

## INTRODUCTION GENERALE

### A - RESUME DU COURS 1998-1999

Le cours de l'année 1998-1999 a poursuivi l'étude entreprise au cours de l'année antérieure de la condensation de Bose-Einstein des gaz atomiques ultrafroids. Il a porté plus particulièrement sur l'analyse des effets nouveaux introduits par les interactions entre atomes.

La première séance passe rapidement en revue les résultats obtenus au cours de l'année antérieure sur la condensation de Bose-Einstein de gaz parfaits de bosons. Quelques résultats expérimentaux récents sont présentés, montrant l'importance des interactions entre atomes et la nécessité de les prendre en compte. L'organisation générale du cours est esquissée.

### Collisions à très basse énergie - Longueur de diffusion

Dans les gaz atomiques ultrafroids où se produit la condensation de Bose-Einstein, les processus élémentaires d'interaction entre atomes sont des collisions à deux ou trois corps, élastiques et inélastiques. A des densités pas trop élevées les collisions binaires, entre deux atomes, sont prépondérantes. Un premier objectif du cours est de décrire quantiquement de telles collisions, en se limitant pour simplifier à des collisions élastiques, et d'introduire les paramètres physiques essentiels qui les caractérisent à la limite des très basses énergies qui sont celles d'atomes ultrafroids.

Après de brefs rappels sur la théorie de la diffusion par un potentiel central et sur le développement en ondes partielles de l'amplitude de diffusion, on analyse les simplifications qui apparaissent à très basse énergie. La longueur d'onde de de Broglie des particules entrant en collision est alors très grande, et c'est seulement dans l'onde de moment angulaire orbital relatif nul (onde  $s$ ) que les particules peuvent s'approcher suffisamment près l'une de l'autre pour ressentir l'effet de leur potentiel d'interaction. Mathématiquement, il est légitime alors de négliger tous les déphasages des diverses ondes partielles autres que le déphasage  $\delta_0$  de l'onde  $s$ . A partir de  $\delta_0$  on introduit une autre grandeur physique importante, la longueur de diffusion  $a$ , et on l'interprète

géométriquement à partir du prolongement à faible distance de la forme asymptotique de la fonction d'onde radiale correspondant à l'onde  $s$ . Le déphasage  $\delta_0$  de l'onde  $s$  dépend de l'énergie, plus précisément du nombre d'onde  $k$  décrivant les oscillations à grande distance de la fonction d'onde radiale  $s$ . A l'ordre le plus bas en  $k$ ,  $\delta_0(k) = -a k$ . L'étude des termes d'ordre supérieur en  $k$  fait apparaître une autre grandeur physique importante, la portée effective  $r_e$ . On peut ainsi obtenir pour l'amplitude de diffusion une expression analytique où apparaissent  $a$ ,  $k$  et  $r_e$ . On montre enfin que, si le potentiel d'interaction admet un état lié d'énergie très faible, dont la fonction d'onde décroît exponentiellement à grande distance avec une longueur caractéristique  $\xi$ , la longueur de diffusion  $a$  est très voisine de  $\xi$ .

Les notions précédentes sont illustrées en détail sur des potentiels en créneau carré, situation où des expressions analytiques peuvent être obtenues pour les fonctions d'onde radiales  $s$ . Un cas particulièrement intéressant est celui des potentiels carrés attractifs de profondeur  $V_0$ . Lorsqu'on fait croître  $V_0$  à partir de 0, le nombre d'états liés dans le puits croît de zéro à l'infini. Toutes les fois qu'un nouvel état lié apparaît, avec une énergie très proche de celle du bord du puits, la longueur de diffusion  $a$  diverge, en passant de  $-\infty$  à  $+\infty$ . Un tel phénomène est étudié en détail au moyen de constructions graphiques. A partir de l'expression établie plus haut de l'amplitude de diffusion en fonction de  $a$ ,  $k$  et  $r_e$ , on introduit également la notion de résonance à énergie nulle apparaissant sur les variations avec  $k$  de la section efficace de diffusion, au voisinage d'une divergence de la longueur de diffusion  $a$ .

### Pseudopotentiel

Le vrai potentiel d'interaction entre deux atomes conduit en général à des calculs non aisés, ne permettant pas d'obtenir des expressions analytiques simples. C'est la raison pour laquelle on essaie souvent de remplacer le vrai potentiel par un potentiel d'expression mathématique plus simple, appelé pseudopotentiel, et donnant les mêmes déphasages, ou tout au moins la même longueur de diffusion que le vrai potentiel. Le pseudopotentiel donnera donc le bon comportement asymptotique des fonctions d'onde pour des distances grandes entre les atomes. Par contre, il ne décrira pas correctement les corrélations à courte distance. Cependant, si le gaz est dilué, les

atomes seront la plupart du temps éloignés les uns des autres et on peut espérer que l'erreur commise sera négligeable.

On commence par étudier un pseudopotentiel en fonction delta,  $V_\delta(\vec{r}) = g \delta(\vec{r})$ , où  $\delta(\vec{r})$  est la fonction delta de Dirac et  $g$  une constante. Si l'on impose à  $V_\delta$  de redonner la même longueur de diffusion  $a$  que le vrai potentiel  $V$  à l'ordre le plus bas en  $g$ , c'est-à-dire à l'approximation de Born, on obtient une équation simple reliant  $g$  à  $a$  et  $V_\delta$  est entièrement défini. Il est possible alors de comparer les prédictions effectuées à partir de  $V_\delta$  et du vrai potentiel  $V$  sur les énergies et les fonctions d'onde des états liés obtenus quand on ajoute au potentiel une paroi réfléchissante à très grande distance  $R$  (boite sphérique). Alors que les prédictions sur les énergies et les formes asymptotiques des fonctions d'onde coïncident à l'ordre 1 en  $g$  pour  $V$  et  $V_\delta$ , on trouve des différences spectaculaires à l'ordre 2 en  $g$ . Les déplacements de niveaux à l'ordre 2 en  $V_\delta$  divergent !

On introduit alors un autre pseudopotentiel  $V_{pseudo}(\vec{r})$ , d'expression mathématique légèrement plus compliquée que celle de  $V_\delta(\vec{r})$ , ne souffrant pas des mêmes défauts. Il conduit pour l'amplitude de diffusion à la même expression que le vrai potentiel  $V$ , avec toutefois une portée effective  $r_e$  nulle. A très basse énergie, quand on peut se limiter aux termes d'ordre le plus bas en  $k$ ,  $V_{pseudo}$  et  $V$  sont donc équivalents.

On discute enfin un paradoxe lié au fait que  $V_{pseudo}$  et  $V$  ont les mêmes éléments de matrice entre fonctions d'onde non perturbées (ordre 0 en  $g$ ). Comment peut-on alors obtenir pour les déplacements d'énergie d'ordre 2 en  $g$  un résultat fini avec  $V_{pseudo}$  et divergent avec  $V_\delta$  ? L'étude d'un exemple simple permet de montrer que la difficulté précédente est liée à un problème de convergence non uniforme et les précautions qu'il faut prendre quand on utilise  $V_\delta$  sont explicitées.

### Equation de Gross-Pitaevskii

A température nulle ( $T = 0^\circ K$ ), un ensemble de  $N$  bosons sans interactions mutuelles, piégés dans un puits de potentiel  $V_{ext}(\vec{r})$ , forme un condensat où chaque boson est dans le même état quantique, l'état fondamental  $u_0$  du piège. En présence d'interactions, la structure d'un tel

condensat est modifiée. Il faudrait en principe déterminer l'état fondamental du Hamiltonien  $H$  du système global qui est la somme de l'énergie cinétique des particules  $E_{cm}$ , de leur énergie de piégeage  $E_{piège}$ , dans  $V_{ext}$ , et de leur énergie d'interaction  $E_{int}$ . La détermination exacte de l'état fondamental de  $H$  est en général impossible et il faut avoir recours à des approximations.

On présente une recherche d'un état fondamental approché de  $H$  basée sur un calcul variationnel où la fonction d'onde  $\psi$  de l'état fondamental est prise sous forme d'un produit de  $N$  fonctions d'ondes identiques  $\varphi(\vec{r})$ . Le problème alors est de déterminer quel est le meilleur choix possible pour  $\varphi_0$  conduisant à la valeur moyenne de  $H$  la plus basse possible.

Les équations variationnelles exprimant que la valeur moyenne de  $H$  dans  $\psi$  est minimale conduisent alors pour  $\varphi_0$  à une équation non linéaire appelée équation de Gross-Pitaevskii. Son interprétation physique est très claire. Elle exprime que chaque particule, se trouvant chacune dans l'état  $\varphi_0$ , se déplace dans un potentiel qui est la somme du potentiel de piégeage  $V_{ext}(\vec{r})$  et du potentiel d'interaction moyen créé par les  $N-1$  autres. La théorie ainsi obtenue est donc une théorie de champ moyen. La valeur propre apparaissant dans l'équation n'est autre que le potentiel chimique. A partir de l'équation de Gross-Pitaevskii, sont déduites un certain nombre de relations générales entre les valeurs moyennes de  $E_{cm}$ ,  $E_{piège}$  et  $E_{int}$ .

Une première application de l'équation de Gross-Pitaevskii est alors présentée. Il s'agit d'étudier la forme du condensat dans une boîte cubique aux parois réfléchissantes. On trouve que la solution de l'équation est une fonction qui reste constante à l'intérieur de la boîte et qui s'annule quand on s'approche des parois sur une distance caractéristique  $\xi_0$ , appelée longueur de relaxation, et dont on donne l'expression en fonction de la densité spatiale moyenne des particules  $n_0$  et de la longueur de diffusion. L'interprétation physique de l'expression de  $\xi_0$  est donnée comme résultant d'un meilleur compromis possible entre énergie d'interaction qui augmente quand  $\xi_0$  croît et énergie cinétique qui décroît quand  $\xi_0$  croît.

### Structure du condensat dans un piège harmonique

A partir de l'équation de Gross-Pitaevskii, il est possible d'aborder simplement un certain nombre de problèmes relatifs à la structure d'un condensat de  $N$  atomes piégés dans un potentiel

harmonique  $V_{ext}(r) = m\omega_0^2 r^2 / 2$ . Comment les interactions entre atomes modifient-elles 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'est à dire quand les interactions effectives entre atomes sont attractives ?

Dans une première approche très qualitative, on étudie l'ordre de grandeur des diverses énergies moyennes  $E_{cin}$ ,  $E_{piège}$  et  $E_{int}$ , exprimées en fonction du rayon  $R$  du condensat, plus précisément en fonction des paramètres sans dimension  $w = R/\sigma$  où  $\sigma$  est la largeur de la fonction d'onde de l'état fondamental du piège harmonique.  $E_{cin}$  varie comme  $N\hbar\omega_0/w^2$ ,  $E_{piège}$  comme  $N\hbar\omega_0 w^2$  et  $E_{int}$  comme  $N\hbar\omega_0 \chi/w^3$  où  $\chi$  est un paramètre sans dimension égal à  $aN/\sigma$ . Ce paramètre  $\chi$  caractérise donc l'importance des interactions qui sont négligeables si  $\chi \ll 1$ , et importantes si  $\chi \gg 1$ .

Lorsque la longueur de diffusion  $a$  est positive (interactions effectives répulsives), on trouve que l'énergie totale  $E = E_{cin} + E_{piège} + E_{int}$  a toujours un minimum quand on fait varier  $w$ , ce qui montre qu'un condensat stable existe quelle que soit la valeur de  $\chi$ . Pour  $\chi \ll 1$ , on retrouve que  $E$  est minimum pour  $w = 1$ , ce qui montre que  $R = \sigma$  (les atomes sont tous dans l'état fondamental du puits harmonique), alors que pour  $\chi \gg 1$ , la valeur de  $R$  qui minimise  $E$  est de l'ordre de  $\sigma \chi^{1/5}$ , c'est à dire beaucoup plus grande que  $\sigma$  : les répulsions entre atomes provoquent un "gonflement" du condensat.

Quand  $a$  est négatif (interactions effectives attractives) on trouve par contre que les variations de  $E$  avec  $w$  ne présentent un minimum que pour des valeurs suffisamment basses de  $\chi$ , inférieures à une valeur critique  $\chi$  de l'ordre de 1. Des attractions trop fortes entre atomes déstabilisent donc le condensat.

Toutes ces conclusions qualitatives sont confirmées par des résolutions numériques de l'équation de Gross-Pitaevskii.

On montre enfin qu'une telle équation se simplifie considérablement à la limite  $\chi \gg 1$ . Le terme d'énergie cinétique peut être négligé et l'équation aux dérivées partielles non linéaire peut alors être valablement approximée par une équation algébrique d'où l'on déduit une expression analytique pour la fonction d'onde du condensat. Une telle limite est appelée limite de Thomas Fermi. Elle conduit à des expressions analytiques simples pour le rayon du condensat, le potentiel

chimique, l'énergie moyenne par particule, le rapport d'anisotropie du condensat dans un piège harmonique anisotrope, la densité d'atomes au centre du condensat.

### Transformation de Bogolubov

L'approche qui a été suivie pour établir l'équation de Gross-Pitaevskii est une approche de champ moyen où l'on ne s'intéresse qu'à l'état fondamental du système des  $N$  bosons en interaction et où l'on néglige les corrélations entre particules (les fonctions d'onde d'essai sont des produits de  $N$  fonctions d'onde identiques). Les deux séances suivantes du cours sont consacrées à la présentation d'une approche un peu plus élaborée, basée sur la transformation de Bogolubov, qui permet de corriger un certain nombre de ces limitations. Des informations plus précises peuvent ainsi être obtenues sur l'état fondamental, en particulier sur les corrélations qui existent dans cet état. On peut également étudier les premiers états excités du système, qui ne sont autres que les excitations élémentaires du système de bosons auxquelles on peut associer des "quasiparticules".

Le cas des bosons enfermés dans une boîte (système appelé "homogène" ou "uniforme") est plus simple à traiter que celui des bosons piégés dans un potentiel extérieur (où la densité varie dans l'espace et est donc inhomogène). Des prédictions analytiques peuvent en particulier être obtenues à partir de l'approche de Bogolubov. C'est la raison pour laquelle on se limite ici à ce cas simple. D'autres méthodes seront introduites dans les deux dernières séances du cours pour étudier les excitations élémentaires d'un gaz de bosons piégés dans un potentiel harmonique.

Le formalisme de la seconde quantification est particulièrement commode pour introduire la transformation de Bogolubov. Le Hamiltonien des  $N$  bosons en interaction est exprimé en fonction des opérateurs  $a_k$  et  $a_k^\dagger$  qui détruisent et créent une particule dans l'état quantique individuel  $k$  de la boîte, et qui obéissent à des relations de commutation caractéristiques de bosons. Le terme d'interaction  $H_{int}$  est en particulier une somme de produits de quatre opérateurs, deux de création et deux d'annihilation décrivant des collisions élémentaires où les deux états initiaux des deux bosons entrant en collision se transforment en deux états finaux. Après un rappel bref des résultats obtenus en traitant l'effet de  $H_{int}$  par la théorie des perturbations, on introduit l'approximation à la base de la transformation de Bogolubov. A très basse température et si le gaz est suffisamment dilué, on s'attend à ce que, dans l'état fondamental et les premiers états excités du système, l'état individuel d'énergie la plus basse de la boîte,  $k = 0$ , ait une population  $n_0$  de l'ordre

du nombre total  $N$  de particules, très grande devant les populations  $n_k$  des autres états individuels  $k \neq 0$ . Comme  $a_0$  et  $a_0^\dagger$  sont de l'ordre de  $\sqrt{n_0}$ , il semble légitime de négliger dans  $H_{int}$  les termes ne contenant pas au moins deux  $a_0$  ou  $a_0^\dagger$ . Par ailleurs, comme le commutateur entre  $a_0$  et  $a_0^\dagger$ , de l'ordre de 1 est négligeable devant  $\sqrt{n_0}$ , on peut également oublier le caractère opératoire de  $a_0$  et  $a_0^\dagger$  et les remplacer par  $\sqrt{n_0}$ . On obtient ainsi un Hamiltonien  $H$  qui n'est plus qu'une fonction quadratique des  $a_k$  et  $a_k^\dagger$  avec  $k \neq 0$  et qui peut donc être diagonalisé par une transformation canonique. Cette transformation n'est autre que la transformation de Bogolubov. Elle revient à introduire des nouveaux opérateurs de destruction  $b_k$  qui sont des combinaisons linéaires de  $a_k$  et  $a_{-k}^\dagger$ , ainsi que leurs adjoints  $b_k^\dagger$ , de telle sorte que  $H$  puisse se réexprimer sous la forme

$$H = E_0 + \sum_{k \neq 0} \hbar \omega(k) b_k^\dagger b_k$$

$E_0$  est l'énergie du nouvel état fondamental, alors que  $b_k$  (et  $b_k^\dagger$ ) détruisent (et créent) une excitation élémentaire d'énergie  $\hbar \omega(k)$ .

L'expression analytique obtenue pour  $\omega(k)$  décrit la relation de dispersion des excitations élémentaires. Pour  $k \gg 1/\xi_0$ , où  $\xi_0$  est la longueur de relaxation introduite plus haut, on trouve  $\hbar \omega(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ , qui n'est autre que la relation de dispersion d'une particule libre de masse  $m$ . Par contre, pour  $k \ll 1/\xi_0$ , on trouve  $\hbar \omega(k) = ck$ , qui correspond à des excitations élémentaires de type phonon,  $c$  étant la vitesse de propagation du son.

Par rapport à la valeur donnée par la théorie de champ moyen,  $E_0$  contient des termes correctifs en  $(\rho a^3)^{1/2}$ , où  $\rho$  est la densité spatiale de particules et  $a$  la longueur de diffusion. Le paramètre infiniment petit, exprimant le caractère dilué du gaz et justifiant l'approximation de Bogolubov est donc le nombre  $\rho a^3$  de particules dans un volume  $a^3$ .

L'approximation de Bogolubov permet également d'obtenir des informations intéressantes sur la fonction d'onde  $\psi_0$  du nouvel état fondamental, satisfaisant à  $b_k |\psi_0\rangle = 0$  pour tout  $k \neq 0$ . On peut calculer analytiquement les valeurs dans  $|\psi_0\rangle$  des nombres moyens d'occupation  $n_k = \langle \psi_0 | a_k^\dagger a_k | \psi_0 \rangle$  des divers états individuels  $k$  et comparer

$$N' = \sum_{k \neq 0} n_k$$

au nombre total  $N$  de particules. Le rapport  $N'/N$  s'appelle le facteur de dépletion quantique de l'état fondamental et se trouve lui aussi être de l'ordre de  $(\rho a_0^3)^{1/2}$ . C'est la valeur petite de ce rapport qui permet de considérer que  $n_0 = N - N'$  est prépondérant devant tous les  $n_k$  avec  $k \neq 0$ .

On peut enfin calculer la densité à deux corps dans le nouvel état fondamental, c'est-à-dire la probabilité  $\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}')$  de trouver une particule en  $\vec{r}$  et une autre particule en  $\vec{r}'$ . En l'absence de corrélation entre les particules,  $\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}')$  se factoriserait sous forme d'un produit de densités simples  $\rho_I(\vec{r})\rho_I(\vec{r}')$ ,  $\rho_I(\vec{r})$  étant la probabilité de trouver une particule en  $\vec{r}$ . On trouve bien effectivement que  $\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}')$  n'est pas un produit et ne tend vers un produit que quand  $|\vec{r} - \vec{r}'| \gg \xi_0$ .

### Equation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps

Dans de nombreuses expériences, le potentiel extérieur dans lequel est plongé le condensat de Bose-Einstein est modulé dans le temps, de manière à exciter les modes propres de vibration 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. Les deux dernières séances du cours sont consacrées à l'étude de ces problèmes.

On commence par montrer qu'il est possible de généraliser l'équation de Gross-Pitaevskii étudiée précédemment à de telles situations dépendant du temps. La démarche suivie utilise le fait que l'équation de Schrödinger des  $N$  bosons en interactions, où apparaît le Hamiltonien complet du système incluant le potentiel d'interaction entre particules et le potentiel extérieur dépendant du temps, peut être déduite d'un principe variationnel correspondant à une action dont on rappelle l'expression. Au lieu de faire varier la fonction d'onde des  $N$  bosons dans tout l'espace de Hilbert, on se restreint à un sous espace de fonctions produits de  $N$  fonctions d'onde individuelles, chaque particule étant décrite par la même fonction d'onde dépendant du temps  $\varphi(\vec{r}, t)$ . La fonction  $\varphi(\vec{r}, t)$  qui minimise l'action se trouve alors obéir à une équation de Schrödinger non linéaire

dépendant du temps. Cette équation décrit l'évolution de chaque particule dans le potentiel extérieur dépendant du temps et dans le champ moyen créé par les  $N-1$  autres, qui lui aussi dépend du temps, à cause de la dépendance temporelle de  $|\varphi(\vec{r}, t)|^2$ . C'est l'équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps.

A la limite des faibles excitations, quand le potentiel extérieur de piégeage est la somme d'une composante statique et d'une petite composante  $\delta V$  dépendant du temps, il est possible de linéariser l'équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps. En prenant une forme de créneau temporel pour  $\delta V$ , on peut ainsi étudier les fréquences des modes propres de vibration de faible amplitude du condensat, fréquences qui sont données par les solutions d'une équation aux valeurs propres. Une telle approche appliquée à un système homogène (bosons enfermés dans une boîte) redonne bien la relation de dispersion des excitations élémentaires obtenue précédemment à partir de la transformation de Bogolubov.

Un autre éclairage intéressant sur l'équation de Gross-Pitaevskii est obtenu en déduisant de cette équation des équations équivalentes couplées régissant l'évolution du module  $\rho(\vec{r}, t)$  et de la phase  $S(\vec{r}, t)$  de la fonction d'onde  $\varphi(\vec{r}, t)$ . A la limite des grandes densités, une approximation analogue à l'approximation de Thomas-Fermi pour un potentiel  $V_{ext}$  dépendant du temps, permet alors de transformer ces équations en des équations hydrodynamiques décrivant l'écoulement d'un fluide. Quand le potentiel extérieur est harmonique et ne dépend du temps que par l'intermédiaire des fréquences propres du piège  $\omega_i(t)$ , ces équations peuvent être simplifiées et remplacées par des équations différentielles non linéaires qui se révèlent très commode pour étudier quantitativement les modes propres de vibration du condensat ou son expansion balistique quand le potentiel extérieur est coupé brusquement.

Plusieurs expériences récentes sont enfin passées en revue. Les observations expérimentales sont en bon accord avec les prédictions théoriques déduites de l'équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps, ce qui montre l'utilité d'une telle équation pour étudier la structure et la dynamique des condensats de Bose-Einstein.

*Les notes de cours sont disponibles sur le WEB  
à l'adresse <http://www.lkb.ens.fr/~cct/cours/>*

Collisions élastiques

T-1

$m_1 = m_2 = m$        $m_{red} = \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m}{2}$

Mouvement du centre de masse

Particule libre de masse  $M = 2m$

Particule "relative"

$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

Etat stationnaire de diffusion

$e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$

Potentiel central - Déphasages

$\psi_{k\ell m}(\vec{r}) = \frac{u_{k\ell}(r)}{r} Y_\ell^m(\theta, \varphi)$        $u_{k\ell}(0) = 0$

$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \right] u_{k\ell}(r) = 0$

$u_{k\ell}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} C \sin \left[ kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell(k) \right]$

Pour une particule libre ( $V=0$ ),  $\delta_\ell = 0$

Amplitude de diffusion en fonction des  $\delta_\ell(k)$

$f_k(\theta, \varphi) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} e^{i\delta_\ell(k)} \sin \delta_\ell(k) Y_\ell^0(\theta)$

Limite des basses énergies

T-2

$\lambda$  de Broglie  $\gg$  Portée du potentiel

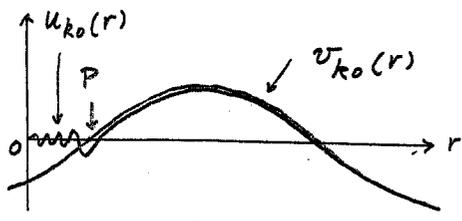
C'est uniquement dans l'onde  $s$  ( $\ell=0$ ) que les particules peuvent s'approcher suffisamment l'une de l'autre pour ressentir l'effet du potentiel d'interaction.

Dans le développement en ondes partielles de  $f_k(\theta)$ , on se limite à l'onde  $s$

$f_k = \frac{1}{k} e^{i\delta_0(k)} \sin \delta_0(k)$

$u_{k0}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} C \sin [kr + \delta_0(k)]$

Fonction "prolongée"  $v_{k0}(r) = C \sin [kr + \delta_0(k)]$



Abscisse du point P où  $v_{k0}(r)$  s'annule

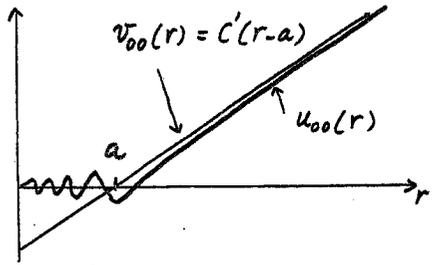
$r_p = -\frac{\delta_0(k)}{k}$        $-\frac{\pi}{2} \leq \delta_0(k) \leq +\frac{\pi}{2}$

Longueur de diffusion a

T-3

$a = \lim_{k \rightarrow 0} -\frac{\delta_0(k)}{k}$

Limite de l'abscisse du point P quand  $k \rightarrow 0$



Amplitude de diffusion

$f_k \underset{k \rightarrow 0}{\approx} -a$

Etat stationnaire de diffusion

$e^{ikz} - a \frac{e^{ikr}}{r}$

Section efficace totale

$\sigma_{tot} = 8\pi a^2$

Expression plus précise de  $f_k$

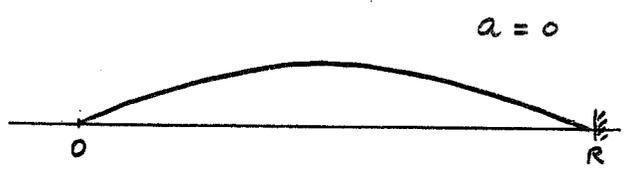
$f_k \approx \frac{-a}{1 + ika - \frac{1}{2} r_e k^2 a}$

$r_e$ : Portée effective

Lien entre le signe de a et le

T-4

signe des corrections introduites par U sur les états d'énergie positive



$\lambda = \frac{2\pi}{k}$  décroît,  $k$  croît,  $\delta E > 0$



$\lambda = \frac{2\pi}{k}$  croît,  $k$  décroît,  $\delta E < 0$

Pseudopotentiels

T-5

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

Potentiel  $V_\delta$

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

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

Potentiel  $V_{pseudo}$

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

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  $r_0 = 0$

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  $|\varphi\rangle$

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

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

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

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

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

Minimum de  $E(\varphi)$  obtenu quand  $\varphi(\vec{r})$

obéit à l'équation

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

$\lambda$  : Multiplicateur de Lagrange

Interprétation

T-7

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  $\varphi$  :  $\int d^3r |\varphi(\vec{r})|^2 = 1$

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

Interprétation de  $\lambda$

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

$\lambda$  est égal au potentiel chimique  $\mu$

Relations générales découlant de l'éq. de G-P

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

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

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

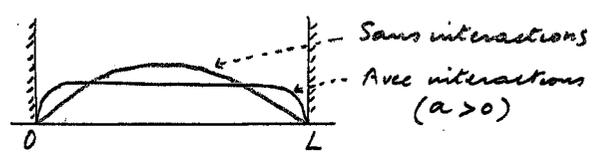
si  $V_{ext}(\vec{r})$  est harmonique

Longueur de relaxation  $\xi_0$

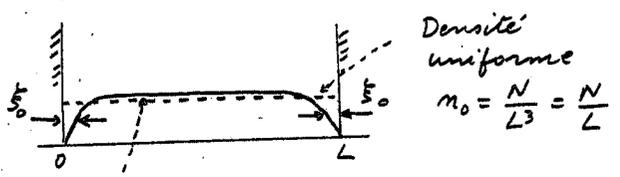
T-8

("Healing length")

$N$  bosons dans une boîte de côté  $L$   
Etude de l'état fondamental



Etude de  $\varphi$  au voisinage des parois



Densité réelle tenant compte des conditions aux limites

$\xi_0$  : Distance au bout de laquelle  $n(\vec{r}) = N |\varphi(\vec{r})|^2$  atteint sa valeur constante

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

$\xi_0$  correspond au minimum de  $E_{cin} + E_{inter}$

Condensat dans un piège harmonique

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

$$\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} = \text{Largeur de l'état fondamental}$$

Ordres de grandeur

R : Rayon du condensat

$$w = \frac{R}{\sigma}$$

$$E_{cin} \approx N \hbar \omega_0 \frac{1}{w^2}$$

$$E_{piège} \approx N \hbar \omega_0 w^2$$

$$E_{inter} \approx N \hbar \omega_0 \frac{1}{w^3} \chi$$

Paramètre  $\chi = \frac{aN}{\sigma}$

$\chi \gg 1$  Interactions fortes

$\chi \ll 1$  Interactions faibles

Un condensat stable existe si

$E(w) = E_{cin} + E_{piège} + E_{inter}$  passe par un minimum quand  $w$  croit de 0 à  $+\infty$

Longueur de diffusion  $a > 0$

$E(w)$  a toujours un minimum

$$\chi \ll 1 \quad w_{min} \approx 1 \quad R \approx \sigma$$

$$\chi \gg 1 \quad w_{min} \propto \chi^{1/5} \quad R \approx \sigma \chi^{1/5} \gg \sigma$$

Le condensat "gonfle" sous l'effet des répulsions entre atomes

Point important : Les interactions peuvent jouer un rôle important même si le milieu est dilué

$$l = R N^{-1/3} \quad \text{Distance entre atomes}$$

$$\frac{a}{l} = \frac{a}{R} N^{1/3} < \frac{a}{\sigma} N^{1/3} \quad \text{car } R \gg \sigma$$

$$\chi = \frac{aN}{\sigma}$$

Comme  $N \gg 1$ , on peut avoir à la fois

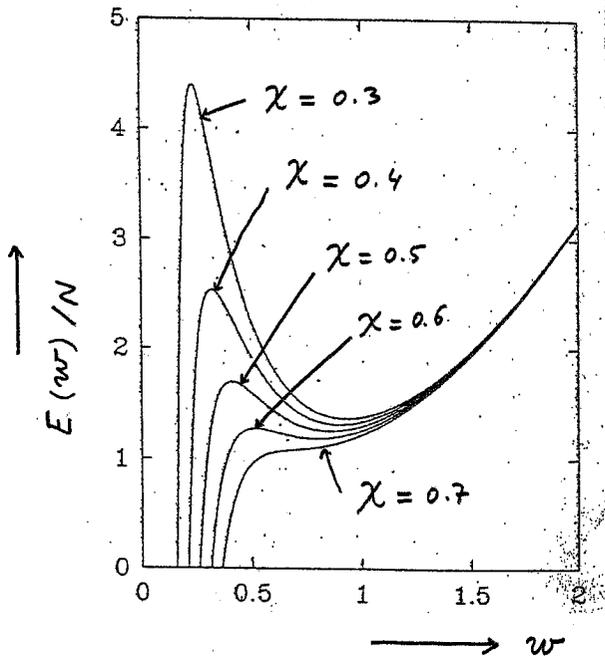
$$\frac{a}{l} \ll 1 \quad \text{Milieu dilué}$$

$$\chi \gg 1 \quad \text{Interactions fortes}$$

Exemple  $\frac{a}{\sigma} = 10^{-4} \quad N = 10^6$

$$\frac{a}{l} < 10^{-2} \ll 1 \quad \frac{aN}{\sigma} = 10^2 \gg 1$$

Longueur de diffusion  $a < 0$



$E(w)$  n'a de minimum que pour  $\chi < \chi_{crit}$

Limite de Thomas - Fermi

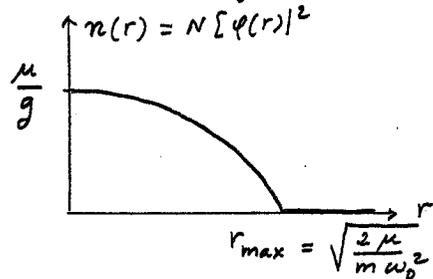
$$a > 0 \quad \chi \gg 1$$

Le terme d'énergie cinétique est négligé dans l'équation de G.P. qui devient

$$\frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2 \varphi(\vec{r}) + N g |\varphi(\vec{r})|^2 \varphi(\vec{r}) = \mu \varphi(\vec{r})$$

Comme  $\varphi(\vec{r})$  est réel, on en déduit

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



Parabole inversée

Expression de  $\mu$  (à partir de  $\int d^3r \varphi^2(r) = 1$ )

$$\mu = \frac{\hbar \omega_0}{2} \left( 15 \frac{aN}{\sigma} \right)^{2/5} = \frac{\hbar \omega_0}{2} (15 \chi)^{2/5} \gg \hbar \omega_0$$

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

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

Energie libérée après coupure du piège

$$E_{\text{totale}}^{\text{avant}} = \cancel{E_{\text{kin}}^{\text{avant}}} + E_{\text{piège}}^{\text{avant}} + E_{\text{inter}}^{\text{avant}}$$

$$E_{\text{totale}}^{\text{après}} = E_{\text{inter}}^{\text{avant}}$$

↳  $E_{\text{libérée}} = E_{\text{inter}}^{\text{avant}}$

$$E_{\text{totale}} = \cancel{E_{\text{kin}}} + E_{\text{piège}} + E_{\text{inter}}$$

$$\mu = \frac{1}{N} (\cancel{E_{\text{kin}}} + E_{\text{piège}} + 2E_{\text{inter}})$$

$$2\cancel{E_{\text{kin}}} - 2E_{\text{piège}} + 3E_{\text{inter}} = 0$$

$$E_{\text{piège}} = \frac{3}{2} E_{\text{inter}}$$

$$\mu = \frac{1}{N} \left( \frac{3}{2} E_{\text{inter}} + 2E_{\text{inter}} \right) = \frac{7}{2N} E_{\text{inter}}$$

$$E_{\text{libérée}} = E_{\text{inter}} = \frac{2}{7} \mu N$$

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

En l'absence d'interactions, on aurait  $E_{\text{libérée}} = \frac{3}{4} \hbar \omega_0$

Transformation de Bogolubov

Bosons en interaction dans une boîte  
 But : 1<sup>ère</sup> corrections au champ moyen  
 - Corrélations entre particules  
 - Excitations élémentaires

Hamiltonien  $\hat{H}$  en seconde quantification

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_k \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{a}_k$$

$$\hat{\Psi}^+(\vec{r}) = \sum_k \frac{1}{L^{3/2}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{a}_k^+$$

$$\hat{H} = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + H_{\text{int}}$$

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \iint d^3r d^3r' \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \hat{\Psi}^+(\vec{r}') \hat{V}(|\vec{r}-\vec{r}'|) \hat{\Psi}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}')$$

Si l'on prend  $V(|\vec{r}-\vec{r}'|) = g \delta(\vec{r}-\vec{r}')$

$$H_{\text{int}} = \frac{g}{2L^3} \sum_{k_1, k_2, k} \hat{a}_{k_1}^+ \hat{a}_{k_2}^+ \hat{a}_{k_2+k} \hat{a}_{k_1-k}$$

Approximations à la base du calcul

- $n_0 = \langle \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 \rangle \gg \sum_{k \neq 0} \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle$
- On néglige dans  $H_{\text{int}}$  tous les termes ne contenant pas au moins 2  $\hat{a}_0$  ou  $\hat{a}_0^+$
- On remplace  $\hat{a}_0$  et  $\hat{a}_0^+$  par  $\sqrt{n_0} \approx \sqrt{N}$

Expression approchée de  $\hat{H}$

Dans le sous-espace des états tels que  $n_0 \gg \sum_{k \neq 0} n_k$ ,  $\hat{H}$  est approximé par une fonction quadratique  $\hat{H}_{\text{eff}}$  des  $\hat{a}_k$  et  $\hat{a}_k^+$  qu'on peut diagonaliser exactement

$$\hat{H}_{\text{eff}} = E_0 + \sum_k \hbar \omega(k) \hat{b}_k^+ \hat{b}_k$$

$$\begin{cases} \hat{b}_k = u_k \hat{a}_k + v_k \hat{a}_{-k}^+ \\ \hat{b}_{-k}^+ = u_k \hat{a}_{-k}^+ + v_k \hat{a}_k \end{cases}$$

$$\begin{cases} u_k = \text{ch } \theta_k \\ v_k = \text{sh } \theta_k \end{cases} \quad \text{th } 2\theta_k = \frac{\rho g}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \rho g}$$

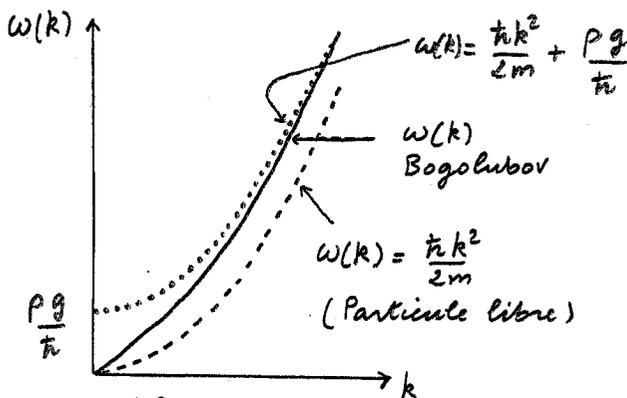
$$\rho = \frac{N}{L^3}$$

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

$$\frac{E_0}{N} = \frac{1}{2} \rho g \left[ 1 + \frac{128}{15\sqrt{\pi}} (\rho a^3)^{1/2} \right]$$

Relation de dispersion des excitations élémentaires

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



Limite  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \ll \rho g \leftrightarrow k \ll k_0$  ou  $k_0 = \frac{1}{\xi_0}$   
 $\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{8\pi a \rho}} = \text{Longueur de relaxation}$

$$\omega = ck \quad c = \sqrt{\frac{\rho g}{m}} \quad \text{Phonons}$$

Limite  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \gg \rho g \leftrightarrow k \gg k_0$

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{\rho g}{\hbar} \quad \text{Particule libre} + \text{Correction } \frac{\rho g}{\hbar}$$

Depletion quantique de l'état fondamental

Nouvel état fondamental  $|\psi_0\rangle$   
 Vide pour les  $\hat{b}_k$  :  $\hat{b}_k|\psi_0\rangle = 0 \quad \forall k \neq 0$

$$N - N_0 = \sum_{k \neq 0} \langle \psi_0 | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k | \psi_0 \rangle$$

On reexprime  $\hat{a}_k$  et  $\hat{a}_k^\dagger$  en fonction de  $\hat{b}_k$  et  $\hat{b}_k^\dagger$  et on utilise  $\hat{b}_k|\psi_0\rangle = 0$

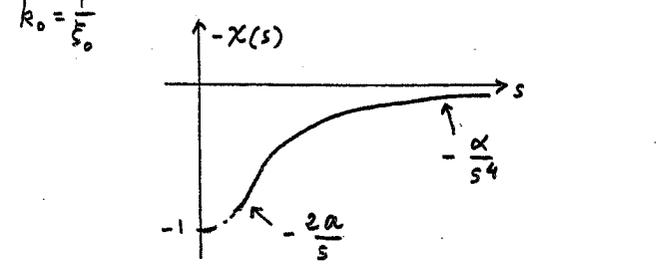
$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} (\rho a^3)^{1/2}$$

Paramètre infiniment petit de la théorie de Bogolubov :  $\rho a^3$

Densité à 2 corps  $\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}')$

$$\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}') = \rho^2 [1 - \chi(s)] \quad s = |\vec{r} - \vec{r}'|$$

$$\chi(s) = \frac{1}{\rho} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}} \left[ \frac{k/k_0}{\sqrt{(k/k_0)^2 + 2}} - 1 \right]$$



Equation de Gross-Pitaevskii

dépendant du temps  
 Expériences où l'on fait varier  $V_{ext}(\vec{r})$  au cours du temps (modulation, coupure brusque du piège ...)

Méthode variationnelle

- L'équation de Schrödinger satisfaite par la fonction d'onde exacte  $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$  peut être déduite d'un principe de moindre action à partir d'une action  $S$

- On se restreint au sous-espace des fonctions d'onde produits  $\varphi(\vec{r}_1, t) \varphi(\vec{r}_2, t) \dots \varphi(\vec{r}_N, t)$  et on minimise  $S$  à l'intérieur de ce sous-espace

- La meilleure fonction d'onde à une particule dépendant du temps  $\varphi(\vec{r}, t)$  obéit à :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\vec{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext}(\vec{r}, t) \right] \varphi(\vec{r}, t) + Ng |\varphi(\vec{r}, t)|^2 \varphi(\vec{r}, t)$$

Limite des faibles excitations

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

$$\delta V \ll V_0$$

Linéarisation de l'équation de G.P. dépendant du temps pour  $\varphi$  voisin de la solution  $\varphi_0(\vec{r}) e^{-i\mu t/\hbar}$  correspondant à  $\delta V = 0$

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

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

On obtient alors pour  $\delta\varphi$  et  $\delta\varphi^*$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \delta\varphi \\ \delta\varphi^* \end{pmatrix} = \mathcal{L}_{GP} \begin{pmatrix} \delta\varphi \\ \delta\varphi^* \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta V \varphi_0 \\ -\delta V \varphi_0^* \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{L}_{GP} = \begin{pmatrix} H_0 - \mu + 2Ng|\varphi_0|^2 & Ng\varphi_0^2 \\ -Ng\varphi_0^{*2} & -(H_0 - \mu + 2Ng|\varphi_0|^2) \end{pmatrix}$$

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

Obtention à partir de cette équation des fréquences des modes propres de vibration comme solutions d'une équation aux valeurs propres.

Réécriture de l'équation de G-P

sous une forme équivalente

- Normalisation choisie pour  $\varphi(\vec{r}, t)$   
 $\int d^3r |\varphi(\vec{r}, t)|^2 = N$

$$|\varphi(\vec{r}, t)|^2 = \rho(\vec{r}, t) = \text{Densité de particules}$$

- Module et phase de  $\varphi(\vec{r}, t)$   
 $\varphi(\vec{r}, t) = \sqrt{\rho(\vec{r}, t)} e^{iS(\vec{r}, t)}$

- Champ de vitesses  $\vec{v}(\vec{r}, t)$   
 $\vec{v}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \vec{\nabla} S(\vec{r}, t)$

A partir de l'équation de G-P dépendant du temps, on déduit alors 2 équations

① Equation de continuité'  

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

② Equation du mouvement de  $\vec{v}(\vec{r}, t)$   

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

T-21

Limite des grandes densités  $\frac{\alpha N}{\sigma} \gg 1$

Il est alors légitime de négliger le terme  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\rho}} \Delta \sqrt{\rho}$  (terme de "pression quantique")

L'équation du mouvement de  $\vec{v}$  devient alors analogue à une équation hydrodynamique

$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \vec{\nabla} \left[ -\frac{1}{2} m v^2 - V_{ext} - \rho g \right]$$

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

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}$$

Equation de la dynamique d'une

particule de masse  $m$  soumise

- à la force de piégeage  $-\vec{\nabla} V_{ext}$
- à la force  $-\vec{\nabla} \rho g$  due aux interactions avec les autres particules

Autre approche valable à haute densité

Quand  $V_{ext}(\vec{r}, t)$  est harmonique et ne dépend de  $t$  que par l'intermédiaire des fréquences de vibration  $\omega_i(t)$

$$V_{ext}(\vec{r}, t) = \frac{m}{2} \sum_{i=x,y,z} \omega_i^2(t) r_i^2 \quad r_i = x, y, z$$

Pour  $t < 0$ ,  $\omega_i(t) = \omega_{i,0} = \text{cte}$

Les équations hydrodynamiques ont alors une solution

$$r_i(t) = b_i(t) r_i(0)$$

correspondant à une simple dilatation

Les  $b_i(t)$  satisfont aux équations

$$\ddot{b}_i(t) + \omega_i^2 b_i(t) - \frac{\omega_{0i}^2}{b_x(t) b_y(t) b_z(t) b_i(t)} = 0$$

Etude à partir de ces équations

- de l'expansion balistique du condensat quand le piège est coupé brusquement
- des modes propres de vibration dans les régimes linéaire (faibles excitations) et non linéaire (fortes excitations)

T-23

B - Thème général du cours 1999-2000

Propriétés de cohérence des condensats de Bose Einstein

- Longueur de cohérence d'un condensat
- Phase relative de 2 condensats
- Fonctions de corrélation  
Cohérences d'ordre supérieur
- Interférences entre condensats
- Lasers à atomes