

Résumé du cours 1997-1998

Le cours de l'année 1997-1998 est le premier d'une série de cours consacrés à l'étude de la condensation de Bose-Einstein des gaz atomiques ultrafroids. La première séance passe rapidement en revue les divers développements expérimentaux qui ont permis l'observation récente d'un tel phénomène : refroidissement et piégeage d'atomes neutres par des faisceaux laser ; pièges magnétostatiques utilisant des gradients de champ magnétique ; refroidissement évaporatif sous l'effet de collisions élastiques entre atomes piégés permettant à certains atomes de gagner une énergie suffisante pour s'échapper du piège, au détriment des autres qui, après rethermalisation, acquièrent une température plus basse. On souligne également l'intérêt de l'étude de la condensation de Bose-Einstein sur des milieux dilués comme les gaz d'atomes alcalins ultrafroids. Les interactions entre atomes, apparaissant essentiellement lors de collisions binaires, ne sont pas prépondérantes devant les effets de statistique pure, comme c'est le cas dans des milieux plus denses, tels que l'hélium superfluide. Il est possible de calculer simplement l'effet de ces collisions binaires à très basse température au moyen d'un petit nombre de paramètres comme la longueur de diffusion et d'établir ainsi un lien quantitatif entre les propriétés macroscopiques de condensats et ces paramètres microscopiques. Le confinement spatial des atomes dans un piège magnétique permet par ailleurs d'éviter les phénomènes complexes se produisant sur des parois matérielles et d'observer une condensation spatiale des atomes qui viennent s'accumuler dans l'état fondamental du piège. Enfin, la fluorescence des atomes alcalins est aisée à observer, ce qui permet une détection optique sensible de l'apparition et de l'évolution des condensats.

**Rappels de mécanique statistique**

Un certain nombre de notions essentielles de mécanique statistique sont brièvement rappelées afin de préciser les notations et d'introduire les outils théoriques adaptés à l'étude de la condensation de Bose-Einstein.

L'entropie statistique  $S(\hat{D})$  est définie à partir de l'opérateur densité  $\hat{D}$  décrivant l'état quantique d'un système, et ses propriétés importantes sont brièvement passées en revue : interprétation en termes d'information manquante, additivité, concavité, invariance dans une transformation unitaire.

L'opérateur densité d'équilibre  $\hat{D}$  est déterminé en rendant l'entropie statistique  $S(\hat{D})$  maximale, compte tenu des contraintes. On introduit alors la fonction de partition  $Z$  associée à  $\hat{D}$  ainsi que divers ensembles statistiques (microcanonique, canonique, grand canonique) correspondant à divers types de contraintes.

Le lien avec la thermodynamique est alors étudié, ce qui permet d'établir un certain nombre de relations importantes entre diverses grandeurs physiques, comme le nombre de particules, l'énergie interne ou la pression et les dérivées partielles du logarithme de la fonction de partition par rapport au potentiel chimique, à la température et au volume.

Le cas particulier des particules indépendantes est également analysé et l'on établit les lois de distribution de Bose-Einstein et Fermi-Dirac donnant les nombres d'occupation moyens des divers états quantiques individuels pour un ensemble de bosons ou de fermions identiques sans interactions.

On introduit enfin l'idée des méthodes variationnelles thermodynamiques. Le calcul explicite du logarithme de la fonction de partition n'est en général possible que pour des particules sans interactions. En présence d'interactions, il peut être judicieux de remplacer le véritable Hamiltonien  $\hat{H}$  par un Hamiltonien d'essai  $\hat{H}_e$  à particules indépendantes, contenant un potentiel de champ moyen  $\hat{V}$  qui essaie de reproduire au mieux l'effet des interactions entre particules. Des inégalités sont établies sur les potentiels thermodynamiques associés à  $\hat{H}$  et  $\hat{H}_e$  permettant de déterminer par des méthodes variationnelles le meilleur choix possible pour  $\hat{H}_e$ .

## **Bosons sans interactions dans une boîte**

La condensation de Bose-Einstein est habituellement décrite pour un ensemble de bosons identiques sans interactions, enfermés dans une boîte de volume  $V$ , en équilibre thermodynamique à la température  $T$ . Une séance est consacrée à l'étude de ce problème.

A partir de l'expression des énergies des niveaux quantiques individuels dans la boîte, il est possible de calculer le nombre d'états quantiques  $\rho(\varepsilon)d\varepsilon$ , d'énergie comprise entre  $\varepsilon$  et  $\varepsilon + d\varepsilon$ ,  $\rho(\varepsilon)$  étant la densité d'états. Il est très courant, en mécanique statistique, de remplacer les sommes discrètes sur les états quantiques individuels qui apparaissent dans l'expression des diverses

grandeurs physiques par des intégrales sur  $\epsilon$  pondérées par la densité d'états  $\rho(\epsilon)$ .

Une telle approximation « continue » conduit à une difficulté sérieuse quand on l'applique au calcul du nombre total de particules  $N$  obtenu en attribuant à chaque niveau quantique individuel une population donnée par la distribution de Bose-Einstein et en sommant sur tous ces états. On trouve qu'avec un potentiel chimique négatif, ce qui est nécessaire pour obtenir une distribution normalisable, il est impossible de répartir les  $N$  bosons dans les divers états quantiques en suivant la distribution de Bose-Einstein.

La difficulté précédente est liée en fait à l'approximation continue qui revient à pondérer la population de l'état fondamental  $\epsilon_0 = 0$  de la boîte par la densité d'états  $\rho(0)$  qui est nulle. Un calcul plus précis, n'utilisant pas l'approximation continue, montre qu'en dessous d'une certaine température critique  $T_c$ , la population  $N_0$  du niveau fondamental peut devenir macroscopique, c'est-à-dire représenter une fraction significative du nombre total  $N$  de particules. Négliger  $N_0$ , comme on le fait en pondérant la population de l'état fondamental par  $\rho(0) = 0$ , conduit donc à un résultat inexact. Le calcul précis de la population  $N_1$  du premier niveau excité de la boîte, situé à une distance  $\delta\epsilon$  au dessus du niveau fondamental, montre que  $k_B T_c \gg \delta\epsilon$  où  $k_B$  est la constante de Boltzmann. Un tel résultat indique que l'accumulation des bosons dans l'état fondamental n'est pas un effet thermique trivial, qui apparaîtrait quand l'énergie thermique  $k_B T_c$  devient de l'ordre de  $\delta\epsilon$  ou inférieure à  $\epsilon$ . La condensation de Bose-Einstein est un effet de statistique quantique qui apparaît à des températures  $T_c$  telles que le facteur de Boltzmann usuel  $\exp(-\delta\epsilon/k_B T_c)$  est de l'ordre de 1. Le calcul de la température critique montre en fait que  $T_c$  est donnée par l'équation  $n[\Lambda_{dB}(T_c)]^3 = 2.612$  où  $n = N/V$  est la densité spatiale de particules et  $\Lambda_{dB}(T) = [2\pi\hbar^2/mk_B T]^{1/2}$  la longueur d'onde de de Broglie thermique à la température  $T$ . En d'autres termes, la condensation de Bose-Einstein apparaît quand la distance moyenne entre particules devient de l'ordre de la longueur d'onde de de Broglie thermique. Les paquets d'ondes associés aux diverses particules commencent alors à se recouvrir et les effets de statistique quantique deviennent importants.

Après une telle discussion physique qualitative, une étude plus quantitative est présentée. On calcule la fraction de particules condensée  $N_0/N$  que l'on trouve être égale à  $1 - (T/T_c)^{3/2}$  pour  $T \leq T_c$ . L'expression du logarithme de la fonction de partition est également établie, ce qui permet d'en déduire la valeur de toute une série de grandeurs physiques comme l'énergie  $U$ , la pression  $P$ , la chaleur spécifique à volume constant  $C_v$ . On montre en particulier que  $C_v$  reste continue en  $T = T_c$ , alors que la dérivée de  $C_v$  par rapport à  $T$  est discontinue en ce point (à la limite  $N \rightarrow \infty$ ). L'étude des isothermes  $P = f(V)$  correspondant

à diverses valeurs de  $T$  permet enfin de souligner des analogies et différences avec les isothermes de changement d'état d'un corps pur (équilibre liquide-vapeur).

### Bosons sans interaction dans un piège harmonique

Le traitement précédent est étendu au cas, correspondant aux expériences réalisées récemment, de  $N$  bosons piégés dans un potentiel harmonique. On néglige là encore toute interaction entre les particules.

Comme pour le cas de la boîte, l'approximation continue conduit au résultat absurde qu'il est impossible de répartir les  $N$  bosons dans les états quantiques du piège en suivant la loi de distribution de Bose-Einstein. Là encore, la résolution d'une telle difficulté est obtenue quand on réalise qu'au dessous d'une certaine température critique  $T_c$ , un nombre macroscopique  $N_0$  de bosons vient se condenser dans l'état fondamental du piège. On démontre que  $k_B T_c / \hbar \omega$  est de l'ordre de  $N^{1/3}$ , de sorte que là encore  $k_B T_c$  est très grand devant l'écart  $\hbar \omega$  entre l'état fondamental et le premier état excité du piège harmonique supposé isotrope. Quant à la fraction  $N_0/N$  d'atomes condensés, elle est maintenant égale à  $1 - (T/T_c)^3$  pour  $T \leq T_c$ . Tous ces résultats sont aisément étendus au cas d'un piège harmonique anisotrope.

On calcule également le logarithme de la fonction de partition d'où l'on déduit l'énergie interne  $U$  et la chaleur spécifique  $C = \partial U / \partial T$ . Il apparaît ici, qu'à la différence de ce qui se passe dans une boîte, la chaleur spécifique présente une discontinuité en  $T = T_c$ .

Une autre différence importante avec ce qui se passe dans une boîte est le caractère spatial de la condensation de Bose-Einstein de particules piégées. Au dessous de  $T_c$ , les  $N_0$  particules condensées dans l'état fondamental  $\varphi_0$  du piège donnent naissance à un pic étroit dans la distribution spatiale des atomes dont la largeur  $\Delta x_0 \approx \sqrt{\hbar/m\omega}$  est la largeur spatiale de la fonction d'onde  $\varphi_0(x)$  de l'état fondamental,  $m$  étant la masse des particules. Les  $N - N_0$  particules non condensées forment un « nuage thermique » dont la largeur  $\Delta x_T$  est, beaucoup plus grande que  $\Delta x_0$ , par un facteur de l'ordre de  $\sqrt{k_B T_c / \hbar \omega} \approx N^{1/6}$ . La distribution spatiale des atomes piégés est donc bimodale en dessous de  $T_c$ , c'est-à-dire formée d'un pic étroit émergeant au-dessus d'un fond beaucoup plus large. Dans une boîte au contraire, la distribution spatiale des atomes est uniforme quelle que soit la température  $T$ . Dans les deux cas, boîte et piège, il y a bien sûr une condensation dans l'espace des impulsions.

## Corrections dues au nombre fini de particules

Toutes les expériences réalisées sur la condensation de Bose-Einstein d'atomes alcalins ultrafroids l'ont été bien sûr avec un nombre fini  $N$  de particules dans un piège harmonique. Il est important d'évaluer les différences entre les prédictions théoriques correspondant, en l'absence d'interactions, à  $N$  fini et  $N$  infini, de manière à ne pas attribuer, à tort, ces différences à l'existence d'interactions entre particules.

Des expressions plus précises sont établies pour la densité d'états  $\rho(\epsilon)$  et le nombre  $N_c$  de particules excitées, c'est-à-dire dans des états autres que l'état fondamental  $\phi_0$ . On trouve que le fait que  $N$  soit fini abaisse la température critique  $T_c$ , l'abaissement relatif  $[T_c(\infty) - T_c(N)]/T_c(\infty)$  étant de l'ordre de  $0.7 N^{-1/3}$ .

Un tel résultat est confirmé par des calculs numériques, sans approximations, effectués pour des valeurs pas trop élevées de  $N$  (de l'ordre de quelques  $10^4$ ). Ce calcul numérique montre également que le fait d'avoir un nombre fini  $N$  de particules « arrondit » les variations de  $N_0/N$  avec  $T/T_c$  au voisinage de  $T/T_c = 1$ , et supprime par ailleurs la discontinuité de la chaleur spécifique  $C$  au voisinage de  $T_c$ , chaleur spécifique qui conserve toutefois une variation d'autant plus rapide en  $T = T_c$  que  $N$  est plus élevé.

## Problèmes de dimensions inférieures à 3

Considérons un piège harmonique anisotrope avec trois fréquences propres différentes  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$  le long des trois axes. Si l'une de ces fréquences  $\omega_3$  est choisie très grande devant les deux autres et si le domaine de températures  $T$  explorées est tel que  $\hbar\omega_3 \gg kT$ , on peut considérer que le degré de liberté correspondant est « gelé » et que le nombre de dimension du problème passe de 3 à 2. Il faut bien sûr vérifier ensuite que la température critique  $T_c$  correspondant à une éventuelle condensation à deux dimensions vérifie bien  $\hbar\omega_3 \gg kT_c$ . La même procédure peut être suivie pour passer de deux dimensions à une dimension.

La méthode générale développée plus haut pour étudier la condensation de Bose-Einstein se généralise aisément à deux et une dimension. A deux dimensions, on trouve des résultats très analogues aux précédents, la seule différence importante étant que la chaleur spécifique  $C$  reste continue au voisinage de  $T = T_c$ , alors qu'elle est discontinue pour un problème à trois dimensions. La fraction de particules condensées  $N_0/N$  varie comme  $1 - (T/T_c)^2$  pour  $T \leq T_c$ .

Pour un piège harmonique de dimension  $D$ , il semble naturel de définir la limite thermodynamique en faisant tendre le nombre total de particules  $N$  vers l'infini, et la fréquence  $\omega$  de l'oscillateur vers 0, tout en gardant constante la densité  $N/(\Delta x_T)^D$  au centre du nuage thermique de largeur  $\Delta x_T$ . Comme  $\Delta x_T$  est proportionnel à  $1/\omega$ , une telle condition revient à garder  $N\omega^D$  constant dans la limite  $N \rightarrow \infty$ ,  $\omega \rightarrow 0$ . On trouve alors que la température critique  $T_c$  tend vers 0 à la limite thermodynamique dans un piège harmonique à une dimension, alors qu'elle ne tend pas vers 0 pour  $D=2$  ou 3. On peut donc considérer qu'il n'y a pas de condensation de Bose-Einstein au sens strict dans un piège harmonique à une dimension. Pour un nombre fini  $N$  de particules, il subsiste néanmoins une variation rapide de  $N_0/N$  avec  $T$  au voisinage d'une température  $T_c$  non nulle. Les calculs de  $N_0/N$  et  $T_c$  sont très voisins pour des bosons dans une boîte à deux dimensions et dans un piège harmonique à une dimension, et les conclusions précédentes sont donc généralisables à une boîte 2D.

### **Premières observation expérimentales**

Le cours se poursuit par une description succincte des premières mises en évidence expérimentales de la condensation de Bose-Einstein d'atomes alcalins ultrafroids. Sont passées en revue les expériences réalisées en 1995 à Boulder sur le Rubidium, à M.I.T. sur le Sodium et à Houston sur le Lithium. La séquence temporelle de chaque expérience est analysée et les résultats obtenus dans chaque cas sont décrits et discutés. La plupart d'entre eux peuvent être interprétés au moins de manière qualitative, au moyen de la théorie de la condensation de Bose-Einstein d'un gaz de bosons sans interactions décrite précédemment. D'autres expériences ont été réalisées depuis, mettant en évidence des effets liés aux interactions entre bosons. Elles seront décrites et analysées dans des cours ultérieurs.

Sujets abordés

Etude des effets nouveaux introduits par les interactions entre atomes.

Comment les résultats relatifs à la condensation de Bose-Einstein d'un gaz de bosons sans interactions sont-ils modifiés par ces interactions? Peut-on calculer simplement ces modifications? Sont-elles importantes pour un gaz dilué? Les prédictions théoriques sont-elles en accord avec les observations expérimentales? Peut-on interpréter simplement les propriétés statiques et dynamiques des condensats au moyen de quelques paramètres microscopiques décrivant les collisions binaires entre atomes?

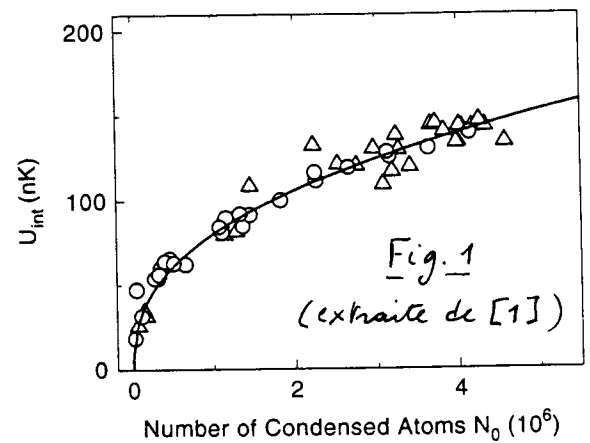
Exemples de résultats expérimentaux montrant l'importance des interactions

- Mesure directe de l'énergie d'interaction moyenne par atome  $U_{int}$  en fonction du nombre total  $N_0$  d'atomes

Principe: On coupe brusquement le piège, on laisse le nuage se dilater pendant un certain temps et on mesure l'énergie cinétique moyenne par atome.

En l'absence d'interactions, cette énergie est l'énergie cinétique moyenne initiale dans l'état fondamental des puits:  $\frac{1}{4}(\hbar^2 \omega_x^2 + \hbar^2 \omega_y^2 + \hbar^2 \omega_z^2)$ , indépendante du nombre  $N_0$  d'atomes.

En présence d'interactions répulsives, l'énergie d'interaction initiale se transforme en énergie cinétique au cours de l'expansion balistique et on peut ainsi la mesurer. La courbe en traits pleins de la figure 1 représente le meilleur ajustement avec une loi en  $N_0^{2/5}$  déduite d'une théorie qui sera décrite plus loin dans ce cours.



- Mesure de la distribution spatiale des atomes dans le condensat.

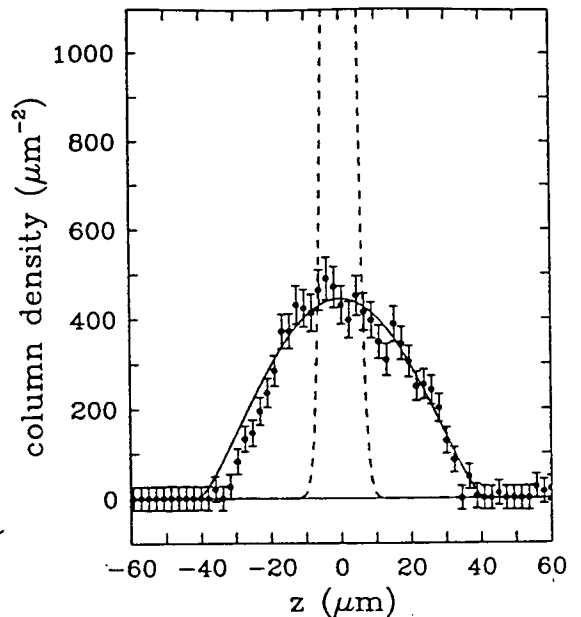
Imagerie par absorption d'un faisceau laser résonnant

La figure 2 extraite de [2] montre une telle image obtenue sur des atomes de Sodium par L. Hau, B. Bush, C. Liu, Z. Dutton, M. Burns et J. Golovchenko

Les points avec les barres d'erreur représentent les résultats expérimentaux

La courbe en traits interrompus est la forme qui serait obtenue en l'absence d'interactions (tous les atomes étant dans l'état fondamental du piège)

La courbe en traits pleins est la forme théorique prévue et tenant compte des interactions. Notez la différence importante entre les largeurs des 2 courbes. La théorie (qui sera exposé plus loin) prévoit une forme parabolique inversée et non pas une gaussienne.



### Approximations

- On se limitera à des collisions binaires entre atomes, la densité étant suffisamment faible pour qu'on puisse négliger les collisions à 3 corps
- Très souvent, on négligera les corrélations spatiales entre atomes, ce qui revient à suivre une approche de type champ moyen. Des méthodes plus élaborées, comme la méthode de Bogolubov, seront également décrites pour étudier les excitations élémentaires

### Organisation du début du cours

#### Etude des collisions binaires à très basse énergie

- Déphasage dans l'onde  $s$  - longueur de diffusion - Portée effective
- Pseudopotentiel : remplacement du potentiel exact par un potentiel plus simple, donnant la même longueur de diffusion et pouvant être traité à l'approximation de Born.

#### Structure du condensat dans un piège

- Calcul variationnel de la fonction d'onde de l'état fondamental  
Equation de Gross-Pitaevskii
- Cas des longueurs de diffusion négatives - Condition de stabilité
- limite des densités élevées - Approximation de Thomas-Fermi

#### Approche de Bogolubov pour un système homogène (dans une boîte)

- Excitations élémentaires - Phonons
- Corrélations spatiales entre atomes - longueur de cohérence

#### Dynamique du condensat dans un piège harmonique

- Modes propres de vibration - Approche hydrodynamique
- Expansion du condensat après coupure du piège



# Diffusion par un potentiel - Brefs rappels

Particule de masse  $\mu$  diffusé par un potentiel  $V(\vec{r})$   
Etat stationnaire de diffusion

- Equation de Schrödinger

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad (1.1)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (1.2.a) \quad V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} U(\vec{r}) \quad (1.2.b)$$

$$[\Delta + k^2 - U(\vec{r})] \varphi_k(\vec{r}) = 0 \quad (1.3)$$

- Solution de (1.3) ayant le comportement asymptotique suivant, somme d'une onde plane incidente  $e^{ikz}$  et d'une onde sphérique diffusée, d'amplitude décroissant en  $1/r$

$$v_k^{diff}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.4)$$

-  $f_k(\theta, \varphi)$  : Amplitude de diffusion dans la direction  $\theta, \varphi$

$$\text{Section efficace différentielle} \quad \sigma(\theta, \varphi) = |f_k(\theta, \varphi)|^2 \quad (1.5)$$

## Equation intégrale de la diffusion

- Fonction de Green sortante  $G_+(\vec{r})$

$$G_+(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.6)$$

Solution de

$$(\Delta + k^2) G_+(\vec{r}) = \delta(\vec{r}) \quad (1.7)$$

ayant un comportement asymptotique d'onde sphérique sortante.

- L'état stationnaire de diffusion  $v_k^{diff}(\vec{r})$  vérifie l'équation intégrale

$$v_k^{diff}(\vec{r}) = e^{ikz} + \int d^3r' G_+(\vec{r}-\vec{r}') U(\vec{r}') v_k^{diff}(\vec{r}') \quad (1.8)$$

• En effet, en appliquant  $(\Delta + k^2)$  aux 2 membres de (1.8) et en utilisant (1.7), on vérifie que  $v_k^{diff}$  est solution de (1.3).

• D'autre part, pour  $r \gg r'$ , on peut écrire (voir Fig. 3), en introduisant  $\vec{u} = \frac{\vec{r}}{r}$

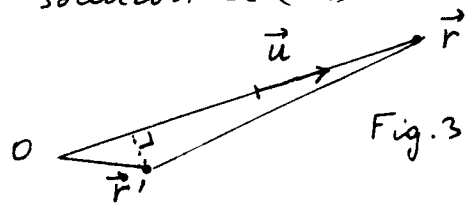


Fig. 3

$$G_+(\vec{r}-\vec{r}') \underset{r \gg r'}{\sim} -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik\vec{u} \cdot \vec{r}'} \quad (1.9)$$

de sorte que (1.8) devient

$$v_k^{diff}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' e^{-ik\vec{u} \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') v_k^{diff}(\vec{r}') \quad (1.10)$$

On retrouve bien le comportement asymptotique (1.4) et on déduit de plus

$$f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') v_{\mathbf{k}}^{\text{diff}}(\vec{r}') \quad (1.11)$$

où  $\vec{k}_f = k\vec{u}$  est le vecteur d'onde final (ou diffusé) dans la direction  $\vec{u}$  du point  $\vec{r}'$  d'angles polaires  $\theta, \varphi$ .

### Approximation de Born

#### Expression de l'amplitude de diffusion

On remplace dans (1.11)  $v_{\mathbf{k}}^{\text{diff}}(\vec{r}')$  par la solution d'ordre 0 en  $V$  de (1.3),  $e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'}$ . En posant  $e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'} = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}}$  ou  $\vec{k}_i = k\hat{z}$  est le vecteur d'onde initial (ou incident), on obtient

$$f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{r}} U(\vec{r}) \quad (1.12)$$

A l'approximation de Born, l'amplitude de diffusion est la transformée de Fourier du potentiel

#### Limite des très basses énergies

Soit  $r_0$  la portée du potentiel. Si l'énergie de la particule  $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$  est suffisamment faible pour que  $kr_0 \ll 1$ , on peut remplacer l'exponentielle de (1.12) par 1 et obtenir

$$f_{\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \underset{k \rightarrow 0}{\approx} -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' U(\vec{r}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r V(\vec{r}) \quad (1.13)$$

L'amplitude de diffusion ne dépend plus de  $\theta$  et  $\varphi$ . La diffusion est isotrope, même si  $V$  n'a pas la symétrie sphérique.

#### Conditions de validité de l'approximation de Born à basse énergie

- Dans (1.8), le 2<sup>ème</sup> terme du membre de droite doit être très petit devant le 1<sup>er</sup>. Remplaçons dans ce terme  $v_{\mathbf{k}}^{\text{diff}}(\vec{r}')$  par la solution d'ordre 0,  $e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'}$ , et remplaçons toutes les exponentielles par 1, ce qui est valable à très basse énergie. On doit donc avoir

$$\left| \int d^3r' G_{\pm}(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \right| \ll 1 \quad (1.14)$$

- Prenons pour  $U(\vec{r})$  un potentiel de hauteur  $V_0$  et de largeur  $r_0$ . En utilisant (1.6), on trouve que la condition (1.14) est équivalente à  $V_0 r_0^2 \ll 1$ , c'est à dire encore en revenant à  $V$  grâce à (1.2.b)

$$V_0 \ll \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \quad (1.15)$$

L'énergie potentielle d'interaction  $V_0$  doit être petite devant l'énergie cinétique de confinement dans une région d'extension  $r_0$ .

# Diffusion par un potentiel central

I-11

$V$  ne dépend que de  $r = |\vec{r}|$  :  $V(r)$

## Equation radiale

- On peut choisir des solutions de la forme

$$\Psi_{k\ell m}(\vec{r}) = R_{k\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \quad (1.16)$$

- Posons :  $R_{k\ell}(r) = \frac{1}{r} u_{k\ell}(r)$  (1.17)

L'équation de Schrödinger (1.3) devient pour  $u_{k\ell}(r)$

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) \right] u_{k\ell}(r) = 0 \quad (1.18)$$

- Les solutions de (1.18) ne sont en fait solutions de (1.3) que si  $R_{k\ell}(r)$  est suffisamment régulière au voisinage de  $r=0$ , pour que l'action de  $\Delta$  ne donne pas des fonctions  $\delta$ . Il faut alors ajouter à (1.18) la condition

$$u_{k\ell}(0) = 0 \quad (1.19)$$

## Ondes sphériques libres

- Pour  $U=0$ , on connaît les solutions  $\Psi_{k\ell m}^{(0)}$  de (1.3) :

$$\Psi_{k\ell m}^{(0)}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_{\ell}(kr) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \quad (1.20)$$

où les  $j_{\ell}(\rho)$  sont les fonctions de Bessel sphériques d'ordre  $\ell$

$$j_{\ell}(\rho) \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} \frac{\rho^{\ell}}{(2\ell+1)!!} \quad (1.21.a)$$

$$j_{\ell}(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \ell \frac{\pi}{2}\right) \quad (1.21.b)$$

- Loins de l'origine,  $\Psi_{k\ell m}^{(0)}(\vec{r})$  est donc la superposition d'une onde entrante et d'une onde sortante

$$\Psi_{k\ell m}^{(0)}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \frac{1}{2ikr} \left[ e^{i(kr - \ell \frac{\pi}{2})} - e^{-i(kr - \ell \frac{\pi}{2})} \right] \quad (1.22)$$

- L'onde plane  $e^{ikz}$  peut être développée en ondes sphériques libres

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} j_{\ell}(kr) Y_{\ell}^0(\theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} c_{\ell} \Psi_{k\ell 0}^{(0)}(\vec{r}) \quad (1.23)$$

## Effet du potentiel - Déphasages $\delta_{\ell}$

- On suppose maintenant  $U \neq 0$ . Considérons une onde entrante  $e^{-i(kr - \ell \frac{\pi}{2})}$  multipliée par le même coefficient que dans (1.22). Comme la diffusion par un potentiel se fait avec un coefficient de réflexion égal à 1 (conservation de la norme), l'onde sortante est multipliée par un coefficient de même module que celui de l'onde entrante. Par rapport à ce qui

se passe pour  $V = 0$ , on a donc simplement un facteur de phase

- On en conclut qu'il existe une solution de (1.3) pour  $V \neq 0$  qui a le comportement asymptotique suivant

$$\Psi_{klm}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{1}{2ikr} \left[ e^{i(kr - l\frac{\pi}{2} + 2\delta_l)} - e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})} \right] \quad (1.24)$$

Alors que  $\Psi_{klm}^{(0)}$  varie en  $\frac{1}{r} \sin(kr - l\frac{\pi}{2})$  pour  $r$  grand,  $\Psi_{klm}(\vec{r})$  varie en  $\frac{1}{r} \sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)$ .  $\delta_l$  est le déphasage de l'onde  $l$

### Amplitude de diffusion en fonction des déphasages

- Chaque fonction  $\Psi_{kl0}(\vec{r})$  est solution de (1.3). Prenons la superposition linéaire  $\sum_l c_l \Psi_{kl0}(\vec{r})$  avec les mêmes coefficients  $c_l$  qu'en (1.23). C'est aussi une solution de (1.3). Son comportement asymptotique est obtenu en utilisant (1.24). En écrivant

$$e^{i(kr - l\frac{\pi}{2} + 2\delta_l)} = e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})} e^{2i\delta_l} = e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})} [1 + 2ie^{i\delta_l} \sin \delta_l] \quad (1.25)$$

et en utilisant (1.22) et (1.23), on constate que  $\sum_l c_l \Psi_{kl0}(\vec{r})$  est une solution de (1.3) qui a bien le comportement asymptotique (1.4), et on obtient de plus l'expression suivante pour l'amplitude de diffusion  $f_k$  (qui ne dépend pas de  $\varphi$  à cause de la symétrie de  $V$ )

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_l^0(\theta) \quad (1.25)$$

- Si l'on connaît les déphasages  $\delta_l$ , on connaît donc l'amplitude de diffusion. Le cas intéressant est bien sûr celui où un très petit nombre de déphasages sont non négligeables.

### Références

- (1) M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.M. Kurn, D.S. Durfee, W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. 77, 416 (1996)
- (2) F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, S. Stringari, "Theory of trapped Bose-condensed gases", Article de revue à paraître dans Rev. Mod. Phys.

Pour la théorie de la diffusion par un potentiel, voir les ouvrages de A. Messiah ; L. Landau et E. Lifschitz ; C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloe, sur la mécanique quantique.

# Collisions à très basse énergie

## Longueur de diffusion

### ① Introduction

- Importance de cette étude pour la physique des atomes froids
  - (i) Importance des collisions élastiques pour le refroidissement évaporatif qui permet d'atteindre le seuil de condensation -
  - (ii) Importance des interactions entre atomes
    - pour comprendre la forme du condensat dans un piège
    - pour comprendre les fréquences propres de vibration du condensat
    - pour diagnostiquer dans certains cas (hydrogène) l'apparition du condensat (déplacement collisionnel de la raie 1S-2S)
  - (iii) Limitations introduites par les collisions inélastiques sur les densités qui peuvent être atteintes dans un piège.
- Dans ce cours, on se limite aux collisions élastiques et on introduit les paramètres physiques essentiels qui décrivent une collision à très basse énergie : déphasage sans l'onde S, longueur de diffusion, portée effective.

### ② Description d'une collision - Notations [1][2][3].

2 particules de masses  $m_1$  et  $m_2$ , interagissant par un potentiel  $V(r)$  ne dépendant que de la distance  $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ .

#### a - Hamiltonien - Séparation du mouvement du centre de masse

$$H = \frac{\vec{P}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{P}_2^2}{2m_2} + V(r) \quad (2.1)$$

- Variables  $\vec{r}_G$  et  $\vec{P}_G$  du centre de masse

$$\vec{r}_G = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (2.2.a) \quad \vec{P}_G = \vec{P}_1 + \vec{P}_2 \quad (2.2.b)$$

- Variables  $\vec{r}$  et  $\vec{p}$  dans le système du centre de masse

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (2.3.a) \quad \frac{\vec{p}}{m_{red}} = \frac{\vec{P}_1}{m_1} - \frac{\vec{P}_2}{m_2} \quad (2.3.b)$$

$$m_{red} = \text{masse réduite} \quad m_{red} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (2.4)$$

$$H = \frac{\vec{P}_G^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{\vec{p}^2}{2m_{red}} + V(r) \quad (2.5)$$

- Cas important où les 2 particules sont identiques

$$m_1 = m_2 = m \quad m_{red} = \frac{m}{2} \quad (2.6)$$

## II-2

Dans toute la suite, on suppose les 2 particules identiques

$$H = \frac{\vec{P}_G^2}{4m} + \frac{\vec{P}^2}{m} + V(r) \quad (2.7)$$

- $\vec{r}_G$  et  $\vec{p}_G$  sont des variables canoniques conjuguées, de même que  $\vec{r}$  et  $\vec{p}$ .  $\vec{r}_G$  et  $\vec{p}_G$  commutent avec  $\vec{r}$  et  $\vec{p}$

Le mouvement du centre de masse est celui d'une particule libre de masse  $2m$ . Dans le système du centre de masse, la dynamique est celle d'une particule fictive, la particule relative, de masse

$$\mu = m_{red} = \frac{m}{2} \quad (2.8)$$

diffusé par un potentiel central  $V(r)$ . Tous les résultats rappelés dans le cours I sont donc applicables, à condition de remplacer  $\mu$  par  $m/2$ .

### b. Fonctions propres de H décrivant une collision

- Impulsions initiales des 2 particules :  $\vec{p}_1 = \hbar \vec{k}_1$  et  $\vec{p}_2 = \hbar \vec{k}_2$   
En posant  $\vec{p}_G = \hbar \vec{k}_G$  et  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ , on obtient compte tenu de (2.3), (2.4), (2.6)

$$\vec{r}_G = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (2.9)$$

$$\vec{k}_G = \frac{\vec{k}_1 + \vec{k}_2}{2} \quad \vec{k} = \frac{\vec{k}_1 - \vec{k}_2}{2} \quad (2.10)$$

- 
$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{i \vec{k}_G \cdot \vec{r}_G} v_k^{diff}(\vec{r}) \quad (2.11)$$

$$e^{i \vec{k}_G \cdot \vec{r}_G} = e^{i \frac{(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \cdot (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)}{2}} \quad (2.12)$$

$$v_k^{diff}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} e^{i \frac{(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}{2}} + f_k(\theta) \frac{e^{ik|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (2.13)$$

Comme  $V(r)$  est central, on peut utiliser le développement en ondes partielles (1.25) de l'amplitude de diffusion  $f_k(\theta)$ .

### c. Conséquences du postulat de symétrisation

- Pour des bosons identiques,  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  doit être symétrique en  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ .

La partie relative au centre de masse, (2.12), est bien symétrique

Par contre, il faut symétriser (2.13) qui n'est pas symétrique

- On montre alors aisément que dans le système du centre de masse, les 2 chemins représentés sur la figure 1 sont indiscernables et interfèrent avec le signe +

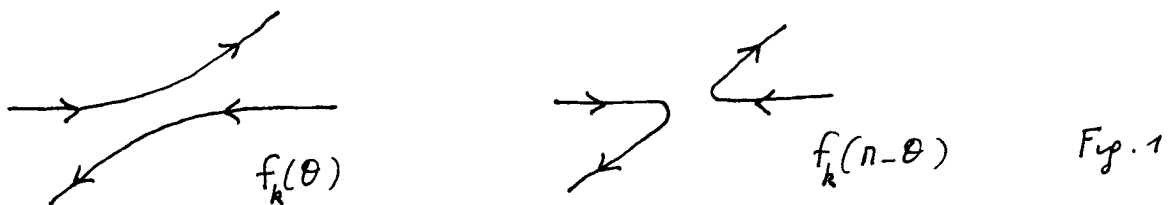


Fig. 1

Il faut donc remplacer l'amplitude de diffusion  $f(\theta)$  par  $f_k(\theta) + f_k(\pi - \theta)$

$$f_k(\theta) \rightarrow f_k(\theta) + f_k(\pi - \theta) \quad (2.14)$$

- Par ailleurs, comme les états physiques dans l'état final sont identiques pour  $\theta$  et  $\pi - \theta$ , il faut, pour obtenir la section efficace totale intégrer sur  $\theta$  de 0 à  $\frac{\pi}{2}$  et non plus de 0 à  $\pi$

$$\sigma_{\text{total}} = \int_0^{\pi/2} 2\pi \sin\theta d\theta |f_k(\theta) + f_k(\pi - \theta)|^2 \quad (2.15)$$

- En reportant (1.25) dans (2.15) et en utilisant les relations d'orthonormalisation des  $Y_l^0(\theta)$ , ainsi que leurs propriétés de symétrie ( $Y_l^0(\pi - \theta) = (-1)^l Y_l^0(\theta)$ ), on obtient :

$$\sigma_{\text{total}}(k) = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l \text{ pairs}} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (2.16)$$

où l'on a fait apparaître dans les notations que  $\sigma_{\text{total}}$  et  $\delta_l$  dépendent de  $k$ . Deux bosons identiques ne peuvent entrer en collision que dans une onde partielle de  $l$  pair (s, d, g...)

- Pour des Fermions identiques, il faudrait remplacer  $\sum_{l \text{ pairs}}$  par  $\sum_{l \text{ impairs}}$ .

#### d. Simplifications apparaissant à très basse énergie

- Revenons à l'équation (1.18) satisfaite par la fonction d'onde radiale. Si  $l$  est non nul, le potentiel centrifuge  $l(l+1)/r^2$  s'ajoute au potentiel  $U(r)$ . Si  $U(r) = 0$ , le potentiel centrifuge empêche la particule d'énergie  $k^2$  de s'approcher de l'origine à une distance inférieure à  $r_0$  où  $r_0$  est donnée par

$$k r_0 = \sqrt{l(l+1)} \quad (2.17)$$

Soit  $b$  la zone d'action du potentiel  $U(r)$ . Si la condition

$$k b \ll 1 \quad \text{c-à-d encore} \quad b \ll \lambda_{dB} \quad (2.18)$$

est satisfaite,  $r_0$  est très grand devant  $b$  dès que  $l \geq 1$ . Toutes les ondes partielles de  $l$  non nul seront donc très peu sensibles au potentiel et on s'attend donc à ce que seul le déphasage  $\delta_0(k)$  dans l'onde s apporte une contribution significative dans (2.16)

- Le raisonnement précédent est confirmé par une étude plus quantitative qui montre que, dès que le potentiel  $U(r)$

II-4] décroît plus vite que  $1/r^3$  aux grandes valeurs de  $r$ , seul  $\delta_0(k)/k$  tend vers une valeur non nulle quand  $kb \rightarrow 0$ .  
 Dans (2.16),  $\sin^2 \delta_0(k)/k^2$  tend donc vers 0 quand  $l \neq 0$  et on peut donc écrire

$$\sigma_{\text{total}}(k) \underset{kb \ll 1}{\approx} \frac{8\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0(k) \quad (2.19)$$

- Dans toute la suite, nous étudions donc uniquement la diffusion dans l'onde  $s$ . L'équation radiale (1.18) s'écrit alors (en omettant l'indice  $l=0$  dans  $u_{kl}$ ):

$$\left\{ \begin{aligned} \left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - U(r) \right] u_k(r) &= 0 & (2.20.a) \\ u_k(0) &= 0 & (2.20.b) \end{aligned} \right.$$

### ③ Longueur de diffusion $a$

a - Définition.

$$a = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{-\delta_0(k)}{k} \quad (2.21)$$

On déduit alors de (2.19) que

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_{\text{total}}(k) = 8\pi a^2 \quad (2.22)$$

b - Fonction d'onde  $v_k(r)$  prolongeant le comportement asymptotique de  $u_k(r)$ .

- Aux très grandes valeurs de  $r$ ,  $u_k(r)$  se comporte comme  $C \sin[kr + \delta_0(k)]$ , par définition même du déphasage  $\delta_0(k)$  ( $C$  est une constante dépendant de la normalisation choisie).
- Pour interpréter géométriquement  $a$ , il est commode d'introduire la fonction  $v_k(r)$  qui pour tout  $r$  est égale à

$$v_k(r) = C \sin[kr + \delta_0(k)] \quad (2.23)$$

En d'autres termes  $v_k(r)$  prolonge au voisinage de  $r=0$  le comportement asymptotique de  $u_k(r)$ . Voir la figure 2 où  $u_k(r)$  est représenté en traits pleins,  $v_k(r)$  en traits tirés.



Fig. 2



C - Interprétation géométrique de la longueur de diffusion

- Soit P l'intersection de  $v_k(r)$  avec l'axe des abscisses (voir Fig. 2) la plus proche de 0. L'abscisse  $r_p$  de P est donnée par

$$r_p = - \frac{\delta_0(k)}{k} \tag{2.24}$$

où le fait que P est le point d'intersection le plus proche de 0 se traduit par la condition  $-\pi/2 \leq \delta_0(k) \leq +\pi/2$  (voir plus bas).

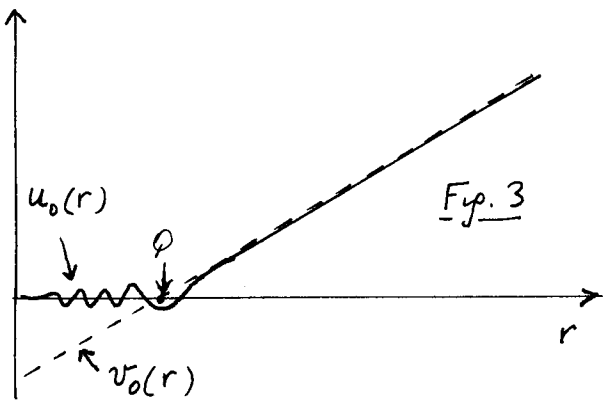
- On déduit alors de (2.21) et (2.24) que a est la limite de l'abscisse  $r_p$  de P quand  $k \rightarrow 0$ . Notons que quand  $k=0$ , la fonction  $v_{k=0}(r) = v_0(r)$  est une fonction linéaire de r (solution de (2.20.a) avec  $k=0, U(r)=0$ ). D'après (2.24), l'abscisse du point

Q d'intersection de la droite correspondante avec l'axe des abscisses n'est autre que a (voir Fig. 3)

On peut donc écrire

$$v_0(r) = C'(r-a) \tag{2.25}$$

où C' est une constante



- On peut retrouver (2.25) en développant (2.23) en puissances de kr et en ne gardant que les termes d'ordre 0 et 1. On obtient ainsi

$$v_k(r) \underset{kr \rightarrow 0}{\simeq} kr \cos \delta_0(k) + \sin \delta_0(k) \tag{2.26}$$

ce qui conduit à une nouvelle expression de a

$$a = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{-\text{tg } \delta_0(k)}{k} \tag{2.27}$$

La définition (2.27) est bien son équivalente à (2.21) puisque  $\text{tg } \delta_0(k) \simeq \delta_0(k)$  quand  $k \rightarrow 0$ . Elle a l'avantage de pouvoir exprimer simplement que sur la figure 2 P est le point d'intersection de  $v_k(r)$  avec l'axe des abscisses le plus proche de 0. En effet  $\delta_0(k)$  n'est défini qu'à  $\pi$  près, puisque ajouter  $\pi$  à  $\delta_0(k)$  revient à changer le signe de  $v_k(r)$ , c'est à dire encore le signe de C. Si l'on impose à  $\delta_0(k)$  d'être compris entre  $-\pi/2$  et  $+\pi/2$

$$-\pi/2 \leq \delta_0(k) \leq +\pi/2 \tag{2.28}$$

les équations (2.27) et (2.28) donnent bien l'abscisse de la limite Q du point P le plus proche de 0

d - Expression de a dans le cadre de l'approximation de Born

- Si l'on ne garde que la diffusion dans l'onde s, l'amplitude de diffusion (1.25), qui ne dépend plus de  $\theta$ , s'écrit :

$$f_k = \frac{e^{i\delta_0(k)} \sin \delta_0(k)}{k} \quad (2.29)$$

Quand  $k \rightarrow 0$ ,  $\delta_0(k) \rightarrow 0$ , et on obtient, compte tenu de (2.21)

$$\lim_{k \rightarrow 0} f_k = -a \quad (2.30)$$

- Par ailleurs, si l'approximation de Born est valable,  $f_k$  est donnée par (1.13) pour  $k$  très petit. En combinant (1.13) et (2.30) et en utilisant  $\mu = m_{red} = m/2$ , on obtient alors

$$a_{Born} = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r V(r) \quad (2.31)$$

#### ④ Portée effective

D'après (2.27),  $\tan \delta_0(k)$  se comporte comme  $-ak$  aux faibles valeurs de  $k$ . Dans ce paragraphe, nous essayons d'établir la forme des termes d'ordre supérieur en  $k$ .

a. Choix d'une normalisation pour les fonctions prolongées  $v$

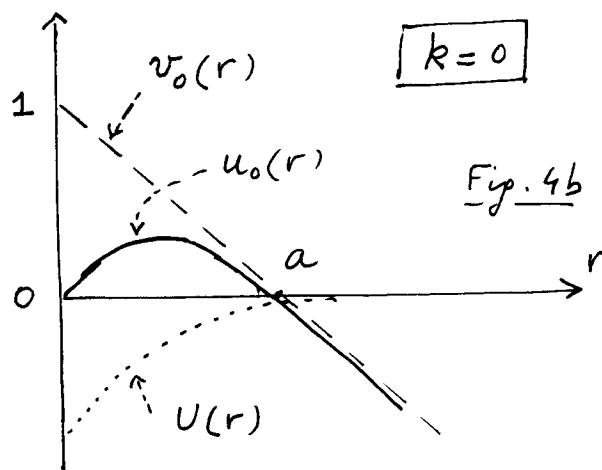
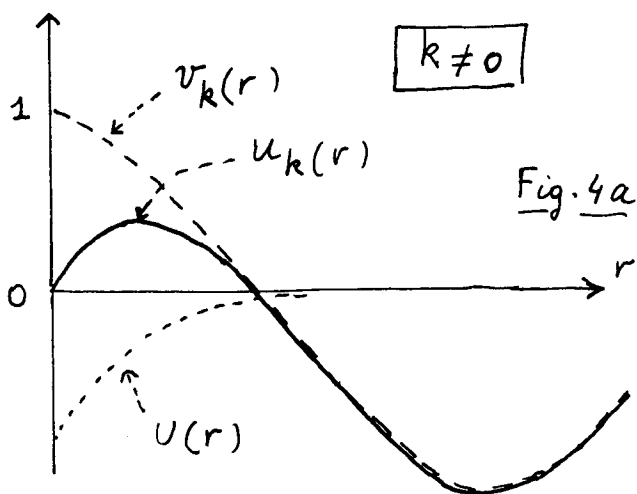
- Nous choisissons  $C$  et  $C'$  pour que la fonction prolongée  $v_k(r)$  pour  $k \neq 0$ , ou  $v_0(r)$  pour  $k=0$ , soit égale à 1 en  $r=0$ . Ceci donne

$$v_k(r) = \frac{\sin [kr + \delta_0(k)]}{\sin \delta_0(k)} \quad (2.32)$$

$$v_0(r) = 1 - \frac{r}{a} \quad (2.33)$$

- Notons que le choix (2.32) n'est valable que si  $\delta_0(k) \neq 0$  lorsque  $k \neq 0$ , car dans ce cas  $v_k(r)$  est infini.

b. Etablissement d'une équation exacte reliant  $a$  et  $\delta_0(k)$



- La figure 4a représentée, pour  $k \neq 0$ , la fonction d'onde radiale  $u_k(r)$  (traits pleins) et la fonction prolongée  $v_k(r)$  (traits tirés). En pointillés est représenté également le potentiel  $V(r)$ . Rappelons les équations satisfaites par  $u_k(r)$  et  $v_k(r)$

$$\begin{cases} \frac{d^2 u_k(r)}{dr^2} + [k^2 - V(r)] u_k(r) = 0 & (2.34.a) \\ \frac{d^2 v_k(r)}{dr^2} + k^2 v_k(r) = 0 & (2.34.b) \end{cases}$$

ainsi que les conditions initiales

$$u_k(0) = 0 \quad (2.35.a) \quad v_k(0) = 1 \quad (2.35.b)$$

- La figure 4b représente les mêmes fonctions pour  $k=0$ . On a donc

$$\begin{cases} \frac{d^2 u_0(r)}{dr^2} - V(r) u_0(r) = 0 & (2.36.a) \\ \frac{d^2 v_0(r)}{dr^2} = 0 & (2.36.b) \end{cases}$$

$$u_0(0) = 0 \quad (2.37.a) \quad v_0(0) = 1 \quad (2.37.b)$$

- Enfin, par définition même des fonctions prolongées

$$v_k(r) - u_k(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad (2.38.a) \quad v_0(r) - u_0(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad (2.38.b)$$

- Multiplions (2.36.a) par  $u_k(r)$ , (2.34.a) par  $u_0(r)$  et soustrayons les 2 équations ainsi obtenues. Il vient

$$u_k(r) u_0''(r) - u_0(r) u_k''(r) = \frac{d}{dr} [u_k(r) u_0'(r) - u_0(r) u_k'(r)] = k^2 u_k(r) u_0(r) \quad (2.39)$$

La même démarche effectuée sur (2.36.b) et (2.34.b) donne :

$$v_k(r) v_0''(r) - v_0(r) v_k''(r) = \frac{d}{dr} [v_k(r) v_0'(r) - v_0(r) v_k'(r)] = k^2 v_k(r) v_0(r) \quad (2.40)$$

Retranchons (2.40) de (2.39). Il vient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} [u_k(r) u_0'(r) - u_0(r) u_k'(r) - v_k(r) v_0'(r) + v_0(r) v_k'(r)] &= \\ &= k^2 [u_k(r) u_0(r) - v_k(r) v_0(r)] \end{aligned} \quad (2.41)$$

Intégrons enfin les 2 membres de (2.41) de  $r=0$  à  $r=\infty$ .

La valeur en  $r=\infty$  du crochet du 1<sup>er</sup> membre est nulle puisque  $v_k$  et  $v_0$  coïncident alors avec  $u_k$  et  $u_0$  respectivement [voir (2.38)]. La valeur en  $r=0$  de ce crochet se calcule aisément compte tenu de (2.35), (2.36) et des relations suivantes qui se déduisent de (2.32) et (2.33)

$$v'_k(0) = k \cotg \delta_0(k) \quad v_0(0) = -\frac{1}{a} \quad (2.42)$$

On obtient ainsi

$$-k \cotg \delta_0(k) - \frac{1}{a} = k^2 \int_0^\infty [u_k(r)u_0(r) - v_k(r)v_0(r)] dr \quad (2.43)$$

c'est à dire encore

$$k \cotg \delta_0(k) = -\frac{1}{a} + k^2 \int_0^\infty [v_k(r)v_0(r) - u_k(r)u_0(r)] dr \quad (2.44)$$

### C - Approximation de la portée effective

- La relation (2.44) est exacte. Nous allons maintenant en déduire une relation approchée, valable quand le potentiel  $V(r)$  décroît suffisamment vite à l'infini (voir remarque ci-dessous)

- Quand  $V(r)$  décroît suffisamment vite, la contribution à l'intégrale de (2.44) de la région extérieure à la zone d'action du potentiel est négligeable car  $u_k$  et  $u_0$  tendent très vite vers  $v_k$  et  $v_0$  dans cette région.

D'autre part, à l'intérieur de la zone d'action du potentiel,  $u_k$  est très peu différent de  $u_0$ , et  $v_k$  très peu différent de  $v_0$ , si l'énergie de la particule relative  $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu = \hbar^2 k^2 / m$  est très petite devant la profondeur du potentiel. Pour  $k$  suffisamment petit, on peut donc, dans l'intégrale de (2.44), remplacer  $u_k$  par  $u_0$  et  $v_k$  par  $v_0$ .

- Si l'on pose donc

$$r_e = 2 \int_0^\infty [v_0^2(r) - u_0^2(r)] dr \quad (2.45)$$

on peut remplacer l'équation exacte (2.44) par

$$k \cotg \delta_0(k) \underset{k \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_e k^2 \quad (2.46)$$

La quantité  $r_e$  définie en (2.45) est indépendante de  $k$  et a les dimensions d'une longueur. C'est la portée effective

- l'équation (2.46) peut également être écrite sous la forme

$$\text{tg } \delta_0(k) \underset{k \rightarrow 0}{\simeq} -ak - \frac{1}{2} r_e a^2 k^3 \quad (2.47)$$

Comme cela a été annoncé au début de ce paragraphe, on obtient ainsi les premières corrections au comportement en  $-ak$  de  $\text{tg } \delta_0(k)$  au voisinage de  $k=0$

Remarque : La notion de portée effective a été introduite initialement pour interpréter les expériences de diffusion proton-neutron.  $V(r)$  décroît alors très vite (exponentiellement) avec  $r$ . Voir ref [4] et références in. Cette notion a été ensuite étendue à des potentiels décroissant en  $1/r^n$  et il a été montré que (2.46) demeure valable pour  $n > 5$  (voir ref. [5]), ce qui rend cette équation applicable aux interactions de van der Waals (en  $1/r^6$ ) entre 2 atomes dans l'état fondamental. Ainsi, pour le potentiel triplet d'interaction entre 2 atomes d'hydrogène dans l'état fondamental, on trouve que  $a = 1.33 a_0$ ,  $r_e = 323 a_0$ , où  $a_0$  est le rayon de Bohr [6].

d - Retour à l'amplitude de diffusion

- Recevons l'expression exacte (2.29) de l'amplitude de diffusion dans l'onde  $\delta$  sous la forme

$$f(k) = \frac{e^{i\delta_0(k)} \sin \delta_0(k)}{k} = \frac{\sin \delta_0(k)}{k e^{-i\delta_0(k)}} = \frac{1}{k(\cot \delta_0(k) - i)} \quad (2.48)$$

- En remplaçant dans (2.48)  $k \cot \delta_0(k)$  par son expression approchée (2.46), on obtient

$$f(k) \underset{k \rightarrow 0}{\approx} \frac{1}{-\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_e k^2 - ik} = \frac{-a}{1 + ika - \frac{1}{2} r_e k^2 a} \quad (2.49)$$

Une telle équation nous sera utile plus loin pour tester la validité de "potentiels modèles", ou pseudo-potentiels, utilisés dans les calculs à la place du vrai potentiel  $V(r)$ .

5) Cas où le potentiel admet un état lié d'énergie très faible

a - Caractérisation de l'état lié

- Soit 
$$E = - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2\mu} = - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} \quad (2.50)$$

l'énergie de l'état lié. On suppose  $|E|$  très petit devant la profondeur du puits de potentiel.

- Désignons par  $u_\kappa(r)$  la fonction propre correspondante. Elle satisfait l'équation

$$u_\kappa''(r) - (\kappa^2 + U(r)) u_\kappa(r) = 0 \quad (2.51)$$

avec, comme plus haut

$$u_\kappa(0) = 0 \quad (2.52)$$

- Par ailleurs,  $u_\kappa(r)$  doit tendre vers 0 quand  $r \rightarrow \infty$  et tendre vers la solution exponentiellement décroissante de (2.51)

avec  $U(r) = 0$ . Comme plus haut, on peut donc introduire la fonction prolongeant le comportement asymptotique de  $u_k(r)$ . Désignons par  $v_k(r)$  cette fonction. Elle est solution de

$$v_k''(r) - \kappa^2 v_k(r) = 0 \quad (2.53)$$

décroissant en  $e^{-\kappa r}$  quand  $r \rightarrow \infty$ . En choisissant comme plus haut la constante de normalisation pour que  $v_k(0) = 1$ , on obtient

$$v_k(r) = e^{-\kappa r} \quad (2.54)$$

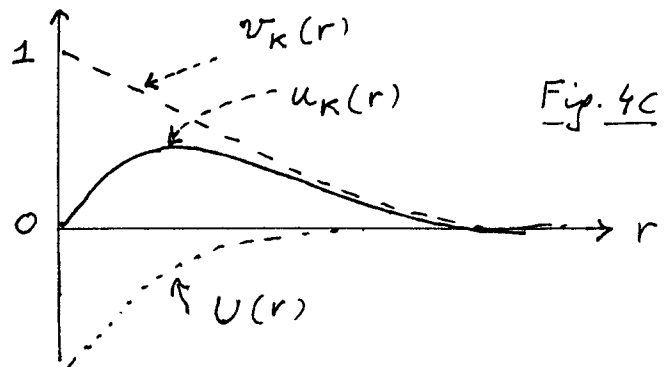
et par suite

$$v_k(0) = 1$$

$$v_k'(0) = -\kappa$$

$$(2.55)$$

La figure 4c est l'équivalent de la figure 4a pour  $v_k$  et  $u_k$



- L'équation (2.54) permet d'introduire une longueur  $\xi$  caractérisant l'extension de l'état lié

$$\xi = \frac{1}{\kappa}$$

$$(2.56)$$

Comme  $\kappa$  est petit,  $\xi$  est grand

b - Etablissement d'une équation exacte reliant a et  $\xi$

Les calculs du § 4b peuvent être exactement répétés en remplaçant  $u_k$  et  $v_k$  par  $u_k$  et  $v_k$ . On obtient ainsi l'équation exacte

$$\frac{1}{\xi} - \frac{1}{a} = - \frac{1}{\xi^2} \int_0^\infty [u_k(r) u_0(r) - v_k(r) v_0(r)] dr \quad (2.57)$$

c - Approximation de la portée effective

- Si  $U(r)$  décroît suffisamment vite avec  $r$ ,  $u_k(r)$  et  $u_0(r)$  tendent très vite vers  $v_k(r)$  et  $v_0(r)$  respectivement. Les contributions importantes à l'intégrale de (2.57) ne viennent donc que de l'intérieur de la zone d'action du potentiel.

- Dans cette zone,  $u_K(r)$  est très proche de  $u_0(r)$ , et  $v_K(r)$  très proche de  $v_0(r)$ , si l'énergie de l'état lié est très petite devant la profondeur du puits de potentiel. On peut donc valablement remplacer  $u_K$  par  $u_0$  et  $v_K$  par  $v_0$  dans l'intégrale de (2.57), ce qui fait apparaître ainsi la portée effective  $r_e$  définie en (2.45). On obtient ainsi la relation approchée

$$\frac{1}{a} \approx \frac{1}{\xi} \left[ 1 - \frac{1}{2} \frac{r_e}{\xi} \right] \tag{2.58}$$

c'est à dire encore

$$a \approx \frac{\xi}{1 - \frac{1}{2} \frac{r_e}{\xi}} \tag{2.59}$$

- Si  $\xi$  est suffisamment grand pour que  $\xi \gg r_e$ , on voit ainsi que  $a \approx \xi$ . Quand  $U(r)$  admet un état lié d'énergie très faible, la longueur de diffusion  $a$  est donc pratiquement égale à l'extension spatiale  $\xi$  de l'état lié.

References

- [1] L. Landau and E. Lifshitz, Quantum Mechanics, Pergamon Press, 1977.
- [2] C. Joachain Quantum Collision Theory, North Holland, 3<sup>rd</sup> edition 1983
- [3] J. Dalibard, in "Bose-Einstein Condensation in Atomic Gases", Proceedings of the International School of Physics Enrico Fermi, ed. by M. Inguscio, S. Stringari and C. Wieman, à paraître
- [4] J. Blatt and V. Weisskopf, Theoretical Nuclear Physics, Wiley, 2<sup>nd</sup> edition 1963
- [5] T.F. O'Malley, L. Spruch and L. Rosenberg, J. Math. Phys 2, 491 (1961)
- [6] Y.H. Huang and W.C. Stwalley, J. de Physique 41, C7 (1980)

## Collision à très basse énergie Longueur de diffusion (suite)

Dans la 2<sup>ème</sup> partie de ce chapitre sur la longueur de diffusion, les notions générales introduites dans la première partie sont illustrées sur des exemples simples de potentiels "carrés" permettant des calculs analytiques. Certains phénomènes peuvent être ainsi analysés plus en détail, comme les résonances à énergie nulle.

### ⑥ Barrière de potentiel en forme de créneau

#### a. Caractérisation du potentiel - Notations

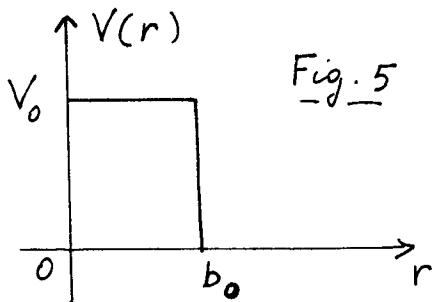


Fig. 5

$$\begin{cases} V(r) = V_0 > 0 & \text{pour } 0 \leq r \leq b \\ V(r) = 0 & \text{pour } r > b \end{cases} \quad (3.1)$$

On pose

$$V_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{m} \quad (3.2)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{m} \quad (3.3)$$

- Equation de Schrödinger pour la fonction radiale  $u_k(r)$

$$u_k''(r) + (k^2 - k_0^2) u_k(r) = 0 \quad r \leq b \quad (3.4.a)$$

$$u_k''(r) + k^2 u_k(r) = 0 \quad r > b \quad (3.4.b)$$

$$u_k(0) = 0 \quad (3.4.c)$$

#### b. Discussion qualitative

- Essayons de préciser l'allure de la solution d'énergie nulle  $u_0(r)$ , correspondant à  $k=0$ . Pour toute barrière de potentiel ( $U > 0$ ),  $u_0''(r)/u_0(r) = k_0^2 U(r)$  est positif.

- La solution de l'équation radiale satisfaite par  $u_0(r)$  dépend de 2 constantes d'intégration (équation du 2<sup>ème</sup> ordre). L'une est fixée par  $u_0(0) = 0$ ; l'autre est une constante multiplicative  $C$  globale qui ne change pas la forme de  $u_0(r)$ . Choisissons  $C > 0$ , ce qui revient à prendre pour  $u_0(r)$  une courbe partant de 0 avec une pente positive (Fig. 6)

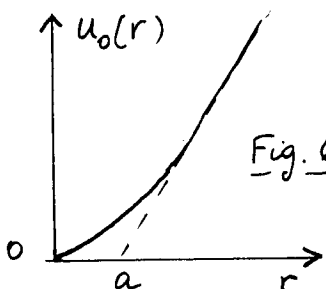


Fig. 6

- Comme  $u_0''/u_0 > 0$ , on en déduit que la concavité de  $u_0$  est positive dans toute la région où  $U(r) \geq 0$ . La concavité de la courbe  $u_0(r)$  est donc dirigée vers le haut



- Quand on sort de la zone d'action de  $V(r)$ ,  $u_0(r)$  devient une fonction linéaire de  $r$  (de courbure nulle). L'extrapolation de la droite correspondante coupe l'axe des  $r$  en  $r=a$ . Compte tenu de la concavité de  $u_0(r)$ , il apparaît alors clairement que  $a > 0$
- Le raisonnement qualitatif précédent s'applique quelle que soit la forme exacte de  $V(r)$ , pourvu que  $V(r)$  reste positif. Il montre que la longueur de diffusion associée à un potentiel répulsif est toujours positive. Par contre, nous verrons au § 7 suivant, que les oscillations de  $u_0(r)$  dans un potentiel attractif peuvent donner des longueurs de diffusion positives ou négatives (voir Fig. 10).

c - Calcul de la longueur de diffusion

- La solution de (3.4.a) avec  $k=0$ , s'écrit compte tenu de (3.4.c)

$$u_0(r) = C \operatorname{sh} k_0 r \quad r \leq b \quad (3.5)$$

- La solution de (3.4.b) avec  $k=0$  est par ailleurs

$$u_0(r) = D(r-a) \quad (3.6)$$

par définition même de  $a$ ,  $D$  étant une constante d'intégration qui s'obtient en raccordant les 2 solutions et leurs dérivées en  $r=r_b$

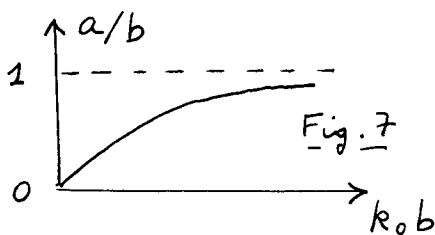
- Ce raccordement est effectué plus simplement en égalant les dérivées logarithmiques de (3.5) et (3.6) en  $r=r_b$ . On obtient ainsi

$$k_0 \frac{\operatorname{ch} k_0 b}{\operatorname{sh} k_0 b} = \frac{1}{b-a} \quad (3.7)$$

d'où l'on déduit

$$a = b - \frac{\operatorname{th} k_0 b}{k_0} \quad (3.8)$$

- Les variations de  $a$  avec  $k_0 b$  sont représentées sur la figure 7



$a/b$  croît monotoniquement de 0 à 1 quand  $k_0 b$  croît

Quand  $k_0$  croît, la pente de la courbe de la figure 6 en  $r=b$  devient de plus en plus verticale, ce qui permet de comprendre pourquoi  $a$  tend alors vers  $b$

d - Limite des potentiels faibles - Approximation de Born

- Quand  $k_0 b \ll 1$ , on obtient

$$a \approx b - \frac{1}{k_0} \left( k_0 b - \frac{k_0^3 b^3}{3} \right) = \frac{k_0^2 b^3}{3} \quad (3.9)$$

- Or la condition  $k_0 b \ll 1$  est équivalente à  $\frac{\hbar^2 k_0^2}{m} \ll \frac{\hbar^2}{m b_0^2}$ , ce qui n'est autre que la condition  $V_0 \ll \frac{\hbar^2}{m b_0^2}$  d'application de l'approximation de Born (voir Eq. (1.15)) à énergie très faible. On vérifie effectivement que (3.9) coïncide avec l'expression (2.31) de l'amplitude de diffusion  $a_{\text{Born}}$ , dans le cadre de l'approximation

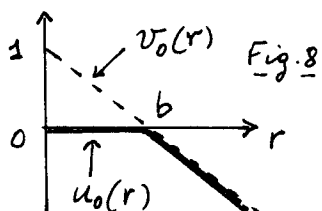
de Born,  $V(r)$  étant remplacé par (3.1).

$$A_{\text{Born}} = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int_0^b 4\pi r^2 dr \frac{\hbar^2 k_0^2}{m} = \frac{k_0^2 b^3}{3} \quad (3.10)$$

e - Limite des potentiels forts - Sphère dure

- Quand  $k_0 b \rightarrow \infty$ ,  $a$  tend vers  $b$ . La barrière de potentiel devient alors infiniment haute et  $u_0(r)$  doit s'annuler en  $r=b$ . On a une sphère dure impénétrable.

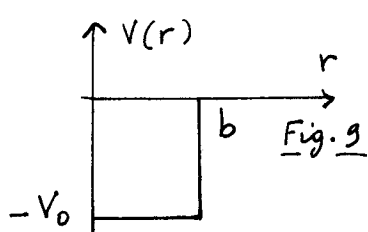
- Calculons ce que vaut  $r_e$  dans ce cas. Sur la figure 8, sont représentés en traits tiretés  $v_0(r)$ , en traits pleins  $u_0(r)$ . On obtient alors, en utilisant la définition (2.45) de  $r_e$



$$r_e = 2 \int_0^b dr \left[ \left(1 - \frac{r}{b}\right)^2 - 0 \right] = 2 \left[ b + \frac{b^3}{3b^2} - 2 \frac{b^2}{2b} \right] = \frac{2}{3} b \quad (3.11)$$

⑦ Puits carré de potentiel

a - Caractérisation du potentiel - Notations



$$\begin{cases} V(r) = -V_0 = -\frac{\hbar^2 k_0^2}{m} & \text{pour } 0 \leq r \leq b \\ V(r) = 0 & \text{pour } r > b \end{cases} \quad (3.12)$$

Les équations (3.4) doivent être remplacées par

$$\begin{cases} u_k''(r) + (k^2 + k_0^2) u_k(r) = 0 & r \leq b & (3.13.a) \\ u_k''(r) + k^2 u_k(r) = 0 & r > 0 & (3.13.b) \\ u_k(0) = 0 & & (3.13.c) \end{cases}$$

- La solution de ces équations s'écrit

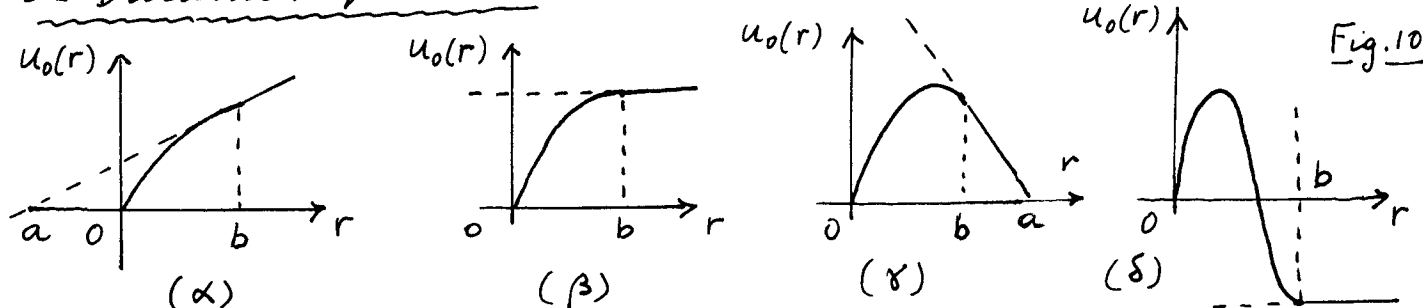
$$\begin{cases} u_k(r) = C \sin \chi r & r \leq b & (3.14.a) \\ u_k(r) = D \sin [kr + \delta_0(k)] & r > b & (3.14.b) \\ \chi = \sqrt{k^2 + k_0^2} & & (3.14.c) \end{cases}$$

- Pour  $k=0$ , on obtient

$$\begin{cases} u_0(r) = C \sin k_0 r & r \leq b & (3.15.a) \\ u_0(r) = D(r-a) & r > b & (3.15.b) \end{cases}$$

Il faut raccorder en  $r=b$  les solutions pour  $r > b$  et  $r < b$

b - Discussions qualitative



### III - 4

- Les figures 3  $\alpha, \beta, \gamma$  montrent les comportements de  $u_0(r) = C \sin k_0 r$  pour des valeurs croissantes de  $k_0 b$ . Tant que  $k_0 b < \pi/2$ , la sinusoïde n'a pas fait un quart d'oscillation en  $b$ , la pente en  $r=b$  est positive. Comme la concavité est tournée vers le bas, l'extrapolation de la tangente en  $r=b$  coupe l'axe des  $r$  en un point d'abscisse  $a < 0$  (Fig.  $\alpha$ ). Le module de  $a$  croît et tend vers l'infini quand  $k_0 b$  atteint la valeur  $\pi/2$  (Fig.  $\beta$ ). Puis quand  $k_0 b$  dépasse légèrement la valeur  $\pi/2$ , la pente en  $r=b$  devient négative et  $a$  devient positif et décroît (Fig.  $\gamma$ ). Pour une certaine valeur de  $k_0 b$ ,  $a$  va s'annuler puis devenir négatif et de nouveau infini quand  $k_0 b = 3\pi/2$  (Fig.  $\delta$ ). Et ainsi de suite...

- L'allure des phénomènes est la même pour tout puits de potentiel. A l'intérieur du puits, la solution  $u_0(r)$  d'énergie nulle oscille d'autant plus que le puits est plus profond. La pente de la droite vers laquelle tend  $u_0(r)$  en dehors du puits dépend de manière importante du nombre d'oscillations de  $u_0(r)$  dans le puits et la longueur de diffusion peut être aussi bien positive que négative.

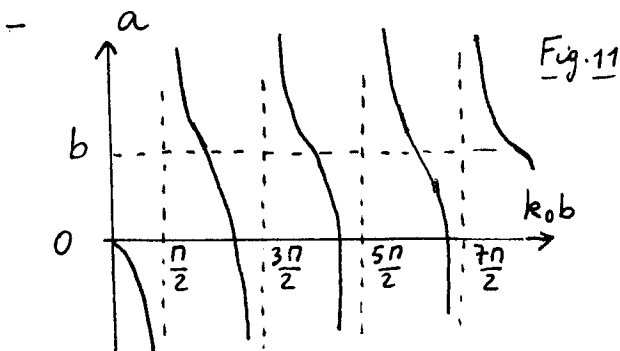
#### C - Calcul de la longueur de diffusion

- En raccordant (3.15.a) et (3.15.b) en  $r=b$  (égalité des dérivées logarithmiques), on obtient

$$k_0 \cotg k_0 b = \frac{1}{b-a} \quad (3.16)$$

ce qui donne

$$a = b - \frac{\tg k_0 b}{k_0} \quad (3.17)$$



La figure 11 donne l'allure des variations de  $a$  avec  $k_0 b$ .  $a$  diverge pour toutes les valeurs

$$k_0 b = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \quad (3.18)$$

où  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

- Pour  $k_0 b \ll 1$ , on trouve en développant  $\tg k_0 b$

$$a = -k_0^2 \frac{b^3}{3} \quad (3.19)$$

valeur qui coïncide avec l'expression (2.31) de  $a_{\text{Born}}$

- Pour  $k_0 b \gg 1$ , on trouve que  $a$  ne diffère de  $b$  que dans de petits intervalles autour des valeurs (3.18) de divergence.

- Nous allons montrer maintenant que les divergences de  $a$  pour les valeurs de  $k_0 b$  données en (3.18) correspondent à l'apparition d'états liés dans le puits de potentiel.

## d. Etude des états liés

### Caractérisation des états liés

- L'énergie  $E$  d'un état lié est négative. Nous posons

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2 k^2}{m} \quad (3.20)$$

et noterons  $u_K(r)$  la fonction propre correspondante qui obéit à

$$\begin{cases} u_K''(r) + (k_0^2 - k^2) u_K(r) = 0 & r \leq b & (3.21.a) \\ u_K''(r) - k^2 u_K(r) = 0 & r > b & (3.21.b) \\ u_K(0) = 0 & & (3.21.c) \end{cases}$$

- La solution des équations (3.21), physiquement acceptable, c'est à dire tendant vers 0 quand  $r \rightarrow \infty$  pour pouvoir représenter un état lié, s'écrit

$$\begin{cases} u_K(r) = C \sin \sqrt{k_0^2 - k^2} r & r \leq b & (3.22.a) \\ u_K(r) = D e^{-kr} & r > b & (3.22.b) \end{cases}$$

- l'égalité des dérivées logarithmiques des équations (3.22) en  $r=b$  donne la condition

$$\sqrt{k_0^2 - k^2} \cotg \sqrt{k_0^2 - k^2} b = -k \quad (3.23)$$

- Posons  $\chi = \sqrt{k_0^2 - k^2}$  (3.24)

Il vient  $\cotg \chi b = -\frac{k}{\chi}$  (3.25)

On en déduit  $1 + \cotg^2 \chi b = 1 + \frac{k^2}{\chi^2} = \frac{k_0^2}{\chi^2} = \frac{1}{\sin^2 \chi b}$  (3.26)

- Les valeurs de  $\chi$  correspondant aux états liés obéissent donc à

$$\pm \sin \chi b = \frac{\chi b}{k_0 b} \quad (3.27)$$

avec, compte tenu de (3.25)

$$\cotg \chi b \leq 0 \quad (3.28)$$

### Résolution graphique

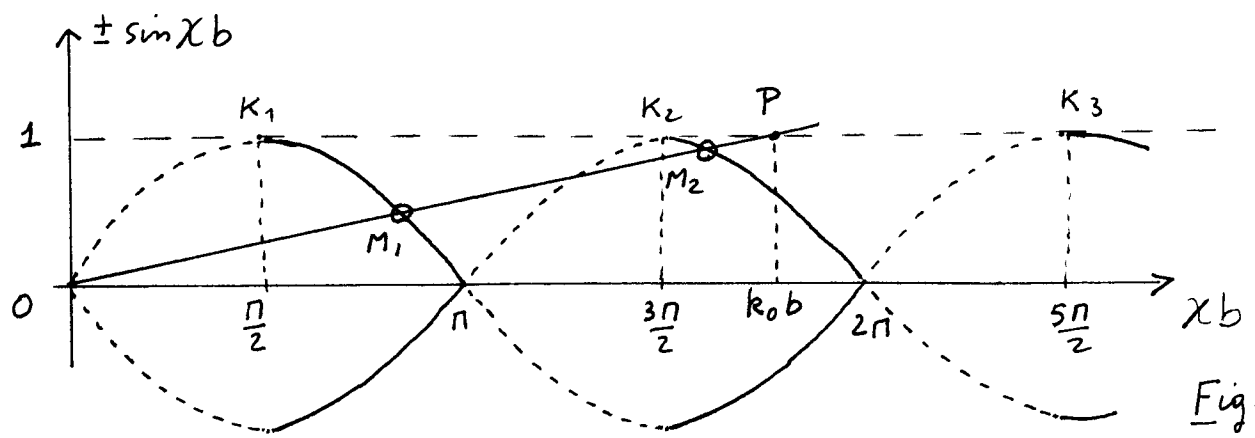


Fig. 12

- Les 2 courbes de la figure 12 sont les 2 sinusoides  $\pm \sin \chi b$  représentés en traits pleins dans les intervalles  $[\pi/2, \pi]$ ,  $[\frac{3\pi}{2}, 2\pi]$ ,  $[\frac{5\pi}{2}, 3\pi]$  où  $\cotg \chi b < 0$  (voir Eq. (3.28))

D'après (3.27), les valeurs de  $\chi b$  correspondant aux états liés sont les abscisses des intersections des parties en traits pleins de ces sinusoides avec la droite  $\frac{\chi b}{k_0 b}$ , droite de pente  $1/k_0 b$  passant par 0. Sur la figure 11, cette droite OP coupe l'horizontale d'ordonnée 1 (en traits longs) au point P d'abscisse  $k_0 b$ . Pour cette valeur de  $k_0 b$ , on voit sur la figure 11 qu'il y a 2 solutions  $\chi_1 b$  et  $\chi_2 b$  de (3.27) et (3.28) correspondant aux abscisses de  $M_1$  et  $M_2$ .

- La construction précédente permet alors de comprendre ce qui se passe quand on augmente progressivement  $k_0 b$  à partir de 0

Tant que  $k_0 b < \pi/2$ , c'est à dire tant que P est à gauche du point  $K_1$  d'abscisse  $\pi/2$  et d'ordonnée 1, il n'y a pas d'intersection de la droite OP avec les parties pleines des sinusoides. Il n'y a donc pas d'état lié. Dès que P atteint et dépasse très légèrement  $K_1$ , un point d'intersection  $M_1$  apparaît d'abscisse  $\chi_1 b$  très proche de  $k_0 b$  et très légèrement inférieure à  $k_0 b$ . D'après (3.24),  $\kappa$  est alors très petit. Un état lié d'énergie très faible apparaît donc dès que P dépasse très légèrement  $K_1$ . Si P continue à se déplacer vers la droite, la différence entre les abscisses de P et  $M_1$  croît, l'état lié associé à  $M_1$  devient de plus en plus lié et un nouvel état discret, d'énergie très faible apparaît dès que P atteint et dépasse très légèrement le point  $K_2$  d'abscisse  $3\pi/2$ , et ainsi de suite. Ainsi, toutes les divergences de la longueur de diffusion  $a$ , apparaissant sur la figure 11, correspondent à l'apparition d'un état lié dans le puits. Une longueur de diffusion très grande et positive correspond à un véritable état lié, d'énergie très faible. Si la longueur de diffusion est très grande en valeur absolue et négative, il suffit d'augmenter très légèrement la profondeur du puits pour faire apparaître un nouvel état lié d'énergie très faible,  $a$  passant de  $-\infty$  à  $+\infty$ . On dit quelquefois qu'une valeur négative de  $a$  très grande en valeur absolue correspond à un état lié "virtuel".

Les résultats précédents se généralisent aisément à un puits de forme quelconque. Quand on augmente de manière progressive la profondeur du puits, on fait apparaître des nouveaux états liés. Au voisinage des seuils d'apparition de ces nouveaux états liés, la longueur de diffusion devient très grande et varie de  $-\infty$  à  $+\infty$ . (voir par exemple la figure 7 de la référence [3] donnant les variations de  $a$  avec le paramètre  $C_0$  d'un potentiel de van der Waals en  $-C_6/r^6$ ).

Longueur de diffusion au voisinage d'une divergence

- Designons par  $\tilde{k}_{0n}$  la valeur de  $k_0$  correspondant à la divergence de  $a$  apparaissant pour  $k_0 b = (n + \frac{1}{2}) \pi$

$$\tilde{k}_{0n} b = (n + \frac{1}{2}) \pi \quad (3.29)$$

On peut à partir de (3.17), exprimer  $a$  en fonction de  $\frac{1}{k_0 - \tilde{k}_{0n}}$  au voisinage de  $\tilde{k}_{0n}$ . Comme d'après (2.56) et (2.59),  $a$  est alors égal à l'extension spatiale  $\xi = 1/k$  de l'état lié, on peut en déduire  $k$  et par suite l'énergie de liaison  $\hbar^2 k^2 / m$  de l'état lié

- Pour  $k_0 b$  très voisin de  $\tilde{k}_{0n} b$ , on peut écrire (3.17) sous la forme

$$a = b - \frac{1}{k_0} \frac{\sin k_0 b}{\cos k_0 b} \approx b + \frac{1}{k_0 (k_0 b - \tilde{k}_{0n} b)} \approx \frac{1}{\tilde{k}_{0n} b} \frac{1}{k_0 - \tilde{k}_{0n}} \quad (3.30)$$

Pour  $k_0$  très légèrement supérieur à  $\tilde{k}_{0n}$ ,  $a$  est positif et coïncide d'après (2.59) avec l'extension spatiale  $\xi = 1/k$  de l'état lié. On en déduit

$$k = \frac{1}{\xi} \approx \frac{1}{a} \approx \tilde{k}_{0n} b (k_0 - \tilde{k}_{0n}) = (n + \frac{1}{2}) \pi (k_0 - \tilde{k}_{0n}) \quad (3.31)$$

ce qui donne pour l'énergie de l'état lié

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{m} = \frac{\hbar^2 (k_0 - \tilde{k}_{0n})^2 \pi^2}{m} (n + \frac{1}{2})^2 \quad (3.32)$$

On peut retrouver un tel résultat en effectuant des développements limités de l'équation (3.27) au voisinage de  $\tilde{k}_{0n}$ .

Portée effective  $r_e$  au voisinage d'une divergence

- Au voisinage d'une divergence la pente en  $r = b$  de la solution d'énergie nulle  $u_0(r)$  est quasiment nulle (voir Figs. 10  $\beta$  et 10  $\delta$ ). La fonction prolongée  $v_0(r)$  est alors une horizontale, d'ordonnée égale à 1 compte tenu du choix de normalisation  $v_0(0) = 1$  [voir (2.33)].

- On en déduit

$$\int_0^b v_0^2(r) dr \approx b \quad \int_0^b u_0^2(r) dr \approx \int_0^b \sin^2 \tilde{k}_{0n} r dr = \frac{b}{2} \quad (3.33)$$

et par suite

$$r_e = 2 \int_0^b [v_0^2(r) - u_0^2(r)] dr = b \quad (3.34)$$

c - Variation du déphasage avec l'énergie

- Jusqu'ici nous avons surtout fait varier  $k_0$ , c'est à dire la profondeur des puits, et étudié comment  $a$  variait avec  $k_0$ . Nous étudions maintenant, pour une valeur donnée de  $k_0$ , c'est à dire de  $a$ , les variations de  $\delta_0(k)$  avec  $k$ , c'est à dire avec l'énergie.

- L'égalité des dérivées logarithmiques de (3.14.a) et (3.14.b) en  $r = b$  donne :

$$\frac{\chi}{\text{tg} \chi b} = \frac{k}{\text{tg} [k b + \delta_0(k)]} \quad (3.35)$$

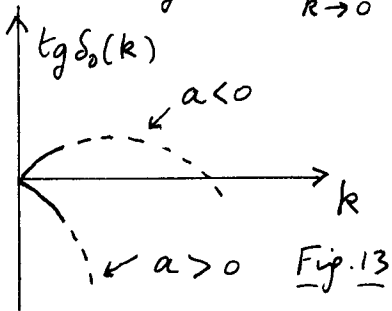
ce qui donne pour le déphasage  $\delta_0(k)$

$$\delta_0(k) = -kb + \text{Arc tg} \left( \frac{k}{\sqrt{k^2 + k_0^2}} \text{tg} \sqrt{k^2 + k_0^2} b \right) \quad (3.36)$$

L'équation (3.36) permet en principe de tracer les variations de  $\delta_0(k)$  avec  $k$  pour  $k_0$  fixé.

- Nous avons établi plus haut une expression perturbative de  $\text{tg} \delta_0(k)$  valable pour tout potentiel quand  $k \rightarrow 0$  [voir Eq. (2.47)]

$$\text{tg} \delta_0(k) \underset{k \rightarrow 0}{\approx} -ak - \frac{1}{2} r_e a^2 k^3 \quad (3.37)$$



La figure 13 représente les variations de  $\text{tg} \delta_0(k)$  avec  $k$ . La pente en 0, égale d'après (3.37) à  $-a$  est positive pour  $a < 0$ , négative pour  $a > 0$ . Comme  $r_e$  est positif la concavité est dirigée vers le bas.

Le comportement (3.37) n'est valable que pour  $k$  petit (courbes en traits pleins). Si néanmoins on l'extrapole (courbe en traits pointillés), on conçoit que  $\delta_0(k)$  puisse s'annuler pour certaines valeurs de  $k$ . Ceci est confirmé par un calcul exact à partir de (3.36) pour un puits carré. Voir aussi la figure 8 de la référence [3] pour un potentiel de van der Waals tronqué,  $\delta_0(k)$  étant calculé numériquement. Notons que les zéros de  $\delta_0(k)$  ne peuvent pas être calculés à partir de la formule perturbative (3.37) et que l'équation exacte (2.44) cesse d'être valable pour  $\delta_0(k) = 0$ , la normalisation (2.32) n'étant plus possible.

- Si  $\delta_0(k)$  s'annule (et si les contributions des ondes partielles de  $l$  non nul restent négligeables), la section efficace s'annule pour une certaine valeur de  $k$ . Un tel effet s'appelle effet Ramsauer. Il est très gênant pour le refroidissement évaporatif. En effet, au fur et à mesure du refroidissement,  $k$  diminue. Si la section efficace élastique s'annule pour une certaine valeur de  $k$ , le refroidissement s'arrête au voisinage de cette valeur. C'est ce qui semble se passer pour l'isotope  $^{85}\text{Rb}$ .

#### f - Probabilité de présence de la particule dans le puits

- Choisissons  $D = 1$  dans (3.14.b) et calculons  $|C|^2$ . La comparaison de  $|C|^2$  à 1 nous permettra de voir si la fonction d'onde de la particule est plus grande à l'intérieur du puits qu'à l'extérieur ou plus petite. Le raccord des 2 fonctions d'onde en  $r = b$  donne

$$\sin [kb + \delta_0(k)] = C \sin \chi b \quad (3.38)$$

et le raccord des 2 dérivées

$$k \cos [kb + \delta_0(k)] = C \chi \cos \chi b \quad (3.39)$$

En élevant au carré ces 2 équations, on obtient alors

$$1 = C^2 \left[ \sin^2 \chi b + \frac{\chi^2}{k^2} \cos^2 \chi b \right] \quad (3.40)$$

c'est à dire encore, compte tenu de la relation  $\chi^2 = k^2 + k_0^2$

$$C^2 = \frac{k^2}{k^2 + k_0^2 [\cos \sqrt{k^2 + k_0^2} b]^2} \quad (3.41)$$

- Si  $k_0$  ne coïncide avec aucune des valeurs de divergence pour  $a$ , c'est à dire si  $\cos k_0 b \neq 0$ , on voit sur (3.41) que  $C^2$  s'annule à la limite  $k \rightarrow 0$ . Le module de la fonction d'onde à l'intérieur du puits est beaucoup plus petit qu'à l'extérieur.

- Par contre si  $k_0 b$  est très proche de  $(n + \frac{1}{2})\pi$ ,  $|C|^2$  peut rester égal à 1 quand  $k$  devient très petit. Une grande valeur de la longueur de diffusion, associée à l'apparition d'un état lié réel ou virtuel dans le puits, correspond donc également à une probabilité importante pour que les 2 particules soient proches l'une de l'autre. Une telle situation peut augmenter la probabilité des processus inélastiques [voir Ref [3] et références ins.).

### ⑧ Résonance à énergie nulle

- Revenons à l'expression (2.49) de l'amplitude de diffusion

$$f(k) \underset{k \rightarrow 0}{\approx} \frac{-a}{1 + ika - \frac{1}{2}k^2 a r_e} \quad (3.42)$$

- Nous supposons que  $a$  est très grand, le potentiel  $U(r)$  admettant un état très faiblement lié (réel ou virtuel). Par contre,  $r_e$  qui caractérise la portée du potentiel est très petit. Par exemple, pour le puits carré du § 7, nous avons vu qu'au voisinage de valeurs de  $k_0$  correspondant à une divergence de  $a$ ,  $r_e$  reste égal à la largeur  $b$  du puits.

- Nous pouvons donc supposer  $k$  suffisamment petit pour que  $kr_e \ll 1$  (la longueur d'onde de de Broglie de la particule est très grande devant la portée du potentiel). Par contre  $ka$  n'est pas nécessairement petit. La longueur de diffusion  $a$  est si grande qu'elle peut être grande devant la longueur d'onde de de Broglie. Dans ces conditions, on peut négliger le terme  $-\frac{1}{2}k^2 a r_e$  dans le dénominateur de (3.42) et écrire

$$f(k) \approx \frac{-a}{1 + ika} \quad (3.43)$$

ce qui donne pour la section efficace totale :



$$\sigma_{total}(k) = \frac{8\pi a^2}{1 + k^2 a^2} \quad (3.44)$$

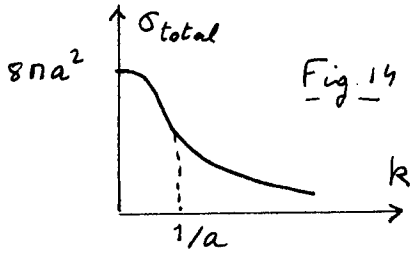


Fig. 14

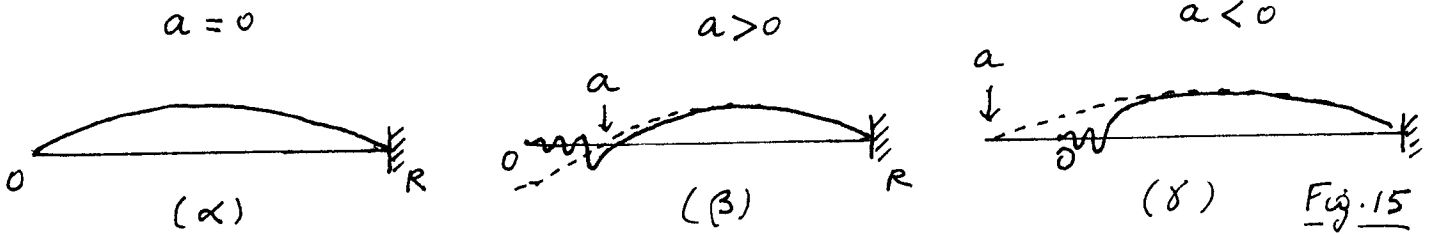
- Pour  $k \ll \frac{1}{a}$ , on obtient  $\sigma_{total} = 8\pi a^2$
- Pour  $k \gg \frac{1}{a}$ , on obtient  $\sigma_{total} = \frac{8\pi}{k^2}$ , ce qui représente, d'après (2.15), la valeur maximale que peut atteindre  $\sigma_{total}$  ( $\sin^2 \delta_0$  est toujours  $\leq 1$ )

- De tels effets ont été observés sur le Césium [7]
- Notons enfin que si  $V(r)$  admet un état très faiblement lié,  $a$  coïncide avec l'extension spatiale  $\xi$  de l'état lié. L'énergie de cet état  $E_{lié}$  s'écrit  $\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2}{2\mu \xi^2} = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2}$ . Par ailleurs l'énergie  $E$  de la particule s'écrit  $\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ , de sorte que (3.44) peut encore s'écrire :

$$\sigma_{total} = \frac{8\pi a^2}{1 + \frac{E}{|E_{lié}|}} \quad (3.45)$$

9) Signe de  $a$  et signe de la correction introduite par le potentiel sur les états d'énergie positive

- En l'absence de  $V$ , le spectre de  $H$  est celui d'une particule libre. Il est commode de discrétiser ce spectre en introduisant une paroi réfléchissante à une très grande distance  $R$ .  $u_k(r)$  s'annule donc en  $r=0$  et  $r=R$ . Voir par exemple l'état fondamental de  $H$  sur la figure 15.  $\alpha$ .
- En présence de  $V$ ,  $u_k(r)$  est modifiée près de  $r=0$  et la fonction prolongée  $v_R(r)$  s'annule en  $r=a$ . Pour  $a > 0$  (Fig 15.  $\beta$ ), la longueur d'onde (à l'extérieur du puits) diminue, le vecteur d'onde  $k$  augmente et la correction  $\delta E$  à l'énergie est  $> 0$  :  $V(r)$  se comporte comme un potentiel répulsif pour les états d'énergie  $> 0$ . Pour  $a < 0$  (Fig. 15  $\gamma$ ), les conclusions sont inversées et  $V(r)$  se comporte comme un potentiel attractif. Un tel résultat, qui demeure valable pour tous les autres états d'énergie  $> 0$ , montre que l'effet de  $V$  sur les états d'énergie  $> 0$  ne dépend que du signe de  $a$ , et non du fait que  $V$  soit un puits ou une barrière de potentiel.



Références (suite de la page II-11)

[7] M. Arndt, M. Ben Dahan, D. Guéry-Odelin, M.W. Reynolds, J. Dalibard, Phys. Rev. Lett. 79, 625 (1997)  
 Voir aussi le séminaire de J. Söding du 20.10.98

① Introduction

- Le vrai potentiel d'interaction entre 2 atomes conduit en général à des calculs non aisés, ne permettant pas d'obtenir des expressions analytiques simples.
- La motivation pour introduire le pseudopotentiel est de remplacer le vrai potentiel par un potentiel d'expression mathématique plus simple donnant les mêmes déphasages, ou tout au moins la même longueur de diffusion. 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 loins les uns des autres et on peut espérer que l'erreur commise sera négligeable.
- Il s'agit donc ici de trouver un pseudopotentiel
  - le plus simple possible pour conduire à des calculs simples.
  - donnant un résultat correct à l'approximation de Born, ce qui est important pour développer des théories de champ moyen.
  - conduisant à la même longueur de diffusion que le vrai potentiel.

② Potentiel en fonction deltaa - Expression mathématique

- L'idée la plus simple consiste à introduire un potentiel très localisé en 0, donc de la forme

$$V_g(\vec{r}) = g \delta(\vec{r}) \quad (4.1)$$

où  $g$  est une constante de couplage et  $\delta(\vec{r})$  la fonction delta

- Admettons pour l'instant qu'un tel potentiel puisse être traité correctement à l'ordre 1 en  $g$  (approximation de Born). Nous reviendrons plus loin sur ce point important (voir § 2c). D'après l'équation (1.15), l'expression de la longueur de diffusion, à l'approximation de Born, est, à la limite  $k \rightarrow 0$  :

$$a_{\text{Born}} = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d^3r V_g(\vec{r}) = \frac{mg}{4\pi\hbar^2} \quad (4.2)$$

- Si l'approximation de Born était valable pour (4.1), on obtiendrait donc en écrivant  $a_{\text{Born}} \simeq a$

$$g = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a \quad (4.3)$$

## IV - 2

- Pour obtenir une meilleure intuition physique de l'expression (4.1), nous allons maintenant revenir au spectre d'énergie d'une particule de masse  $\mu = m/2$  enfermée dans une boîte sphérique de rayon  $R$  aux parois réfléchissantes (voir p. III-10) et voir si les déplacements  $\delta E_n$  des divers niveaux d'énergie produits par le vrai potentiel peuvent être réinterprétés en remplaçant le vrai potentiel par le potentiel en fonction  $\delta$

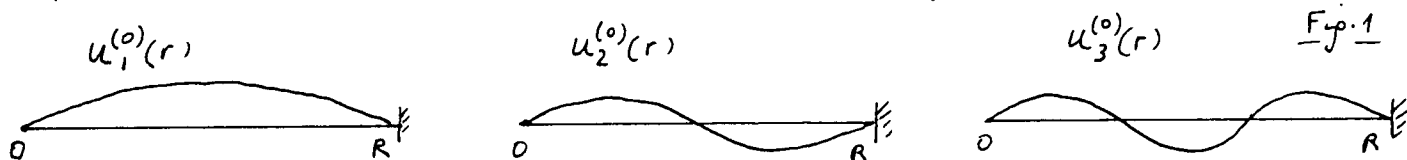
### b - Particule dans une boîte sphérique

#### Fonctions propres et valeurs propres en l'absence de potentiel

- La fonction radiale non perturbée  $u^{(0)}(r)$  doit s'annuler en  $r=0$  et  $r=R$ . Les fonctions propres non perturbées  $u_n^{(0)}(r)$  sont donc

$$u_n^{(0)}(r) = C_n \sin \frac{n\pi}{R} r \quad n=1, 2, 3, \dots \quad (4.4)$$

$C_n$  étant une constante de normalisation (voir Fig. 1)



- Énergies non perturbées  $E_n^{(0)}$

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \left(\frac{n\pi}{R}\right)^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{mR^2} n^2 \quad (4.5)$$

- Calcul de  $C_n$ . La fonction d'onde complète  $\psi_n^{(0)}(\vec{r})$  est égale à  $\frac{u_n^{(0)}(r)}{r}$   
Normalisons  $\psi_n^{(0)} \bar{a} 1$

$$|C_n|^2 \int d^3r |\psi_n^{(0)}(\vec{r})|^2 = |C_n|^2 \int_0^R 4\pi r^2 \frac{1}{r^2} \sin^2 \frac{n\pi}{R} r dr = 2\pi R |C_n|^2 = 1 \quad (4.6)$$

On en déduit

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} \quad (4.7)$$

et par suite

$$\psi_n^{(0)}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} \frac{1}{r} \sin \frac{n\pi}{R} r \quad (4.8)$$

- Densité de probabilité de présence à l'origine

Il apparaît clairement sur (4.8) que  $\psi_n^{(0)}(\vec{r})$  tend vers une limite finie non nulle quand  $r \rightarrow 0$ . Plus précisément, on peut écrire

$$|\psi_n^{(0)}(\vec{0})|^2 = \frac{\pi^2}{2\pi R^3} n^2 \quad (4.9)$$

#### Corrections en énergie introduites par le vrai potentiel $V(r)$

- En présence de  $V(r)$ , la fonction radiale, qui s'annule toujours en  $r=0$ , tend à l'extérieur du puits vers une sinusoïde qui s'annule en  $r=R$ . (Voir figures 15  $\beta$  et 15  $\gamma$  page III-10). Ce résultat est valable pour toutes les fonctions propres perturbées  $u_n(r)$  associées à  $u_n^{(0)}(r)$ .

- Soient  $v_n(r)$  les fonctions "prolongées" associées à  $u_n(r)$  (tracées en traits tiretés sur les figures 15β et 15γ, p. III-10, pour  $n=1$ )  
 Ces sinusoides coupent l'axe des abscisses en  $r=a$  où  $a$  est la longueur de diffusion associée au vrai potentiel  $V(r)$ . Notons que ce résultat demeure valable pour  $n \neq 1$ , si  $E_n$  reste très petit, ce qui est possible d'après (4.5) pour  $R$  très grand.

On peut donc écrire pour la fonction "prolongée" perturbée  $v_n(r)$  qui s'annule en  $r=a$  et  $r=R$

$$v_n(r) = C'_n \sin \frac{n\pi}{R-a} (r-a) \quad (4.10)$$

où  $C'_n$  est un coefficient de normalisation qui, après un calcul analogue à celui conduisant à (4.7) est trouvé égal à  $\bar{a}$  ( $\bar{a}$  l'ordre 1 inclus en  $a$ )

$$C'_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi(R-a)}} \quad (4.11)$$

- Le nouveau vecteur d'onde apparaissant dans (4.10) est  $\frac{n\pi}{R-a}$  au lieu de  $\frac{n\pi}{R}$ , de sorte que les nouvelles énergies perturbées  $E_n$  s'écrivent

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m(R-a)^2} n^2 \quad (4.12)$$

- En développant (4.12) en puissances de  $\frac{a}{R}$ , on obtient alors

$$E_n = E_n^{(0)} + \delta E_n^{(1)} + \delta E_n^{(2)} + \dots \quad (4.13)$$

où

$$\delta E_n^{(1)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{m R^2} \frac{2a}{R} \quad (4.14.a) \quad \delta E_n^{(2)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{m R^2} \frac{3a^2}{R^2} \quad (4.14.b)$$

Comparaison avec l'effet du potentiel  $g \delta(\vec{r})$  à l'ordre le plus bas en  $g$

- A l'ordre le plus bas en  $g$ , l'effet de  $g \delta(\vec{r})$  est de modifier l'énergie  $E_n$  d'une quantité  $\overline{\delta E_n^{(1)}}$  où  $\overline{\delta E_n^{(1)}}$  s'écrit

$$\overline{\delta E_n^{(1)}} = \int d^3r \psi_n^{(0)*}(\vec{r}) g \delta(\vec{r}) \psi_n^{(0)}(\vec{r}) = g |\psi_n^{(0)}(\vec{0})|^2 = g \frac{\pi^2 n^2}{2\pi R^3} \quad (4.15)$$

On a utilisé (4.8) et (4.9)

- On constate alors que si l'on utilise l'expression (4.3) de  $g$ ,  $\overline{\delta E_n^{(1)}}$  coïncide avec  $\delta E_n^{(1)}$  donné en (4.14.a)

$$g = \frac{4\pi \hbar^2}{m} a \implies \overline{\delta E_n^{(1)}} = \delta E_n^{(1)} \quad (4.16)$$

En d'autres termes, utiliser  $g \delta(\vec{r})$  au lieu du vrai potentiel ainsi que l'expression de  $a_{\text{Born}}$  associée à  $g \delta(\vec{r})$  redonne les bonnes corrections, au 1<sup>er</sup> ordre en  $g$ , des énergies positives de la particule.

#### IV - 4

### c - Au delà de l'approximation de Born

- Peut-on utiliser l'approximation de Born pour le potentiel en fonction  $\delta$ ? Les termes d'ordres suivants (en  $g$ ) sont-ils petits par rapport au terme d'ordre 1? Pour répondre à une telle question, nous allons calculer le déplacement au 2<sup>ème</sup> ordre en  $g$  des niveaux de la particule dans une boîte sphérique (§ 26 précédent)

- Calculons tout d'abord les éléments non diagonaux de  $V_\delta$

$$\begin{aligned}\langle q | V_\delta | n \rangle &= \int d^3r \psi_q^{(0)*}(\vec{r}) g \delta(\vec{r}) \psi_n^{(0)}(r) = g \psi_q^{(0)*}(0) \psi_n^{(0)}(0) \\ &= \frac{1}{2\pi R} \frac{\pi^2}{R^2} g q n\end{aligned}\quad (4.17)$$

- D'après la théorie des perturbations du 2<sup>ème</sup> ordre, le déplacement  $\overline{\delta E_n^{(2)}}$  au 2<sup>ème</sup> ordre en  $g$  dû à  $V_\delta$  vaut :

$$\overline{\delta E_n^{(2)}} = \sum_{q \neq n} \frac{|\langle q | V_\delta | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}} = g^2 \frac{m}{\hbar^2 R^4} \sum_{q \neq n} \frac{q^2 n^2}{n^2 - q^2}\quad (4.18)$$

La série apparaissant en (4.18) diverge ! Non seulement  $\overline{\delta E_n^{(2)}}$  diffère de l'expression exacte  $\delta E_n^{(2)}$  donnée en (4.14.b), mais  $\overline{\delta E_n^{(2)}}$  est infini. L'approximation de Born n'est donc clairement pas applicable à  $V_\delta$ .

### d - Utilisation d'une fonction delta de largeur petite mais non nulle.

- On pourrait croire que la divergence de  $\overline{\delta E_n^{(2)}}$  est due au caractère singulier de  $\delta(\vec{r})$ . Que se passe-t-il si l'on remplace la fonction  $\delta$  par une fonction créneau  $\delta_\epsilon$ , égale à  $\frac{3}{4\pi\epsilon^3}$  dans une sphère de rayon  $\epsilon$  et à zéro partout ailleurs?

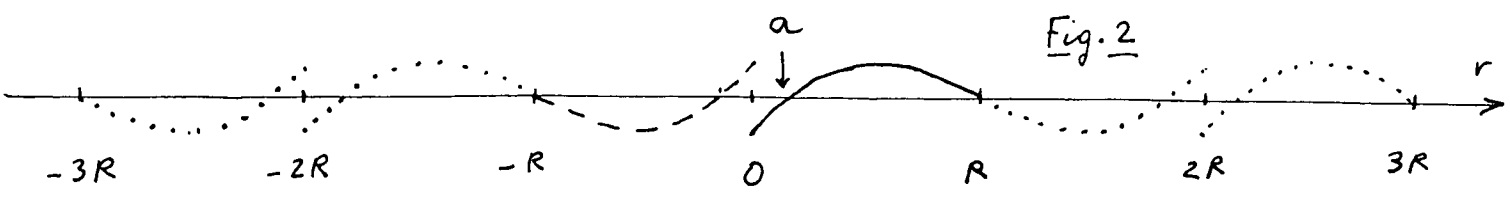
- On est alors ramené au problème des potentiels carrés étudiés dans les § 6 et 7 du cours III. Si  $\epsilon$  est très petit, la hauteur de la barrière (si  $a > 0$ ) est très grande, et on sait alors que la longueur de diffusion d'un tel potentiel est égale à la largeur de la barrière, c'est à dire à  $\epsilon$ . La longueur de diffusion du potentiel  $g\delta_\epsilon(\vec{r})$  est donc égale à  $\epsilon$  et tend vers 0 quand  $\epsilon \rightarrow 0$ .

Calculé à tous les ordres en  $g$ , le potentiel  $g\delta_\epsilon(\vec{r})$  ne produit donc aucune diffusion. Il ne peut donc visiblement pas décrire les effets physiques associés au vrai potentiel.

En conclusion, le potentiel en fonction delta,  $V_\delta$ , redonne bien les résultats du vrai potentiel, si l'on utilise la relation (4.3) entre  $g$  et  $a$ , et si l'on se limite au 1<sup>er</sup> ordre en  $g$ . Toute tentative d'aller à des ordres supérieurs conduit à des résultats erronés.

e. Fonctions d'onde à l'ordre 1 en  $g$

- Avant de quitter les potentiels en fonction  $\delta$  et de passer aux pseudo-potentels étudiés dans le § 3 qui suit, examinons la correction  $\psi_n^{(1)}$  (de la fonction d'onde  $\psi_n^{(0)}$ ) introduite par  $V_\delta$  à l'ordre 1 en  $g$ . Cette étude nous permettra de préciser certains points délicats relatifs à la convergence des développements en fonctions propres non perturbées et sera utile pour les discussions du § 3.
- Considérons la fonction prolongée  $v_n$  associée à la fonction radiale  $u_n$  dans le vrai potentiel et représentée ci-dessous en traits pleins sur la figure 2 pour  $n=1$  (et  $a > 0$ ).



Une telle fonction coïncide-t-elle à l'ordre 1 inclus en  $g$  avec la fonction perturbée calculée à l'ordre 1 inclus en  $V_\delta$ ? En d'autres termes peut-on écrire

$$\frac{1}{r} v_n(r) \stackrel{?}{\approx} \psi_n^{(0)}(r) + \sum_{q \neq n} \psi_q^{(0)}(r) \frac{\langle q | V_\delta | n \rangle}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}} \quad (4.19)$$

- Considérons formellement  $r$  comme une variable pouvant prendre toutes les valeurs entre  $-\infty$  et  $+\infty$ . Les fonctions  $u_n^{(0)} \propto \sin(n\pi r/R)$  et  $u_q^{(0)} \propto \sin(q\pi r/R)$  apparaissant dans  $\psi_n^{(0)}$  et  $\psi_q^{(0)}$ , sont des fonctions impaires de  $r$ , périodiques de période  $2R$ . Prenons alors la courbe symétrique de  $v_n(r)$  par rapport à 0 (en traits tiretés sur la figure 2) et déplaçons le motif ainsi obtenu entre  $-R$  et  $R$  d'un multiple de  $2R$  à droite et à gauche (en pointillés sur la figure 2). Si la relation (4.19) est exacte, et si l'on fait varier dans cette formule  $r$  de  $-\infty$  à  $+\infty$ , le membre de droite de (4.19) devrait représenter le développement en série de Fourier de la fonction impaire et périodique représentée sur la figure 2.

- En fait, comme on connaît l'expression de  $v_n(r)$  [voir (4.10) et (4.11)], on peut, après avoir prolongé  $v_n(r)$  comme sur la figure 2, calculer explicitement les coefficients  $\gamma_q$  de la série de Fourier associée à la fonction périodique et impaire de la figure 2

$$\gamma_q = \int_{-R}^{+R} \frac{1}{\sqrt{R}} \sin q\pi \frac{r}{R} v_n(r) dr = \frac{2}{\sqrt{R}} \int_0^R dr \sin q\pi \frac{r}{R} v_n(r) \quad (4.20)$$

Après report de (4.10) et (4.11) dans (4.20), on peut calculer à l'ordre 1 inclus en  $a$  l'intégrale en  $r$  et obtenir

$$\delta_n = 1 \quad \delta_{q \neq n} = \frac{\langle q | V_g | n \rangle}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}} \quad (4.21)$$

On en déduit que le développement de perturbation à l'ordre 1 inclus en  $V_g$  donne le développement en série de Fourier de la fonction représentée sur la figure 2.

- Il faut bien noter cependant que la fonction de la figure 2 est discontinue en  $r=0$  (et également en  $r = \pm 2kR$ ,  $k=1,2,3,\dots$ ), car  $v_n(r)$  tend vers une valeur non nulle quand  $r \rightarrow 0$ . Le développement en série de Fourier ne converge donc pas uniformément vers cette fonction. En particulier, toutes les fonctions  $\sin q\pi r/R$  apparaissant dans le développement s'annulent en  $r=0$ . Le développement en série de Fourier s'annule donc en  $r=0$ . Quand on augmente le nombre de termes dans ce développement on obtient une courbe (en traits tiretés sur la figure 3) qui a une pente de plus en plus raide en  $r=0$  et qui ailleurs se rapproche de plus en plus de  $v_n(r)$  (en traits pleins)

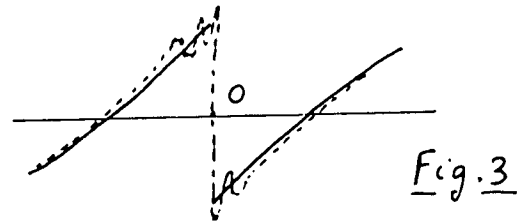


Fig. 3

### ③ Pseudopotentiel

#### a - Arguments guidant le choix du pseudopotentiel

- Plutôt que de choisir un peu au hasard une forme simple de potentiel, puis d'examiner après coup s'il donne les mêmes corrections que le vrai potentiel au spectre d'énergie positives, nous allons maintenant essayer de guider un tel choix en précisant le but recherché.
- Le but recherché est de trouver un potentiel  $V_{\text{pseudo}}$  tel que les fonctions propres d'énergie positive de l'hamiltonien  $H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V_{\text{pseudo}}$  soient les fonctions  $\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{r} v_k(r)$  où  $v_k(r) = C \sin[kr + \delta_0(k)]$  est la fonction prolongeant la fonction radiale  $u_k(r)$  correspondant au vrai potentiel [voir Eq. (2.23) et Fig. 2 page II-4].
- Comme  $v_k(0) \neq 0$ , l'action de  $\Delta$  sur  $v_k(r)/r$  va donner un terme en  $v_k(0) \delta(\vec{r})$ . Pour compenser ce terme,  $V_{\text{pseudo}}$  doit

done lui aussi contenir une fonction  $\delta$ . Il semble alors judicieux de choisir pour  $V_{\text{pseudo}}$  un opérateur donnant naissance à un terme en  $v'_k(0) \delta(\vec{r})$ . La compensation entre les 2 termes en  $v_k(0) \delta(\vec{r})$  et  $v'_k(0) \delta(\vec{r})$  provenant de  $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta$  et  $V_{\text{pseudo}}$  devrait alors permettre de fixer  $v'_k(0)/v_k(0)$  c'est à dire la dérivée logarithmique de  $v_k(r)$  en  $r=0$ , très simplement relié à la longueur de diffusion  $a$ .

b - Détermination du pseudopotentiel

Expression de  $V_{\text{pseudo}}$

$$V_{\text{pseudo}} = g \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} r \tag{4.22}$$

- Plus précisément, si  $|\psi\rangle$  est un ket de fonction d'onde  $\langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\vec{r})$

$$\langle \vec{r} | V_{\text{pseudo}} | \psi \rangle = g \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} r \psi(\vec{r}) \tag{4.23}$$

- En particulier, si  $\psi(r) = \frac{v_k(r)}{r}$

$$V_{\text{pseudo}} \frac{v_k(r)}{r} = g \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} v_k(r) = g \delta(\vec{r}) v'_k(0) \tag{4.24}$$

$V_{\text{pseudo}}$  donne bien naissance à un terme en  $\delta(\vec{r}) v'_k(0)$

Equation de Schrödinger pour  $\psi_k(\vec{r}) = \frac{v_k(r)}{r}$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \frac{v_k(r)}{r} + V_{\text{pseudo}} \frac{v_k(r)}{r} - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} v_k(r) = 0 \tag{4.25}$$

- Terme d'énergie cinétique

$$\frac{v_k(r)}{r} = \frac{v_k(0)}{r} + \frac{v_k(r) - v_k(0)}{r} \tag{4.26}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \frac{v_k(r)}{r} = \frac{\hbar^2}{2\mu} 4\pi \delta(\vec{r}) v_k(0) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} v_k(r) \tag{4.27}$$

Le dernier terme du membre de droite de (4.26) est en effet régulier en  $r=0$  et on peut utiliser  $\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r$  (onde s)

- Terme en  $V_{\text{pseudo}} \rightarrow$  (4.24)

- En reportant (4.24) et (4.27) dans (4.25) et en multipliant tous les termes par  $2\mu/\hbar^2 = m/\hbar^2$ , on obtient

$$\delta(\vec{r}) \left[ 4\pi v_k(0) + \frac{mg}{\hbar^2} v'_k(0) \right] - \frac{1}{r} \left[ v_k''(r) + k^2 v_k(r) \right] = 0 \tag{4.28}$$

- L'annulation du coefficient de  $\delta(\vec{r})$  donne, en posant

$$g = \frac{4\pi \hbar^2}{m} a \tag{4.29}$$



$$\frac{v_k'(0)}{v_k(0)} = -a \quad (4.30)$$

L'équation (4.28) devient alors  $v_k''(r) + k^2 v_k(r) = 0$ , dont la solution est

$$v_k(r) = C \sin[kr + \delta_0(k)] \quad (4.31)$$

En reportant (4.31) dans (4.30) et en faisant  $r=0$ , on obtient enfin une équation reliant  $\delta_0(k)$  à  $a$

$$\frac{\operatorname{tg} \delta_0(k)}{k} = -a \quad (4.32)$$

Amplitude de diffusion associée à  $V_{\text{pseudo}}$

- L'amplitude de diffusion  $f(k)$  dans l'onde  $s$  est reliée au déphasage  $\delta_0(k)$  par l'équation (2.48)

$$f(k) = \frac{e^{i\delta_0(k)} \sin \delta_0(k)}{k} = \frac{\sin \delta_0(k)}{k e^{-i\delta_0(k)}} = \frac{1}{k[\operatorname{cotg} \delta_0(k) - i]} \quad (4.33)$$

- D'après (4.32),  $k \operatorname{cotg} \delta_0(k) = -\frac{1}{a}$ , de sorte que

$$f(k) = \frac{1}{(-\frac{1}{a} - ik)} = \frac{-a}{1 + ika} \quad (4.34)$$

En comparant (4.34) à (2.49), on voit que  $V_{\text{pseudo}}$  est caractérisé par une longueur de diffusion  $a$  et une portée effective  $r_e = 0$ .

- Inversement, considérons le vrai potentiel  $V(r)$  caractérisé par  $a$  et  $r_e$ . Si on le remplace par  $V_{\text{pseudo}}$  où  $g$  est relié à  $a$  par (4.29), on obtiendra des collisions caractérisées par la même longueur de diffusion  $a$ , mais par une portée effective nulle au lieu d'être égale à  $r_e$ . On voit sur (2.49) que le terme en  $r_e k^2 a$  est négligeable devant le terme  $-ika$  si  $kr_e \ll 1$ .  $V_{\text{pseudo}}$  donne donc une bonne description des collisions dues à  $V(r)$  tant que  $kr_e \ll 1$ .

- Notons enfin que  $f(k)$  est développable en puissances de  $ka$  si  $ka < 1$

$$f(k) = -a + ika^2 - ik^2 a^3 + \dots \quad (4.35)$$

$V_{\text{pseudo}}$  peut donc être traité à l'approximation de Born si  $ka < 1$  et on a:

$$a_{\text{Born}} = a \quad (4.36)$$

### c Calcul perturbatif des effets du pseudopotentiel

Cette étude est utile pour préciser les précautions à prendre quand on utilise  $V_{pseudo}$

#### Action de $V_{pseudo}$ sur des fonctions d'onde régulières à l'origine

- On considère des  $\psi(\vec{r})$  telles que  $\psi(\vec{r})$  et ses dérivées restent finies à l'origine. On a alors

$$\begin{aligned} V_{pseudo} \psi(\vec{r}) &= g \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} r \psi(\vec{r}) = g \underbrace{\delta(\vec{r}) r}_{=0} \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial r} + g \delta(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \\ &= g \delta(\vec{r}) \psi(\vec{0}) \end{aligned} \tag{4.37}$$

Par ailleurs, pour de telles fonctions, le potentiel en fonction  $\delta$  défini en (4.1) donne le même résultat lorsqu'il agit sur  $\psi(\vec{r})$ . On a donc

$$\psi(\vec{r}) \text{ régulière en } 0 \Rightarrow V_{pseudo} \psi(\vec{r}) = V_{\delta} \psi(\vec{r}) = g \delta(\vec{r}) \psi(\vec{0}) \tag{4.38}$$

- Notons que si  $\psi(\vec{r})$  est égal à  $\frac{v(r)}{r}$ , la régularité en 0 implique que  $v(0) = 0$ ,  $v'(0)$  fini. En écrivant  $v(r) = v(0) + r v'(0) + \dots$  qui donne  $v(r) = r v'(0) + \dots$  et donc  $\psi(0) = v'(0)$ , on obtient

$$\psi(\vec{r}) = \frac{v(r)}{r} \text{ régulière en } 0 \Rightarrow V_{pseudo} \frac{v(r)}{r} = g \delta(\vec{r}) v'(0) \tag{4.39}$$

qui montre que (4.24) est valable que  $v(0)$  soit nul ou non

#### Effet de $V_{pseudo}$ au 1<sup>er</sup> ordre

- En général, les fonctions propres d'ordre 0 sont des ondes planes (particule libre dans tout l'espace), ou des fonctions  $\frac{1}{r} \sin(q\pi r/R)$  (particule enfermée dans une boîte sphérique). Ces fonctions propres d'ordre 0,  $\psi_n^{(0)}$ , sont régulières en 0, et le déplacement au 1<sup>er</sup> ordre en  $V_{pseudo}$  s'écrit

$$\delta E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | V_{pseudo} | \psi_n^{(0)} \rangle \tag{4.40}$$

- En utilisant (4.38), on obtient alors

$$\langle \psi_n^{(0)} | V_{pseudo} | \psi_n^{(0)} \rangle = \langle \psi_n^{(0)} | V_{\delta} | \psi_n^{(0)} \rangle \tag{4.41}$$

On comprend ainsi à posteriori pourquoi  $V_{\delta}$  donne les bonnes corrections à l'énergie à l'ordre 1 en  $g$ .

- On a de même pour les éléments non diagonaux

$$\langle \psi_q^{(0)} | V_{pseudo} | \psi_n^{(0)} \rangle = \langle \psi_q^{(0)} | V_{\delta} | \psi_n^{(0)} \rangle \tag{4.42}$$

Le développement en fonctions propres non perturbées de la fonction propre d'ordre 1 en  $g$  est donc le même pour  $V_{pseudo}$  et  $V_{\delta}$ .

Effet de  $V_{pseudo}$  au 2<sup>ème</sup> ordre

Reprenons ici l'exemple concret où la particule est enfermée dans une boîte sphérique de rayon  $R$ .

- Si  $\Psi_n^{(1)}$  est la fonction perturbée au 1<sup>er</sup> ordre, le déplacement au 2<sup>ème</sup> ordre de  $E_n$  s'écrit

$$\langle \Psi_n^{(0)} | V_{pseudo} | \Psi_n^{(1)} \rangle \tag{4.43}$$

- Si l'on utilise le développement de  $|\Psi_n^{(1)}\rangle$  en fonctions propres non perturbées, on obtient l'expression bien connue

$$\sum_{q \neq n} \frac{|\langle \Psi_q^{(0)} | V_{pseudo} | \Psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}} \tag{4.44}$$

- Compte tenu de l'égalité (4.42), (4.44) coïncide avec l'expression analogue (4.18) pour  $V_g$  qui diverge!
- Considérons maintenant (4.43). La définition (4.23) de  $V_{pseudo}$  entraîne que

$$V_{pseudo} \Psi_n^{(1)}(\vec{r}) = g \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} \Psi_n^{(1)}(\vec{r}) \Big|_{r=0} \tag{4.45}$$

Pour calculer  $\frac{\partial}{\partial r} \Psi_n^{(1)}(\vec{r})$  en  $r=0$ , revenons à la fonction d'onde exacte au 1<sup>er</sup> ordre inclus en  $g$ ,  $\frac{v_n(r)}{r}$ , où  $v_n(r)$  est donné en (4.10) et (4.11). Le terme d'ordre 1 en  $a$  dans la dérivée de  $v_n(r)/r$  en  $r=0$  s'obtient en prenant le terme d'ordre 1 en  $a$  de  $C_n' \frac{n\pi}{R-a}$  c'est à dire de  $\frac{1}{\sqrt{2\pi(R-a)}} \frac{n\pi}{R-a}$ . On obtient ainsi

$$\frac{\partial}{\partial r} \Psi_n^{(1)}(r) \Big|_{r=0} = \frac{n\pi}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{R^{3/2}} \frac{3}{2} \frac{a}{R} \tag{4.46}$$

En reportant (4.46) dans (4.45) puis dans (4.43), on obtient alors, compte tenu de (4.8) et (4.29)

$$\langle \Psi_n^{(0)} | V_{pseudo} | \Psi_n^{(1)} \rangle = g \frac{n^2 \pi^2}{2\pi R^2} \frac{3}{2} \frac{a}{R^2} = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{m R^2} \frac{3a^2}{R^2} \tag{4.47}$$

qui coïncide avec le résultat exact (4.14.b) pour  $\delta E_n^{(2)}$ .

- Ainsi, suivant qu'on utilise (4.43) ou (4.44), on obtient le résultat exact pour la correction au 2<sup>ème</sup> ordre  $\delta E_n^{(2)}$  ou une somme divergente.
- Pour comprendre le résultat précédent, étrange à 1<sup>ère</sup> vue, revenons à la discussion du § 2c. Nous avons vu alors que le développement en fonctions propres non perturbées de  $\Psi_n^{(1)}(\vec{r})$  n'est pas uniformément convergent vers  $\Psi_n^{(1)}(\vec{r})$ :  $v_n(r)$  est discontinue en  $r=0$  alors que le développement en série de Fourier de  $v_n(r)$  est continu (voir Fig. 3, p. IV-6). La limite de la somme des actions de  $V_{pseudo}$  sur chacun des termes du développement en série de Fourier ne coïncide pas avec l'action de  $V_{pseudo}$  sur la limite de la somme de ces termes. La divergence de (4.44)

est un fait lié à la divergence en  $r=0$  de la pente de la courbe en traits tiretés de la figure 3, alors que la courbe en traits pleins a une pente finie à droite et à gauche de  $r=0$

- En conclusion, l'utilisation de  $V_{pseudo}$  nécessite des précautions. Tant qu'on s'intéresse à des effets d'ordre 1, il n'y a aucune difficulté et on peut remplacer  $V_{pseudo}$  par  $V_g$ . Par contre, aux ordres supérieurs à 1, il ne faut pas faire agir séparément  $V_{pseudo}$  sur chacun des termes des développements en fonctions propres non perturbées. Il faut faire agir directement  $V_{pseudo}$  sur les fonctions d'ordre 1,  $\Psi_n^{(1)}(r)$ . On obtient alors des résultats corrects avec  $V_{pseudo}$ .

- Notons que, même si l'on fait agir directement  $V_g$  sur  $\Psi_n^{(1)}(r)$ , on obtient une correction infinie.  $V_g$  ne donne des résultats corrects qu'au 1<sup>er</sup> ordre en énergie.

- Les mêmes considérations peuvent être appliquées au développement de Born obtenu avec  $V_{pseudo}$ . Si l'on prend la précaution de sommer les séries avant de faire agir  $V_{pseudo}$  sur elles, on retrouve bien (4.35).

e - Utilisation d'une fonction delta de largeur finie dans  $V_{pseudo}$

- D'après (4.24) 
$$V_{pseudo} \frac{v_k(r)}{r} = g \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} v_k(r) \tag{4.48}$$

Pour éviter les singularités en  $r=0$  de  $\delta(\vec{r})$ , on peut remplacer  $\delta(r)$  par une fonction  $\delta_\epsilon(\vec{r})$  de largeur finie  $\epsilon$ , comme dans le § 2d. On trouve alors [4] que pour obtenir les résultats corrects, il faut prendre, non pas  $g \delta_\epsilon(\vec{r}) v_k'(r)$  dans (4.48), mais  $g \delta_\epsilon(\vec{r}) v_k'(\epsilon)$ . C'est la dérivée à droite du potentiel,  $v_k'(\epsilon)$ , qui intervient.

- Ce résultat se comprend bien à partir de la Fig. 3. L'utilisation de  $\delta_\epsilon$  au lieu de  $\delta$  entraîne que  $v_k(r)$  s'annule en  $r=0$  et ressemble à la courbe en traits tiretés de la figure 3. La pente en  $r=0$  diverge et c'est bien la dérivée hors du potentiel, à droite, qui a un sens physique.

Références

(1) J. Blatt, V. Weisskopf, Theoretical Nuclear Physics, Wiley, 2<sup>ème</sup> ed., 1963  
(2) K. Huang, Statistical Mechanics, Wiley, 1987 et références en  
(3) K. Huang, C. Yang, Phys. Rev. 105, 767 (1957)  
(4) F. Laloe, Calcul non publié

## 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'interagiraient 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  $\varphi$  qui, à chaque  $\varphi$ , 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 $\langle \psi | H | \psi \rangle$

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

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

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

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

Contribution du terme d'interaction

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

### 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 de 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  $\delta \varphi$  et  $\delta \varphi^*$ . Comme on peut faire varier indépendamment  $\text{Re} \delta \varphi$  et  $\text{Im} \delta \varphi$ , il est possible de considérer  $\delta \varphi$  et  $\delta \varphi^*$  comme des variations indépendantes. L'équation (5.7) donne:

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

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  $\varphi^*$  dans (5.6). La variation de  $\varphi^*$  donne donc 2 termes qui se révèlent être égaux par permutation des variables muettes  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$ .

- Comme  $\delta \varphi^*$  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

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

c. Remplacement du vrai potentiel d'interaction par  $V_{\text{pseudo}}$

- 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  $V_{\text{pseudo}}$  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  $V_{\text{pseudo}}$  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  $V_{\text{pseudo}}$  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 qu'on suppose  $N \gg 1$ , on obtient

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

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

- 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 $\lambda$

- 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  $V\delta$ )

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

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

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

Dans la dernière ligne de (5.18),  $\partial \varphi / \partial N$  est la variation  $\delta \varphi$  de  $\varphi$  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  $\varphi$  de  $\delta \varphi$ . Mais  $\varphi$  est obtenu précisément en écrivant que  $E[\varphi]$  est stationnaire pour toute variation  $\delta \varphi$  de  $\varphi$ . On a donc pour la solution  $\varphi$  de (5.12)  $\delta E / \delta \varphi = 0$  et la 3<sup>ème</sup> 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<sup>ème</sup> ligne est remplacée par 0), on constate que  $\lambda = \partial E[\varphi] / \partial N$ , à la limite  $N \gg 1$  où  $N - \frac{1}{2} \approx N - 1 \approx N$ .

$\lambda$  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  $\mu$  [voir Eq. (2.38) du cours 97-98]

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



En remplaçant  $\lambda$  par  $\mu$  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  $E_{int}$

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

b - Expression du potentiel chimique

- En remplaçant dans (5.19)  $\lambda$  par  $\mu$  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  $p_0$  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  $\varphi$ , mais que cette modification de  $\varphi$  ne change pas  $E[\varphi]$  au 1<sup>er</sup> 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  $\varphi$  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  $\nu$  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,  $\tilde{E}_{piège}^x$ , peut être calculée en fonction de l'ancienne

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

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

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

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

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

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

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

Comme  $E[\varphi]$  est stationnaire autour de  $\varphi$  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

$$2E_{cin}^x - 2E_{piège}^x + E_{int} = 0 \tag{5.36}$$

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

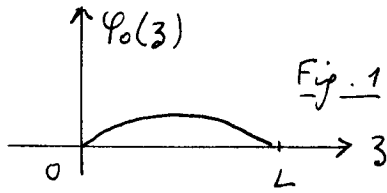
$$2E_{cin} - 2E_{piège} + 3E_{int} = 0 \tag{5.37}$$

#### 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  $T = 0^{\circ}K$ . 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  $z = L$ .

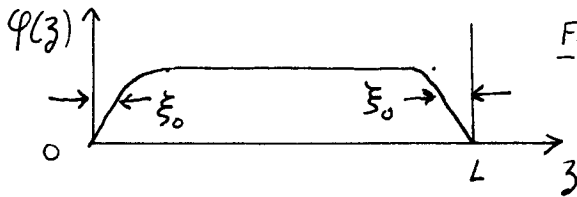
- En l'absence d'interactions, toutes les particules sont dans l'état fondamental de la boîte. Le long de l'axe Oz, la fonction d'onde  $\varphi_0(z)$  s'écrit :



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

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  $\xi_0$  au bout de laquelle  $\varphi(z)$ , partant de 0 en  $z=0$  ou  $z=L$ , atteint une valeur constante.

La longueur  $\xi_0$  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 $E_{int}^0$

- 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

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

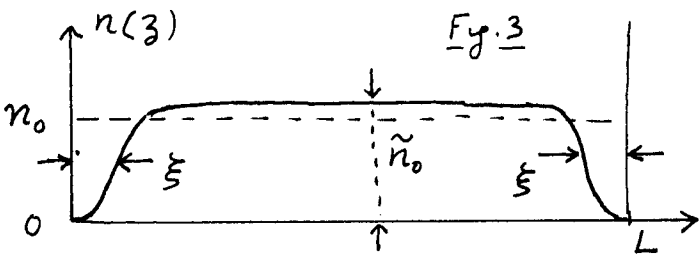
$$E_{int} - E_{int}^0 = \frac{1}{2} g \int d^3r [n^2(\vec{r}) - n_0^2] = \frac{1}{2} g \int d^3r [n(\vec{r}) - n_0]^2 > 0 \quad (5.42)$$

### 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 tireté 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  $\xi$ . Quelle est la valeur optimale  $\xi_0$  de  $\xi$  qui minimise  $E[\varphi]$ ? Ici  $E[\varphi]$  se réduit à  $E_{cin} + E_{int}$  puisque  $E_{pot}$  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  $\xi$  aussi grand que possible. Mais les particules enlevées dans les zones de largeur  $\xi$  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  $\xi$  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  $\xi$  et on conçoit qu'il existe une valeur optimale  $\xi_0$  de  $\xi$  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  $\xi$ , 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)
 
$$E_{int} \approx \frac{1}{2} g S \int_0^L n^2(z) dz \approx \frac{1}{2} g S (L - 2\xi) \tilde{n}_0^2$$

$$\approx \frac{1}{2} g S L n_0^2 \left(1 - \frac{2\xi}{L}\right) \left(1 + \frac{2\xi}{L}\right)^2 \approx E_{int}^0 + g S n_0^2 \xi \quad (5.46)$$

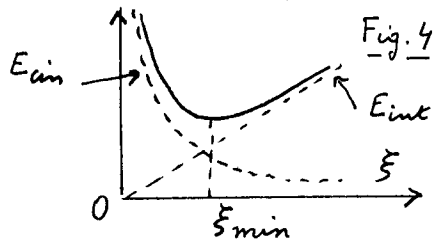
V-10]

Value optimale  $\xi_0$  de  $\xi$

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  $\xi_{\text{min}} = \sqrt{2} \xi_0$

$$\text{ou} \quad \xi_0 = \frac{1}{\sqrt{8\pi a n_0}} \quad (5.49)$$

$\xi_0$  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  $\varphi$  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 
$$\zeta = \frac{z}{\xi_0} \quad (5.53)$$

où  $\xi_0$  est donné en (5.49), on peut récrire (5.52) sous la forme

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

On vérifie aisément que

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

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  $\xi_0$ .

### 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.

## Structure du condensat dans un piège harmonique

### ① Introduction

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

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

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

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

### ② Etude des diverses énergies caractéristiques

#### a - Calcul simple d'ordres de grandeur

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

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

$w$  est un paramètre sans dimension

Energie cinétique  $E_{cin}$ 

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

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

Energie de piégeage  $E_{piège}$ 

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

Energie d'interaction:  $E_{int}$ 

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

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

et une énergie d'interaction

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

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

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

b - Calcul variationnel plus précis

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

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

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

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

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

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

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



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

### c - Paramètre sans dimension caractérisant les interactions

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

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

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

- Si  $\chi \ll 1$  le dernier terme de (6.11) est négligeable par rapport aux 2 premiers au voisinage des valeurs de  $w$  (c'est à dire de  $\mathbb{R}$ ) qui minimisent la somme de ces 2 termes. On peut alors négliger les interactions en première approximation.

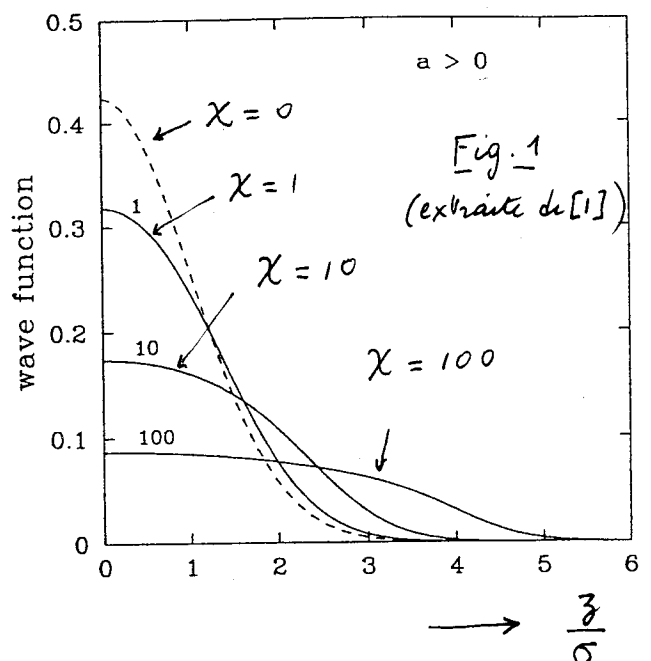
- Si  $\chi \gg 1$ , le dernier terme de (6.11) est prépondérant au voisinage de  $w=1$ . Les interactions jouent un rôle essentiel. Il faut déterminer l'éventuel nouveau minimum de (6.11) en distinguant les cas  $a > 0$  (interactions effectives répulsives) et  $a < 0$  (interactions effectives attractives).

### ③ Cas des longueurs de diffusion positives

#### a - Existence d'un condensat stable pour toute valeur de $\chi$

- Les 1<sup>er</sup> et le 3<sup>ème</sup> termes de (6.11) sont des fonctions positives et décroissantes de  $w$ , alors que le 2<sup>ème</sup> terme est une fonction croissante. Il existe donc toujours une valeur de  $w$  qui minimise  $E_{\text{total}}$ .

- Une telle prédiction est vérifiée par une résolution numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii. Voir Fig. 1 (extraite de [1]) qui donne l'évolution de  $\varphi(z)$  pour des valeurs croissantes de  $\chi$



VI-4

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$l \approx R N^{-1/3} \tag{6.15}$$

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

$$\frac{a}{l} < \frac{a}{\sigma} N^{1/3} \tag{6.16}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

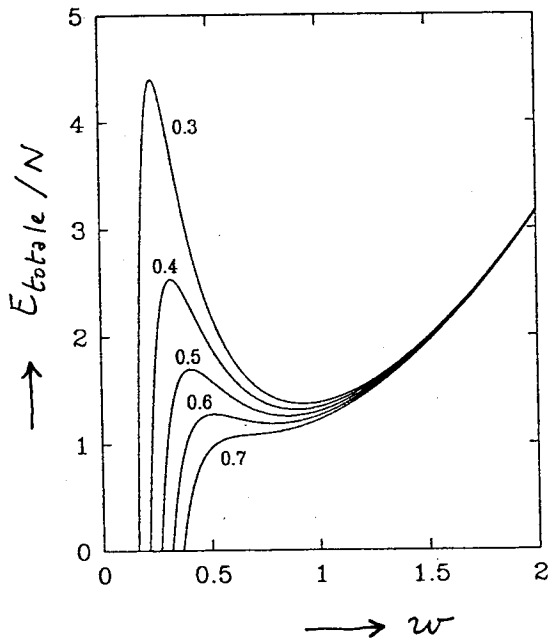


Fig. 2 (extraite de [1]) les chiffres indiqués auprès de chaque courbe sont les valeurs correspondantes de  $\chi$

## b - Condition de stabilité - Régime critique.

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

$$\frac{1}{N\hbar w_0} \frac{dE_{\text{rotale}}}{dw} = 0 \quad \frac{1}{N\hbar w_0} \frac{d^2 E_{\text{rotale}}}{dw^2} = 0 \quad (6.19)$$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{6}{4} w_{\text{crit}}^{-3} + \frac{6}{4} w_{\text{crit}} + \frac{3}{\sqrt{2\pi}} \chi_{\text{crit}} w_{\text{crit}}^{-4} = 0 \\ \frac{18}{4} w_{\text{crit}}^{-4} + \frac{6}{4} - \frac{12}{\sqrt{2\pi}} \chi_{\text{crit}} w_{\text{crit}}^{-5} = 0 \end{array} \right. \quad (6.20.a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{6}{4} w_{\text{crit}}^{-3} + \frac{6}{4} w_{\text{crit}} + \frac{3}{\sqrt{2\pi}} \chi_{\text{crit}} w_{\text{crit}}^{-4} = 0 \\ \frac{18}{4} w_{\text{crit}}^{-4} + \frac{6}{4} - \frac{12}{\sqrt{2\pi}} \chi_{\text{crit}} w_{\text{crit}}^{-5} = 0 \end{array} \right. \quad (6.20.b)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

(voir Ref [2]), on trouve que l'équation de G-P n'a plus de solutions. La valeur exacte (6.23) de  $\chi_{\text{crit}}$  n'est pas trop éloignée de la valeur approchée (6.22).

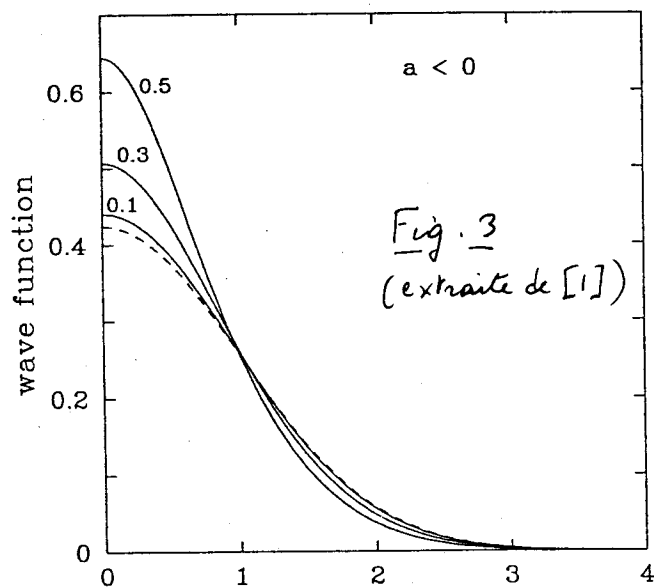


Fig. 3  
(extraite de [1])

→ 3/6

## ⑤ Limite de Thomas-Fermi ( $a > 0$ )

VI-7

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

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

Forme du condensat

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

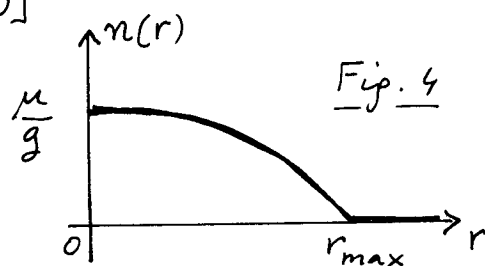
$$\frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2 \varphi(\vec{r}) + N g [\varphi(\vec{r})]^3 = \mu \varphi(\vec{r}) \quad (6.24)$$

- On en déduit

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

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

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



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

b - Potentiel chimique  $\mu$  et énergie totale par particule

- La condition de normalisation de  $\varphi$

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

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

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

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

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

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

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

Comme  $\omega_0, a, \sigma$  ne dépendent pas de  $N$ , on déduit alors par intégration de (6.29)

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

et par suite pour l'énergie totale par particule

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

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

#### d - Energie libérée après coupure brutale du piège

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### f. Densité au centre du condensat

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

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

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

### Références

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



## Bosons en interaction dans une boîte Transformation de Bogolubov

### ① Introduction

- Dans les 2 cours précédents V et VI, on s'est intéressé uniquement à l'état fondamental d'un système de  $N$  bosons piégés à  $T = 0^\circ \text{K}$ . De plus, cet état fondamental a été déterminé de manière approchée à partir d'une méthode variationnelle qui décrit le mouvement de chaque particule dans le champ moyen créé par les  $N-1$  autres et qui néglige les corrélations entre particules; les fonctions d'essai sont des fonctions produits.
- Ce cours VII présente une approche plus élaborée, l'approche de Bogolubov. Cette approche fournit des informations plus précises sur l'état fondamental, en particulier sur les corrélations qui existent dans cet état. Elle donne également 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. Nous commencerons donc par étudier ce cas. Nous aborderons ensuite le problème des excitations élémentaires d'un gaz de bosons piégés dans un potentiel harmonique.
- Nous supposons, comme dans les cours précédents, que les atomes interagissent par un potentiel  $V(r)$  ne dépendant pas de leur distance et nous ignorons les collisions à 3 corps. La plupart des expressions sont écrites en supposant  $V(r)$  quelconque et traitable à l'approximation de Born. Si cette approximation n'est pas valable pour  $V(r)$ , il faut remplacer  $V(r)$  par le pseudopotentiel  $V_{\text{pseudo}}$  de même longueur de diffusion (cf cours IV). La plupart du temps, on peut d'ailleurs remplacer  $V_{\text{pseudo}}$  par un potentiel en fonction

delta  $V_g$ , car les 2 opérateurs ont les mêmes éléments de matrice entre fonctions d'onde n'ayant pas de comportement singulier en  $r=r'$ . Des précautions sont cependant nécessaires quand apparaissent des problèmes de convergence non uniforme (voir cours IV).

- Nous supposons ici que la longueur de diffusion  $a$  du potentiel est positive. Contrairement à ce qui se passe dans un piège, le gaz de bosons ne serait pas stable en présence d'interactions effectives attractives caractérisées par une longueur de diffusion  $a < 0$ .

## ② Hamiltonien du système en seconde quantification

- Comme nous supposons ici  $V_{ext}(\vec{r}) = 0$ , le Hamiltonien  $H$  du système s'écrit dans le formalisme usuel :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (7.1)$$

Les particules sont numérotées.  $H$  est complètement symétrique.

- Dans le formalisme de la seconde quantification, on travaille dans un espace de Fock où les états de base du système sont repérés par les nombre d'occupation  $n_\alpha, n_\beta \dots$  d'une base d'états individuels  $\varphi_\alpha, \varphi_\beta \dots$ . Les opérateurs du système s'expriment comme des sommes de produits d'opérateurs d'annihilation  $a_\alpha, a_\beta \dots$  détruisant une particule dans l'état  $\varphi_\alpha, \varphi_\beta \dots$  et d'opérateurs de création  $a_\alpha^+, a_\beta^+ \dots$  créant une particule dans ces états. Les propriétés de symétrie des états imposées par le postulat de symétrisation entraînent des relations de commutation pour les  $a$  et  $a^+$

$$[a_\alpha, a_\beta^+] = \delta_{\alpha\beta} \quad (7.2)$$

tous les autres commutateurs étant nuls

- Ainsi, tout opérateur à 1 particule (somme symétrique d'opérateurs à 1 particule) de la forme

$$F = \sum_{i=1}^N f(i) \quad (7.3)$$

devient en seconde quantification

$$F = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} a_{\beta}^+ a_{\alpha} \langle \varphi_{\beta} | f | \varphi_{\alpha} \rangle \quad (7.4)$$

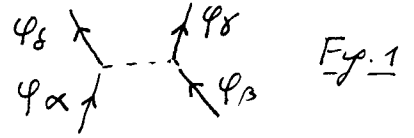
Tout opérateur à 2 particules de la forme

$$G = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} g(i, j) \quad (7.5)$$

avec  $g(i, j) = g(j, i)$ , devient

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \sum_{\delta} a_{\delta}^{\dagger} a_{\gamma}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha} \langle \delta \gamma | g | \beta \alpha \rangle \quad (7.6)$$

où  $\langle \delta \gamma | g | \beta \alpha \rangle$  est l'élément de matrice de  $g$  entre les états représentés sur la figure 1



- Notons que dans (7.4) or (7.6), tout numéro de particule (non physique) a disparu et que les sommations portent sur les états individuels  $\alpha, \beta, \dots$  et non plus sur les numéros.

- Appliquons maintenant un tel formalisme à l'opérateur  $H$  écrit en (7.1).

Terme d'énergie cinétique

- L'opérateur  $\vec{p}^2/2m$  individuel est diagonal dans une base d'ondes planes.
- Nous prendrons des conditions aux limites périodiques dans une boîte de côté  $L$ . Les états de base  $|\vec{k}\rangle$  sont donc décrits par les fonctions d'onde normalisées

$$\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (7.7)$$

où les composantes  $k_{x,y,z}$  de  $\vec{k}$  sont de la forme

$$k_{x,y,z} = \frac{2\pi}{L} n_{x,y,z} \quad (7.8)$$

$n_{x,y,z}$  étant un entier  $\geq 0$ .

- Dans cette base, l'opérateur d'énergie cinétique (1<sup>er</sup> terme du second membre de (7.1)) s'écrit, compte tenu de (7.4)

$$H_{cin} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} \quad (7.9)$$

Terme d'interaction - Potentiel  $V(r)$  quelconque

- Dans la base de l'opérateur position  $\{|\vec{r}\rangle\}$ , le dernier terme de (7.1) devient en seconde quantification

$$H_{int} = \frac{1}{2} \iint d^3r d^3r' \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}') V(\vec{r}-\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}') \quad (7.10)$$

où  $\hat{\psi}(\vec{r})$  [resp.  $\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r})$ ] est l'opérateur de destruction [resp. de création] d'une particule au point  $\vec{r}$ .

-  $\hat{\psi}(\vec{r})$  et  $\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r})$  se développent sur les  $a_{\vec{k}}$  et  $a_{\vec{k}}^{\dagger}$

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} a_{\vec{k}} \quad (7.11)$$

$$\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{L^{3/2}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} a_{\vec{k}}^{\dagger} \quad (7.12)$$

- Reportons (7.11) et (7.12) dans (7.10), et introduisons les variables

$$\vec{R} = \frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2} \quad \vec{s} = \vec{r} - \vec{r}' \quad (7.13)$$

L'invariance par translation de  $V$  qui ne dépend que de  $s = |\vec{s}|$  entraîne que le produit des 4 opérateurs apparaissant dans (7.6)  $a_{\vec{k}_4}^+ a_{\vec{k}_3}^+ a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}$  est tel que  $\vec{k}_3 + \vec{k}_4 = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$ . L'intégration sur  $\vec{R}$  fait en effet apparaître  $\delta_{\vec{k}_3 + \vec{k}_4 - \vec{k}_1 - \vec{k}_2}$  qui traduit la conservation de l'impulsion globale. Reste l'intégration sur  $\vec{s}$  qui fait apparaître la transformée de Fourier spatiale de  $V$

$$\tilde{V}(\vec{k}) = \int d^3s e^{-i\vec{k} \cdot \vec{s}} V(s) \quad (7.14)$$

Finalement, on obtient pour  $H_{int}$

$$H_{int} = \frac{1}{2L^3} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}} \tilde{V}(\vec{k}) a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ a_{\vec{k}_2 + \vec{k}} a_{\vec{k}_1 - \vec{k}} \quad (7.15)$$

### Terme d'interaction - Pseudopotentiel

- L'équation (7.10) s'écrit maintenant, compte tenu de la définition (4.22) de  $V_{pseudo}$

$$H_{int} = \frac{1}{2} g \iint d^3r d^3r' \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}^+(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\partial}{\partial s} [s \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r})] \quad (7.16)$$

où  $s = |\vec{r} - \vec{r}'|$

- Comme plus haut, reportons (7.11) et (7.12) dans (7.16). Passons des variables  $\vec{r}, \vec{r}'$  aux variables  $\vec{R}, \vec{s}$  écrites en (7.13). L'intégration sur  $\vec{R}$  fait apparaître la conservation de l'impulsion globale. On obtient alors

$$H_{int} = \frac{1}{2L^3} g \int d^3s \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ \delta(\vec{s}) \left[ \frac{\partial}{\partial s} s \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}_2 + \vec{k}} a_{\vec{k}_1 - \vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{s}} \right] \quad (7.17)$$

Lors de l'intégration sur  $s$ , la présence de  $\delta(\vec{s})$  entraîne qu'il faut prendre la valeur du crochet en  $s=0$  et l'on obtient finalement

$$H_{int} = \frac{1}{2L^3} g \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ \left[ \frac{\partial}{\partial s} s \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{s}} a_{\vec{k}_2 + \vec{k}} a_{\vec{k}_1 - \vec{k}} \right]_{s=0} \quad (7.18)$$

- Dans les éléments de matrice de  $H_{int}$ , on tombe sur l'action de  $\frac{\partial}{\partial s} s$  sur des sommes de fonctions de  $s$  évaluées en  $s=0$ . Si les développements correspondants sont uniformément convergents, on trouve le même résultat que si l'on avait utilisé  $V_g = g \delta(\vec{r})$  au lieu de  $V_{pseudo}$ , ce qui revient à remplacer  $\tilde{V}(\vec{k})$  par  $g$  dans (7.15). Sinon, les 2 résultats sont différents et, seuls, ceux obtenus avec  $V_{pseudo}$  sont corrects (cf cours IV).

### ③ Calcul perturbatif habituel

Dans ce paragraphe, nous utilisons la théorie des perturbations pour étudier l'effet de  $H_{int}$  sur l'état fondamental du système et sur le 1<sup>er</sup> état excité. Nous verrons qu'il est impossible d'obtenir ainsi les excitations élémentaires du système, mais certains résultats obtenus nous seront utiles pour la suite.

#### a - Calcul du 1<sup>er</sup> ordre

##### Déplacement de l'état fondamental

- L'état fondamental non perturbé correspond à une situation où les  $N$  particules sont toutes dans l'état fondamental individuel  $\vec{k} = \vec{0}$  (fonction d'onde uniforme égale à  $1/\sqrt{L^3}$ ) d'énergie nulle. Nous noterons un tel état

$$|0\rangle = |n_0 = N\rangle \quad (7.19)$$

Seuls les nombres d'occupation non nuls (ici le nombre d'occupation  $n_0$  de l'état  $\vec{k} = \vec{0}$ ) sont indiqués

- Le déplacement d'ordre 1 de cet état est donné par

$$\delta E_0^{(1)} = \langle 0 | H_{int} | 0 \rangle \quad (7.20)$$

Dans le développement (7.15) de  $H_{int}$ , le seul terme qui intervient est  $\frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} a_0^+ a_0^+ a_0 a_0$ . En utilisant  $a_0 |n_0\rangle = \sqrt{n_0} |n_0-1\rangle$ , on obtient

$$\delta E_0^{(1)} = \frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} N(N-1) \quad (7.21)$$

- Comme il n'y a pas ici de somme sur  $k$ , les éléments de matrice de  $V_{pseudo}$  sont égaux à ceux de  $V_g = g \delta(\vec{r})$  et on obtient, en notant que  $\tilde{V}_g(0) = g$

$$\delta E_0^{(1)} = \frac{g}{2L^3} N(N-1) \approx \frac{g N^2}{2L^3} = \frac{N}{2} g \rho \quad (7.22)$$

où  $\rho = N/V$  est la densité de particules.

##### Déplacement du 1<sup>er</sup> état excité

- En supposant les 3 côtés de la boîte inégaux, le 1<sup>er</sup> état excité

$$|1\rangle = |n_0 = N-1, n_1 = 1\rangle \quad (7.23)$$

n'est pas dégénéré et son déplacement au 1<sup>er</sup> ordre vaut

$$\delta E_1^{(1)} = \langle 1 | \text{Hint} | 1 \rangle \quad (7.24)$$

Ici 5 termes de Hint interviennent dans l'élément de matrice:  
 $a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 \tilde{V}(0)/2L^3$ ,  $a_0^+ a_1^+ a_1 a_0 \tilde{V}(0)/2L^3$ ,  $a_1^+ a_0^+ a_0 a_1 \tilde{V}(0)/2L^3$ ,  
 $a_1^+ a_0^+ a_1 a_0 \tilde{V}(\vec{k}_1 - \vec{k}_0)/2L^3$ ,  $a_0^+ a_1^+ a_0 a_1 \tilde{V}(\vec{k}_0 - \vec{k}_1)/2L^3$

A cause de la symétrie sphérique de  $V$ ,  $\tilde{V}(\vec{k}) = \tilde{V}(-\vec{k})$ . De plus, à la limite  $L \rightarrow \infty$ ,  $\tilde{V}(\vec{k}_1 - \vec{k}_0) \rightarrow \tilde{V}(0)$ . Les 5 termes précédents sont tous proportionnels à  $\tilde{V}(0)/2L^3$  avec des coefficients qui valent respectivement  $(N-1)(N-2)$ ,  $N-1$ ,  $N-1$ ,  $N-1$ ,  $N-1$ . On obtient finalement

$$\delta E_1^{(1)} = \frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} [N(N-1) + 2(N-1)] \simeq \delta E_0^{(1)} + \frac{N}{L^3} \tilde{V}(0) \quad (7.25)$$

Pour  $V_g$  ou  $V_{\text{pseudo}}$ ,  $\delta E_1^{(1)}$  se réduit à

$$\delta E_1^{(1)} = \delta E_0^{(1)} + g \frac{N}{V} = \delta E_0^{(1)} + g \rho \quad (7.26)$$

- Il apparaît ainsi un écart ("gap") égal à  $g\rho$  entre les 2 corrections du 1<sup>er</sup> ordre à  $E_0$  et  $E_1$ , qui reste fini quand  $N \rightarrow \infty$ ,  $V \rightarrow \infty$  avec  $\rho = N/V$  constant, alors que l'écart entre les énergies non perturbées  $\rightarrow 0$ . Un tel résultat montre clairement que la théorie des perturbations aux ordres les plus bas n'est pas valable puisque les corrections en énergie sont supérieures aux écarts entre énergies non perturbées. L'approche de Bogolubov exposé plus loin revient à diagonaliser exactement  $H = H_0 + \text{Hint}$  dans un sous-espace avec certaines approximations effectuées sur les éléments de matrice de Hint. Avant d'exposer cette méthode, nous allons encore calculer le déplacement au 2<sup>em</sup> ordre de l'état fondamental car certains résultats relatifs à l'utilisation de  $V_{\text{pseudo}}$  nous seront utiles plus loin.

## b - Déplacement de l'état fondamental au 2<sup>em</sup> ordre

### Etats auxquels l'état fondamental est couplé

- A cause de la conservation de l'impulsion globale, les seuls états auxquels l'état fondamental  $|0\rangle$  est couplé sont les états où 2 particules ont disparu de l'état  $\vec{k} = \vec{0}$  pour être remplacées par une paire  $\vec{k}, -\vec{k}$ . Nous noterons l'état correspondant  $|\vec{k}, -\vec{k}\rangle$

$$|\vec{k}, -\vec{k}\rangle = |n_0 = N-2, n_{\vec{k}} = 1, n_{-\vec{k}} = 1\rangle \quad (7.27)$$

- Dans les sommations sur les états  $|\vec{k}, -\vec{k}\rangle$ , il suffit de sommer sur  $\vec{k}$  variant dans un  $1/2$  espace. Sinon, on compterait 2 fois le même état puisque  $|\vec{k}, -\vec{k}\rangle = |-\vec{k}, \vec{k}\rangle$ . Nous noterons une telle somme  $\sum_{\vec{k}}^{1/2}$  (le terme  $\vec{k}=\vec{0}$  étant exclu)

- Dans le calcul de  $\langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle$ , les seuls termes de (7.15) qui contribuent sont [en utilisant  $\tilde{V}(\vec{k}) = \tilde{V}(-\vec{k})$ ]:

$$\frac{\tilde{V}(\vec{k})}{2L^3} [a_{-\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}^+ a_0 a_0 + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ a_0 a_0] \quad (7.28)$$

On en déduit que

$$\langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle = \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{L^3} \sqrt{N(N-1)} \quad (7.29)$$

- L'absence de singularité en  $\vec{r}=\vec{r}'$  entraîne que les éléments de matrice de  $H_{int}$  écrits avec  $V_g$  ou  $V_{pseudo}$  sont égaux à

$$\langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle_g = \langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle_{pseudo} = \frac{g}{L^3} \sqrt{N(N-1)} \quad (7.30)$$

- La correction au 1<sup>er</sup> ordre à  $|0\rangle$  s'écrit donc

$$|\psi_0^{(1)}\rangle = \sum_{\vec{k}}^{1/2} |\vec{k}, -\vec{k}\rangle \frac{\langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle}{E_0 - E_{\vec{k}, -\vec{k}}} \quad (7.31)$$

Comme  $E_0 - E_{\vec{k}, -\vec{k}} = 0 - 2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 k^2}{m}$ , on déduit de (7.29) et (7.31)

$$|\psi_0^{(1)}\rangle = - \sum_{\vec{k}}^{1/2} \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{L^3} \frac{m}{\hbar^2} \sqrt{N(N-1)} \frac{1}{k^2} |\vec{k}, -\vec{k}\rangle \quad (7.32)$$

$\tilde{V}(\vec{k})$  étant remplacé par  $g$  quand on utilise  $V_g$  ou  $V_{pseudo}$

Calcul du déplacement pour un potentiel  $V(r)$

$$\delta E_0^{(2)} = \sum_{\vec{k}}^{1/2} \frac{|\langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle|^2}{E_0 - E_{\vec{k}, -\vec{k}}} \quad (7.33)$$

En utilisant (7.29) et en remplaçant  $\sum_{\vec{k}}^{1/2}$  par  $\frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}}$ , on obtient

$$\delta E_0^{(2)} = - \frac{N(N-1)m}{2\hbar^2 L^6} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{|\tilde{V}(\vec{k})|^2}{k^2} \quad (7.34)$$

Si  $\tilde{V}(\vec{k})$  tend suffisamment vite vers 0 quand  $k \rightarrow \infty$ , la somme sur  $\vec{k} \neq \vec{0}$  converge.

Calcul du déplacement pour un potentiel  $V_g = g\delta(\vec{r})$

On a alors  $\tilde{V}(\vec{k}) = g$  et

$$\delta E_0^{(2)} = - \frac{N(N-1)m g^2}{2\hbar^2 L^6} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{k^2} = \infty \quad (7.35)$$

### Calcul des déplacements pour $V_{\text{pseudo}}$

- Il faut alors partir de (7.32) avec  $\tilde{v}(k)$  remplacé par  $g$  et de

$$\delta E_0^{(2)} = \langle 0 | \text{Hint} | \Psi_0^{(1)} \rangle \quad (7.36)$$

- Les seuls termes de (7.18) qui interviennent dans (7.36) sont

$$\frac{g}{2L^3} \left\{ a_0^+ a_0^+ \left[ \frac{\partial}{\partial s} s e^{-i\vec{k}\cdot\vec{s}} a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ \right]_{s=0} + a_0^+ a_0^+ \left[ \frac{\partial}{\partial s} s e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}} a_{-\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}^+ \right]_{s=0} \right\} \quad (7.37)$$

- Faisons agir (7.37) sur  $|\Psi_0^{(1)}\rangle$  et projetons sur  $\langle 0 |$ .

On obtient

$$\delta E_0^{(2)} = - \frac{N(N-1)mg^2}{2k^2 L^6} \left[ \frac{\partial}{\partial s} s \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}}}{k^2} \right]_{s=0} \quad (7.38)$$

- Comme nous l'avons expliqué dans le cours IV, il faut, à cause de problèmes de convergence non uniforme, effectuer la somme sur  $\vec{k}$  dans (7.38) avant de faire agir  $\frac{\partial}{\partial s} s$ .

A la limite  $L \rightarrow \infty$ , on peut remplacer les sommes discrètes sur  $\vec{k}$  par des intégrales

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3k \quad (7.39)$$

Par ailleurs, comme l'intégrand de  $\int d^3k \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}}}{k^2}$  ne diverge pas en  $k=0$ , on peut s'affranchir de la restriction  $\vec{k} \neq \vec{0}$  figurant dans 7.38 et utiliser

$$\int d^3k \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}}}{k^2} = \frac{(2\pi)^3}{4\pi s} \quad (7.40)$$

On voit apparaître alors

$$\left[ \frac{\partial}{\partial s} s \frac{1}{s} \right]_{s=0} = 0 \quad (7.41)$$

ce qui montre que le déplacement au 2<sup>ème</sup> ordre de l'état fondamental calculé avec  $V_{\text{pseudo}}$  est nul.

- Dans la suite de ce cours, nous effectuerons la plupart des temps les calculs avec  $V_S$  car ils sont plus simples. Cependant, quand nous rencontrerons des expressions divergentes comme (7.35), nous les remplacerons par 0 car nous venons de voir qu'un calcul correct avec  $V_{\text{pseudo}}$  donne un résultat nul.



## ④ L'approche de Bogolubov

### a - Principe de la démarche

- En l'absence d'interactions, l'état fondamental d'un gaz parfait de bosons correspondrait à une situation où tous les atomes seraient dans l'état  $\vec{k} = \vec{0}$  :  $n_0 = N$ ,  $n_k = 0$  si  $k \neq 0$ . En présence d'interactions, et si le gaz est suffisamment dilué pour que l'effet des interactions ne soit pas trop fort, on s'attend à ce que, dans l'état fondamental et les premiers états excités du système,  $n_0$  reste macroscopique, de l'ordre de  $N$ , et très grand devant tous les autres  $n_k$  avec  $k \neq 0$ .
- La méthode de Bogolubov consiste à se restreindre à un sous-espace  $\tilde{E}$  d'états caractérisés par  $n_0$  de l'ordre de  $N$ , tous les autres  $n_k$  étant de l'ordre de quelques unités, puis à simplifier l'expression de  $H$  en ne gardant que les termes d'ordre 1 en  $\epsilon = \sum_{k \neq 0} n_k / N$ . On obtient alors un Hamiltonien effectif  $H_{\text{eff}}$  suffisamment simple pour pouvoir être diagonalisé exactement.

### b - Détermination de $H_{\text{eff}}$

Action de  $a_0$  sur les états du sous-espace  $\tilde{E}$

$$a_0 |\{n_k\}\rangle = \sqrt{N - \sum_{k \neq 0} n_k} |\{n_k - \delta_{k0}\}\rangle \approx \sqrt{N} |\{n_k - \delta_{k0}\}\rangle \quad (7.42)$$

Les éléments de matrice de  $a_0$  (de même que ceux de  $a_0^+$ ) sont donc de l'ordre de  $\sqrt{N} \gg 1$ . Parmi les divers termes de (7.15) il est donc légitime de ne garder que ceux contenant 4  $a_0$  (ou  $a_0^+$ ), ou 2  $a_0$  (ou  $a_0^+$ ). Il n'y a pas de terme contenant 3  $a_0$  (ou  $a_0^+$ ) à cause de la conservation de l'impulsion globale. Nous négligerons les termes ne contenant qu'un  $a_0$  (ou  $a_0^+$ ), ou aucun. Enfin, dans les termes conservés, nous remplacerons  $a_0$  et  $a_0^+$  par  $\sqrt{N}$  (voir toutefois ci-dessous pour le terme à 4 opérateurs  $a_0$  ou  $a_0^+$ )

Terme contenant 4  $a_0$  ou  $a_0^+$

$$\frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} a_0^+ a_0^+ a_0 a_0, \text{ de l'ordre de } \frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} N^2 \quad (7.43)$$

Comme ce terme est très important il est important de le calculer plus précisément et de tenir compte de la différence entre  $N$  et le nombre d'occupation  $n_0$  de l'état  $\vec{k} = \vec{0}$ . Pour cela, on écrit

$$a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 = a_0^+ (a_0 a_0^+ - 1) a_0 = (a_0^+ a_0)^2 - (a_0^+ a_0) \quad (7.44)$$

$$a_0^+ a_0 = \hat{N}_0 = N - \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k \quad (7.45)$$

$$(a_0^+ a_0)^2 = \left( N - \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k \right)^2 \approx N^2 - 2N \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k \quad (7.46)$$

$$a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 \approx N^2 - 2N \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k - N = N(N-1) - 2N \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k \quad (7.47)$$

de sorte que finalement

$$\frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 = \frac{1}{2} \rho (N-1) \tilde{V}(0) - \rho \tilde{V}(0) \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k \quad (7.48)$$

où 
$$\rho = \frac{N}{L^3} = \frac{N}{V} \quad (7.49)$$

est la densité de particules (qu'on note  $\rho$ , et non plus  $n_0$ , pour ne pas la confondre avec le nombre d'occupation  $n_0$  de l'état  $\vec{k} = \vec{0}$ ).

Termes contenant  $2a_0$  ou  $a_0^+$

$$a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ a_0 a_0 \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ \tilde{V}(\vec{k}) \quad (7.50.a)$$

$$a_0^+ a_0^+ a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \tilde{V}(\vec{k}) \quad (7.50.b)$$

$$a_{\vec{k}}^+ a_0^+ a_{\vec{k}} a_0 \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \tilde{V}(\vec{k}) \quad (7.50.c)$$

$$a_0^+ a_{-\vec{k}}^+ a_0 a_{-\vec{k}} \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{-\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} \tilde{V}(\vec{k}) \quad (7.50.d)$$

$$a_0^+ a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} a_0 \frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \tilde{V}(0) \quad (7.50.e)$$

$$a_{\vec{k}}^+ a_0^+ a_0 a_{\vec{k}} \frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \tilde{V}(0) \quad (7.50.f)$$

### Récapitulation

Ajoutons les 6 termes (7.50) à (7.48). Les 2 termes (7.50.e) et (7.50.f) se simplifient avec le dernier terme de (7.48) et on obtient finalement (en n'oubliant pas le terme Han écrit en (7.9) et en remplaçant  $N-1$  par  $N$ )

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2} N \rho \tilde{V}(0) + \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \rho \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \tilde{V}(\vec{k}) \left[ a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \right] \quad (7.51)$$

### C. Diagonalisation de $H_{\text{eff}}$

L'expression (7.51) de  $H_{\text{eff}}$  est une fonction quadratique des  $a_{\vec{k}}$  et  $a_{\vec{k}}^+$  qu'il est possible de mettre sous forme d'une somme de termes  $b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$  où les  $b_{\vec{k}}$  et  $b_{\vec{k}}^+$  sont des combinaisons linéaires des  $a_{\vec{k}}$  et  $a_{\vec{k}}^+$  satisfaisant les mêmes relations de commutation que les  $a_{\vec{k}}$  et  $a_{\vec{k}}^+$ . Les opérateurs  $b_{\vec{k}}$  et  $b_{\vec{k}}^+$  apparaissent alors comme des opérateurs de destruction et de création de "quasiparticule" décrivant les excitations élémentaires du système.

Définitions des opérateurs  $b_{\vec{k}}$  et  $b_{\vec{k}}^+$

$$\begin{cases} b_{\vec{k}} = u_k a_{\vec{k}} + v_k a_{-\vec{k}}^+ \\ b_{-\vec{k}}^+ = u_k a_{-\vec{k}}^+ + v_k a_{\vec{k}} \end{cases} \quad (7.52)$$

où les  $u_k, v_k$  sont des coefficients réels, ne dépendant que de  $k = |\vec{k}|$

- A partir de (7.52) on calcule aisément

$$[b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}}^{\dagger}] = u_k^2 [a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}}^{\dagger}] + v_k^2 [a_{-\vec{k}}, a_{-\vec{k}}] = u_k^2 - v_k^2 \quad (7.53)$$

Si l'on veut que  $b_{\vec{k}}$  et  $b_{\vec{k}}^{\dagger}$  satisfassent les relations de commutation bosoniques, il faut donc imposer

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \quad (7.54)$$

ce qui est réalisé en prenant

$$u_k = \text{ch } \theta_k \quad v_k = \text{sh } \theta_k \quad (7.55)$$

$\theta_k$  sera déterminé ultérieurement.

- L'inversion de (7.52) donne, compte tenu de (7.54)

$$\begin{cases} a_{\vec{k}} = u_k b_{\vec{k}} - v_k b_{-\vec{k}}^{\dagger} \\ a_{-\vec{k}}^{\dagger} = u_k b_{-\vec{k}}^{\dagger} - v_k b_{\vec{k}} \end{cases} \quad (7.56)$$

Expressions de Heff en fonction de  $b_{\vec{k}}$  et  $b_{\vec{k}}^{\dagger}$

- Reexprimons (7.51) en remplaçant partout les  $a_{\vec{k}}$  et  $a_{\vec{k}}^{\dagger}$  par leur expression (7.56) en fonction des  $b_{\vec{k}}$  et  $b_{\vec{k}}^{\dagger}$ . La symétrie sphérique de  $V(r)$  entraîne que  $\tilde{V}(\vec{k})$  ne dépend que de  $k = |\vec{k}|$ . On obtient ainsi après un calcul sans difficulté, l'expression suivante de Heff

$$\begin{aligned} \text{Heff} = & \frac{1}{2} N \rho \tilde{V}(0) + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} v_k^2 + \rho \tilde{V}(k) [v_k^2 - u_k v_k] \right\} \\ & + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (u_k^2 + v_k^2) + \rho \tilde{V}(k) [u_k^2 + v_k^2 - 2u_k v_k] \right\} b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}} \\ & + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} u_k v_k + \frac{\rho}{2} \tilde{V}(k) [-2u_k v_k + u_k^2 + v_k^2] \right\} (b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{-\vec{k}}^{\dagger} + b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}}) \end{aligned} \quad (7.57)$$

Choix de  $\theta_k$  pour obtenir un Hamiltonien d'excitations élémentaires

- Choisissons le paramètre  $\theta_k$  défini en (7.55) de manière à ce que le coefficient de  $(b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{-\vec{k}}^{\dagger} + b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}})$  dans la 3<sup>ème</sup> ligne de (7.57) soit nul

$$-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} u_k v_k + \frac{\rho}{2} \tilde{V}(k) [-2u_k v_k + u_k^2 + v_k^2] = 0 \quad (7.58)$$

L'expression (7.57) de Heff se réduit alors à la première ligne, qui est une constante, et à la 2<sup>ème</sup> ligne, qui est une somme de termes  $b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}}$ , apparaissant comme un Hamiltonien d'excitations élémentaires.

- En remplaçant  $u_k$  et  $v_k$  par  $\text{ch } \theta_k$  et  $\text{sh } \theta_k$  dans (7.58), on obtient l'équation suivante pour  $\theta_k$ , équivalente à (7.58):

$$\text{th } 2\theta_k = \frac{\rho \tilde{V}(k)}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \rho \tilde{V}(k)} \quad (7.59)$$

Quand on utilise  $V_S$  ou  $V_{\text{pseudo}}$ , l'équation (7.59) devient :

$$\tanh 2\theta_k = \frac{8\eta\rho a}{k^2 + 8\eta\rho a} = \frac{k_0^2}{k^2 + k_0^2} \quad (7.60)$$

$$\text{ou } k_0 = \sqrt{8\eta\rho a} = 1/\xi_0 \quad (7.61)$$

$\xi_0$  étant la longueur de relaxation introduite dans le cours V

- Enfin, on peut utiliser (7.59) pour exprimer les diverses quantités  $u_k^2$ ,  $v_k^2$ ,  $u_k v_k$  apparaissant dans (7.57)

$$u_k^2 + v_k^2 = \cosh^2 \theta_k + \sinh^2 \theta_k = \cosh 2\theta_k = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2 2\theta_k}} = \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \rho \tilde{V}(k)}{\sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho \tilde{V}(k) \right)}} \quad (7.62)$$

Comme  $u_k^2 - v_k^2 = 1$ , on en déduit

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \rho \tilde{V}(k)}{\sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho \tilde{V}(k) \right)}} + 1 \right] \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \rho \tilde{V}(k)}{\sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho \tilde{V}(k) \right)}} - 1 \right] \quad (7.63)$$

$$u_k v_k = \cosh \theta_k \sinh \theta_k = \frac{1}{2} \sinh 2\theta_k = \frac{1}{2} \frac{\tanh 2\theta_k}{\sqrt{1 - \tanh^2 2\theta_k}} = \frac{1}{2} \frac{\rho \tilde{V}(k)}{\sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho \tilde{V}(k) \right)}} \quad (7.64)$$

- Les expressions précédentes se simplifient quand on utilise (7.60)

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{k^2 + k_0^2}{\sqrt{k^2(k^2 + 2k_0^2)}} + 1 \right] \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{k^2 + k_0^2}{\sqrt{k^2(k^2 + 2k_0^2)}} - 1 \right] \quad u_k v_k = \frac{1}{2} \frac{k_0^2}{\sqrt{k^2(k^2 + 2k_0^2)}} \quad (7.65)$$

### Expression finale de $H_{\text{eff}}$

- Quand on reporte les expressions (7.63) et (7.64) (ou (7.65)) dans (7.57), on obtient

$$H_{\text{eff}} = E_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} \hbar \omega(k) b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}} \quad (7.66)$$

où  $E_0$  et  $\omega(k)$  sont des fonctions de  $k$  dont les expressions seront données plus loin

-  $H_{\text{eff}}$  apparaît ainsi comme une somme de Hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques, décrivant des excitations élémentaires du gaz de bosons, ou quasiparticules.  $b_{\vec{k}}^{\dagger}$  et  $b_{\vec{k}}$  sont les opérateurs de destruction et de création d'une quasiparticule d'énergie  $\hbar \omega(k)$  et d'impulsion  $\hbar \vec{k}$ . La fonction  $\omega(k)$  n'est autre que la relation de dispersion de ces excitations élémentaires

- L'état fondamental du système est le "vide" des opérateurs  $b_{\vec{k}}$

$$b_{\vec{k}} |\psi_0\rangle = 0 \quad \forall \vec{k} \quad (7.67)$$

$E_0$  est l'énergie de cet état fondamental

- Le contenu physique de ces résultats et la comparaison avec les prédictions des théories de champ moyen seront donnés dans le cours VIII, qui contiendra aussi une liste de références.

Bosons en interaction dans une boîte  
 Transformation de Bogolubov (suite)

 5) Excitations élémentaires du gaz de bosons

 a - Relation de dispersion

Compte tenu de la relation (7.58) qui permet d'annuler la 3<sup>ème</sup> ligne de (7.57), la 2<sup>ème</sup> ligne de (7.57) devient :

$$\sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (u_k^2 + v_k^2 + 2u_k v_k) b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} \quad (8.1)$$

En utilisant les expressions (7.63) et (7.64) de  $u_k^2$ ,  $v_k^2$ ,  $u_k v_k$ , on transforme alors (8.1) en  $\sum_{\vec{k}} \hbar \omega(k) b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$  où

$$\hbar \omega(k) = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho \tilde{V}(k) \right)} \quad (8.2)$$

 b - Quelques repères importants dans l'échelle des valeurs de k.

- Quand k croît de 0 à  $+\infty$ ,  $\tilde{V}(k)$  décroît en général de  $\tilde{V}(0) = 4\pi\hbar^2 a/m$  à 0. La valeur de k au delà de laquelle  $\tilde{V}(k)$  décroît significativement est de l'ordre de  $1/r_e$  où  $r_e$  caractérise la portée du potentiel  $V(r)$ .
- Il existe une autre valeur importante  $k_0$  dans l'échelle des valeurs de k, celle pour laquelle les 2 termes  $\hbar^2 k^2/2m$  et  $\rho \tilde{V}(k)$  sont du même ordre de grandeur

$$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = \rho \tilde{V}(k_0) \quad (8.3)$$

En fait, comme nous allons le vérifier plus loin,  $k_0$  est beaucoup plus petit que  $1/r_e$  où  $r_e$  est la portée du potentiel, de sorte que l'on peut remplacer  $\tilde{V}(k_0)$  par  $\tilde{V}(0) = 4\pi\hbar^2 a/m$  dans (8.3) qui donne alors

$$k_0 = \sqrt{8\pi a \rho} = 1/\xi_0 \quad (8.4)$$

où  $\xi_0$  est la longueur de relaxation introduite dans le cours V.

- Vérifions maintenant que  $k_0 \ll 1/r_e$ , c-à-d que  $\xi_0 \gg r_e$

D'après (8.4)

$$\xi_0 \sim \frac{1}{\sqrt{\rho a}} = \frac{a}{\sqrt{\rho a^3}} \quad (8.5)$$

Nous supposons ici le gaz très dilué, de sorte que

$$\rho a^3 \ll 1 \quad (8.6)$$

On en déduit que  $\xi_0 \gg a$ , de sorte que si  $a$  et  $r_e$  sont du même ordre de grandeur, on a bien  $\xi_0 \gg r_e$

### c - Discussion physique

#### Existence de 2 régimes

- Pour  $k \ll k_0$ , on peut négliger dans la parenthèse de (8.2)  $\hbar^2 k^2 / 2m$  devant  $2\rho \tilde{V}(k)$ , qu'on peut également remplacer par  $2\rho \tilde{V}(0) = 8\pi a \rho \hbar^2 / m$ . On obtient alors

$$\omega(k) = c k \quad (8.7)$$

où

$$c = 2 \frac{\hbar}{m} \sqrt{\pi a \rho} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{m \xi_0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar k_0}{m} \quad (8.8)$$

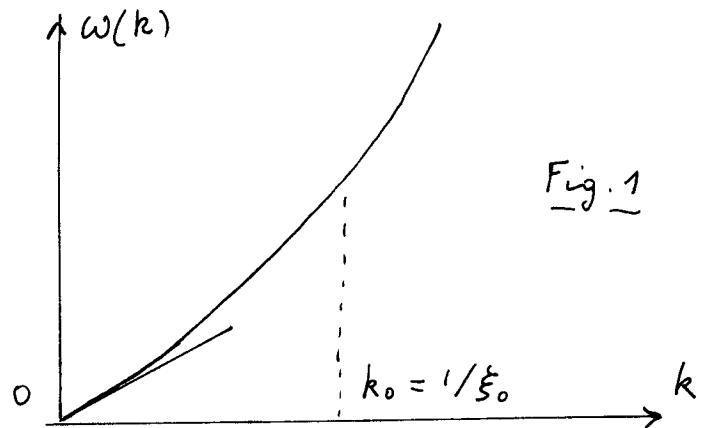
Les excitations élémentaires du gaz de bosons sont alors des phonons, caractérisés par une relation de dispersion linéaire en  $k$ , c'est à dire par une vitesse de propagation  $c$  donnée par (8.8).

- Pour  $k \gg k_0$ , on peut au contraire négliger  $2\rho \tilde{V}(k)$  devant  $\hbar^2 k^2 / 2m$  dans (8.2) qui donne alors

$$\omega(k) = \hbar \frac{k^2}{2m} \quad (8.9)$$

Les excitations élémentaires correspondent alors au spectre d'énergie d'une particule libre de masse  $m$ .

- Ces résultats sont regroupés sur la figure 1 qui donne les variations de  $\omega(k)$  avec  $k$



- Revenons enfin à (7.59). Il apparaît clairement sur cette équation que, pour  $k \ll k_0$ ,  $\tanh 2\theta_k \simeq 1$ , de sorte que  $\theta_k \gg 1$ . On a alors  $u_k = \cosh \theta_k \simeq v_k = \sinh \theta_k$ . D'après (7.52), les excitations élémentaires  $\vec{k}$  sont des superpositions linéaires à poids égaux d'un "trou"  $-\vec{k}$  et d'une particule  $\vec{k}$ .

Par contre quand  $k \gg k_0$ ,  $\tanh 2\theta_k \simeq 0$  de sorte que  $\theta_k \ll 1$ . On a alors  $u_k = \cosh \theta_k \gg v_k = \sinh \theta_k$ . Les excitations élémentaires sont alors pratiquement des états de particule  $\vec{k}$ .

- Il apparaît clairement sur la figure 1 que le spectre des excitations élémentaires croît de manière continue à partir de 0 et ne présente plus le "gap" prévu par le calcul perturbatif du § 3.
- Notons cependant que la densité d'états est diminuée au voisinage de 0, par rapport à celle correspondant à une par-ticule libre (la densité d'états associée à une relation de dispersion linéaire est en effet plus faible que celle associée à une relation de dispersion quadratique).

## ⑥ Energie $E_0$ de l'état fondamental

### a - Calcul de $E_0$

- Comme le vecteur d'onde  $k_0 = 1/\xi_0$  qui caractérise les variations de  $u_k^2, v_k^2, u_k v_k$  est très petit devant  $1/r_0$ , où  $r_0$  est la portée du potentiel  $V(r)$ , nous allons négliger ici la portée du potentiel, ce qui revient à remplacer  $V(r)$  par  $V_{\text{pseudo}}$ . De plus, nous utiliserons pour simplifier  $V_g$  au lieu de  $V_{\text{pseudo}}$  et nous nous appuyerons sur les résultats du § 3b du cours VII pour résoudre les problèmes de divergence que nous rencontrerons.
- Si l'on remplace  $V(r)$  par  $V_g$ , on peut utiliser les expressions (7.65) de  $u_k^2, v_k^2, u_k v_k$ . Reportons ces expressions dans la 1<sup>ère</sup> ligne de (7.57) qui n'est autre que l'énergie  $E_0$  de l'état fondamental de Hef. Remplaçons également dans cette expression  $\tilde{V}(0)$  par  $4\pi\hbar^2 a/m$  et introduisons la variable sans dimension

$$x = \frac{k}{k_0} \quad (8.10)$$

Il vient :

$$\begin{aligned} E_0 &= N \frac{2\pi\hbar^2}{m} a \rho + \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{1}{2} \left[ \frac{x^2+1}{x\sqrt{x^2+2}} - 1 \right] + \frac{4\pi\hbar^2 \rho a}{m} \frac{1}{2} \left[ \frac{x}{\sqrt{x^2+2}} - 1 \right] \right\} \\ &= N \frac{2\pi\hbar^2}{m} a \rho + \frac{2\pi\hbar^2}{m} a \rho \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left\{ x^2 \left[ \frac{x^2+1}{x\sqrt{x^2+2}} - 1 \right] + \left[ \frac{x}{\sqrt{x^2+2}} - 1 \right] \right\} \\ &= \frac{2\pi\hbar^2 a \rho}{m} \left\{ N + \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left[ x\sqrt{x^2+2} - 1 - x^2 \right] \right\} \quad (8.11) \end{aligned}$$

- Etudions le comportement de la somme sur  $k$  aux grands  $k$ , c'est à dire aux grands  $x = k/k_0$

$$\sqrt{x^2+2} = x \left( 1 + \frac{2}{x^2} \right)^{1/2} = x \left[ 1 + \frac{1}{x^2} - \frac{1}{2} \frac{1}{x^4} + O\left(\frac{1}{x^6}\right) \right] \quad (8.12)$$

On en déduit

$$\left[ x\sqrt{x^2+2} - 1 - x^2 \right]_{x \gg 1} \simeq -\frac{1}{2x^2} + O\left(\frac{1}{x^4}\right) \quad (8.13)$$

Comme  $\sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{-1}{2x^2} = -\frac{k_0^2}{2} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{k^2}$  diverge, on en conclut que l'expression (8.11) de  $E_0$  contient une partie divergente donnée par

$$\begin{aligned} (E_0)_{div} &= -\frac{2\pi \hbar^2 a \rho}{m} \frac{k_0^2}{2} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{x^2} = -\frac{2\pi \hbar^2 a \rho}{m} \frac{1}{2} 8\pi a \rho \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{k^2} \\ &= -\frac{8\pi^2 \hbar^2}{m} a^2 \rho^2 \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{k^2} = -\frac{1}{2} \frac{m \rho^2}{\hbar^2} g^2 \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{k^2} \quad (8.14) \end{aligned}$$

b - Elimination de la partie divergente de  $E_0$

- Comparons (8.14) et (7.35). Si l'on remplace dans (7.35)  $N(N-1)/L^6$  par  $N^2/L^6 = (N/L^3)^2 = \rho^2$ , on trouve que les 2 expressions sont égales. En d'autres termes, la partie divergente de  $E_0$  n'est autre que l'expression du déplacement de l'état fondamental, calculé au 2<sup>ème</sup> ordre en  $V_g$ .

- Or nous avons vu dans le § 3 b du cours VII qu'un tel calcul fait avec  $V_g$  est incorrect à cause de problèmes de convergence uniforme, et qu'un calcul correct fait avec  $V_{pseudo}$  donne un résultat nul [voir Eq. (7.41)]. La divergence trouvée en (8.14) est donc artificielle et est liée à l'utilisation de  $V_g$  à des ordres supérieurs. Une utilisation de  $V_{pseudo}$  dès le début, basée sur l'expression (7.18) de  $H_{int}$ , conduirait à remplacer (8.14) par 0. Nous ne ferons pas ici un tel calcul, qui serait fort long, et admettrons le résultat. [voir Ref [7]].

- Pour éliminer la partie divergente de  $E_0$ , nous ajouterons simplement un terme  $+\frac{1}{2x^2}$  au crochet de la somme sur  $\vec{k}$  de (8.11) [voir (8.13)]. La nouvelle expression de  $E_0$  devient (en mettant  $N$  en facteur):

$$E_0 = \frac{2\pi \hbar^2 a \rho N}{m} \left\{ 1 + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left[ x\sqrt{x^2+2} - 1 - x^2 + \frac{1}{2x^2} \right] \right\} \quad (8.15)$$

Remplaçons la somme sur  $\vec{k}$  par une intégrale. Comme l'intégrale ne diverge pas en  $\vec{k} = \vec{0}$ , on peut s'affranchir de la restriction  $\vec{k} \neq \vec{0}$

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \dots &\rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \dots = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k_0^3 \int x^2 dx \dots \\ &= V 8 \sqrt{\frac{2}{\pi}} (a\rho)^{3/2} \int x^2 dx \dots \quad (8.16) \end{aligned}$$

En reportant (8.16) dans le 2<sup>ème</sup> terme du crochet de (8.15), on fait apparaître ce 2<sup>ème</sup> terme sous la forme

$$8 \sqrt{\frac{2}{\pi}} (\rho a^3)^{1/2} \underbrace{\int_0^\infty dx x^2 \left[ x\sqrt{x^2+2} - 1 - x^2 + \frac{1}{2x^2} \right]}_I \quad (8.17)$$



- L'intégrale sur  $x$  de (8.17) est maintenant convergente. Pour la calculer, intégrons sur  $x$  de 0 à  $x_M$ , où  $x_M \gg 1$ . L'intégrale des 3 derniers termes,  $-x^2, -x^4, +1/2$  est immédiate. Pour le 1<sup>er</sup> terme, on prend  $x^2$  comme variable. On obtient ainsi

$$I = \lim_{x_M \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{5} x_M^5 \left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{5/2} - \frac{2^{5/2}}{5} - \frac{2}{3} x_M^3 \left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{3/2} + 2 \frac{2^{3/2}}{3} - \frac{x_M^3}{3} - \frac{x_M^5}{5} + \frac{x_M}{2} \right\} \quad (8.18)$$

Il suffit alors de développer  $\left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{5/2}$  et  $\left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{3/2}$  en puissances de  $1/x_M^2$  pour s'apercevoir que tous les termes en  $x_M, x_M^3, x_M^5$  s'éliminent et pour obtenir

$$I = 2^{5/2} \left( \frac{1}{3} - \frac{1}{5} \right) = \frac{2^{7/2}}{15} \quad (8.19)$$

- En reportant (8.15) dans (8.17), puis en remplaçant le 2<sup>ème</sup> terme de l'accolade de (8.15) par (8.17), on obtient finalement

$$E_0 = \frac{2\pi\hbar^2 a \rho}{m} N \left[ 1 + \frac{128}{15\sqrt{\pi}} (\rho a^3)^{1/2} \right] \quad (8.20)$$

c - Discussion physique

Comparaison avec les résultats du calcul variationnel (champ moyen)

- Dans l'approche variationnelle du cours V, l'énergie  $E_0$  de l'état fondamental est approximée par le minimum de  $E[\varphi] = \langle \varphi | H | \varphi \rangle / \langle \varphi | \varphi \rangle$  quand on fait varier  $|\varphi\rangle$  dans le sous-espace des états produits  $|\varphi(1)\rangle |\varphi(2)\rangle \dots |\varphi(i)\rangle \dots |\varphi(N)\rangle$ . Rappelons que

$$E[\varphi] = E_{cin} + E_{piège} + E_{int} \quad (8.21)$$

et que le minimum de  $E[\varphi]$  est atteint quand  $|\varphi\rangle$  obéit à l'équation de Gross-Pitaevskii.

- Dans une boîte de côté  $L$  avec des conditions aux limites périodiques, la solution d'une telle équation est

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \quad (8.22)$$

(normalisation  $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$ ).  $E_{cin}$  et  $E_{piège}$  sont alors nuls et  $E_{int}$  est égal à [voir Eq. (5.24)] :

$$E_{int} = g \frac{N(N-1)}{2} \int d^3r |\varphi|^4 \approx g \frac{N^2}{2} \int d^3r \frac{1}{L^6} = g \frac{N^2}{2} \frac{L^3}{L^6} = \frac{1}{2} g \rho N \quad (8.23)$$

Nous désignons maintenant  $N/L^3$  par  $\rho$  (et non plus par  $n$ ). En remplaçant  $g$  par  $4\pi\hbar^2 a/m$ , on obtient finalement

$$(E_0)_{\text{vari.}} = E[\varphi] = E_{int} = \frac{2\pi\hbar^2 a \rho}{m} N \quad (8.24)$$

Quant au potentiel chimique  $\mu$ , il vaut :

$$\begin{aligned}
 (\mu)_{\text{varié}} &= \frac{\partial}{\partial N} (E_0(N))_{\text{varié}} = \frac{\partial}{\partial N} \left( g \frac{N^2}{2L^3} \right) \\
 &= g \frac{N}{L^3} = g \rho = \frac{4\pi \hbar^2 a \rho}{m} \quad (8.25)
 \end{aligned}$$

- En toute rigueur, un gaz de bosons dans une "vraie" boîte doit être décrit avec des conditions aux limites correspondant à l'annulation de  $\psi(\vec{r})$  sur les parois de la boîte. Mais nous avons vu dans le § 4 du cours V que, sous l'effet des interactions,  $\psi(\vec{r})$  devient uniforme dans tout le volume intérieur de la boîte, sauf dans une région d'extension  $\xi_0$  au voisinage des parois, où  $\xi_0$  est la longueur de relaxation. A la limite thermodynamique,  $N \rightarrow \infty$ ,  $V = L^3 \rightarrow \infty$  avec  $N/V = \rho = \text{constante}$ .  $\xi_0$  reste alors constant et les corrections liées aux parois physiques tendent vers 0 quand  $\xi_0/L \rightarrow 0$ . Les résultats obtenus plus haut avec des conditions aux limites périodiques sont alors valables.

### Corrections données par la théorie de Bogolubov

- Comparons (8.24) et (8.20). La contribution du terme 1 du crochet de (8.20) redonne le résultat (8.24) du calcul variationnel. On peut donc écrire

$$(E_0)_{\text{Bogol.}} = (E_0)_{\text{varié}} \left[ 1 + \frac{128}{15\sqrt{\pi}} (\rho a^3)^{1/2} \right] \quad (8.26)$$

- La correction introduite par la théorie de Bogolubov est donc, en valeur relative, égale à  $\frac{128}{15\sqrt{\pi}} (\rho a^3)^{1/2}$ . On voit ainsi apparaître clairement l'infinitésimal petit qui caractérise une telle théorie et qui est égal à  $\rho a^3$ , c'est à dire au nombre de particules dans un volume  $a^3$ . C'est la petitesse de ce paramètre qui permet de dire qu'un gaz de bosons en interaction est dilué.

- On peut également calculer la valeur du potentiel chimique dans la théorie de Bogolubov. Le terme correctif par rapport à la valeur (8.25) du calcul variationnel est obtenu en dérivant par rapport à  $N$  la contribution des 2<sup>ème</sup> terme du crochet de (8.20). Il ne faut pas oublier la dépendance en  $N$  de  $\rho = N/V$  qui fait que la contribution des 2<sup>ème</sup> terme du crochet de (8.20) est proportionnelle à  $N^{5/2}$ . Après dérivation par rapport à  $N$ , on obtient finalement

$$(\mu)_{\text{Bogol.}} = \frac{\partial}{\partial N} (E_0)_{\text{Bogol.}} = (\mu)_{\text{varié}} \left[ 1 + \frac{32}{3\sqrt{\pi}} (\rho a^3)^{1/2} \right] \quad (8.27)$$

## ⑦ Depletion quantique de l'état fondamental

a - Nombre de particules hors de l'état  $\vec{k} = \vec{0}$

- L'état fondamental du gaz de bosons est le vide des opérateurs  $b_{\vec{k}}$  satisfaisant

$$b_{\vec{k}} |\Psi_0\rangle = 0 \quad \forall \vec{k} \neq \vec{0} \quad (8.28)$$

et la relation adjointe

$$\langle \Psi_0 | b_{\vec{k}}^\dagger = 0 \quad \forall \vec{k} \neq \vec{0} \quad (8.29)$$

- Un tel état ne correspond pas à une situation où tous les bosons seraient dans l'état  $\vec{k} = \vec{0}$ , situation décrite par l'état  $|0\rangle = |n_0 = N\rangle$ . Calculons le nombre moyen de particules hors de l'état  $\vec{k} = \vec{0}$ ,  $N - N_0$ , quand le gaz de bosons est dans l'état fondamental  $|\Psi_0\rangle$

$$N - N_0 = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \langle \Psi_0 | a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} | \Psi_0 \rangle \quad (8.30)$$

Pour calculer (8.30), exprimons  $a_{\vec{k}}$  et  $a_{\vec{k}}^\dagger$  en fonction des  $b_{\vec{k}}$  et  $b_{\vec{k}}^\dagger$  au moyen de (7.56) et utilisons (8.28) et (8.29). Il vient :

$$\begin{aligned} N - N_0 &= \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \langle \Psi_0 | (u_k b_{\vec{k}}^\dagger - v_k b_{-\vec{k}}) (u_k b_{\vec{k}} - v_k b_{-\vec{k}}^\dagger) | \Psi_0 \rangle \\ &= \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} v_k^2 \langle \Psi_0 | b_{-\vec{k}} b_{-\vec{k}}^\dagger | \Psi_0 \rangle = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} v_k^2 \end{aligned} \quad (8.31)$$

- Remplaçons la somme sur  $\vec{k}$  de (8.31) par une intégrale et utilisons la 2<sup>ème</sup> équation (7.65) (nous utilisons ici  $V_S$ ). En introduisant comme plus haut  $x = k/k_0$ , on obtient

$$N - N_0 = \frac{L^3 k_0^3}{4\pi^2} J \quad (8.32)$$

où

$$J = \int_0^\infty dx \, x \left[ \frac{x^2+1}{\sqrt{x^2+2}} - x \right] \quad (8.33)$$

L'intégrale donnant  $J$  est convergente. Pour la calculer, procédons comme dans le § 6 b, en intégrant de 0 à  $x_M \gg 1$ , puis en prenant  $x_M \rightarrow \infty$ .

$$\begin{aligned} J &= \lim_{x_M \rightarrow \infty} \left[ \frac{1}{3} x_M^3 \left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{3/2} - \frac{2^{3/2}}{3} - x_M \left(1 + \frac{2}{x_M^2}\right)^{1/2} + 2^{1/2} - \frac{x_M^3}{3} \right] \\ &= -\frac{2\sqrt{2}}{3} + \sqrt{2} = \frac{\sqrt{2}}{3} \end{aligned} \quad (8.34)$$

$$\text{Par ailleurs, } \frac{L^3 k_0^3}{4\pi^2} = \frac{L^3}{4\pi^2 \xi_0^3} = \frac{L^3}{4\pi^2} \sqrt{8}^3 \pi \sqrt{\pi} \rho \sqrt{\rho} a^{3/2} = N \sqrt{\frac{32}{\pi}} (\rho a^3)^{1/2} \quad (8.35)$$

En reportant (8.34) et (8.35) dans (8.32), on obtient finalement

$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} (\rho a^3)^{1/2} \quad (8.36)$$

- La quantité  $(N - N_0)/N$ , proportion relative d'atomes hors de l'état  $\vec{k} = \vec{0}$  est appelé "déplétion quantique" de l'état fondamental du gaz de bosons. On voit apparaître la même quantité sans dimension  $(\rho a^3)^{1/2}$  que dans la correction à l'énergie de l'état fondamental [voir Eq. (8.20)].

### b. Comparaisons avec les résultats du calcul variationnel

Comme nous l'avons déjà indiqué dans le § 6C, la solution de l'équation de Gross-Pitaevskii dans une boîte de côté  $L$  très grand correspond à une situation où tous les atomes sont dans l'état  $\vec{k} = \vec{0}$ . On a alors  $N = N_0$  et  $(N - N_0)/N = 0$ . La théorie de Bogolubov permet donc de rendre compte du fait que les interactions viduent légèrement l'état  $\vec{k} = \vec{0}$  en transférant une fraction de atome dans les états  $\vec{k} \neq \vec{0}$ .

## 8) Densité à 2 corps pour un gaz de bosons dans l'état fondamental

### a. Définitions

- Commençons par rappeler la définition de la densité à 1 corps  $\rho_I(\vec{r})$ . C'est la densité de probabilité de trouver une particule quelconque au point  $\vec{r}$ , qu'on peut écrire dans le formalisme habituel

$$\rho_I(\vec{r}) = \langle \Psi_0 | \sum_{i=1}^N \delta(\hat{r}_i - \vec{r}) | \Psi_0 \rangle \quad (8.37)$$

où  $\hat{r}_i$  est l'opérateur position de la particule  $i$ , et

$$\rho_I(\vec{r}) = \langle \Psi_0 | \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}) | \Psi_0 \rangle \quad (8.38)$$

en seconde quantification. Pour le gaz homogène étudié ici

$$\rho_I(\vec{r}) = \rho \quad \text{indépendant de } \vec{r} \quad (8.39)$$

- La densité à 2 corps  $\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}')$  est la densité de probabilité de trouver une particule quelconque en  $\vec{r}$  et une autre particule quelconque en  $\vec{r}'$ . L'équivalent des équations (8.37) et (8.38) est

$$\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \Psi_0 | \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \delta(\hat{r}_i - \vec{r}) \delta(\hat{r}_j - \vec{r}') | \Psi_0 \rangle \quad (8.40)$$

$$\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \Psi_0 | \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}) | \Psi_0 \rangle \quad (8.41)$$

### b. Calcul de $\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}')$

- Dans les expressions (7.11) et (7.12) de  $\hat{\Psi}(\vec{r})$  et  $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r})$ , isolons les contributions de  $a_0$  et  $a_0^\dagger$

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} a_0 + \tilde{\Psi}(\vec{r}) \quad \text{où} \quad \tilde{\Psi}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{L^{3/2}} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (8.42)$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} a_0^\dagger + \tilde{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \quad \text{où} \quad \tilde{\Psi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{L^{3/2}} a_{\vec{k}}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (8.43)$$

- Reportons (8.42) et (8.43) dans (8.41) et, comme plus haut, ne gardons que les termes contenant 4  $a_0$  ou  $a_0^+$ , 2  $a_0$  ou  $a_0^+$  (la contribution des termes contenant 3  $a_0$  ou  $a_0^+$  est nulle). Enfin, remplaçons  $a_0$  et  $a_0^+$  par  $\sqrt{N}$  (sauf dans le terme contenant 4  $a_0$  ou  $a_0^+$ )

Terme contenant 4  $a_0$  ou  $a_0^+$  . Même calcul que dans le § 4 b

$$\frac{1}{L^6} \langle \Psi_0 | a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{L^6} \left[ N(N-1) - 2N \sum_{\vec{k} \neq 0} \langle \Psi_0 | a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} | \Psi_0 \rangle \right]$$

$$\approx \rho^2 - 2 \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \text{sh}^2 \theta_k \quad (8.44)$$

On a utilisé (8.31) et  $v_k = \text{sh} \theta_k$ .

Termes contenant 2  $a_0$  ou  $a_0^+$  . On pose  $\tilde{a}_0 = a_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$   $\tilde{a}_0' = a_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}$

$$\frac{1}{L^6} \langle \Psi_0 | \tilde{a}_{\vec{k}}^+ \tilde{a}_{-\vec{k}}^+ a_0 a_0 | \Psi_0 \rangle \rightarrow - \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \text{sh} \theta_k \text{ch} \theta_k \quad (8.45.a)$$

$$\frac{1}{L^6} \langle \Psi_0 | a_0^+ a_0^+ \tilde{a}_{-\vec{k}} \tilde{a}_{\vec{k}} | \Psi_0 \rangle \rightarrow - \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \text{sh} \theta_k \text{ch} \theta_k \quad (8.46.b)$$

$$\frac{1}{L^6} \langle \Psi_0 | a_0^+ \tilde{a}_{\vec{k}}^+ a_0 \tilde{a}_{\vec{k}} | \Psi_0 \rangle \rightarrow \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \text{sh}^2 \theta_k \quad (8.46.c)$$

$$\frac{1}{L^6} \langle \Psi_0 | \tilde{a}_{\vec{k}}^+ a_0^+ \tilde{a}_{\vec{k}} a_0 | \Psi_0 \rangle \rightarrow \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \text{sh}^2 \theta_k \quad (8.46.d)$$

$$\frac{1}{L^6} \langle \Psi_0 | a_0^+ \tilde{a}_{\vec{k}}^+ \tilde{a}_{\vec{k}} a_0 | \Psi_0 \rangle \rightarrow \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \text{sh}^2 \theta_k \quad (8.46.e)$$

$$\frac{1}{L^6} \langle \Psi_0 | \tilde{a}_{\vec{k}}^+ a_0^+ a_0 \tilde{a}_{\vec{k}} | \Psi_0 \rangle \rightarrow \frac{\rho}{L^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \text{sh}^2 \theta_k \quad (8.46.f)$$

On constate que les 2 derniers termes (8.46.e) et (8.46.f) compensent le dernier terme de (8.44) et on obtient

$$\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}') = \rho^2 [1 - \chi(\vec{r} - \vec{r}')] \quad (8.47)$$

où

$$\chi(\vec{s}) = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k} \neq 0} e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}} [\text{sh}^2 \theta_k - \text{sh} \theta_k \text{ch} \theta_k] \quad (8.48)$$

Le remplacement dans (8.48) de la somme sur  $\vec{k}$  par une intégrale et l'utilisation des équations (7.65) donnant  $v_k^2 = \text{sh}^2 \theta_k$  et  $u_k v_k = \text{ch} \theta_k \text{sh} \theta_k$  conduisent finalement à

$$\chi(\vec{s}) = \frac{1}{\rho} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}} \left[ \frac{x}{\sqrt{x^2+2}} - 1 \right] \quad (8.49)$$

où  $x = k/k_0$ .

c - Discussion physique

- La théorie de Bogolubov montre ainsi clairement que

$$\rho_{II}(\vec{r}, \vec{r}') \neq \rho_I(\vec{r}) \rho_I(\vec{r}') = \rho^2 \quad (8.50)$$

Elle montre donc l'existence de corrélations spatiales entre les

particules et conduit à une formule analytique pour la transformée de Fourier de l'écart entre  $\rho_{II}$  et  $\rho^2$ .

Comportement quand  $s = |\vec{r} - \vec{r}'| \rightarrow 0$

Considérons la limite  $s \ll \xi_0 = 1/k_0$ , de sorte que  $\alpha = k/k_0 \gg 1$ . On suppose cependant  $s \gg a$ , car l'expression précédente n'est plus valable pour  $s \lesssim a$ . Le comportement de  $\chi(\vec{s})$  pour  $s$  petit est déterminé par le comportement de l'intégrand de (8.49) pour  $\alpha \gg 1$ . Ecrivons alors

$$\sqrt{\alpha^2 + 2} - 1 = \sqrt{1 + \frac{2}{\alpha^2}} - 1 \approx -\frac{1}{\alpha^2} + O\left(\frac{1}{\alpha^4}\right) \quad (8.51)$$

En remplaçant le crochet de l'intégrand de (8.49) par  $-1/\alpha^2$ , on fait apparaître la transformée de Fourier de  $1/s$  et on obtient :

$$\chi(\vec{r} - \vec{r}') \underset{a \ll |\vec{r} - \vec{r}'| \ll \xi_0}{\approx} -\frac{2a}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (8.52)$$

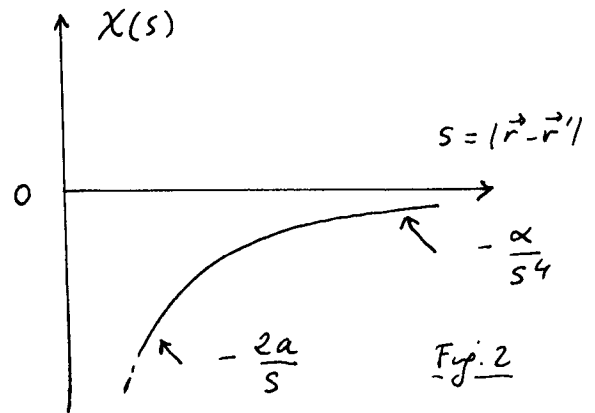
Comportement pour  $s \rightarrow \infty$

Après avoir effectué l'intégrale angulaire de (8.49), on tombe sur une intégrale sur  $k = |\vec{k}|$ . Une série d'intégrations par parties permet alors de montrer que

$$\chi(\vec{r} - \vec{r}') \underset{|\vec{r} - \vec{r}'| \rightarrow \infty}{\approx} -\frac{\alpha}{|\vec{r} - \vec{r}'|^4} \quad (8.53)$$

où  $\alpha$  est un coefficient

Tous ces résultats sont regroupés sur la Figure 2



## Références

- [1] - N. Bogolubov, J. Phys. USSR, 11, 23 (1947)
- [2] - K. Huang, Statistical Mechanics, J. Wiley, 1963, chapitre 19
- [3] - L. Landau et L. Lifschitz, Physique Statistique, Editions Mir 1967, § 78
- [4] - R. Pathria, Statistical Mechanics, Pergamon, 1972, chapitre 11.
- [5] - K. Huang, C. Yang, Phys. Rev. 105, 767 (1957)
- [6] - T.D. Lee, K. Huang, C. Yang, Phys. Rev. 106, 1135 (1957)
- [7] - Y. Castin, Séminaire interne, Groupe atomes froids ENS, Novembre 1995 et calculs non publiés sur le pseudopotentiel.
- [8] - Pour la généralisation de l'approche de Bogolubov à un gaz de bosons inhomogènes (piégés dans un potentiel externe), voir :  
A. Fetter, Annals of Physics, 70, 67 (1972)

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 tempsa - 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 :

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

- Quand  $V_{\text{ext}}$  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 : obtenus l'équation de Schrödinger (9.1) à partir d'un principe variationnel,  $\Psi$  variant dans tout l'espace (§ 2C) ; puis simplifier le problème en se contentant de faire varier  $\Psi$  dans le sous-espace

des états produits (§ 2d). Auparavant, nous rappelons très brièvement les équations de Lagrange pour un champ  $\psi$  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 AII)

- Champ scalaire complexe  $\psi(\vec{r}, t)$
  - Densité de Lagrangien  $\mathcal{L}$  - Fonction (réelle) de  $\psi, \psi^*, \vec{\nabla}\psi, \vec{\nabla}\psi^*, \dot{\psi} = \frac{\partial\psi}{\partial t}, \dot{\psi}^* = \frac{\partial\psi^*}{\partial t}$
- $$\mathcal{L}(\psi, \psi^*, \vec{\nabla}\psi, \vec{\nabla}\psi^*, \dot{\psi}, \dot{\psi}^*) \quad (9.2)$$

- Action  $S$
- $$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3r \mathcal{L} \quad (9.3)$$

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

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

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  $\delta S$  de  $S$  correspondant à des variations  $\delta\psi$  et  $\delta\psi^*$ . En utilisant

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

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

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

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

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

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

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

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

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



- Equations de Lagrange associée à (9.8)

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

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

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

Généralisation à  $N$  particules identiques en interaction

- Il faut prendre maintenant

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & i \frac{\hbar}{2} \left[ \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \dot{\psi}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) - \dot{\psi}^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \right] \\ & - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \left( \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \right) \cdot \left( \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \right) \\ & - \left[ \sum_{i=1}^N V_{\text{ext}}(\vec{r}_i, t) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right] \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \end{aligned} \quad (9.11)$$

- On vérifie alors que l'équation de Lagrange associée à (9.11) coïncide 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  $\psi$  dans tout l'espace de Hilbert, on se restreint maintenant au sous-espace engendré par

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = \varphi(\vec{r}_1, t) \varphi(\vec{r}_2, t) \dots \varphi(\vec{r}_N, t) \quad (9.12)$$

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  $\varphi$  qui minimise  $S$ .

- De (9.12), on déduit

$$\dot{\Psi}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = \sum_{i=1}^N \dot{\varphi}(\vec{r}_i, t) \prod_{j \neq i} \varphi(\vec{r}_j, t) \quad (9.13)$$

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

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

- La variation  $\delta S$  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  $\delta \vec{\nabla} \varphi = \vec{\nabla} \delta \varphi$  or 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

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

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

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

## ② Limite des faibles excitations

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

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

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

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 connaît la solution de (9.16). D'après les résultats du cours V, elle est de la forme

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

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

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

- Si  $\delta V$  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

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

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

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

Posons également

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

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

- Reportons (9.22) dans (9.21). A l'ordre 0 en  $\epsilon$ , on retrouve (9.19). A l'ordre 1, on obtient

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

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

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

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

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

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

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

$\delta V$  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  $\omega$ . Pour les trouver, il faut diagonaliser  $\mathcal{L}_{GP}$ , puisque pour  $t > t_e$  le terme source est nul dans (9.24).

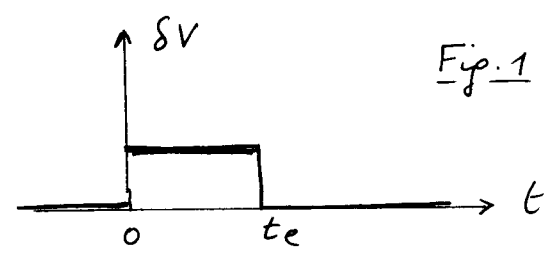


Fig. 1

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 :

$$\begin{cases} [H_0 - \mu + 2Ng|\phi_0(\vec{r})|^2] u(\vec{r}) + Ng\phi_0^2(\vec{r}) v(\vec{r}) = \hbar\omega u(\vec{r}) \\ -Ng\phi_0^{*2}(\vec{r}) u(\vec{r}) - [H_0 - \mu + 2Ng|\phi_0(\vec{r})|^2] v(\vec{r}) = \hbar\omega v(\vec{r}) \end{cases} \quad (9.28)$$

- Il est facile de vérifier sur (9.28) que si  $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$  est vecteur propre de  $\mathcal{L}_{\text{op}}$  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  $\phi_0(\vec{r})$  est l'état fondamental d'un condensat piégé dans  $V_0(\vec{r})$  avec  $g > 0$ , on peut montrer que  $\omega$  est réel. La solution la plus générale de fréquence  $\omega$ , s'écrit donc

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

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

$$\beta = \alpha^* \quad (9.30)$$

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

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

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

$$\varphi(\vec{r}, t) = [\phi_0(\vec{r}) + u(\vec{r}) e^{-i\omega t} + v^*(\vec{r}) e^{i\omega t}] e^{-i\mu t/\hbar} \quad (9.32)$$

Dans (9.32),  $u$  et  $v$  sont les composantes des vecteurs propres de  $\mathcal{L}_{\text{op}}$  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

$$\phi_0(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \rightarrow N|\phi_0|^2 = \frac{N}{L^3} = \rho \quad (9.32.a)$$

$$\mu = \rho g \quad (9.32.b)$$

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

- Cherchons des solutions ayant la forme d'ondes planes, c-à-d telles que  $u(\vec{r})$  et  $v(\vec{r})$  varient en  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ . 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

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

c-à-d encore par

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

d'où l'on tire

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

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 vibration 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 Reécriture 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  $\varphi$  à 1, il sera plus commode pour la suite de prendre

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

L'équation (9.16) devient alors

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

- Avec une telle normalisation, on a

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

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 - Equations de continuité

- Compte tenu de (9.38), on peut écrire

$$\varphi(\vec{r}, t) = \sqrt{\rho(\vec{r}, t)} e^{iS(\vec{r}, t)} \quad (9.39)$$

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

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

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

- 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

$$\vec{\nabla} \cdot (a \vec{u}) = a \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + (\vec{\nabla} a) \cdot \vec{u} \quad (9.41)$$

on a, d'après (9.39)

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

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

- On en déduit

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

ce qui, reporté dans (9.40), donne

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

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

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

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

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

### C. Équation du mouvement de $\vec{v}(\vec{r}, t)$

- D'après (9.39),

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

On en déduit

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

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)

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

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

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

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

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

- Avec la définition (9.32) de  $\rho$  et  $S$ , puis la définition (9.46) de  $\vec{v}$ , les équations (9.47) et (9.52) sont strictement équivalentes 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  $\hbar$  apparaît explicitement, et qui fait intervenir les dérivées spatiales de  $\rho$  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  $T = 0^{\circ}K$ , nous avons vu qu'à grande densité, plus exactement pour

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

où  $\sigma$  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  $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$  devant  $V_{ext} \psi$  et  $g |\psi|^2 \psi$ .

- Pourrait-on de même négliger, à grande densité, le terme  $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$  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 sûr incorrect de négliger cette énergie, qui est d'ailleurs la quantité mesurée expérimentalement.

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

ballistique, 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 apparaît 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  $\rho$ , et non celle de la phase  $S$ . A la limite des grandes densités,  $\rho$  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  $\Delta S$  (voir (9.43)). L'équation (9.37) devient alors

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

- En plus de l'expansion balistique, on peut également considérer des modes de vibration du condensat où  $\rho$  varie sur de 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

$$\frac{\hbar^2}{2m d^2} \ll g \rho \quad (9.55)$$

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

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \ll g \rho \quad (9.56)$$

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

$$\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{8\pi a \rho}} \quad (9.57)$$

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

### c - Discussion physique

- En appliquant l'identité d'analyse vectorielle

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

au champ de vitesses  $\vec{v}$  et en utilisant le fait que, compte tenu



de (9.46) 
$$\vec{\nabla} \times \vec{v} = \vec{0} \tag{9.59}$$

on obtient 
$$\frac{1}{2} \vec{\nabla} v^2 = (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \tag{9.60}$$

ce qui permet de réécrire (9.54) sous la forme 
$$m \left( \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right) \vec{v} = - \vec{\nabla} (V_{ext} + g\rho) \tag{9.61}$$

- On reconnaît dans le membre de gauche de (9.61) la dérivée totale de  $\vec{v}$ , dérivée temporelle de  $\vec{v}$  lorsqu'on suit le mouvement de la particule. L'équation (9.61) est alors simplement l'équation de la dynamique, appelée 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 piègeage, force  $-g\vec{\nabla}\rho$  due aux interactions avec les autres particules.

Remarque :

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  $T=0^{\circ}K$ , qui ne dépend que de  $N$  et de  $V$  [voir Eq. (8.23)]

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

La pression  $P$  d'un tel gaz est égale à 
$$P = -\frac{\partial}{\partial V} E_0(N, V) = \frac{1}{2} g \frac{N^2}{V^2} = \frac{1}{2} g \rho^2 \tag{9.63}$$

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 sur 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 2<sup>ème</sup> membre de (9.61).

d- Régime d'équilibre

- 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

$$g\rho + V_{ext} = Cte \text{ indépendante de } \vec{r} \tag{9.64}$$

En appelant  $\mu$  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  $\rho_0$  et  $\vec{v}_0$

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

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

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \delta\rho = -\vec{\nabla} \cdot (\rho_0 \delta\vec{v}) & (9.66.a) \\ m \frac{\partial}{\partial t} \delta\vec{v} = -\vec{\nabla} [V_{\text{ext}} + g\rho_0 + g\delta\rho] = -g\vec{\nabla} \delta\rho & (9.66.b) \end{cases}$$

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

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

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

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

avec  $c = \frac{g\rho}{m}$  (9.69)

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

### Références

- [1] Photons et Atomes - Introductions 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.

# Dynamique d'un condensat dans un piège à $T=0^{\circ}\text{K}$

## ① Condensat dans un piège harmonique à la limite des hautes densités.

Remplacement des équations hydrodynamiques par des équations différentielles - Transparents T1 à T5.  
Références [2], [3], [4]

## ② Expansion balistique d'un condensat Transparents T6 à T7

## ③ Modes propres de vibration d'un condensat

- Utilisation des équations différentielles du § 1 - Transparents T8 à T12
  - Equations hydrodynamiques linéarisées - Transparents T13 à T16
- Références [12], [13], [14]

## ④ Description et analyse de quelques expériences Références [15][16][17][18]

## Références

- [1] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, S. Stringari, Article de revue à paraître dans Rev. Mod. Phys.
- [2] Y. Castin, R. Dum, Phys. Rev. Lett. 77, 5315 (1996)
- [3] Yu Kagan, E. Surkov, G. Shlyapnikov, Phys. Rev. A54, R1753 (1996)
- [4] F. Dalfovo, C. Minniti, S. Stringari, L. Pitaevskii, Phys. Lett. A227, 259 (1997)
- [5] P. Ruprecht, M. Edwards, K. Burnett, C. Clark, Phys. Rev. A54, 4178 (1996)
- [6] M. Edwards, K. Ruprecht, K. Burnett, R. Dodd, C. Clark, Phys. Rev. Lett. 77, 1671 (1996)
- [7] K. Singh, D. Rokhsar, Phys. Rev. Lett. 77, 1667 (1996)
- [8] B. Esry, Phys. Rev. A55, 1147 (1997)
- [9] D. Hutchinson, E. Zaremba, A. Griffin, Phys. Rev. Lett. 78, 1842 (1997)
- [10] L. You, W. Hoston, M. Lewenkien, Phys. Rev. A55, R1581 (1997)
- [11] F. Dalfovo, S. Giorgini, M. Guilleumas, L. Pitaevskii, S. Stringari, Phys. Rev. A56, 3840 (1997)
- [12] S. Stringari, Phys. Rev. Lett. 77, 2360 (1996)
- [13] E. Zaremba, Phys. Rev. A57, 518 (1998)
- [14] S. Stringari, Phys. Rev. A58, 2385 (1998)
- [15] D. Guény-Odelin, Thèse de doctorat, Paris (1998).
- [16] D. Jin, J. Ensher, M. Matthews, C. Wieman, E. Cornell, Phys. Rev. Lett. 77, 420 (1996)
- [17] M.-O. Hewes, M. Andrews, N. van Druten, D. Kurn, D. Durfee, C. Townsend, W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. 77, 988 (1996)
- [18] M. Andrews, D. Kurn, H. Miesner, D. Durfee, C. Townsend, S. Inouye, W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. 79, 553 (1997) + Erratum 1998, Phys. Rev. Lett. 80, 2967

X-2

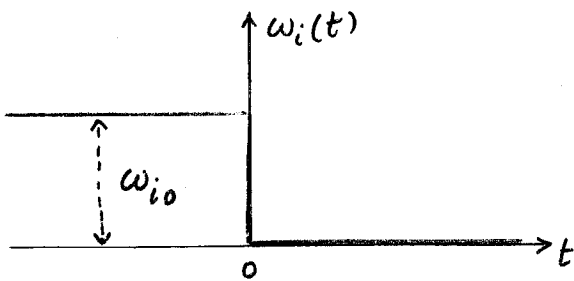
Remplacement des équations hydrodynamiques par une équation différentielle (à haute densité)

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

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

$$r_i = x, y, z$$

Exemple de problème abordé



Expansion balistique

Densité initiale à l'équilibre

$\omega_i(t)$  est resté constant et égal à  $\omega_{i0}$  pendant un temps suffisant

↳ Etat d'équilibre donné par (Thomas-Fermi)

$$\begin{aligned} \rho_0(\vec{r}) &= \frac{1}{g} (\mu - V_{ext}(\vec{r})) \\ &= \frac{\mu}{g} - \frac{m}{2g} \sum_{i=x,y,z} \omega_{0i}^2 r_i^2 \end{aligned}$$

A partir de  $t=0$ ,  $\omega_i(t)$  peut changer et prendre une valeur quelconque

On va montrer que la solution des équations hydrodynamiques est

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

Simple dilatation

Quelle est l'équation donnant  $b_i(t)$ ?

References [2], [3], [4]

Densité  $\rho(\vec{r}, t)$  à l'instant  $t$

Une particule au point  $r_i$  à l'instant  $t$  était en  $\frac{r_i}{b_i(t)}$  à l'instant  $t=0$ .

La dilatation  $b_x(t), b_y(t), b_z(t)$  suivant les 3 axes réduit la densité par un facteur  $\frac{1}{b_x(t)b_y(t)b_z(t)}$

$$\rho(r_i, t) = \frac{1}{b_x(t)b_y(t)b_z(t)} \rho_0\left(\frac{r_i}{b_i(t)}\right)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\mu}{g} \frac{1}{b_x(t)b_y(t)b_z(t)} - \\ &- \frac{m}{2g} \sum_{i=x,y,z} \frac{\omega_{0i}^2 r_i^2}{b_x(t)b_y(t)b_z(t) b_i^2(t)} \end{aligned}$$

Le nombre total de particules est conservé est l'équation de continuité est satisfaite

Champ de vitesses  $\vec{v}(r_i, t)$

La particule en  $\vec{r}$  à  $t$  est partie de  $\vec{r}_0$  à  $t=0$

$$r_{i0} = \frac{r_i}{b_i(t)}$$

Sa vitesse à l'instant  $t$  est

$$\begin{aligned} v_i(\vec{r}, t) &= \dot{b}_i(t) r_{i0} \\ &= \frac{\dot{b}_i(t)}{b_i(t)} r_i \end{aligned}$$

On en déduit

$$\frac{\partial}{\partial t} v_i(\vec{r}, t) = \left[ \frac{\ddot{b}_i(t)}{b_i(t)} - \left(\frac{\dot{b}_i(t)}{b_i(t)}\right)^2 \right] r_i$$

$$\vec{v}^2 = \sum_i \left(\frac{\dot{b}_i(t)}{b_i(t)}\right)^2 r_i^2$$

$$\vec{\nabla} \cdot \frac{1}{2} m \vec{v}^2 = m \sum_i \left(\frac{\dot{b}_i(t)}{b_i(t)}\right)^2 r_i$$

Equation du mouvement de  $\vec{v}$  (5)

$$m \frac{\partial}{\partial t} v_i = - \frac{\partial}{\partial r_i} \left[ \frac{1}{2} m \vec{v}^2 + \frac{1}{2} m \sum_j \omega_j^2(t) r_j^2 + g\rho \right]$$

$$m \frac{\partial}{\partial t} v_i = m \left[ \frac{\dot{b}_i(t)}{b_i(t)} - \left( \frac{\dot{b}_i(t)}{b_i(t)} \right)^2 \right] r_i \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial r_i} \frac{1}{2} m \vec{v}^2 = \frac{\partial}{\partial r_i} \left[ \frac{1}{2} \sum_j m \left( \frac{\dot{b}_j(t)}{b_j(t)} \right)^2 r_j^2 \right]$$

$$= m \left( \frac{\dot{b}_i(t)}{b_i(t)} \right)^2 r_i$$

$$\frac{\partial}{\partial r_i} \left[ \frac{1}{2} m \sum_j \omega_j^2(t) r_j^2 \right] = m \omega_i^2(t) r_i$$

$$g \frac{\partial \rho}{\partial r_i} = g \left( -\frac{m}{2g} \right) \frac{\partial}{\partial r_i} \sum_j \frac{\omega_{0j}^2 r_j^2}{b_x(t) b_y(t) b_z(t) b_j^2(t)}$$

$$= -m \frac{\omega_{0i}^2 r_i}{b_x(t) b_y(t) b_z(t) b_i^2(t)}$$

(1) est équivalente à

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

Système d'équations différentielles plus simples que l'équation (1)

Expansion balistique (6)

Condensat initialement dans un piège à symétrie cylindrique et très anisotrope :  $\omega_{03} \ll \omega_{0\perp}$

Coupure du piège à  $t=0$

$$\omega_i(t) = 0 \quad \text{pour } t > 0$$

$$\frac{d^2 b_{\perp}(t)}{dt^2} = \frac{\omega_{0\perp}^2}{b_{\perp}^3(t) b_3(t)} \quad \frac{d^2 b_3}{dt^2} = \frac{\omega_{03}^2}{b_{\perp}^2(t) b_3^2(t)}$$

$$\tau = \omega_{0\perp} t \quad \lambda = \frac{\omega_{03}}{\omega_{0\perp}} \ll 1$$

$$\frac{d^2 b_{\perp}(\tau)}{d\tau^2} = \frac{1}{b_{\perp}^3(\tau) b_3(\tau)} \quad \frac{d^2 b_3}{d\tau^2} = \frac{\lambda^2}{b_{\perp}^2(\tau) b_3^2(\tau)}$$

Solution sous forme d'un développement en puissances de  $\lambda^2$

$$\begin{cases} b_{\perp}(\tau) = \sqrt{1 + \tau^2} \\ b_3(\tau) = 1 + \lambda^2 [\tau \text{Arctan } \tau - \ln \sqrt{1 + \tau^2}] \end{cases}$$

Ref. [2]

Evolution du rapport d'anisotropie A (7)

- Avant la coupure du piège, l'approximation de Thomas-Fermi donne

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{g} \left[ \mu - \frac{1}{2} m (\omega_{03}^2 z^2 + \omega_{0\perp}^2 r^2) \right]$$

Dimensions du piège :  $R_3, R_{\perp}$

$$A = \frac{R_{\perp}}{R_3} = \frac{\omega_{03}}{\omega_{0\perp}} = \lambda$$

- Après coupure du piège

$$A(\tau) = \frac{R_{\perp}(\tau)}{R_3(\tau)} = \frac{R_{\perp} b_{\perp}(\tau)}{R_3 b_3(\tau)}$$

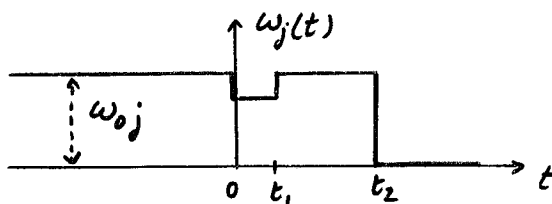
$$= \lambda \frac{\sqrt{1 + \tau^2}}{1 + \lambda^2 [\tau \text{Arctan } \tau - \ln \sqrt{1 + \tau^2}]}$$

- Vérifications expérimentales

Voir références [1], [15]

Modes propres de vibration (8)

Variation temporelle des  $\omega_j(t)$



0 - t<sub>1</sub> Phase de préparation  
On excite certains modes de vibration

t<sub>1</sub> - t<sub>2</sub> Phase d'oscillation  
les modes excités oscillent librement

t > t<sub>2</sub> Expansion balistique

Principe de l'expérience : On mesure le rapport d'anisotropie A pour plusieurs valeurs de t<sub>2</sub> - t<sub>1</sub>.

Possibilité de détection dispersive (non destructive) - MIT

Limite des faibles excitations

1<sup>ère</sup> méthode

Résolution numérique de l'équation aux valeurs propres de  $\alpha_{GP}$   
 (Linéarisation de l'équation de G-P dépendant du temps - Eqn. (9.28) du cours IX) Références [5] à [11]

2<sup>ème</sup> méthode (valable à haute densité)

- Résolution des équations hydrodynamiques linéarisées
- Recherche des valeurs propres de l'équation (9.67) du cours IX
- Cas d'un piège harmonique
- Résolution des équations linéarisées pour les facteurs de dilatation  $b_x(t), b_y(t), b_z(t)$

Linéarisation des équations du mouvement des  $b_i(t)$

Piège harmonique anisotrope  
 $\omega_{0z} \quad \omega_{0x} = \omega_{0y} = \omega_{0\perp}$

Phase d'oscillation libre

$$\begin{cases} \ddot{b}_x + \omega_{0\perp}^2 b_x - \frac{\omega_{0\perp}^2}{b_x^2 b_y b_z} = 0 \\ \ddot{b}_y + \omega_{0\perp}^2 b_y - \frac{\omega_{0\perp}^2}{b_x b_y^2 b_z} = 0 \\ \ddot{b}_z + \omega_{0z}^2 b_z - \frac{\omega_{0z}^2}{b_x b_y b_z^2} = 0 \end{cases}$$

Linéarisation :  $b_i = 1 + \delta b_i$

On ne garde que les termes linéaires en  $\delta b_i$

$$\begin{cases} (\delta \ddot{b}_x) + 3\omega_{0\perp}^2 \delta b_x + \omega_{0\perp}^2 \delta b_y + \omega_{0\perp}^2 \delta b_z = 0 \\ (\delta \ddot{b}_y) + \omega_{0\perp}^2 \delta b_x + 3\omega_{0\perp}^2 \delta b_y + \omega_{0\perp}^2 \delta b_z = 0 \\ (\delta \ddot{b}_z) + \omega_{0z}^2 \delta b_x + \omega_{0z}^2 \delta b_y + 3\omega_{0z}^2 \delta b_z = 0 \end{cases}$$

Recherche des fréquences propres  $\omega$

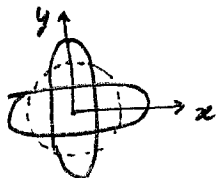
$\delta b_i(t) \propto e^{-i\omega t} \quad \ddot{\delta b}_i = -\omega^2 \delta b_i$

$$\begin{cases} (3\omega_{0\perp}^2 - \omega^2) \delta b_x + \omega_{0\perp}^2 \delta b_y + \omega_{0\perp}^2 \delta b_z = 0 \\ \omega_{0\perp}^2 \delta b_x + (3\omega_{0\perp}^2 - \omega^2) \delta b_y + \omega_{0\perp}^2 \delta b_z = 0 \\ \omega_{0z}^2 \delta b_x + \omega_{0z}^2 \delta b_y + (3\omega_{0z}^2 - \omega^2) \delta b_z = 0 \end{cases}$$

1<sup>er</sup> vecteur propre  $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} \delta b_x = -\delta b_y \\ \delta b_z = 0 \end{matrix}$

$\hookrightarrow \omega^2 = 2\omega_{0\perp}^2 \quad \omega = \omega_{0\perp} \sqrt{2}$

Mode  $|m| = 2$   
 Variation de  $x^2 - y^2$   
 sans variation de  $z$



Recherche des autres vecteurs propres

$\delta b_x = \delta b_y = \delta b_z \quad \delta b_z \neq 0$

$$\begin{cases} (4\omega_{0\perp}^2 - \omega^2) \delta b_{\perp} + \omega_{0\perp}^2 \delta b_z = 0 \\ 2\omega_{0z}^2 \delta b_{\perp} + (3\omega_{0z}^2 - \omega^2) \delta b_z = 0 \end{cases}$$

Equation aux valeurs propres

pour les 2 modes  $\delta b_x = \delta b_y \quad \delta b_z \neq 0$

Det  $\begin{pmatrix} 4\omega_{0\perp}^2 - \omega^2 & \omega_{0\perp}^2 \\ 2\omega_{0z}^2 & 3\omega_{0z}^2 - \omega^2 \end{pmatrix} = 0$

$\omega^4 - \omega^2 (3\omega_{0z}^2 + 4\omega_{0\perp}^2) + 10 \omega_{0\perp}^2 \omega_{0z}^2 = 0$

$\omega^2 = \frac{1}{2} \left[ 3\omega_{0z}^2 + 4\omega_{0\perp}^2 \pm \sqrt{9\omega_{0z}^4 + 16\omega_{0\perp}^4 - 16\omega_{0z}^2 \omega_{0\perp}^2} \right]$

Comparaison avec les expériences du JILA

Piège TOP  $\rightarrow \omega_{0z}^2 = 8\omega_{0\perp}^2$

$\omega^2 = [2(7 \pm \sqrt{29})] \omega_{0\perp}^2$

$\omega_1 = 4.976 \omega_{0\perp}$

$\delta b_{\perp}$  et  $\delta b_z$  de même signe

$\omega_2 = 1.797 \omega_{0\perp}$

$\delta b_{\perp}$  et  $\delta b_z$  de signe opposé

Equations hydrodynamiques linéarisées <sup>(13)</sup>

Valables à haute densité et à faible excitation

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

Fréquences  $\omega$  des modes propres de vibration :  $\delta \rho(\vec{r}, t) \propto e^{-i\omega t}$

$$\omega^2 \delta \rho(\vec{r}) = -\frac{g}{m} \vec{\nabla} \cdot [\rho_0(\vec{r}) \vec{\nabla} \delta \rho(\vec{r})]$$

Cas simple d'un piège isotrope

A l'approximation de Thomas-Fermi

$$\begin{aligned} \rho_0(\vec{r}) &= \frac{1}{g} [\mu - \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2] \\ &= \frac{1}{2} m \omega_0^2 [R^2 - r^2] \end{aligned}$$

R : rayon du condensat

$$\frac{g}{\mu} = \frac{1}{2} m \omega_0^2 R^2$$

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2} \delta \rho(\vec{r}) = -\frac{1}{2} R^2 \vec{\nabla} \cdot \left[ \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \vec{\nabla} \delta \rho(\vec{r}) \right]$$

Référence [12]

Calcul des fréquences propres  $\omega$  <sup>(14)</sup>

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2} = \Omega^2 \quad u = \frac{r}{R} \quad \delta \rho(\vec{r}) = Y_l^m(\theta, \varphi) R_l(u)$$

L'équation aux dérivées partielles satisfaite par  $\delta \rho(\vec{r})$  devient :

$$\begin{aligned} (1-u^2) \frac{d^2}{du^2} R_l(u) + \left(\frac{2}{u} - 4u\right) \frac{d}{du} R_l(u) + \\ + [2\Omega^2 + (1 - \frac{1}{u^2})l(l+1)] R_l(u) = 0 \end{aligned}$$

Solution sous forme d'un développement en puissances de  $u$

$$R_l(u) = u^s (1 + A_2 u^2 + \dots + A_{2n} u^{2n} + \dots)$$

Annulation du coefficient du terme en  $u^{s-2}$

$$s(s-1) + 2s - l(l+1) = 0$$

$$s(s+1) - l(l+1) = 0$$

2 solutions :  $s = l \quad s = -(l+1)$

Seule la solution  $s = l$  est acceptable pour éviter une divergence en  $u = 0$

Relation de récurrence <sup>(15)</sup>

$$R_l(u) = u^l + A_2 u^{l+2} + \dots + A_{2n} u^{l+2n} + \dots$$

Annulation du coef. du terme en  $u^{l+2n}$

$$\begin{aligned} A_{2n+2} [(l+2n+2)(l+2n+1) + 2(l+2n+2) - l(l+1)] = \\ = A_{2n} \{ (l+2n)(l+2n-1) + 4(l+2n) - 2\Omega^2 - l(l+1) \} \end{aligned}$$

$$\frac{A_{2n+2}}{A_{2n}} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \frac{4n^2}{4n^2} = 1$$

La série  $R_l(u)$  diverge en  $u = 1$  ( $r = R$ )

Pour éviter cette situation non physique,  $A_{2n+2}$  doit s'annuler.  $R_l(u)$  se réduit alors à un polynôme

Annulation de  $A_{2n+2}$

$$(l+2n)(l+2n-1) + 4(l+2n) - 2\Omega^2 - l(l+1) = 0$$

$$\Omega^2 = \frac{\omega^2}{\omega_0^2} = 2n^2 + 2nl + 3n + l$$

Comparaison avec un gaz sans interactions

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi_0(\vec{r}) + \sum_{n_x, n_y, n_z} c_{n_x, n_y, n_z} \psi_{n_x, n_y, n_z}(\vec{r}) e^{-i(n_x + n_y + n_z)\omega t}$$

$$p(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \text{ oscille à } (n_x + n_y + n_z)\omega$$

Autre situation analysée Refs [13], [14] <sup>(16)</sup>

Propagation d'ondes dans un condensat extrêmement allongé le long de Oz apparaissant à la limite comme un cylindre de rayon R

Dans le plan radial, la densité  $\rho(r)$  est parabolique (Thomas-Fermi), et la densité maximale au centre  $\rho(0)$  est 2 fois plus grande que la densité moyennée dans le plan radial

$$\rho(0) = 2\bar{\rho}$$

Des ondes sonores de longueur d'onde  $\lambda$  se propagent le long de Oz.

Problème à 1 dimension si  $\lambda \gg R$ .

On trouve une vitesse de propagation

$$c = \sqrt{\frac{g\bar{\rho}}{m}} = \sqrt{\frac{g\rho(0)}{2m}}$$

Résultat analogue à celui de la théorie de Bogolubov avec  $\rho$  remplacé par  $\bar{\rho}$