportant (9.12) et (9.13) dans (9.11), puis dans (9.3), on obtient en supposant $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$

$$\begin{aligned}S = \int_{t_1}^{t_2}dt\,\Big\{ & N\int d^3r\left[\varphi^*(\vec r,t)\,\dot\varphi(\vec r,t) - \dot\varphi^*(\vec r,t)\,\varphi(\vec r,t) - \frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla\varphi^*(\vec r,t)\cdot\vec\nabla\varphi(\vec r,t)\right. \\ & \left. - V_{ext}(\vec r,t)\,\varphi^*(\vec r,t)\,\varphi(\vec r,t)\right] + \frac{N(N-1)}{2}\iint d^3r\,d^3r'\,|\varphi(\vec r,t)|^2\,|\varphi(\vec r',t)|^2\,V(\vec r-\vec r')\Big\}\end{aligned} \quad (9.14)$$

- La variation δS de S correspondant à des variations $\delta\varphi$ et $\delta\varphi^*$ se calcule alors aisément en utilisant $\delta\dot\varphi = \frac{\partial}{\partial t}\delta\varphi$ et $\delta\vec\nabla\varphi = \vec\nabla\delta\varphi$ et en effectuant des intégrations par parties. En annulant le coefficient de $\delta\varphi^*(\vec r)$ dans l'intégrale sur $\vec r$, on obtient l'équation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r},t) + V_{ext}(\vec{r},t)\, \varphi(\vec{r},t) + (N-1)\left[\int d^3r'\, V(\vec{r}-\vec{r}')\, |\varphi(\vec{r}',t)|^2\right] \varphi(\vec{r},t) \qquad (9.15)$$

Cette équation décrit le mouvement de chaque particule dans le champ moyen dépendant du temps créé par les $(N-1)$ autres. On parle parfois d'"approximation Hartree-Fock dépendant du temps".

- Si l'on remplace dans (9.15) $N-1$ par N (car $N \gg 1$) et $V(\vec{r}-\vec{r}')$ par $g\,\delta(\vec{r}-\vec{r}')$, on obtient l'équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r},t) + V_{ext}(\vec{r},t)\, \varphi(\vec{r},t) + Ng\, |\varphi(\vec{r},t)|^2\, \varphi(\vec{r},t)} \qquad (9.16)$$

② Limite des faibles excitations

a - Linéarisation de l'équation de G-P dépendant du temps

- Supposons $V_{ext}(\vec{r},t)$ de la forme

$$V_{ext}(\vec{r},t) = V_0(\vec{r}) + \delta V(\vec{r},t) \qquad (9.17)$$

où $V_0(\vec{r})$ est un potentiel statique et $\delta V(\vec{r},t)$ une petite perturbation dépendant du temps

- Lorsque $\delta V = 0$, on connait la solution de (9.16). D'après les résultats du cours V, elle est de la forme

$$\varphi(\vec{r},t) = \varphi_0(\vec{r})\, e^{-i\mu t/\hbar} \qquad (9.18)$$

où $\varphi_0(\vec{r})$ est la solution de l'équation de G-P indépendante du temps correspondant à $V_0(\vec{r})$ et μ le potentiel chimique

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_0(\vec{r}) + V_0(\vec{r})\, \varphi_0(\vec{r}) + Ng\, |\varphi_0(\vec{r})|^2 \varphi_0(\vec{r}) = \mu\, \varphi_0(\vec{r}) \qquad (9.19)$$

- Si δV est très petit, on s'attend à ce que $\varphi(\vec{r},t)$ soit peu différent de (9.18). Plus précisément, si l'on pose

$$\varphi(\vec{r},t) = \tilde{\varphi}(\vec{r},t)\, e^{-i\mu t/\hbar} \qquad (9.20)$$

on s'attend à ce que $\tilde{\varphi}(\vec{r},t)$ soit peu différent de $\varphi_0(\vec{r})$. Reportons (9.17) et (9.20) dans (9.16). Il vient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi}(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_0(\vec{r}) + \delta V(\vec{r},t) - \mu + Ng\, |\tilde{\varphi}(\vec{r},t)|^2\right] \tilde{\varphi}(\vec{r},t) \qquad (9.21)$$

Posons également

$$\tilde{\varphi}(\vec{r},t) = \varphi_0(\vec{r}) + \delta\varphi(\vec{r},t) \qquad (9.22)$$

Soit ε l'infiniment petit caractérisant $\delta V / V_0$. $\delta\varphi$ est au moins d'ordre 1 en ε.

– Reportons (9.22) dans (9.21). A l'ordre 0 en ε, on retrouve (9.19). A l'ordre 1, on obtient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta\varphi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_0(\vec{r}) - \mu + 2Ng\,|\varphi_0(\vec{r})|^2 \right] \delta\varphi + + Ng\, \varphi_0^2(\vec{r})\, \delta\varphi^* + \delta V(\vec{r},t)\, \varphi_0(\vec{r}) \qquad (9.23)$$

L'évolution de $\delta\varphi$ est couplée à celle de $\delta\varphi^*$. Pour obtenir une équation linéaire, il faut introduire le vecteur colonne $\begin{pmatrix} \delta\varphi \\ \delta\varphi^* \end{pmatrix}$ qui satisfait à l'équation linéaire

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \delta\varphi \\ \delta\varphi^* \end{pmatrix} = \mathcal{L}_{GP} \begin{pmatrix} \delta\varphi \\ \delta\varphi^* \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} S \\ -S^* \end{pmatrix} \qquad (9.24)$$

où $\mathcal{L}_{GP}$ est une matrice 2×2 indépendante du temps

$$\mathcal{L}_{GP} = \begin{pmatrix} H_0 - \mu + 2Ng\,|\varphi_0(\vec{r})|^2 & Ng\,\varphi_0^2(\vec{r}) \\ -Ng\,\varphi_0^{*2}(\vec{r}) & -\left(H_0 - \mu + 2Ng\,|\varphi_0(\vec{r})|^2\right) \end{pmatrix} \qquad (9.25)$$

avec
$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_0(\vec{r}) \qquad (9.26)$$

et où $\begin{pmatrix} S \\ -S^* \end{pmatrix}$ est un terme source avec
$$S = \delta V(\vec{r},t)\, \varphi_0(\vec{r}) \qquad (9.27)$$

– l'équation (9.24) représente une linéarisation de l'équation de G-P dépendant du temps valable à la limite $\delta V \ll V_0$

b – Fréquences des modes propres de vibration

Expérience considérée

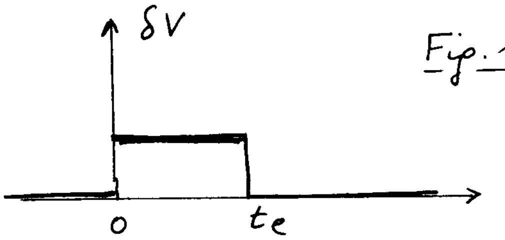

Fig. 1

δV est appliqué pendant une phase d'excitation entre 0 et t_e, ce qui fait sortir le condensat de son état d'équilibre, puis coupé brusquement. Le condensat va alors vibrer à ses fréquences propres ω. Pour les trouver, il faut diagonaliser $\mathcal{L}_{GP}$, puisque pour $t > t_e$ le terme source est nul dans (9.24).

Equation aux valeurs propres de $\mathcal{L}_{GP}$

– Soit $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ un vecteur propre de $\mathcal{L}_{GP}$ de valeur propre $\hbar\omega$. On a :

$$\begin{cases} \left[H_0 - \mu + 2Ng|\varphi_0(\vec{r})|^2\right] u(\vec{r}) + Ng\,\varphi_0^2(\vec{r})\, v(\vec{r}) = \hbar\omega\, u(\vec{r}) \\ -Ng\,\varphi_0^{*2}(\vec{r})\, u(\vec{r}) - \left[H_0 - \mu + 2Ng|\varphi_0(\vec{r})|^2\right] v(\vec{r}) = \hbar\omega\, v(\vec{r}) \end{cases} \tag{9.28}$$

- Il est facile de vérifier sur (9.28) que si $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ est vecteur propre de $\mathcal{L}_{GP}$ de valeur propre $\hbar\omega$, $\begin{pmatrix} v^* \\ u^* \end{pmatrix}$ est également vecteur propre de valeur propre $-\hbar\omega^*$. Il suffit pour cela de prendre les complexes conjuguées des 2 équations (9.28)
- En fait si $\varphi_0(\vec{r})$ est l'état fondamental d'un condensat piégé dans $V_0(\vec{r})$ avec $g>0$, on peut montrer que ω est réel. La solution la plus générale de fréquence ω, s'écrit donc

$$\begin{pmatrix} \delta\varphi \\ \delta\varphi^* \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} e^{-i\omega t} + \beta \begin{pmatrix} v^* \\ u^* \end{pmatrix} e^{i\omega t} \tag{9.29}$$

Si l'on veut que les 2 composantes $\delta\varphi$ et $\delta\varphi^*$ du vecteur colonne soient complexes conjuguées l'une de l'autre, il faut que

$$\beta = \alpha^* \tag{9.30}$$

Comme u et v ne sont définis qu'à une constante multiplicative près, on peut prendre $\alpha = \beta = 1$, ce qui donne

$$\delta\varphi(\vec{r},t) = u(\vec{r})\, e^{-i\omega t} + v^*(\vec{r})\, e^{i\omega t} \tag{9.31}$$

et par suite, compte tenu de (9.18), (9.20) et (9.22)

$$\varphi(\vec{r},t) = \left[\varphi_0(\vec{r}) + u(\vec{r})\, e^{-i\omega t} + v^*(\vec{r})\, e^{i\omega t}\right] e^{-i\mu t/\hbar} \tag{9.32}$$

Dans (9.32), u et v sont les composantes du vecteur propre de $\mathcal{L}_{GP}$ de valeur propre $\hbar\omega$ [cf Eq. (9.28)].

C - Cas particulier d'un gaz homogène - Lien avec l'approche de Bogolubov.

- Pour un gaz homogène, on a

$$\varphi_0(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \quad \rightarrow \quad N|\varphi_0|^2 = \frac{N}{L^3} = \rho \tag{9.32.a}$$

$$\mu = \rho g \tag{9.32.b}$$

$$V_0(\vec{r}) = 0 \quad \rightarrow \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \tag{9.32.c}$$

- Cherchons des solutions ayant la forme d'ondes planes, c-à-d telles que $u(\vec{r})$ et $v(\vec{r})$ varient en $e^{i\vec{k}.\vec{r}}$. Compte tenu de (9.32.c) on a alors $H_0 u(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} u(\vec{r})$, $H_0 v(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} v(\vec{r})$

Les solutions $\hbar\omega$ de l'équation aux valeurs propres (9.28) sont alors données par

$$\mathrm{Det}\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2k^2}{2m} + g\rho - \hbar\omega & g\rho \\ -g\rho & -\frac{\hbar^2k^2}{2m} - g\rho - \hbar\omega \end{pmatrix} = 0 \qquad (9.33)$$

c-à-d encore par

$$\hbar^2\omega^2 - \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + g\rho\right)^2 + g^2\rho^2 = 0 \qquad (9.34)$$

d'où l'on tire

$$\hbar\omega = \sqrt{\frac{\hbar^2k^2}{2m}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + 2g\rho\right)} \qquad (9.35)$$

On retrouve ainsi la loi de dispersion des excitations élémentaires d'un gaz de bosons, donnée par la théorie de Bogolubov.

- La linéarisation de l'équation de G-P dépendant du temps apparaît ainsi comme un moyen simple de trouver les fréquences de vibrations d'un condensat, y compris dans des situations $V_0 \neq 0$, se prêtant moins à des calculs analytiques que la situation d'un gaz homogène. Effectivement, les équations (9.28) ont été résolues numériquement par de nombreux auteurs pour déterminer ces fréquences propres de vibration (voir les références mentionnées dans [2]).

(3) Reecriture de l'équation de G-P sous une forme équivalente

a- Changement de normalisation

- Revenons à l'équation de G-P dépendant du temps (9.16). Au lieu de normaliser φ à 1, il sera plus commode pour la suite de prendre

$$\int d^3r\, |\varphi(\vec{r})|^2 = N \qquad (9.36)$$

L'équation (9.16) devient alors

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r},t) + V_{ext}(\vec{r},t)\,\varphi(\vec{r},t) + g|\varphi(\vec{r},t)|^2\varphi(\vec{r},t) \qquad (9.37)$$

- Avec une telle normalisation, on a

$$|\varphi(\vec{r},t)|^2 = \rho(\vec{r},t) \qquad (9.38)$$

où $\rho(\vec{r},t)$ est la densité de particules au point $\vec{r}$ à l'instant t

b- Module et phase de la fonction d'onde - Equation de continuité

- Compte tenu de (9.38), on peut écrire

$$\varphi(\vec{r},t) = \sqrt{\rho(\vec{r},t)}\, e^{i S(\vec{r},t)} \qquad (9.39)$$

$S(\vec{r},t)$ est la phase de la fonction d'onde, $\sqrt{\rho(\vec{r},t)}$ son module.

- D'après (9.38), $\frac{\partial\rho}{\partial t} = \phi^*\frac{\partial\phi}{\partial t} + \phi\frac{\partial\phi^*}{\partial t}$. En écrivant l'équation complexe conjuguée de (9.37), en la multipliant par φ, puis en l'ajoutant à l'équation (9.37) multipliée par φ^*, on obtient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\rho = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\varphi^* \Delta\varphi - \varphi\Delta\varphi^*\right] \qquad (9.40)$$

- Pour transformer (9.40), et pour la suite des calculs, il est utile de calculer $\Delta\varphi$ en fonction des dérivées spatiales de $\sqrt{\rho}$ et S

Compte tenu de

$$\vec{\nabla}.(a\vec{u}) = a\,\vec{\nabla}.\vec{u} + (\vec{\nabla}a).\vec{u} \qquad (9.41)$$

on a, d'après (9.39)

$$\vec{\nabla}\varphi = (\vec{\nabla}\sqrt{\rho})\,e^{iS} + \sqrt{\rho}\,e^{iS}(i\vec{\nabla}S) \qquad (9.42)$$

$$\begin{aligned}\Delta\varphi = \vec{\nabla}.(\vec{\nabla}\varphi) &= (\Delta\sqrt{\rho})\,e^{iS} + 2i\vec{\nabla}(\sqrt{\rho}).(\vec{\nabla}S)\,e^{iS} \\ &- \sqrt{\rho}\,e^{iS}(\vec{\nabla}S)^2 + i\sqrt{\rho}\,e^{iS}(\Delta S)\end{aligned} \qquad (9.43)$$

- On en déduit

$$\begin{aligned}\varphi^*\Delta\varphi - \varphi\Delta\varphi^* &= 4i\sqrt{\rho}\,(\vec{\nabla}\sqrt{\rho}).(\vec{\nabla}S) + 2i\rho\,(\Delta S) \\ &= 2i\,(\vec{\nabla}\rho).(\vec{\nabla}S) + 2i\rho\,(\Delta S) = 2i\,\vec{\nabla}.(\rho\vec{\nabla}S)\end{aligned} \qquad (9.44)$$

ce qui, reporté dans (9.40), donne

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla}.\left[\rho\left(\frac{\hbar}{m}\vec{\nabla}S\right)\right] = 0 \qquad (9.45)$$

Si l'on introduit le champ de vitesse $\vec{v}(\vec{r},t)$ par

$$\vec{v}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{m}\vec{\nabla}S(\vec{r},t) \qquad (9.46)$$

on peut réécrire (9.45) sous forme d'une équation de continuité

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}.(\rho\vec{v}) = 0 \qquad (9.47)$$

C - Equation du mouvement de $\vec{v}(\vec{r},t)$

- D'après (9.39),

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\sqrt{\rho}\,e^{iS}) = i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\sqrt{\rho}\right)e^{iS} - \hbar\sqrt{\rho}\,\frac{\partial S}{\partial t}\,e^{iS} \qquad (9.48)$$

On en déduit

$$i\hbar\left(\varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \varphi\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\right) = -2\hbar\rho\frac{\partial S}{\partial t} \qquad (9.49)$$

Le membre de gauche se calcule aisément à partir de (9.37) et de l'équation complexe conjuguée et vaut, compte tenu de (9.38), (9.39), (9.43)

$$\begin{aligned}i\hbar\left(\varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \varphi\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\right) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\varphi^*\Delta\varphi + \varphi\Delta\varphi^*\right] + 2V_{ext}|\varphi|^2 + 2g|\varphi|^4 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}2\sqrt{\rho}\,(\Delta\sqrt{\rho}) + \frac{\hbar^2}{2m}2\rho(\vec{\nabla}S)^2 + 2\rho V_{ext} + 2g\rho^2\end{aligned} \qquad (9.50)$$

En reportant (9.50) dans (9.49) et en divisant les 2 membres de l'équation par -2ρ, on obtient

$$\hbar\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{\rho}}(\Delta\sqrt{\rho}) - \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}S)^2 - V_{ext} - g\rho \qquad (9.51)$$

Enfin, en prenant le gradient des 2 membres de (9.51) et en utilisant (9.46), on obtient

$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \vec{\nabla}\left[+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{\rho}}\Delta\sqrt{\rho} - \frac{1}{2}mv^2 - V_{ext} - g\rho\right] \qquad (9.52)$$

- Avec la définition (9.32) de ρ et S, puis la définition (9.46) de $\vec{v}$, les équations (9.47) et (9.52) sont strictement équivalente à l'équation de G-P dépendant du temps (9.37). Aucune approximation supplémentaire n'a été effectuée.
- Le terme $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{\rho}}\Delta\sqrt{\rho}$, où $\hbar$ apparait explicitement, et qui fait intervenir les dérivées spatiales de ρ est appelé terme de "pression quantique".

(4) Limite des grandes densités

a - Retour sur l'approximation de Thomas-Fermi pour un condensat en équilibre.

- Dans le cours VI, portant sur les condensats en équilibre à $T = 0°K$, nous avons vu qu'à grande densité, plus exactement pour

$$\frac{Na}{\sigma} \gg 1 \qquad (9.53)$$

où σ est l'extension spatiale de la fonction d'onde de l'état fondamental du puits, l'énergie cinétique de la particule pouvait être négligée devant l'énergie d'interaction. Mathématiquement, dans l'équation de G-P indépendante du temps, on peut négliger le terme $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi$ devant $V_{ext}\,\varphi$ et $g|\varphi|^2\varphi$.

- Pourrait-on de même négliger, à grande densité, le terme $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi$ dans l'équation de G-P dépendant du temps (9.37) ?

Un contre-exemple simple montre qu'il n'en est rien. Dans les expériences d'expansion balistique du condensat, l'énergie d'interaction du condensat initial en équilibre, qui est très importante à grande densité, se transforme en énergie cinétique après la coupure brutale du piège, et il serait bien sur incorrect de négliger cette énergie, qui est d'ailleurs la quantité mesurée expérimentalement.

- Mathématiquement, l'impossibilité de négliger $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi$ dans (9.37) tient au fait que le module $\sqrt{\rho}$ de φ peut varier très lentement dans l'espace alors que la phase S de φ peut varier beaucoup plus rapidement. Dans un condensat en équilibre à $T = 0°K$, φ est en général réel et il n'y a pas de gradient de phase. Par contre, au cours d'une expansion balistique, des gradients de phase apparaissent, décrivant la vitesse d'expansion radiale du condensat, et c'est pourquoi il n'est plus possible de négliger $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi$

- Autre exemple : on sait bien que la fonction d'onde qui décrit un paquet d'ondes libre qui s'étale devient complexe, même si elle est initialement réelle. Il apparait alors des oscillations de phase dans les ailes du paquet d'ondes, le paquet d'ondes apparaissant plus "bleu" dans les ailes qu'au centre.

b - Approximation consistant à négliger le terme de pression quantique

- Le terme de pression quantique apparaissant dans (9.52) ne fait intervenir que les dérivées spatiales de la densité ρ, et non celle de la phase S. A la limite des grandes densités, ρ varie lentement dans l'espace, aussi bien à l'équilibre que dans les phases d'expansion balistique. Il est donc justifié de négliger ce terme dans (9.52) alors qu'il ne serait pas légitime de négliger le terme en $\Delta\varphi$ dans (9.37) puisque $\Delta\varphi$ contient $\vec{\nabla}S$ et ΔS (voir (9.43)). L'équation (9.37) devient alors

$$m\frac{\partial}{\partial t}\vec{v} = \vec{\nabla}\left(-\frac{1}{2}mv^2 - V_{ext} - g\rho\right) \tag{9.54}$$

- En plus de l'expansion balistique, on peut également considérer des modes de vibration du condensat où ρ varie sur des distances de l'ordre de d. Ces distances ne doivent pas être trop petites pour que le terme de pression quantique reste négligeable devant les autres, en particulier devant $g\rho$, ce qui donne la condition

$$\frac{\hbar^2}{2md^2} \ll g\rho \tag{9.55}$$

Considérons par exemple un condensat homogène où se propagent des ondes de longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$. La condition (9.55) s'écrit

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m} \ll g\rho \tag{9.56}$$

c'est à dire encore $k \ll k_0$ ou $\lambda \gg \xi_0$

$$\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{8\pi a\rho}} \tag{9.57}$$

est la longueur de relaxation, appelée également longueur de cohérence.

c - Discussion physique

- En appliquant l'identité d'analyse vectorielle

$$(\vec{u}\cdot\vec{\nabla})\,\vec{u} = (\vec{\nabla}\times\vec{u})\times\vec{u} + \frac{1}{2}\vec{\nabla}u^2 \tag{9.58}$$

au champ de vitesses v et en utilisant le fait que, compte tenu de (9.46) $$\vec{\nabla} \times \vec{v} = \vec{0} \qquad (9.59)$$

on obtient $$\frac{1}{2}\vec{\nabla} v^2 = (\vec{v}.\vec{\nabla})\,\vec{v} \qquad (9.60)$$

ce qui permet de réécrire (9.54) sous la forme

$$m\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}.\vec{\nabla}\right)\vec{v} = -\,\vec{\nabla}\left(V_{ext} + g\rho\right) \qquad (9.61)$$

- On reconnait dans le membre de gauche de (9.61) la dérivé totale de $\vec{v}$, dérivé temporelle de $\vec{v}$ lorsqu'on suit le mouvement de la particule. L'équation (9.61) est alors simplement l'équation de la dynamique, appelé encore équation d'Euler en hydrodynamique. Elle exprime que l'accélération d'une particule du fluide est égale à la somme des forces qui agissent sur elle, force $-\vec{\nabla} V_{ext}$ due au potentiel de piégeage, force $-g\vec{\nabla}\rho$ due aux interactions avec les autres particules.

<u>Remarque</u> :

On peut interpréter la force $-g\vec{\nabla}\rho$ comme une force de pression. Revenons à l'énergie d'un gaz homogène de bosons en équilibre à $T = 0°K$, qui ne dépend que de N et de V [voir Eq. (8.23)]

$$E_0(N,V) = -\frac{1}{2}g\frac{N^2}{V} \qquad (9.62)$$

La pression P d'un tel gaz est égale à

$$P = -\frac{\partial}{\partial V}E_0(N,V) = \frac{1}{2}g\frac{N^2}{V^2} = \frac{1}{2}g\rho^2 \qquad (9.63)$$

En présence d'inhomogénéités spatiales variant suffisamment lentement, on peut introduire une pression $P(\vec{r}) = \frac{1}{2}g\rho^2(\vec{r})$. La force de pression s'exerçant un élément d^3r de fluide contenant $\rho\, d^3r$ particules vaut $-(\vec{\nabla}P)d^3r = -g\rho(\vec{\nabla}\rho)d^3r$. La force exercée sur chaque particule vaut donc $-g\vec{\nabla}\rho$, qui n'est autre que l'une des 2 forces apparaissant au 2ème membre de (9.61).

d - <u>Régime d'équilibre</u>

- Que deviennent les équations (9.47) et (9.54) à l'équilibre, quand $\rho = Cte$ et $\vec{v} = \vec{0}$. L'équation (9.47) est automatiquement satisfaite. L'équation (9.54) exprime que $\vec{\nabla}(g\rho + V_{ext}) = \vec{0}$, donc que

$$g\rho + V_{ext} = Cte \text{ independante de } \vec{r} \qquad (9.64)$$

En appelant μ cette constante, on retrouve que $\rho = \frac{1}{g}(\mu - V_{ext})$ ce qui n'est autre que la densité d'équilibre à l'approximation de Thomas-Fermi.

- Les équations (9.47) et (9.54) apparaissent ainsi comme la généralisation de l'approximation de T-F à des problèmes dépendant du temps

e – Cas des faibles excitations

– On peut linéariser les équations (9.47) et (9.54) en introduisant les corrections $\delta\rho$ et $\delta\vec{v}$ aux solutions d'équilibre ρ_0 et $\vec{v}_0$

$$\begin{cases} \rho_0(\vec{r}) = \frac{1}{g}\left[\mu - V_{ext}(\vec{r})\right] \\ \vec{v}_0(\vec{r}) = \vec{0} \end{cases} \tag{9.65}$$

et en ne gardant que les termes linéaires en $\delta\rho$ et $\delta\vec{v}$. On obtient ainsi

$$\frac{\partial}{\partial t}\delta\rho = -\vec{\nabla}\cdot(\rho_0\,\delta\vec{v}) \tag{9.66.a}$$

$$m\frac{\partial}{\partial t}\delta\vec{v} = -\vec{\nabla}\left[V_{ext} + g\rho_0 + g\delta\rho\right] = -g\,\vec{\nabla}\delta\rho \tag{9.66.b}$$

En prenant le gradient de (9.66.a), la dérivée temporelle de (9.66.b) et en éliminant $\delta\vec{v}$, on obtient finalement

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\delta\rho(\vec{r},t) = \frac{g}{m}\,\vec{\nabla}\cdot\left[\rho_0(\vec{r})\,\vec{\nabla}\delta\rho(\vec{r},t)\right] \tag{9.67}$$

– Cas d'un fluide homogène : $\rho_0(\vec{r}) = \rho$. On obtient

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2\Delta\right)\delta\rho(\vec{r},t) = 0 \tag{9.68}$$

avec

$$c = \frac{g\rho}{m} \tag{9.69}$$

On retrouve les ondes sonores prédites par la théorie de Bogolubov dans le régime $k \ll k_0$ où s'applique l'approximation de Thomas-Fermi.

Références

[1] Photons et Atomes – Introduction à l'électrodynamique quantique, C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg InterEditions / Editions du CNRS, 1987

[2] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, S. Stringari Article de revue à paraître dans Rev. Mod. Phys.