

UNIVERSITE SAAD DAHLAB DE BLIDA

Faculté des sciences

Département de physique

MEMOIRE DE MAGISTER

Spécialité: physique théorique

DYNAMIQUE NON-LINEAIRE DU CONDENSAT DE BOSE-ENSTEIN

POUR UN GAZ PIEGE :

AU DELA DES EQUATIONS DE GROSS-PITAEVSKII.

Par

CHACHOU SAMET HOURIA

Devant le jury constitué de :

M. Bentaiba	Maître de conférences. USD. Blida	Président
M. Benarous	Maître de conférences. UHB. Chlef	Rapporteur
M. Ladrem	Professeur ENS. Kouba	Examineur
A.E.K. Ali-Benamara	Maître de conférences. UHB. Chlef	Examineur

Blida, Janvier, 2005

RESUME

Dans la première partie de ce mémoire, nous avons présenté un aperçu historique sur le phénomène de la condensation de Bose-Einstein, et une étude sur les techniques utilisées dans la réalisation et la manipulation de la condensation de Bose-Einstein. Nous avons également présenté les mécanismes de refroidissement des atomes alcalins, et quelques résultats expérimentaux.

La deuxième partie du travail a été consacrée à l'approche théorique en rappelant les approximations historiques qui décrivent en partie le phénomène de la condensation de Bose-Einstein tels que l'approximation de Popov, Bogoliubov ainsi que l'approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov. Nous avons pu montrer que les trois approximations ne sont pas consistantes car la dynamique des atomes non-condensés est imposée à priori. A l'opposé, nous avons montré que notre approche basée sur le principe variationnel de Balian-Vénéroni, introduit une dynamique couplée des densités des atomes condensés et non-condensés ainsi que la densité anormale.

En choisissant des espaces d'essai relativement simples, mais physiquement acceptables, nous obtenons un système d'équations dynamiques que l'on a noté TDHFB (de l'anglais Time-Dependent-Hartree-Fock-Bogoliubov). puis on est passé à l'étude statique de ces équations qui a été traduit par une série de courbes qui décrivent l'évolution spatiale des différentes densités en fonction de la température.

Ces explorations numériques assez simples témoignent de l'aptitude de notre formalisme variationnel à décrire correctement la physique du système depuis la température nulle jusqu'à la température de transition.

Les équations ainsi obtenues permettent pour la première fois d'obtenir des expressions analytiques et non-perturbatives de paramètres dominants du problème de la condensation, tels que la température de transition, la taille du condensat ainsi que le potentiel chimique du système en interaction, expressions que nous n'avons nullement vues écrites ailleurs.

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier Docteur Mohamed Benarous, mon directeur de thèse, qui m'a offert cette chance formidable de travailler sur un sujet aussi passionnant. Grâce à ces suggestions et à son suivi continuel j'ai pu apprendre ce qui est, je crois, la chose la plus importante pour un jeune chercheur: la méthodologie de la recherche. Je lui exprimé toute ma gratitude.

Je souhaiterais aussi exprimer mes profonds remerciements au Docteur M. Bentaiba qui a accepté de présider le jury de cette thèse malgré ses nombreuses obligations. Je l'en remercie vivement.

Mes remerciements vont aussi au Professeur M. Ladrem de ENS de Kouba et au Docteur A.E.K.Ali-Benamara, maître de conférences à l'université de Chlef. Ils ont été d'une extrême gentillesse en acceptant d'être membres de jury.

Je ne voudrais surtout pas oublier de remercier mon très cher père, ma mère ainsi que mes sœurs et mes frères

Enfin, je remercie les personnes qui ont participé à la réalisation technique de ce mémoire, en particulier, monsieur N/E. Bouiad, et mademoiselle B. Silakhel, maîtres de conférences à l'université de Blida.

Que le soutien moral de tous mes autres amis trouve ici l'expression de mes meilleurs sentiments en particulier: Fatma Zohra, Djazia, Malika, Rachida, Zahra, Naima, Zahira, Batoul, Soufiane, Hakim, Rabia, Nacima, Souad, Saliha, Mbarka, Sid Ahmed, Hocine, Kadour, Bekhta, Djamila, Radia, Latifa, Rachid, Mohemed, Merci à tous.

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX

Figure 1	Un exemple de piège magnétique couramment utilisé (Piège de Ioffe-Pritchard).	12
Figure 1.2	Photographies d'un ensemble d'atomes de rubidium après évaporation (Photos de P.Desdiolles, D. Guéry-Odelin et J. Soding,ENS).	15
Figure 5.1	Rayon du condensat en fonction de la température.	44
Figure 5.2	Potentiel en fonction de la température.	45
Figure 5.3	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I=1$ ($T=0$).	45
Figure 5.4	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I=100$.	46
Figure 5.5	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I=10^6$.	46
Figure 5.6	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I=10^7$.	47
Figure 5.7	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I= 1.5 \cdot 10^6$.	47
Figure 5.8	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I= 2.5 \cdot 10^7$.	48
Figure 5.9	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I= 3 \cdot 10^7$.	48
Figure 5.10	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I= 3.6 \cdot 10^7$.	49
Figure 5.11	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I= 3.9 \cdot 10^7$.	49
Figure 5.12	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I= 4 \cdot 10^7$.	50
Figure 5.13	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I= 4.5 \cdot 10^7$.	50
Figure 5.14	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I= 4.8 \cdot 10^7$.	51
Figure 5.15	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I= 4.8 \cdot 10^7$.	51

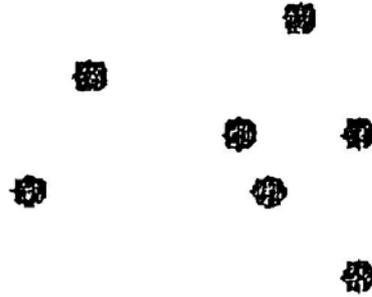
Figure 5.16	Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I= 4.85410^7$.	52
Figure 5.17	Profils des densités en fonction de la température au centre du piège ($r=0$)	52
Tableau 2.1	Les termes retenus dans l'Hamiltonien (2-7).	21

INTRODUCTION GENERALE

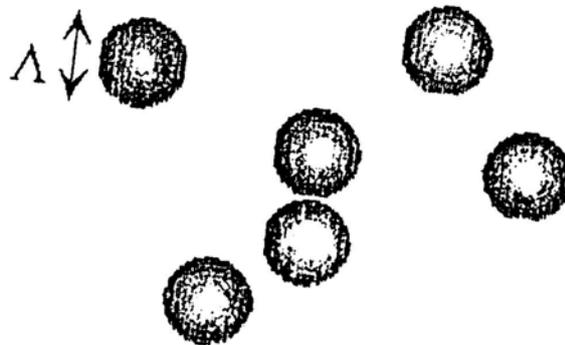
La description de la nature en termes d'assemblages d'indivisibles briques élémentaires, les atomes, est apparue dès l'antiquité dans les écrits des philosophes disciples d'Epicure. Il fallut pourtant attendre le XIX^{ème} siècle pour voir à nouveau émerger ce concept dans des écrits scientifiques, en particulier dans les travaux de Ludwig Boltzman. Et ce n'est qu'au début de XX^{ème} siècle que la description de la matière en termes d'atomes fut définitivement admise.

La vision que les scientifiques avaient alors de ces atomes était celle d'entités élémentaires indivisibles et discernables. Cet état de fait ne dura pas. En effet, les efforts des physiciens du début du XX^{ème} siècle pour étudier la structure atomique aboutirent rapidement à la mise en évidence d'une nature composite (mise en évidence du noyau puis sa structure interne de protons et de neutrons.....). Par ailleurs, les paradoxes apportés en thermodynamique statistique par une vision trop classique des systèmes composés d'atomes identiques amenèrent Josia William Gibbs au concept d'atomes indiscernables. Ces conséquences au niveau des particules sont différentes selon qu'il s'agit de bosons ou de fermions. Les premiers, placés dans des conditions particulières de densité et de température, sont capables de se condenser par un pur effet de statistique quantique

En mécanique quantique, toute particule est décrite par une fonction d'onde $\psi(r)$. La quantité $|\psi(r)|^2$ représente la probabilité de présence de la particule dans l'espace (probabilité de trouver la particule à la position r). La précision avec laquelle sa position peut être déterminée est régie par le principe d'incertitude de Heisenberg: $\Delta r \cdot \Delta p \geq \hbar$ où Δr est l'extension spatiale de la fonction d'onde ψ (incertitude en position) et Δp l'incertitude sur l'impulsion de la particule. Ainsi, pour un gaz thermique à température ambiante, la vitesse des particules est comprise entre 0 et $\sim 300 m/s$. Δp est grand, donc Δr est petit et les particules peuvent être considérées comme ponctuelles (c'est le cas classique).



Pour un gaz d'atomes ultrafroid ($T \sim 100\mu K$), la vitesse d'agitation thermique est très petite. Elle est comprise entre 0 et 10cm/s . Δp est petit, donc Δr est grand, c'est-à-dire que la fonction d'onde est plus étendue que la taille de la particule. L'extention spatiale Δr de la fonction d'onde ψ vaut : $\Lambda = \lambda_{dB} \sqrt[3]{n}$ où Λ est la longueur d'onde thermique de De Broglie.



Avec l'avènement de la mécanique quantique, d'une part l'indiscernabilité des atomes (identiques) fut définitivement admise, d'autre part les atomes, comme d'ailleurs toutes les particules, gagnèrent un statut très particulier: celui de pouvoir, sous certaines conditions, montrer des propriétés de nature ondulatoire (la notion de dualité onde/corpuscule).

A l'évidence, les concepts de particule et d'onde ne peuvent coéxister, et une particule quantique (quanton) est quelque chose d'intermédiaire entre les deux. Il existe cependant en théorie quantique des relations liant les caractéristiques propres d'une particule à celle de l'onde qui lui est associée. Ainsi, l'une de ces relations, la relation de De Broglie, relie la

quantité de mouvement (particule) et sa longueur d'onde associée. Elle définit la longueur d'onde, dite de De Broglie, dont la valeur numérique fournit au physicien de précieux renseignements sur le système étudié.

Alors que le caractère quantique des particules légères, comme les électrons, fut mis en évidence expérimentalement assez rapidement, ce ne fut pas avant les années quatre vingt que l'aspect ondulatoire des atomes (particules plus lourdes, donc aux longueurs d'onde de De Broglie plus petites) fut vérifié et systématiquement étudié. Différentes techniques de ralentissement de jets atomiques, dont le refroidissement laser, permettent aujourd'hui de manipuler des jets d'atomes très lents possédant donc de grandes longueurs d'onde de De Broglie. Une nouvelle branche de la physique a ainsi vu le jour, l'optique atomique, dont l'étude porte sur les ondes de matière. Et comme en optique classique où les ondes lumineuses sont guidées par des objets matériels, en optique atomique ce sont les ondes de matière qui sont guidées et manipulées par la lumière. La mise en évidence expérimentale de ces effets de statistique quantique n'est pas très aisée. Ils ne se manifestent que si la distance inter particulaire devient du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de de Broglie.

C'est bien sûr en physique des collisions que ces effets furent d'abord observés. Mais leur signature la plus spectaculaire reste le phénomène connu sous le nom de condensation de Bose-Einstein (BEC de l'anglais Bose-Einstein condensation).

Le présent travail est subdivisé en cinq chapitres. Le premier, après une brève introduction, relate les faits expérimentaux et les différentes techniques utilisées pour l'élaboration et l'étude du BEC, en particulier, les différents pièges et les méthodes de refroidissement ainsi que la manipulation du condensat. La deuxième partie, plus formelle, comprend quatre chapitres dont le deuxième aborde différentes approches théoriques pour l'étude du BEC à savoir, les approximations dites de Bogoliubov, de Popov et de Hartree-Fock-Bogoliubov. Le chapitre 3 est consacré à l'introduction du principe variationnel de Balian et Vénéroni pour extraire les équations de mouvement qui gèrent la dynamique de tout système bosonique. On établit les équations de mouvement, et l'on extrait les propriétés statiques du condensat. Dans le chapitre 4, on résout numériquement les équations ainsi établies dans le cas statique à température finie. On procède au dernier chapitre à l'analyse des courbes obtenues.

On termine ce travail par une conclusion générale résumant l'ensemble de nos résultats.

CHAPITRE 1

LES TECHNIQUES EXPERIMENTALES POUR LA REALISATION DE LA CONDENSATION DE BOSE-EINSTEIN

1.1. La prédiction d'Einstein

En 1924, Albert Einstein reçut un projet d'article écrit par un jeune physicien bengali, Satyendra Nath Bose [1, 2], qui démontrait la loi de Planck pour le rayonnement du corps noir en traitant les photons comme un gaz de particules identiques. Fort intéressé, Einstein traduisit le manuscrit en allemand et veilla à sa publication, puis généralisa cette idée à un gaz de particules matérielles. Dans un second article, publié en 1925 [3], Einstein démontra une propriété extraordinaire de ce système de particules matérielles : si sa densité spatiale n est plus grande qu'une certaine valeur critique donnée par :

$$n_c \approx \frac{0.166}{\hbar^3} (mk_B T)^{3/2} \quad (1)$$

où k_B et \hbar sont les constantes de Boltzmann et de Planck, et m la masse des particules, alors une fraction macroscopique des atomes se condense dans l'état d'énergie le plus bas, c'est-à-dire l'état d'impulsion nulle pour une enceinte de confinement arbitrairement grande. Une formulation équivalente revient à comparer la distance moyenne entre particules, $d = n^{-1/3}$, à la longueur d'onde thermique de De Broglie $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$. Quand

d est grand devant λ , le comportement du gaz est voisin de celui prédit par la théorie classique des gaz. En revanche, quand le rapport λ/d croît et devient de l'ordre de l'unité, le phénomène de condensation se produit. Ainsi, quand $\lambda = 2d$, Einstein prédit que les deux tiers des particules du gaz devraient occuper l'état fondamental.

« C'est une belle théorie, mais contient-elle une vérité ? ». C'est par ces mots qu'Einstein lui-même décrira son résultat dans une lettre à Paul Ehrenfest, avant de se détourner définitivement du phénomène de condensation. Cette défiance demeura générale pendant les années qui suivirent. Il a fallu attendre 1937 [4], avec la découverte de la superfluidité de l'hélium liquide, pour que la prédiction d'Einstein soit reconsidérée avec intérêt. F. London remarqua que la température de la transition superfluide, $T_\lambda = 2.2K$, est

étonnement proche de la température de la condensation de Bose-Einstein d'un gaz parfait de même densité que l'hélium liquide, $T_c = 3.2K$, et il eut l'intuition que les deux phénomènes devaient être liés [5].

Cette remarque de London est à la base des modèles théorique modernes de l'hélium liquide: l'hélium est un ensemble de particules de spin entier et il est légitime de lui appliquer les principes de la statistique découverte par Bose et Einstein. Néanmoins, on sait aussi que le lien entre la condensation de Bose-Einstein et la superfluidité n'est pas immédiat. La superfluidité trouve son origine dans l'interaction entre particules [4], alors que le modèle d'Einstein traite d'un gaz parfait. Plus quantitativement, les expériences de diffusion de neutrons révèlent que le condensat dans l'hélium liquide ne contient pas plus de 10% des atomes, même à température nulle, alors qu'il devrait pouvoir accueillir la totalité des atomes pour un gaz parfait. L'hélium liquide est cependant resté depuis les travaux de London l'exemple-type de condensat de Bose-Einstein, que l'on retrouve dans tous les manuels de physique statistique.

1.2. Les condensats gazeux

La recherche de systèmes plus proches du modèle initial d'Einstein est devenue très active au cours des 20 dernières années. Le développement des techniques de piégeage et de refroidissement d'atomes par des faisceaux lumineux ou des champs magnétiques statiques a permis de faire sauter les verrous qui avaient auparavant bloqué cette recherche. En 1995, à Boulder, la découverte par le groupe de E.Cornell et C.Wieman d'un condensat de rubidium [6, 7], suivie de peu par son analogue pour le lithium [8, 9, 10], le sodium [11,12, 13] et l'hydrogène, est venue couronner ces efforts.

On utilise souvent les atomes alcalins dans l'étude de BEC car ils ont une raie de résonance qui correspond à de la lumière visible (rouge pour le lithium, ou jaune pour le sodium) ou dans l'infrarouge proche (0.78 microns pour le rubidium). A ces longueurs d'onde là, on dispose de sources lasers puissantes et faibles, ce qui permet de les prérefroidir facilement dans des mélasses optiques et des pièges magnéto-optiques.

Si l'on voulait travailler sur des atomes de fer, ou d'oxygène par exemple, il faudrait des lasers dans l'ultra-violet, donc à des longueurs d'onde très courtes. De tels lasers (continus) ne sont pas encore disponibles.

Quels sont les outils nécessaires pour le succès de telles expériences ? On souhaite se rapprocher de l'hypothèse de base d'Einstein, c'est-à-dire travailler avec un gaz très dilué et pas un liquide, comme c'est le cas pour l'hélium. Le prix à payer se lit immédiatement sur l'équation (1) : quand on diminue la densité spatiale du système en jeu, la température de transition s'abaisse également. Ces nouveaux condensats atomiques se forment pour une densité voisine de 10^{19} atomes / cm^3 (au lieu de 10^{27} atomes/ cm^3 pour l'hélium liquide) et la température de condensation est dans le domaine du microkelvin, ou en deçà.

Cette contrainte en température vient imposer un point commun à toutes ces expériences [14,15, 16]: le confinement du gaz atomique ne peut pas se faire par des parois matérielles, car la totalité des atomes se collerait immédiatement aux parois pour ne plus bouger. Le gaz est piégé grâce à un champ magnétique inhomogène, qui le maintient en lévitation au centre d'une enceinte où règne un vide très poussé (10^{-9} Pa). Chaque atome porte un moment magnétique $\vec{\mu}$, qui se couple au champ magnétique local pour donner naissance à l'énergie d'interaction $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Cette énergie joue le rôle d'une énergie potentielle pour le mouvement du centre de masse de l'atome, et la force magnétique qui en résulte permet de confiner l'atome.

Considérons par exemple un atome au voisinage d'un point O où l'amplitude $|\vec{B}(\vec{r})|$ du champ magnétique est minimale (Figure1).

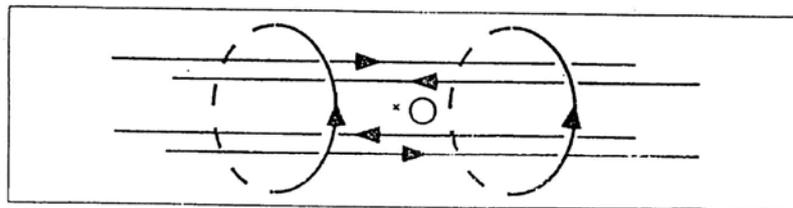


Figure1. 1 : Un exemple de piège magnétique couramment utilisé (piège de Ioffe-Pritchard)

Ce piège est constitué par quatre fils parallèles, parcourus par des courants deux à deux opposés, qui assurent le confinement transverse des atomes. Le confinement longitudinal provient des deux bobines circulaires, parcourues par un même courant. La distance entre ces deux bobines doit être supérieure à leur rayon, pour que le module du champ magnétique présente un minimum en O . Expérimentalement, le champ magnétique en O est de l'ordre de 10^{-4} Tesla.

Si le moment magnétique de l'atome a une direction opposée à celle du champ magnétique local, l'énergie magnétique s'écrit $E(\vec{r}) = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}(\vec{r}) = |\vec{\mu}| |\vec{B}(\vec{r})|$. Cette énergie potentielle est elle-même minimale en O , et l'atome va effectuer des oscillations stables autour de ce point. Dans les conditions usuelles de fonctionnement des pièges magnétiques, ces oscillations se font à une fréquence de l'ordre de la centaine de hertz, et l'approximation qui consiste à supposer que $\vec{\mu}$ et \vec{B} restent en permanence anti-parallèles est très bien vérifiée.

On pourrait également songer à travailler au voisinage d'un point où l'amplitude du champ magnétique est maximale, et piéger les atomes dont le moment magnétique est parallèle au champ. Mais les équations de la magnétostatique interdisent l'existence d'un maximum, à moins de se placer à l'intérieur d'un aimant ou à la surface d'un fil parcouru par un courant. Une telle solution étant incompatible avec la stabilité du condensat gazeux recherché, on se limite aux pièges centrés sur un minimum de champ magnétique.

Comment mettre des atomes dans un piège magnétique ? On prépare un nuage atomique le plus froid possible au voisinage de O , et on branche rapidement le courant dans les bobines créant le champ magnétique piégeant. Les moments magnétiques des atomes sont simultanément orientés dans la direction opposée à celle du champ grâce à un faisceau lumineux. Ce faisceau assure le pompage optique du gaz, selon une technique mise au point par Alfred Kastler et Jean Brossel entre 1950 [17] et 1960 [18, 19]. Les atomes dont l'énergie cinétique est inférieure à la profondeur du puits sont capturés. On peut ainsi garder pendant plusieurs minutes une assemblée d'atomes, la seule limitation étant le gaz résiduel de l'enceinte à vide dans laquelle se déroule l'expérience : si une molécule du gaz résiduel entre en collision avec un atome piégé, celui-ci recule et s'échappe du piège. La présence du piège ne change pas de manière significative le critère de condensation donné par l'équation (1), pourvu que n_c désigne la densité au centre du piège, et que le nombre d'atomes présents

dans le piège au seuil de condensation soit grand. En pratique ce nombre est de l'ordre du million, et la prédiction d'Einstein peut donc s'appliquer aisément.

Le refroidissement initial du nuage atomique se fait en général grâce à des lasers, ce qui permet d'atteindre des températures inférieures à la centaine de microkelvins. Le principe du refroidissement consiste à tirer parti des échanges d'impulsion entre lumière et atomes pour diminuer l'agitation thermique du gaz. Il permet de se rapprocher notablement de la condition de condensation de Bose-Einstein, faisant passer le rapport λ/d de 10^{-6} (pour la vapeur atomique initiale) à 10^{-2} (pour un piège magnéto-optique). Jusqu'à maintenant, il n'a pas été possible d'atteindre le seuil de condensation $\lambda/d \approx 1$ en utilisant uniquement le refroidissement laser. En effet, à basse température et à haute densité, un effet néfaste de la lumière se manifeste : elle favorise la formation de molécules à partir des atomes que l'on cherche à condenser (c'est ce que l'on appelle le phénomène de recombinaison), ce qui crée des pertes trop importantes pour atteindre le seuil de condensation.

1.3. Le refroidissement évaporatif

Une fois le piège magnétique branché, il s'agit d'amener le gaz vers la condensation, sans utiliser de moyens autres que ceux directement liés au piège lui-même. Une première idée pourrait être d'accroître le courant dans les bobines créant le champ, ce qui crée un potentiel confinant plus raide, et donc une densité centrale plus élevée. Malheureusement, dans cette opération, la température augmente aussi et le rapport λ/d ne change pas. Le succès des expériences récentes est venu d'une technique très ancienne, et connue de tous les enfants ayant dû avaler une assiette de soupe trop chaude: pour la refroidir, on souffle dessus. Ce refroidissement n'est pas dû à une différence de température entre le liquide et le gaz soufflé, mais à l'évaporation de la soupe qui est favorisée par la ventilation provoquée par l'enfant. Arracher une molécule du liquide coûte de l'énergie, qui est prélevée sur le liquide restant. On procède de la même façon pour les atomes piégés, en tronquant la profondeur du potentiel confinant les atomes à une hauteur légèrement supérieure à l'énergie cinétique moyenne des atomes piégés. Ainsi les atomes les plus rapides s'échappent du piège, et les atomes restants se rethermalisent à une température inférieure à la température initiale [20] On peut montrer que la densité au centre du piège augmente lors de cette évaporation. Par conséquent, en la poursuivant assez longtemps, on réussit à atteindre le seuil de condensation.

Contrairement à la cuillère de soupe, dont le volume n'est que très faiblement diminué par l'évaporation, il faut sacrifier beaucoup d'atomes pour atteindre ce but. En pratique, on part d'environ un milliard d'atomes dans le piège magnétique, pour finir avec un million seulement. C'est à ce prix qu'un condensat de Bose-Einstein peut se former au centre du piège. Pour modifier à volonté la hauteur du puits de potentiel magnétique confinant les atomes, on utilise une onde radio de pulsation ω ajustable. Cette onde fait basculer les moments magnétiques résonnants, c'est-à-dire ceux situés sur une surface de champ magnétique donnée, telle que $\mu B = \hbar \omega$.

La valeur initiale de ω est grande : ceci correspond à une profondeur élevée pour le puits de potentiel, et permet de confiner même des atomes d'énergie importante (milli kelvin). Le refroidissement évaporatif forcé se fait en maintenant constant le courant créant le piège magnétique, et en diminuant progressivement ω . La valeur finale de la fréquence radio correspond à un champ magnétique B voisin de la valeur minimale pour le piège magnétique considéré. La profondeur du puits de potentiel en fin d'évaporation est très faible, de l'ordre de quelques microkelvins seulement [21].

1.4. Comment voir un condensat?

L'observation des condensats gazeux se fait en éclairant par une brève impulsion lumineuse, dont on mesure ensuite l'absorption ou le déphasage par l'assemblée atomique. On a ainsi accès à la distribution spatiale des atomes dans le potentiel magnétique. On peut également couper le piège magnétique et laisser l'assemblée atomique s'étaler pendant une durée de quelques dizaines de millisecondes, avant d'envoyer l'éclair lumineux. De l'étendue du nuage atomique après étalement, on déduit la distribution en vitesse initiale.

La figure 2 montre la répartition des atomes au sein du piège magnétique. La distribution des atomes a une forme de cigare, qui résulte de la forte anisotropie du piège. La présence éventuelle d'un condensat est révélée de manière non ambiguë par les clichés donnant les distributions en vitesse (2c, d). Pour la photo 2c, prise pour une densité inférieure à la densité critique, on obtient une distribution en vitesse quasi isotrope, comme attendu à partir de l'équipartition d'énergie pour un gaz bien décrit par la physique statistique classique. Au contraire, le cliché 2d, pris pour une densité centrale plus élevée que la densité critique, montre une distribution en vitesse fortement anisotrope, la direction la plus fortement confinée dans le piège magnétique étant celle ayant la plus grande dispersion en vitesse. Cette conséquence directe de la relation d'incertitude de Heisenberg

révèle que les atomes se sont accumulés dans ce cas dans l'état fondamental du piège magnétique : ils ont tous les mêmes fonctions d'ondes, dont la distribution horizontale est plus grande que la dispersion verticale du fait de l'assymétrie du piège. En revanche, la dispersion verticale des vitesses est plus grande que la dispersion horizontale ce type d'image permet d'obtenir des informations quantitatives sur les condensats, ainsi que le nombre d'atomes.

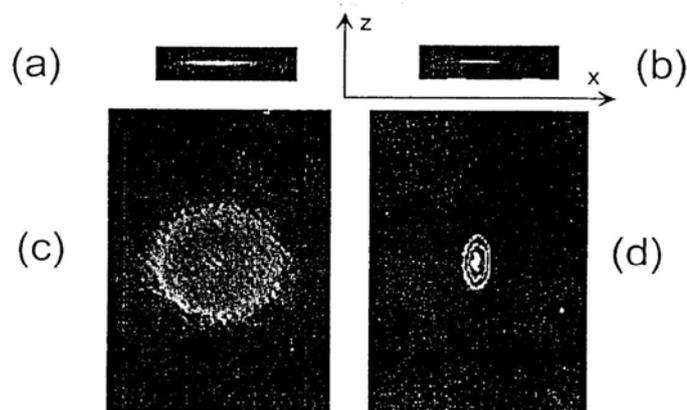


Figure1. 2 : Photographies d'un ensemble d'atomes de rubidium après évaporation (Photos de P.Desbiolles, D.Guéry-Odelin et J.Soding, ENS).

Ce nouvel état de la matière que représentent les condensats atomiques offre plusieurs voies à explorer. L'une d'elles est évidemment l'étude des propriétés physiques (par exemple l'équivalent de la superfluidité observée dans l'hélium liquide) des condensats. Une autre est la réalisation de lasers à atomes, c'est-à-dire d'instruments capables de délivrer un faisceau d'atomes se trouvant tous dans le même état, à l'instar des photons d'un rayon laser. Cela serait d'une grande utilité pour l'optique et l'interférométrie atomique, à la chimie (étude de réactions entre deux faisceaux atomiques dans des conditions très bien définies et contrôlées, condensats de molécules, etc.). Plusieurs équipes de physiciens sont parvenues, dès 1997, à produire un effet laser avec des atomes, le principe étant de former d'abord un condensat puis d'extraire par un moyen adéquat une partie des atomes condensés. Mais beaucoup de chemin reste à parcourir avant d'arriver à des flux atomiques d'intensité et de durée appréciables, afin de pouvoir les exploiter dans des applications pratiques.

1.5. La dynamique des condensats

La possibilité d'observer des condensats de Bose-Einstein gazeux a permis une confrontation très précise des modèles théoriques avec les mesures expérimentales. Ces modèles, développés initialement pour rendre compte de la superfluidité de l'hélium liquide, n'avaient pas pu être testés quantitativement en raison de la complexité des processus prenant place au sein du liquide.

Comment décrire théoriquement un condensat gazeux ? Remarquons pour commencer que, contrairement au cas du gaz avant condensation, qui est très dilué et donc proche d'un gaz parfait, la description théorique d'un condensat de Bose-Einstein nécessite une prise en compte correcte des interactions entre les atomes : l'accumulation du condensat au fond du puits de potentiel magnétique conduit à une densité spatiale de l'ordre de 10^{14} atomes/cm³, pour laquelle le modèle du gaz parfait n'est plus valable. Fort heureusement, ces interactions entre atomes condensés sont très bien décrites par une théorie simple de champ moyen. C'est pourquoi l'on peut supposer que tous les atomes sont dans le même état quantique, décrit par une fonction d'onde unique. Cette fonction d'onde du condensat est solution de l'équation de Schrödinger qui fait intervenir l'énergie cinétique des atomes, le potentiel magnétique de confinement, et un terme non linéaire décrivant l'effet du condensat sur lui-même.

Le terme de champ moyen peut être répulsif ou attractif, selon l'espèce atomique considérée, et ce point joue un rôle essentiel pour le comportement du condensat. Pour l'hydrogène, le sodium ou le rubidium 87, le champ moyen correspond à une interaction répulsive. On peut alors mettre un nombre arbitrairement élevé d'atomes dans le condensat, sa taille d'équilibre augmentant avec sa population. Au contraire, un champ moyen attractif, comme c'est le cas pour le lithium 7, limite le nombre d'atomes condensables. Au-delà d'une certaine valeur, de l'ordre du millier d'atomes, le condensat s'effondre sur lui-même. Des molécules et des agrégats sont formés lors de cet effondrement et s'échappent du piège magnétique.

1.6 Perspectives

Une trentaine de groupes dans le monde disposent désormais de condensats de Bose Einstein (dont deux en France, à l'ENS et à l'institut d'optique d'Orsay) et les recherches sur ces systèmes se sont fortement diversifiées au cours des dernières années. Un sujet fort débattu à la fois sur le plan théorique et expérimental porte sur l'existence au sein de ces gaz de courants permanents, qui sont une conséquence directe de leur superfluidité. Très récemment, des tourbillons quantiques dans un condensat de rubidium ont été mis en évidence au laboratoire Kastler-Brossel de l'ENS. Le gaz est mis en rotation avec un faisceau laser, qui joue un rôle analogue à celui de la cuillère qu'on utilise pour mélanger le sucre dans une tasse de café. Au-dessus d'une fréquence critique de rotation, un ou plusieurs tourbillons apparaissent, puis persistent même si l'on débranche "la cuillère" laser. Des études sont actuellement en cours pour étudier la nucléation de ces tourbillons, et mesurer le champ de vitesse atomique correspondant. Ces systèmes permettent également de réaliser un rêve de théoricien des années 60, qui consiste à superposer des condensats de nature différente. Pour cela on tire parti du fait que le niveau d'énergie électronique fondamental d'un atome de rubidium ou de sodium est clivé en deux sous niveaux par l'interaction hyperfine entre les électrons et le noyau. Les chercheurs de Boulder ont ainsi préparé un mélange quantique de condensats en disposant dans le même piège deux assemblées d'atomes de rubidium, correspondant chacune à un des deux sous niveaux hyperfins. On peut ensuite coupler de manière cohérente ces assemblées grâce à une onde électromagnétique, ce qui présente une analogie profonde avec l'effet Josephson, couplage cohérent de deux supra-conducteurs à travers une jonction isolante.

Un autre thème de recherche vise à généraliser le phénomène de condensation à d'autres systèmes, comme des molécules polyatomiques. Même si le refroidissement de tels objets reste encore acrobatique, les perspectives ouvertes par ces recherches sont fascinantes par le pont que l'on pourrait ainsi jeter entre la physique des gros objets que sont les édifices moléculaires, et la cohérence quantique macroscopique qui caractérise les condensats de Bose-Einstein.

CHAPITRE 2

METHODES D'APPROXIMATION POUR L'ETUDE DES CONDENSATS

2.1. Approximation de Bogoliubov [22]

Si l'interaction entre les atomes est faible, ce qui est le cas d'un gaz de bosons idéal, la majorité des atomes se condensent à température nulle dans l'état fondamental.

Pour les densités spatiales relativement élevées des condensats de Bose-Einstein, on ne peut pas ignorer les interactions entre atomes. Ces interactions jouent un rôle essentiel pour déterminer les propriétés statiques du condensat (taille, énergie) ainsi que les propriétés dynamiques. Leur prise en compte semble a priori un problème ardu, car le potentiel d'interaction entre deux atomes $V(r_1 - r_2)$ est compliqué: attractif à longue distance ($|r_1 - r_2| > 0.5 nm$), il devient répulsif quand les deux atomes sont suffisamment proches car leurs nuages électroniques se recouvrent. Fort heureusement, à très basse température, il n'est pas nécessaire de prendre en compte la forme précise de ce potentiel pour décrire les propriétés du gaz atomique. La relation d'incertitude de Heisenberg nous dit qu'un atome est d'autant plus délocalisé que sa vitesse est bien connue. L'ordre de cette délocalisation quantique est donné par la longueur d'onde thermique λ ; quand celle-ci devient supérieure à la portée du potentiel, on peut ignorer les détails de $V(r_1 - r_2)$ et le caractériser par une seule quantité, appelée longueur de diffusion a . En particulier, deux potentiels ayant même longueur de diffusion ont des effets physiques équivalents. Pour des interactions répulsives on peut ainsi remplacer le potentiel d'interaction $V(r_1 - r_2)$ par un potentiel beaucoup plus simple

$$V(r) = g \delta^3(r) \quad g = \frac{4 \pi \hbar^2}{m a} \quad (2-1)$$

L'Hamiltonien \hat{H} du système se décompose en :

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k^0 a_k^+ a_k + \frac{g}{2V} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k_3} a_{k_4} \delta_{k_1+k_2, k_3 k_4} \quad (2-2)$$

a_k^+ et a_k sont les opérateurs de création et d'annihilation d'une particule dans l'état \vec{K} , obéissant aux

relations de commutation usuelles. Le symbole de Kroneker δ assure la conservation de l'impulsion. \tilde{V}_K est la transformée de Fourier du potentiel inter-atomique $V(r)$.

$\varepsilon_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ est l'énergie de chaque particule.

Les gaz de bosons imparfaits à basse température ressemblent à un gaz idéal dans l'état stationnaire. A cause des mouvements du condensat et des effets des interactions répulsives, les atomes subissent une transition de l'état fondamental à un autre état avec une impulsion non nulle.

L'état fondamental d'un gaz de bosons uniforme et idéal s'écrit dans le formalisme du nombre d'occupation

$$|\Phi_0(N)\rangle = |N,0,0\rangle = \frac{(a_0^+)^N |0\rangle}{\sqrt{N!}} \quad (2-3)$$

La densité du condensat est définie par:

$$\frac{\langle \phi_0 | a_0^+ a_0 | \phi_0 \rangle}{V} = \frac{N_0}{V} = n_0 \quad (2-4)$$

La prescription de Bogoliubov [23, 24] consiste à remplacer a_0^+ et a_0 par $\sqrt{N_0}$. Cette approximation est d'autant plus justifiée lorsque $N_0 \gg 1$. L'hamiltonien d'interaction devient alors [25]:

$$\hat{H} \cong \frac{g}{2V} \left[N_0^2 + 2N_0 \sum_{k \neq 0} (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) + N_0 \sum_{k \neq 0} (a_k^+ a_{-k}^+ + a_k a_{-k}) \right] \quad (2-5)$$

Les termes qui contiennent $N_0^{3/2}$ sont nuls à cause de la conservation du moment

$$\hat{N} = \sum_k a_k^+ a_k \approx N_0 + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) \quad (2-6)$$

L'Hamiltonien du système s'écrit finalement sous la forme:

$$\hat{H} = \frac{gN^2}{2V} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} [(\varepsilon_k^0 + ng)(a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) + ng(a_k^+ a_{-k}^+ + a_k a_{-k})] \quad (2-7)$$

où l'on a supposé qu'à basse température, le nombre d'atomes non condensés

$N - N_0 = \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k$ est beaucoup plus petit que celui des atomes condensés.

Les termes retenus dans l'Hamiltonien (2-7) sont repris dans le tableau suivant

Tableau 2.1: Les termes retenus dans l'Hamiltonien (2-7)

terme	signification
$\varepsilon_k^0 a_k^+ a_k$	l'énergie cinétique
$a_0^+ a_0^+ a_0 a_0$	les interactions dans l'état fondamental
$a_0^+ a_k^+ a_k a_0$ et $a_k^+ a_0^+ a_0 a_k$	l'énergie d'une particule non excitée dans l'état fondamental
$a_k^+ a_0^+ a_k a_0$ et $a_0^+ a_k^+ a_0 a_k$	l'énergie d'échange d'une particule dans l'état fondamental
$a_0^+ a_0^+ a_k a_{-k}$ et $a_k^+ a_{-k}^+ a_0 a_0$	l'énergie soit de deux particules initiales, soit deux particules finales dans l'état fondamental.

La conservation de l'impulsion exclut l'existence de termes contenant des opérateurs associés à trois particules dans l'état fondamental. L'hamiltonien du système a une forme quadratique dans les opérateurs de création et d'annihilation. On peut alors le diagonaliser par la transformation canonique suivante [23]:

$$a_k = u_k \alpha_k - v_k \alpha_{-k}^+$$

$$\alpha_{-k}^+ = u_k \alpha_{-k}^+ - v_k \alpha_k$$

Les coefficients v_k et u_k sont des fonctions réelles et paires de k et sont liées à la probabilité de trouver une quasi-particule dans l'état k . Ils peuvent être choisis de manière à rendre le commutateur des opérateurs α^+ et α égal à l'unité (transformation de Bogoliubov). Ces nouveaux opérateurs obéissent aux mêmes relations de commutation usuelles,

$$[\alpha_k, \alpha_k] = [\alpha_k^+, \alpha_k^+] = 0 \quad [\alpha_k, \alpha_k^+] = 1$$

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \quad \text{Pour } k \neq 0$$

et sont appelés opérateurs de quasi-bosons. Une substitution directe dans l'Hamiltonien (2-7) donne:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{2} gn^2V \sum_{k \neq 0} [(\varepsilon_k^0 + ng)v_k^2 - 2ngu_k v_k] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} [(\varepsilon_k^0 + ng)(u_k^2 + v_k^2) - 2ngu_k v_k] \times (\alpha_k^+ \alpha_{+k} + \alpha_{-k}^+ \alpha_{-k}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} [ng(u_k^2 + v_k^2) - 2(\varepsilon_k^{0^2} + ng)u_k v_k] (\alpha_k^+ \alpha_{-k}^+ + \alpha_k \alpha_k) \end{aligned} \quad (2-8)$$

Le premier et le deuxième terme sont diagonaux (voir annexe A), mais le troisième ne l'est pas. On peut l'éliminer par un choix convenable des deux fonctions u_k et v_k

$$\begin{aligned} ng(u_k^2 + v_k^2) &= 2(\varepsilon_k^0 + ng)u_k v_k \\ u_k^2 - v_k^2 &= 1 \end{aligned} \quad (2-9)$$

On peut alors prendre $u_k = \cosh \theta_k$, $v_k = \sinh \theta_k$, $\tanh 2\theta_k = \frac{ng}{\varepsilon_k^0 + ng}$

et choisir pour g le signe positif (interaction répulsive) pour éviter la divergence dans $\tanh 2\theta_k$.

La solution de l'équation (2-9) donne

$$v_k^2 = u_k^2 - 1 = \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_k^0 + ng}{E_k} - 1 \right) \quad (2-10)$$

L'énergie d'excitation du système devient alors:

$$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k^0 + ng)^2 - (ng)^2} = \sqrt{(\varepsilon_k^0)^2 + 2ng\varepsilon_k^0} \quad (2-11)$$

A partir de (2-10) et (2-11), on obtient une expression simple de l'hamiltonien (2-8) en fonction des nouveaux opérateurs

$$H = \frac{1}{2} gn^2V - \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} (\varepsilon_k^0 + ng - E_k) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} E_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \alpha_{-k}^+ \alpha_{-k}) \quad (2-12)$$

Dans ce modèle, un seul état k ne peut être occupé que par une seule particule et donc

$$\alpha_k |\phi_0\rangle = 0 \quad \text{Pour } \vec{k} \neq \vec{0}$$

L'énergie de l'état fondamental est alors

$$E_g = \langle \phi_0 | \hat{H} | \phi_0 \rangle = \frac{1}{2} gn^2V - \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} (\varepsilon_k^0 + ng - E_k) = \frac{1}{2} gn^2V - \sum_{k \neq 0} E_k v_k^2 \quad (2-13)$$

E_k étant l'énergie d'excitation obtenue à partir de l'équation (2-10), c'est-à-dire

$$E_k = \begin{cases} \sqrt{\frac{gn}{m}} \hbar k = \sqrt{\frac{4\pi\hbar^2 an}{m^2}} \hbar k & k \rightarrow 0 \\ \varepsilon_k^0 + \frac{4\pi\hbar^2 an}{m} & k \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2-14)$$

Dans la limite de grandes longueurs d'onde $k \rightarrow 0$, les excitations élémentaires sont représentées par la loi de dispersion linéaire des phonons avec une vitesse donné par

$$\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_k}{\partial k} = \sqrt{\frac{ng}{m}} \quad , \quad (2-15)$$

alors que pour les petites longueurs d'onde, on trouve la loi de dispersion des particules

libres plus un autre terme dit de Hartree $\varepsilon_0^k + \frac{4\pi\hbar^2 an}{m}$.

2.2. Approximation de Popov [26, 27]

Il s'agit dans cette approximation d'examiner le comportement thermodynamique d'un système de bosons piégés par un champ magnétique, en utilisant la théorie du champ moyen basée sur l'approximation de Bogoliubov mais à température finie.

Le point de départ est l'hamiltonien grand canonique en fonction des opérateurs champs

$\hat{\psi}(r)$ et $\hat{\psi}^+(r)$:

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N} = \int dr \hat{\psi}^+(r) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{ext} - \mu \right) \hat{\psi}(r) + \frac{g}{2} \int dr \hat{\psi}^+(r) \hat{\psi}^+(r) \hat{\psi}(r) \hat{\psi}(r) \quad (2-16)$$

où $V_{ext}(r)$ est le potentiel confinant et μ est le potentiel chimique des bosons.

En décomposant le système en deux parties: une partie condensée décrite par la valeur moyenne du champ $\phi(r) = \langle \hat{\psi}(r) \rangle$ et une partie non condensée décrite par le champ

$\tilde{\psi}(r) = \hat{\psi}(r) - \phi(r)$ tel que $\langle \tilde{\psi}(r) \rangle = 0$

le terme d'interaction dans l'hamiltonien (2-16) devient :

$$\begin{aligned} \psi^+ \psi^+ \psi \psi &= |\phi|^4 + 2|\phi|^2 \phi^* \tilde{\psi} + 2|\phi|^2 \phi \tilde{\psi}^* + 4|\phi|^2 \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \\ &+ \phi^{*2} \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} + 4|\phi|^2 \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} + \phi^{*2} \tilde{\psi} \tilde{\psi} + \phi^2 \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \\ &2\phi^* \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \tilde{\psi} + 2\phi \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} + \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \tilde{\psi} \end{aligned}$$

Dans l'approximation du champ moyen de Hartree-Fock, on considère que la particule se meut sous l'action d'un champ produit par toutes les autres particules, on néglige donc l'effet des corrélations entre les particules. Nous pouvons alors écrire ce champ en fonction de la valeur moyenne du produit $\tilde{\psi}(r)\tilde{\psi}^+(r)$. Les trois derniers termes des expressions ci-dessus, s'écrivent alors:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}(r)\tilde{\psi}(r) &\cong 2\langle\tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}(r)\rangle\tilde{\psi}(r) = 2\tilde{n}(r)\tilde{\psi}(r) \\ \tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}(r) &\cong 2\langle\tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}(r)\rangle\tilde{\psi}^+(r) = 2\tilde{n}(r)\tilde{\psi}^+(r) \\ \tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}(r)\tilde{\psi}(r) &\cong 4\langle\tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}(r)\rangle\tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}(r) = 4\tilde{n}(r)\tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}(r) \end{aligned}$$

L'équation dynamique de l'opérateur de fluctuation s'écrit à partir de la relation de commutation de Heisenberg :

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}^+}{\partial t} = [\tilde{\psi}^+, \tilde{K}_2] \quad ; \quad i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = [\tilde{\psi}, \tilde{K}_2]$$

la densité de la fraction de bosons non-condensée $\tilde{n}(r)$ est donnée par la moyenne $\langle\tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}(r)\rangle$. Les termes proportionnels à la densité «anormale» $\tilde{m}(r) = \langle\tilde{\psi}(r)\tilde{\psi}(r)\rangle$ [23, 27] sont négligés. Cette approximation, dite de Popov, est satisfaite à haute température où $\tilde{n}(r) \gg \tilde{m}(r)$. En effet, lorsque la température s'approche de la température critique de condensation (c'est-à-dire la température à partir de laquelle la densité des atomes condensés devient négligeable par rapport à la densité des atomes non-condensés), le terme qui exprime la collision entre les deux phases $\tilde{m}(r)$ devient négligeable.

A basse température, on peut ignorer les densités normale et anormale car, selon l'approximation de Bogoliubov, la fraction non-condensée est très faible.

L'hamiltonien grand canonique de ce système, d'après la décomposition et les propriétés du système atomique à basse température s'écrit:

$$\hat{K} = \hat{K}_0 + \hat{K}_1 + \hat{K}_1^+ + \hat{K}_2$$

Avec:

$$\hat{K}_0 = \int dr \phi^*(r) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext} - \mu + \frac{g}{2} n_c(r) \right) \phi(r). \quad (2-17a)$$

$$\hat{K}_1 = \int dr \tilde{\psi}(r) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) - \mu + g(n_c(r) + 2g\tilde{n}(r)) \right) \phi(r) \quad (2-17b)$$

$$\hat{K}_2 = \int dr \tilde{\psi}^+(r) \mathfrak{S} \tilde{\psi}(r) + \frac{g}{2} \int dr \phi^2(r) \tilde{\psi}^+(r) \tilde{\psi}(r) + \frac{g}{2} \int dr \phi^{*2}(r) \tilde{\psi}^+(r) \tilde{\psi}(r) \quad (2-17c)$$

Dans (2-17a, b et c), nous avons introduit les quantités $\mathfrak{S} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) - \mu + 2gn(r)$

et $n(r) = n_c(r) + \tilde{n}(r)$ avec $n_c(r) = |\phi|^2$.

A partir de l'équation de mouvement de l'opérateur champ dans la représentation de Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r,t)}{\partial t} = [\psi(r,t), H] = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) - \mu \right) \hat{\psi}(r,t) + g \hat{\psi}^+(r,t) \hat{\psi}(r,t) \hat{\psi}(r,t)$$

on trouve l'équation de mouvement de condensat:

$$i\hbar \frac{\partial \phi(r,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) - \mu + gn_c + 2g\tilde{n}(r,t) \right) \phi(r,t) + g\tilde{m}(r,t) \phi^*(r,t) + g \langle \tilde{\psi}^+(r,t) \tilde{\psi}(r,t) \tilde{\psi}(r,t) \rangle \quad (2-18)$$

Si l'on considère une solution statique $\phi(r)$, selon Gross et Pitaevskii [28, 29, 30], de l'équation du condensat précédente (2-18), et après suppression des deux derniers termes, on trouve [31,32]:

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) - \mu + g(n_c(r) + 2\tilde{n}(r)) \right) \phi(r) = [\mathfrak{S} - gn_c] \phi(r) \quad (2-19)$$

cela implique que \hat{K}_1 et K_1^+ s'annulent automatiquement.

On peut aussi diagonaliser \hat{K}_2 par la transformation de Bogoliubov suivante:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(r) &= \sum_j \left(u_j(r) \alpha_j + v_j^*(r) \alpha_j^+ \right) \\ \tilde{\psi}^+(r) &= \sum_j \left(u_j^*(r) \alpha_j^+ + v_j(r) \alpha_j \right)\end{aligned}\quad (2-20)$$

avec les propriétés:

$$\int dr [u_i^*(r) u_j(r) - v_i^*(r) v_j(r)] = \delta_{ij}$$

Les opérateurs des quasi-particules α_i ont une dépendance harmonique en temps et en énergie d'excitation ε_j , et peuvent s'écrire sous la forme suivante[33]:

$$\alpha_i(t) = \alpha_i \exp\left(\frac{-i\varepsilon_i t}{\hbar}\right) \quad ; \quad \alpha_i^+(t) = \alpha_i^+ \exp\left(\frac{+i\varepsilon_i t}{\hbar}\right)$$

L'hamiltonien (1-16) dans l'approximation du champ moyen de Popov devient:

$$\hat{K}_{popov} = \int dr \phi^*(r) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) - \mu + \frac{g}{2} n_c(r) \right) \phi(r) + \sum_j \varepsilon_j \alpha_j^+ \alpha_j \quad (2-20)$$

L'équation dynamique de l'opérateur de fluctuation s'écrit à partir de la relation de commutation de Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}^+}{\partial t} = [\tilde{\psi}^+, \tilde{K}_2] \quad ; \quad i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = [\tilde{\psi}, \tilde{K}_2] \quad (2-21)$$

Cette équation peut être réécrite sous la forme d'un système d'équations (dit de Bogoliubov couplées):

$$\Im u_j(r) + g n_c(r) v_j(r) = \varepsilon_j u_j(r) \quad (2-22a)$$

$$\Im v_j(r) + g n_c(r) u_j(r) = -\varepsilon_j v_j(r) \quad (2-22b)$$

et on a:

$$\tilde{n} = \sum_j \left(|u_j|^2 + |v_j|^2 \right) \langle \alpha_j^+ \alpha_j \rangle \quad (2-23a)$$

$$\tilde{m} = 2 \sum_j u_j v_j^* \langle \alpha_j^+ \alpha_j \rangle \quad (2-23b)$$

Il apparaît, dans les équations (2-23a, b), que les coefficients u_i et v_i représentent la probabilité de présence des quasi-particules.

On peut résoudre le système d'équations (2-22a, b) par l'approximation de la densité locale [34, 35] où l'on pose:

$$u_j(r) = u(r, p) e^{i\varphi(r)} \quad (2-24a)$$

$$v_j(r) = v(r, p) e^{i\varphi(r)} \quad (2-24b)$$

avec $p = \hbar \nabla \varphi$. L'équation (2-22a, b) deviennent alors :

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V_{ext} - \mu + 2gn(r) \right) u(r, p) + gn_c(r)v(r, p) = \varepsilon(r, p)u(r, p) \quad (2-25a)$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V_{ext} - \mu + 2gn(r) \right) v(r, p) + gn_c(r)u(r, p) = -\varepsilon(r, p)v(r, p) \quad (2-25b)$$

L'approximation de Popov apporte des améliorations considérables à l'approximation de Bogoliubov elle tient compte de la fraction non-condensée [36, 37], dont la présence seule témoigne des effets thermiques ($\tilde{n} = 0$ à température nulle).

2.3 Approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov

Cette approximation consiste à introduire la densité anormale. En effet, alors que le théorème de Hugenholtz-Pines (HP) [38], donne:

$$\mu_{HP} = g(n + \tilde{n} - \tilde{m}) \quad (2-26)$$

l'équation statique de HFB donnée par [39]

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + gn_c + 2g\tilde{n} + g\tilde{m} \right] \sqrt{n_c} = \mu_c \sqrt{n_c} \quad (2-27)$$

fournit

$$\mu_c(HFB) = g(n + \tilde{n} + \tilde{m}) \quad (2-28)$$

ce qui est différent du potentiel chimique de HP donné par l'équation (2-26). Pour avoir le même potentiel chimique, il faut omettre le terme qui contient \tilde{m} et ne garder que le terme en \tilde{n} dans l'équation (2-27).

Pour pouvoir traiter un gaz de bosons piégés à température finie, il faut faire un calcul général de la fonction de réponse, c'est-à-dire, qu'il faut garder les fluctuations de toutes les densités δn_c , $\delta \tilde{n}$ et $\delta \tilde{m}$ dans les équations de mouvements (2-18).

Dans les trois approximations étudiées, on remarque que cette hypothèse n'est pas utilisée. De ce fait, les résultats obtenus pour la densité du condensat diffèrent des données expérimentales [40].

L'origine naturelle de ce problème est que bien que \tilde{m} et \tilde{n} fassent partie intégrante de la physique du système, elles ne sont pas traitées sur le même pied d'égalité que n_c .

L'idée serait donc que la dynamique des différentes variables du problème soit issue d'un même principe de départ de sorte à conserver une certaine consistance de l'approche. C'est ce que nous allons présenter au chapitre suivant.

CHAPITRE 3

APPROXIMATION DU CHAMP MOYEN DEPENDANT DU TEMPS

3.1 Rappels sur les principes variationnels

L'étude de tout système physique passe en premier lieu par la résolution de ses équations exactes. Lorsque celles-ci sont complexes ou difficiles à établir, on passe en seconde approche à une analyse approximative.

Les méthodes d'approximation sont bâties sur des hypothèses simplificatrices qui, nécessairement, restreignent leur applicabilité à des domaines ou à des régimes particuliers. Parmi ces derniers, les plus fréquemment utilisés, on citera les régimes perturbatifs, ou de couplage faible, où l'un des paramètres caractéristiques du système étudié (température, vitesse, énergie,.....) prend des valeurs relativement petites par rapport au reste des paramètres. On procède alors à des développements en série des solutions en tronquant ces séries à des ordres (généralement les plus bas) qui permettront de conduire à bout l'ensemble des calculs [41].

Il va de soi, néanmoins, qu'il existe des régimes (ou des systèmes) où il n'existe pas de paramètre petit. L'hypothèse perturbative perd alors de son sens et il devient difficile d'obtenir des descriptions réalistes.

Dans d'autre cas, bien que l'hypothèse perturbative demeure valable, le système possède un grand nombre de degrés de liberté. Aussi même une résolution exacte devient quasiment impossible. On a alors recours à des méthodes numériques du type Monte-Carlo. Ces méthodes de simulation, bien que très puissantes, sont rapidement limitées par les capacités des calculateurs. Il faut beaucoup d'ingéniosité et de perspicacité pour analyser des problèmes concrets.

Une autre façon de concevoir le problème et qui remonte très loin dans l'histoire consiste à chercher quelles sont les quantités qui deviennent minimales lorsque le système vérifie ses équations de mouvement. Une fois ces variables caractéristiques identifiées, on construit des méthodes d'approximation, dites variationnelles, et l'on postule que plus les variables sous-citées sont proches de leurs minimas, plus l'on sera proche des solutions exactes, et donc mieux sera notre description du système [42, 43]. C'est dans ce contexte

que l'on peut citer le principe variationnel de Rayleigh-Ritz [44, 45] qui cherche à déterminer l'état fondamental d'un système en minimisant son énergie.

Une foule d'autres principes existe dans la littérature, allant de la chimie à la mécanique, où l'on vise à minimiser telle ou telle quantité. Plus cette quantité est petite, meilleur est le choix que l'on a fait pour les espaces variationnels.

Pour les systèmes dynamiques, où la dépendance en temps des degrés de liberté joue un rôle majeur, l'approche variationnelle est radicalement différente. En effet, il n'y a plus de sens dans ce contexte à minimiser une quantité donnée car il s'agit maintenant d'obtenir des équations de mouvement approchées qui ne minimisent pas forcément, même dans le cas exact, une quelconque fonctionnelle. Dans ce contexte, on peut citer les principes variationnels de Lippmann-Schwinger [46] et de Blaizot-Ripka [47] qui se proposent d'optimiser les amplitudes de transition dans les processus de collision. On citera aussi le principe variationnel de Frenkel-Dirac [48, 49] bâti autour de l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Le principe variationnel de Balian-Vénéroni [50, 51, 52], quant à lui, se propose d'optimiser la valeur moyenne d'une observable mesurée à partir de la connaissance, même imparfaite, de l'état initial du système. Ce principe se voue donc à des systèmes décrits par leur opérateur densité, mais l'on comprendra aisément qu'il peut se ramener aux principes variationnels sus-cités. Il est bâti autour de l'équation de Liouville-von-Neumann qui gouverne l'évolution exacte de l'opérateur densité.

Ce principe présente donc des avantages à plusieurs égards. En premier lieu, utilisant le formalisme de l'opérateur densité, il tient compte par essence même des effets statistiques et thermiques; la température est inhérente au principe. En second lieu, la présence d'une évolution temporelle intrinsèque fait que le formalisme est en mesure de s'appliquer aux systèmes loin de l'équilibre thermique. Par ailleurs le formalisme variationnel peut s'affranchir de toute hypothèse perturbative.

3.2 Formalisme général du principe de Balian-Vénéroni:

3.2-1 Introduction

Le principe variationnel de Balian-Vénéroni [50, 51, 52] permet d'obtenir une dynamique approchée visant à prédire la valeur moyenne d'une observable, une fois que des ansätze (espaces d'essai) aient été choisis pour les objets variationnels.

Pour évaluer cette valeur moyenne, il faut déterminer l'opérateur densité du système à l'instant final t_1 . Pour cela, on résout l'équation de Liouville-Von-Neumann:

$$i\hbar \frac{dD(t)}{dt} = [H, D(t)] \quad (3-1)$$

avec la condition initiale $D(t_0) = D_0$. La solution formelle de cette équation est de la forme :

$$D(t) = U^+(t, t_0) D_0 U(t, t_0) \quad (3-2)$$

où U est l'opérateur d'évolution vérifiant $U(t, t_0) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} H(t - t_0)\right)$

Pour un système préparé dans un état initial, le résultat cherché est donné par

$$\langle A \rangle_{t_1} = \text{Tr} A D(t_1) = \text{Tr} A U(t_1, t_0) D_0 U(t_0, t_1) \quad (3-3)$$

Pour avoir l'expression de $\langle A(t) \rangle$ dans la représentation de Heisenberg, il suffit d'utiliser la propriété de groupe satisfaite par U et l'invariance cyclique de la trace.

$$\langle A \rangle_{t_1} = \text{Tr} U(t_0, t_1) A U(t_1, t_0) D(t_0) = \text{Tr} A(t_1, t_0) D(t_1) \quad (3-4)$$

Pour cela, on résout l'équation de Heisenberg pour l'observable $\hat{A}(t_1, t)$:

$$i\hbar \frac{d\hat{A}(t_1, t)}{dt} = -[\hat{A}(t_1, t), H] \quad (3-5)$$

avec la condition finale $\hat{A}(t_1, t_1) = \hat{A}$

En pratique, pour la majorité des systèmes physiques comprenant de nombreux degrés de liberté, l'équation de Liouville-Von-Neumann (3-1) et celle de Heisenberg (3-5) ne peuvent pas être résolues exactement et l'évaluation exacte de la valeur moyenne (3-3) ou (3-4) est impossible. Par ailleurs, le nombre élevé de degrés de liberté du système entraîne que l'état initial D_0 peut lui-même avoir une forme compliquée qui empêche toute manipulation. De ce fait, le recours à des méthodes d'approximation est inévitable. Ces méthodes poursuivent en général deux objectifs. Tout d'abord, elles visent à réduire le nombre de degrés de liberté. De plus, elles s'attachent à simplifier la description des couplages entre ces degrés de liberté par l'introduction d'hypothèses simplificatrices plausibles (gaz idéal, interactions limitées aux proches voisins,.... etc.).

3. 2-2 Le principe variationnel de Balian-Vénéroni

Balian et Vénéroni [52] ont introduit un principe variationnel dépendant du temps, bâti autour de l'équation exacte de Liouville-Von-Neumann.

Lorsque l'on n'introduit aucune restriction sur les espaces variationnels, on retrouve les équations exactes (3-1) et (3-4). Mais pour des espaces variationnels restreints, il permet d'obtenir de façon consistante une approximation au résultat de la mesure en fournissant une évaluation optimale de la valeur moyenne de l'observable considérée.

L'outil variationnel introduit par Balian et Vénéroni est la fonctionnelle \mathfrak{S} [52] suivante:

$$\mathfrak{S} = \text{Tr}AD(t_1) - \int_{t_0}^{t_1} dt \text{Tr}A(t) \left(\frac{dD(t)}{dt} + i[H, D(t)] \right) \quad (3-6)$$

On reconnaît dans le terme entre parenthèses l'équation (3-1) de Liouville Von Neumann. Dans (3-6), il apparaît deux objets variationnels: les opérateurs $A(t)$ et $D(t)$. Le symbole Tr dénotera une trace sur tous les états de l'espace de Fock approprié au système à N-corps considéré. Les crochets indiquent un commutateur et H est l'hamiltonien du système. En intégrant par parties l'expression (3-6), on obtient:

$$\mathfrak{S} = \text{Tr}A(t_0)D(t_0) + \int_{t_0}^{t_1} dt \text{Tr}D(t) \left\{ \frac{dA(t)}{dt} + i[H, A(t)] \right\} \quad (3-7)$$

Les données qui définissent la mesure, à savoir l'opérateur densité D_0 connu à l'instant initial t_0 , et l'observable A mesurée à l'instant final t_1 interviennent par les conditions aux limites:

$$D(t_0) = D_0 \quad ; \quad A(t) = A \quad (3-8)$$

Les quantités $A(t)$ et $D(t)$ qui rendent \mathfrak{S} stationnaire, sont celles qui fournissent la prédiction optimale, pour un choix donné d'espaces variationnels pour $A(t)$ et $D(t)$, de la valeur moyenne de l'observable A au temps t_1 , à partir de la connaissance de l'état initial du système D_0 à l'instant t_0 . les variations de (3-6) par rapport à $A(t)$ donnent:

$$\text{Tr} \delta A(t) \left[\frac{dD(t)}{dt} + i[H, D(t)] \right] = 0 \quad (3-9)$$

tandis que celles par rapport à $D(t)$

$$\text{Tr} \delta D(t) \left[\frac{dA(t)}{dt} + i[A(t), H] \right] = 0 \quad (3-10)$$

Quand les variations $\delta A(t)$ et $\delta D(t)$ ne sont soumises à aucune restriction, c'est-à-dire quand les espaces variationnels sont les plus généraux possibles, on est conduit bien sûr aux équations d'évolution exactes (3-1, 3-5).

3.2-3 Application du principe de Balian Vénéroni à un système de bosons piégés

Nous nous intéressons, à un système de n bosons en interaction, et nous introduisons les opérateurs de création et d'annihilation de bosons obéissant aux relations de commutation usuelles,

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij} \quad [a_i^+, a_j^+] = [a_i, a_j] = 0 \quad i, j = 1, \dots, n \quad (3-11)$$

L'espace de Fock associé à notre système est construit au moyen des opérateurs de création $\{a_i^+, i = 1, \dots, n\}$. Il est commode d'introduire les opérateurs α_i à $2n$ composantes,

$$\alpha = \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix}, \quad (3-12)$$

pour lesquels les relations de commutation (3-11) s'écrivent:

$$[\alpha_i, \alpha_j^+] = \tau_{ij} \quad , \quad \tau = \begin{pmatrix} 0 & 1_n \\ 1_n & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad (1_n) = \delta_{ij} \quad (3-13)$$

On écrit l'opérateur variationnel linéaire le plus général $A(t)$ sous la forme

$$A = v_a I + \tilde{\lambda}_a \tau \alpha + \frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau S_a \alpha, \quad (3-14)$$

où interviennent le c -nombre v_a , le vecteur à $2n$ composantes λ_a , et la matrice $(2n \times 2n)$ S_a . La forme variationnelle que nous adoptons pour l'opérateur $D(t)$ est l'exponentielle d'une forme quadratique, que nous pouvons écrire sous la forme factorisée:[51]

$$D = \exp(v_a I) \exp(\tilde{\lambda}_a \tau \alpha) \exp\left(\frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau S_a \alpha\right) \quad (3-15)$$

où ν_d , λ_d et S_d sont des objets du même type que ν_a , λ_a et S_a . Une telle matrice densité correspond à un état non corrélé du problème bosonique à N -corps, et décrit un système de particules (où quasi particules) indépendantes. Comme cet espace restreint permet de conduire explicitement l'ensemble des calculs, il constitue souvent un choix privilégié dans la théorie des systèmes à N -corps. L'opérateur (3-15), qui définit aussi une transformation canonique généralisée, où il ressort que, pour que cet opérateur appartienne à l'espace des matrices densité, il faut que la matrice S_d , définisse une transformation de Bogoliubov acceptable (annexe B). dans la suite de ce travail, nous supposons que cette propriété est toujours vérifiée.

Les paramètres variationnels du problème sont $A(t)$, pour $S_d(t)$, et $\nu_d(t)$, $\lambda_d(t)$ et $s_d(t)$ pour $D(t)$. Toutefois, il est plus pratique de remplacer ces trois derniers paramètres par un ensemble équivalent constitué de la fonction de partition Z du vecteur des valeurs moyennes de l'opérateur à un boson $\langle \alpha \rangle$, ainsi que la matrice des contractions ρ (que l'on appellera à l'occasion matrice densité à un corps). Le passage de l'ensemble $\{\nu_d(t), \lambda_d(t), S_d(t)\}$ à $\{Z, \langle \alpha \rangle, \rho\}$ est régi par les relations suivantes [51] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \log Z \equiv \log \text{Tr} D = \nu_d + \frac{1}{2} \tilde{\lambda}_d \tau \rho \lambda_d + \frac{1}{2} \log \det \sigma_1 \rho \\ \langle \alpha \rangle \equiv \text{Tr} \alpha D / Z = \frac{1}{1 - e^{-s_d}} \lambda_d \\ (\rho)_{ij} \equiv \text{Tr} (\overline{\tau \alpha \tilde{\alpha}})_{ij} D / Z = \left(\frac{1}{e^{s_d} - 1} \right)_{ij} \end{array} \right. \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1_n \\ 1_n & 0 \end{pmatrix} \quad (3-16)$$

Dans ces expressions, nous avons introduit les opérateurs centrés $\bar{\alpha} = \alpha - \langle \alpha \rangle$. On remarque que la matrice ρ possède la structure formelle que l'on attend pour un système relevant de la statistique de Bose. C'est en fait l'expression généralisée de la distribution de Bose-Einstein. Avant d'effectuer la variation de l'action B(3-7), examinons un cas particulier de l'opérateur (3-15) que nous aurons l'occasion de considérer:

Un état pur est un état dont l'opérateur densité est un projecteur. Il vérifie donc $D^2 = D$. D est alors un projecteur sur les états cohérents (pour des fermions, ce serait sur un déterminant de Slater). Ceci se traduit par les conditions suivantes sur Z et ρ :

$$\begin{aligned} Z &= 1 \\ \rho(\rho+1) &= 0 \end{aligned} \quad (3-17)$$

les valeurs moyennes $\langle \alpha \rangle$ ne devant pas satisfaire de condition particulière.

Ecrivons maintenant l'expression de l'action \mathfrak{S} (3-7). Nous commençons par le calcul

de $TrA \frac{dD}{dt}$. Il est plus simple d'évaluer d'abord $TrAD$ puis de dériver cette expression

par rapport au temps, en gardant constants les paramètres de A .

On a

$$TrAD = Z \left\{ v_a + \tilde{\lambda}_a \langle \alpha \rangle - \frac{1}{2} tr S_a (\rho - \langle \alpha \rangle \langle \tilde{\alpha} \rangle \tau) \right\}, \quad (3-18)$$

Le symbole tr dénote une trace matricielle sur les indices discrets et continus. En introduisant le vecteur:

$$L_a = \lambda_a - S_a \langle \alpha \rangle \quad (3-19)$$

On obtient aisément

$$TrA\dot{D} = \frac{\dot{Z}}{Z} TrAD + Z \left\{ \tilde{L}_a \tau \langle \dot{\alpha} \rangle - \frac{1}{2} tr S_a \dot{\rho} \right\} \quad (3-20)$$

Passons maintenant au calcul de la deuxième partie de l'intégrand de l'action (3-7), $Tr[A, H]D$. On peut obtenir une expression formelle de ce terme sans spécifier la forme particulière de l'hamiltonien H . Pour ce faire, on remarque que la variation d'un opérateur exponentiel par rapport à ses paramètres ν , λ et S s'écrit comme le produit de cet opérateur par un polynôme du deuxième degré en α . Ceci permet d'exprimer la variation de l'énergie ζ associée à une variation de D sous la forme:

$$\delta \zeta \equiv \tilde{\nu} \tau \delta \langle \alpha \rangle - \frac{1}{2} tr h \delta \rho. \quad (3-21)$$

Le vecteur ν et la matrice h définis par (3-21) sont fournis par les différentielles de l'énergie:

$$\nu(\langle \alpha \rangle, \rho) = \tau \frac{\partial \zeta}{\partial \langle \alpha \rangle} \quad h(\langle \alpha \rangle, \rho) = -2 \frac{\partial \zeta}{\partial \rho} \quad (3-22)$$

où l'on introduit la convention $\frac{\partial}{\partial \rho_{ji}} = \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \right)_{ij}$

Si maintenant l'on remarque que pour un choix (3-14) et (3-15), le commutateur

$[D, H]$ est aussi le produit d'un polynôme d'ordre 2 en α et de D , on voit que la quantité $TrD[D, A]H$, peut s'exprimer en fonction de ν et h . On obtient ainsi:

$$Tr[A, H]D = Z \left\{ \tilde{L}_a \tau \nu + \frac{1}{2} tr(S_a[\rho, h]) \right\} = -Z \left\{ \tilde{\nu} \tau L_a - \frac{1}{2} tr([\rho, S_a]h) \right\} \quad (3-23)$$

On notera que dans (3-23) les quantités $-L_a$ et $-\rho, S_a$ jouent le même rôle que $\delta\langle\alpha\rangle$ et $\delta\rho$ dans (3-21). Finalement, en rassemblant les expressions (3-20) et (3-23), l'action réduite s'écrit:

$$\mathfrak{S} = TrAD|_{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} dt \left(\frac{\dot{Z}}{Z} TrAD - iZ \left\{ \tilde{L}_a \tau (i\langle\dot{\alpha}\rangle - \nu) - \frac{1}{2} tr S_a (i\dot{\rho} - [\rho, h]) \right\} \right) \quad (3-24)$$

Pour établir les équations de mouvement de $D(t)$, on varie l'action réduite (3-24) par rapport à ν_a, λ_a (ou de façon équivalente L_a et S_a). Comme $TrAD$ est linéaire en ν_a , la variation de (3-23) par rapport à ν_a est égale à \dot{Z} . La première équation du mouvement est donc,

$$\dot{Z} = 0 \quad (3-25)$$

La fonction de partition est donc conservée. La stationnarité de l'action par rapport à L_a et S_a fournit les deux autres équations de mouvement

$$\begin{cases} i\langle\dot{\alpha}\rangle = \nu \\ i\dot{\rho} = [\rho, h] \end{cases} \quad (3-26)$$

Le système (3-25, 3-26, 3-27), où ν et h sont donnés par (3-22), constitue les équations du champ moyen dépendant du temps [25]. Pour un système de fermions, l'équation (3-26) n'a évidemment pas d'analogue; l'équation correspondant à (3-27) est l'équation de Hartree-Fock (ou de Hartree-Fock-Bogoliubov) dépendant du temps, formellement identique à (3-27) à condition de remplacer ξ par l'énergie de Hartree-Fock [53].

Les équations (3-25, 3-27), qui définissent l'évolution de l'opérateur $D(t)$, ne dépendent ni de l'observable A , ni du temps de mesure t_1 . La résolution de ces équations

suffit au calcul de $TrAD(t_1)$ qui est donc ramenée à un problème aux valeurs initiales. Celles-ci consistent en l'ensemble des trois contractions de l'opérateur $D(t)$ au temps t_0 : $Z(t_0)$, $\langle \alpha \rangle(t_0)$ et $\rho(t_0)$.

Les équations de mouvement TDHFB (de l'anglais Time-Dependent-Hartree-Fock-Bogoliubov) (3-26, 3-27), régissent la dynamique d'un système de bosons à température finie. Nous allons exploiter ces résultats pour un système de bosons piégés par un potentiel extérieur $V_{ext}(r)$. Cela nous permettra de comparer nos résultats avec ceux obtenus par d'autres approximations.

Les équations TDHFB peuvent s'écrire sous une forme plus simple: [51]

$$i\hbar \frac{\partial \langle a \rangle}{\partial t} = \frac{\partial \xi}{\partial \langle a^+ \rangle}, \quad (3-28a)$$

$$i\hbar \frac{\partial \langle a^+ \rangle}{\partial t} = -\frac{\partial \xi}{\partial \langle a \rangle} \quad (3-28b)$$

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -2 \left[\rho, \frac{\partial \xi}{\partial \rho} \right], \quad (3-28c)$$

2 4 Application à un gaz de bosons piégés

Dans l'espace position, les opérateurs a^+ et a dénotent l'opérateur champ et son conjugué, $\psi(r)$ et $\psi^+(r)$. Les opérateurs \bar{a} et \bar{a}^+ sont les opérateurs centrés qui décrivent les fluctuations du champ autour de sa valeur moyenne. A partir de ces identifications, on remarque que la valeur moyenne $\langle \bar{a}^+ \bar{a} \rangle$ est la densité non-condensée \tilde{n} , et $\langle \bar{a} \bar{a} \rangle$ est la densité anormale \tilde{m} . La quantité $|\langle a \rangle|^2 = |\langle \tilde{\psi}(r) \rangle|^2$ est la densité condensée $n_c = |\phi(r)|^2$.

Les composantes de la matrice $1 + 2\rho$ s'écrivent en fonction de \tilde{n} , \tilde{m} comme suit

$$1 + 2\rho = \begin{pmatrix} 1 + 2\tilde{n} & -2\tilde{m} \\ -2\tilde{m}^* & -1 - 2\tilde{n} \end{pmatrix} \quad (3-29)$$

On peut maintenant écrire (3-28a, b) sous une forme naturelle pour notre problème :

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial \xi}{\partial \phi^*} \quad (3-30a)$$

$$i\hbar \frac{\partial \phi^*}{\partial t} = -\frac{\partial \xi}{\partial \phi} \quad (3-30b)$$

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} = -2 \left[\tilde{m} \frac{\partial \xi}{\partial \tilde{m}} - \tilde{m}^* \frac{\partial \xi}{\partial \tilde{m}^*} \right] \quad (3-30c)$$

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{m}}{\partial t} = 4 \left[\frac{\partial \xi}{\partial \tilde{n}} \tilde{m} - \frac{\partial \xi}{\partial \tilde{m}^*} \left(\tilde{n} + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (3-30d)$$

(3-30-

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{m}^*}{\partial t} = -4 \left[\frac{\partial \xi}{\partial \tilde{n}} \tilde{m}^* - \frac{\partial \xi}{\partial \tilde{m}} \left(\tilde{n} + \frac{1}{2} \right) \right] \text{e)}$$

Considérons l'Hamiltonien grand canonique de bosons piégés [53]

$$\hat{H} = \int_r a^+(r) [T(r) + V_{ext}(r) - \mu] a(r) + \frac{g}{2} \int_r a^+(r) a^+(r) a(r) a(r), \quad (3-31)$$

où μ est le potentiel chimique des particules et $T(r)$ est leur énergie cinétique

Pour un opérateur densité gaussien, le calcul de l'énergie du système $\xi = \langle \hat{H} \rangle$ s'effectue aisément par application du théorème de Wick [53]. On obtient ainsi

$$\begin{aligned} \xi = \int_r [& -\frac{\hbar^2}{2m} \phi^* \Delta \phi + (V_{ext} - \mu) |\phi|^2 + \frac{g}{2} |\phi|^4 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \tilde{n} + (V_{ext} - \mu) \tilde{n} \\ & + g \tilde{n}^2 + \frac{g}{2} |\tilde{m}|^2 + \frac{g}{2} (4\tilde{n} |\phi|^2 + \tilde{m}^* \phi^2 + \tilde{m} \phi^{*2}) \end{aligned} \quad (3-32)$$

En calculant les différentes dérivées qui interviennent dans (3-32) on obtient finalement les équations:

$$i\hbar \dot{\phi} = [T(r) + V_{ext}(r) - \mu + gn_c + 2g\tilde{n}] \phi(r, t) + g\tilde{m} \phi^*(r, t), \quad (3-33a)$$

$$i\hbar \dot{\phi}^* = -[T(r) + V_{ext}(r) - \mu + gn_c + 2g\tilde{n}] \phi^*(r, t) - g\tilde{m}^* \phi(r, t), \quad (3-33b)$$

$$i\hbar \dot{\tilde{m}} = \left[T(r) + V_{ext}(r) - \mu + 2g \left(n_c + 2\tilde{n} + \frac{1}{2} \right) \right] \tilde{m} + g(2\tilde{n} + 1) \phi^2(r, t), \quad (3-33c)$$

$$i\hbar \dot{\tilde{m}}^* = - \left[T(r) + V_{ext}(r) - \mu + 2g \left(n_c + 2\tilde{n} + \frac{1}{2} \right) \right] \tilde{m}^* - g(2\tilde{n} + 1) \phi^{*2}(r, t), \quad (3-33d)$$

$$i\hbar \dot{\tilde{n}} = -g(\tilde{m} \phi^{*2}(r, t) - \tilde{m}^* \phi^2(r, t)) \quad (3-33e)$$

Regardons maintenant les propriétés d'invariance du système. On peut d'abord aisément vérifier que l'énergie du champ moyen $\xi = \langle \tilde{H} \rangle$ est une constante de mouvement.

Par ailleurs, l'invariant de Heisenberg I , donné par $\rho(\rho + 1) = \frac{I-1}{4}$ est aussi conservé. Cet

invariant s'écrit dans notre cas $\frac{I-1}{4} = \tilde{n}(\tilde{n} + 1) - |\tilde{m}|^2$.

(notons que $I = \coth^2\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)$ pour une distribution thermique à l'équilibre [48]). Cette dernière propriété est en fait liée à la forme que l'on a choisie pour l'opérateur densité. Elle montre en particulier, qu'un état initialement pur, $I=1$, reste pur durant l'évolution. Cette observation n'est qu'une conséquence du champ moyen, où il n'y a pas apparition dynamique des corrélations à 2 corps et plus. Il est aussi aisé en second lieu, de noter que la quantité $n = n_c + \tilde{n}$ est conservée. Cela témoigne de la conservation du nombre total de particules du système.

Comme il est aisé de le constater, les équations (3.33-a, 3.33-e) généralisent toutes les approximations étudiées, à savoir, Gross-Pitaevskii (GP), Popov et HFB.

En effet, alors que (3.33a, b) contiennent des termes absents dans GP, Popov et HFB, on voit l'apparition d'équations dynamiques pour la densité non-condensée et pour la densité anormale. Cette dynamique produite un effet de feedback sur le condensat qui est ainsi modifié par rapport à toutes les dynamiques connues. Nos équations sont simplement self-consistantes.

Voyons maintenant la portée réelle de nos équations en comparant, en premier lieu, leurs prédictions dans la situation la plus connue : le cas statique.

CHAPITRE 4

RESOLUTION DES EQUATIONS TDHFB STATIQUES

La situation statique est intéressante à plusieurs égards. D'une part, elle correspond à des cas réels où des expériences ont été effectuées et où des calculs théoriques existent déjà. On peut donc à priori confronter les prédictions de notre approximation aux résultats expérimentaux et théoriques. D'autre part, l'étude du cas statique est un point de départ pour l'analyse des situations dynamiques beaucoup plus complexes

4.1 Température nulle

Commençons d'abord par la situation la plus simple à $T=0$ où tous les atomes sont condensés. Du système TDHFB statique, il reste $n_{c_0} = n$ et $\tilde{n}_0 = \tilde{m}_0 = 0$. Dans ce cas, nous avons une seule équation à résoudre, à savoir

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext}(r) - \mu + gn_{c_0}(r) \right) \phi_0(r) = 0 \quad (4.1)$$

qui est encore une équation aux dérivées partielles. Cependant, dans la quasi-totalité des expériences (JILA, MIT, ...), l'énergie cinétique des atomes est assez faible devant leur énergie potentielle de sorte que l'on peut la négliger; c'est ce que l'on appelle l'approximation de Thomas Fermi (TF) et c'est ce que nous allons supposer par la suite.

Puisque les atomes sont condensés, la symétrie du système est brisée et le paramètre d'ordre ϕ_0 est non-nul. Cela entraîne donc que $n_{c_0}(r) = \frac{\mu - V_{ext}}{g}$.

Le rayon du condensat R_{TF} est déterminé par la condition $n_{c_0}(R_{TF}) = 0$. Pour un

potentiel sphérique $V_{ext}(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$, et sachant que $N_{c_0} = N_0 = \int d\vec{r} n_{c_0}(r)$ où N_0

est le nombre total d'atomes, on aura

$$N_0 = \frac{4\pi}{g} \int_0^{R_{TF}} r^2 dr \left(\mu - \frac{1}{2} m\omega_0^2 r^2 \right) \quad (4.2)$$

Ce qui donne finalement:

$$\begin{cases} R_{TF}^{(0)} = a_{H_0} \left(15 N_0 \frac{a}{a_{H_0}} \right)^{1/5} \\ \mu_{TF}^{(0)} = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \left(15 N_0 \frac{a}{a_{H_0}} \right)^{2/5} \end{cases} \quad (4.3)$$

où $a_{H_0} = \left(\frac{\hbar}{m \omega_0} \right)^{1/2}$ est la "taille" de l'état fondamental et $a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} g$ est la longueur de

diffusion de l'onde sphérique. La densité des atomes condensés est donc complètement déterminée et le problème à température nulle est résolu.

4.2 Température finie

A température finie, il n'est pas aisé de résoudre nos équations analytiquement.

Aussi, nous nous concentrons sur des approximations de ces équations.

Nous invoquons le même raisonnement que précédemment en négligeant l'énergie cinétique des atomes. Nos équations aux dérivées partielles deviennent alors des équations différentielles ordinaires.

Dans l'approximation de Thomas -Fermi , on posera:

$$\phi_0 = \sqrt{n_{c_0}} e^{i\varphi} \quad , \quad \tilde{m}_0 = |\tilde{m}_0| e^{i\theta}. \quad (4-4)$$

On résout l'équation (3-33e) dans le cas statique $g(\tilde{m}_0 \phi_0^{*2}(r,t) - \tilde{m}_0^* \phi_0^2(r,t)) = 0$ pour obtenir $\sin(2\varphi - \theta) = 0$. On obtient donc d'une part la relation $2\varphi - \theta = n\pi$, $n = 0,1,2,\dots$, d'autre part, les équations (3.33a, d) deviennent:

$$\frac{V_{ext} - \mu}{g} + n_{c_0} + 2 \tilde{n}_0 + |\tilde{m}_0| = 0 \quad (4-5a)$$

$$g(2 \tilde{n}_0 + 1) n_{c_0} + 4 \left(\frac{V_{ext} - \mu}{g} + 2 n_{c_0} + \frac{5}{2} \tilde{n}_0 + \frac{g}{4} \right) |\tilde{m}_0| = 0 \quad (4-5b)$$

En posant $\zeta = \frac{V_{ext} - \mu}{g}$, avec $n = n_c + \tilde{n}$,

on trouve qu'en particulier, la généralisation du théorème d'Hugenholtz-Pines [38] est vérifiée:

$$|\tilde{m}| = \zeta + n + \tilde{n} \quad (4-6)$$

Nous nous mettons dans la situation $0 < T < T_c$ où T_c est la température de transition et nous résolvons numériquement les équations (4-5a, b), puis nous faisons une interpolation des résultats numériques. Cela donne les expressions:

$$\begin{cases} n_{c_0}(\zeta) = -227 - 0.0000426 I - 0.12\zeta \\ \tilde{n}_0(\zeta) = -16855 + 0.00021 I - 0.38\zeta \\ n_0(\zeta) = -17082 + 0.00017 I - 0.5\zeta \\ \tilde{m}_0(\zeta) = -33937 + 0.00038 I + 0.12\zeta \end{cases} \quad (4-7)$$

Les expressions (4-7) fournissent pour la première fois, une estimation des différentes densités atomiques du problème en fonction de la distance radiale et de la température. Elles sont encore implicites puisqu'elles font intervenir le potentiel chimique à température finie, encore inconnu à ce stade.

On peut néanmoins l'obtenir en utilisant la même procédure que dans le cas $T = 0$. On obtient finalement l'expression:

$$\mu(I) = 1.32 \mu_{TF}^{(0)} \left[1 - \frac{3.19\eta(I) - 0.176}{\eta(I_c) - 1} \right] \quad (4-8)$$

$$\mu_{TF}^{(0)} \text{ étant donné par l'expression (4-3) et } \eta(I) = \frac{I-1}{8.2} \cdot 10^{-6}, \text{ avec } I = \coth^2\left(\frac{\hbar\omega}{KT}\right)$$

On note d'une part, que cette expression n'a jamais été écrite auparavant car elle donne le potentiel chimique à température finie. D'autre part, elle ne se réduit pas, comme on pourrait s'y attendre, à $\mu_{TF}^{(0)}$ à température nulle ($I = 1$). Cela produit donc un écart définitif par rapport aux approximations précédentes et témoigne de l'effet des corrélations à 1 corps (décrit par \tilde{m}_0) même à température nulle.

On calcule aussi aisément le rayon du condensat pour avoir :

$$R_{TF}(I) = 1.15 R_{TF}^{(0)} \left[1 - \frac{\eta(I) - 1}{\eta(I_c) - 1} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4-9)$$

Là aussi, on observe les mêmes effets que précédemment et l'on aboutit aussi aux mêmes conclusions. Finalement, on obtient pour la température critique T_c (calculable via I_c):

$$I_c = 4703.67 \left(\frac{\hbar\omega}{g} \right) \left(30N_0 \frac{a}{a_H} \right)^{\frac{2}{5}} + 1,82 \cdot 10^9. \quad (4-10)$$

Cette expression peut aussi être confrontée à l'expérience.

En conclusion, la résolution numérique de nos équations statiques a permis d'aboutir à des résultats intéressants. En premier lieu, nous obtenus des expressions analytiques, vérifiables expérimentalement, pour le potentiel chimique, la taille du condensat ainsi que la température de transition. Nous tenterons dans un prochain travail de les confronter aux données expérimentales.

En second lieu, nos résultats montrent la limite à température nulle du calcul global est différente des prédictions de Gross-Pitaevskii où l'on néglige dès le départ toutes sortes de corrélations. Autrement dit, la densité anormale, bien que faible, a un effet non négligeable sur l'approximation proprement dite.

Nous allons pousser notre étude en analysant les profils de densité donnés par (4-7).

CHAPITRE 5

RESULTATS NUMERIQUES ET ANALYSE DES COURBES

Les expressions (4-7) permettent d'obtenir les différents profils des densités en fonction de la température et de la distance radiale. Les courbes ci-dessous sont obtenues avec les données suivantes : $N_0 = 10^5$, $\omega_0 = 200\pi$, $a = 5nm$, $a_H = 10^3 nm$, $m = 85.46uma$

Sur la figure 1, on présente le rayon du condensat défini par l'équation (4-9) en fonction de la température, donnée par $I = \coth^2\left(\frac{\hbar\omega}{KT}\right)$. Sur cette figure, on observe que plus I augmente plus $R_{TF}(I)$ diminue, jusqu'à la température critique ou le rayon du condensat s'annule.

Nous avons tracé sur la même figure la valeur du rayon du condensat à température nulle ($R_{TF}^{(0)}$) défini par l'équation (4-3). On note un écart de plus de 15% entre $R_{TF}(I=1)$ et $R_{TF}^{(0)}$. Cet écart est vraisemblablement dû à la présence dès le départ de la densité anormale.

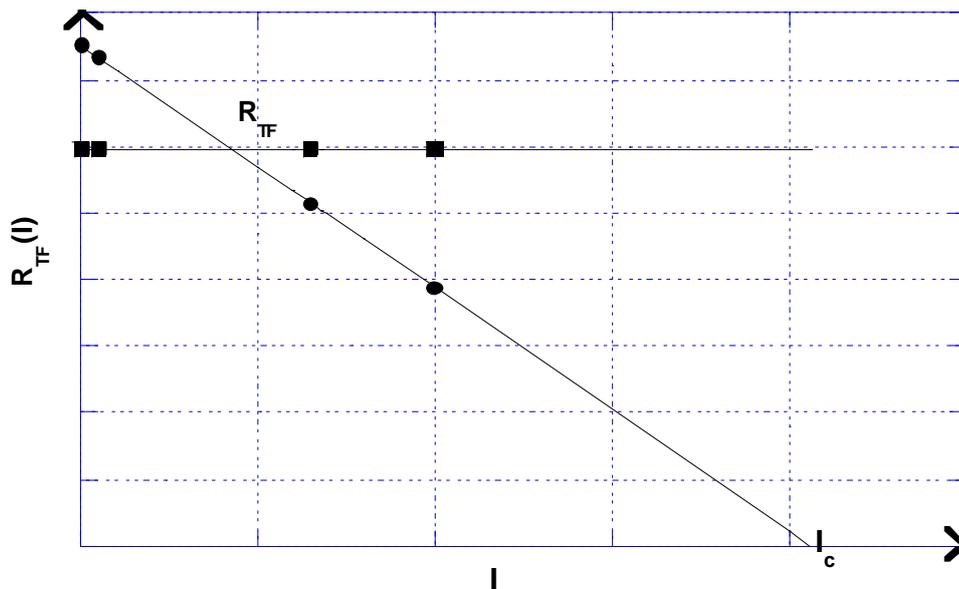


Figure 5.1 : Rayon du condensat en fonction de la température

Sur la figure 2, on trace le potentiel chimique défini par l'équation (4-8) en fonction de la température. Là aussi, on observe les mêmes effets que sur la figure 2 et les mêmes conclusions s'imposent.

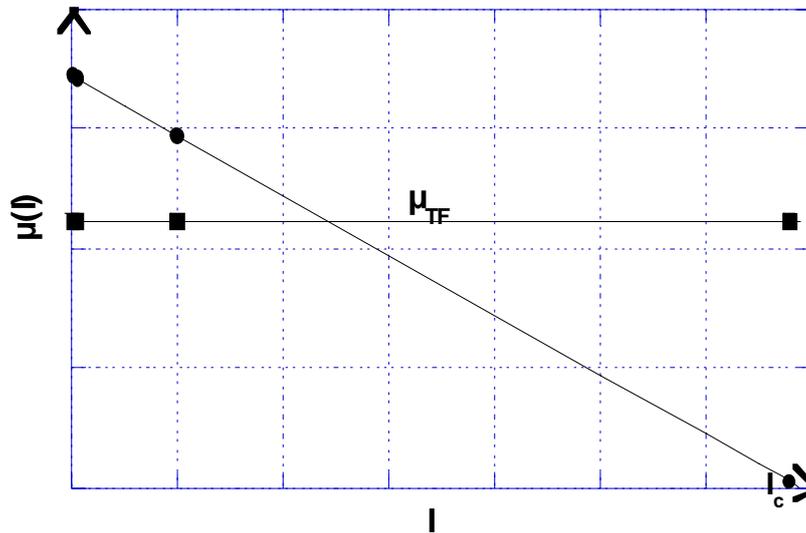


Figure 5.2: Potentiel chimique en fonction de la température

Sur les figures 3 à 15, on représente les profils des densités en fonction de la température. On remarque sur la figure 4 que même pour $I = 100$, la température est encore trop basse pour que la densité des atomes non-condensés devienne appréciable.

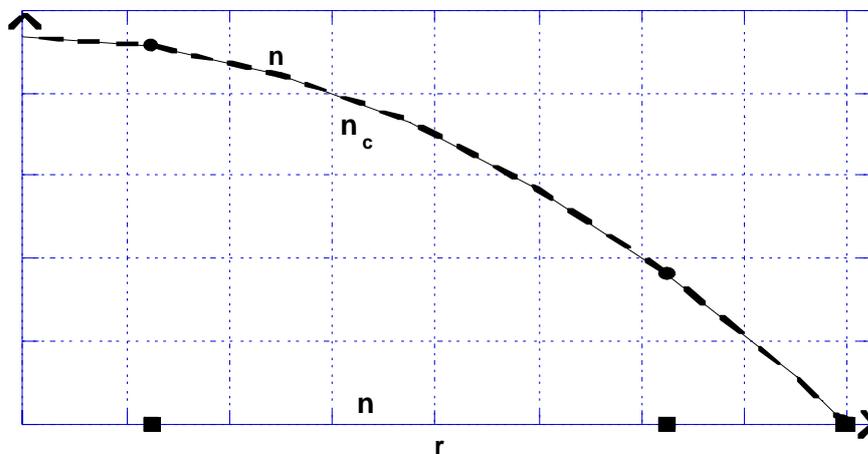


Figure 5.3 : Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 1$ ($T = 0$)

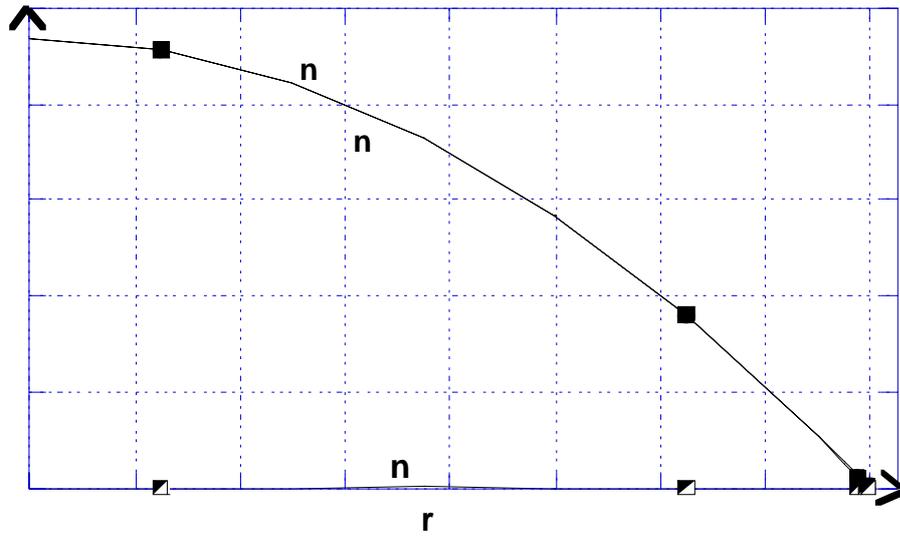


Figure 5.4: Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 100$

A partir de la figure 5 ($I = 10^6$), on commence à observer une densité non-condensée. En effet, en augmentant la température, les atomes non-condensés deviennent de plus en plus nombreux, surtout, aux frontières du piège.

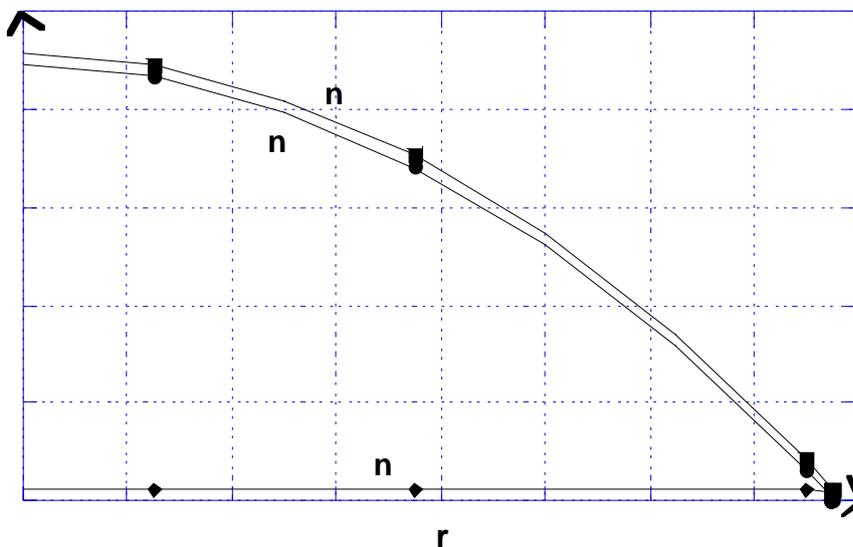


Figure 5.5 : Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 10^6$

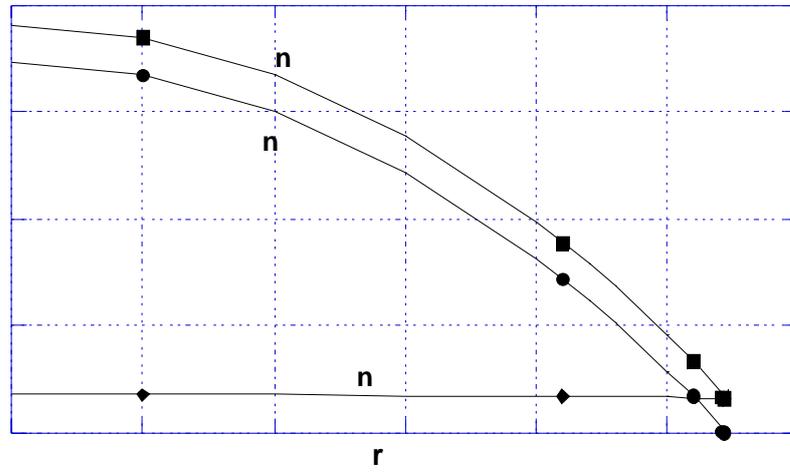


Figure 5.6 : Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 10^7$

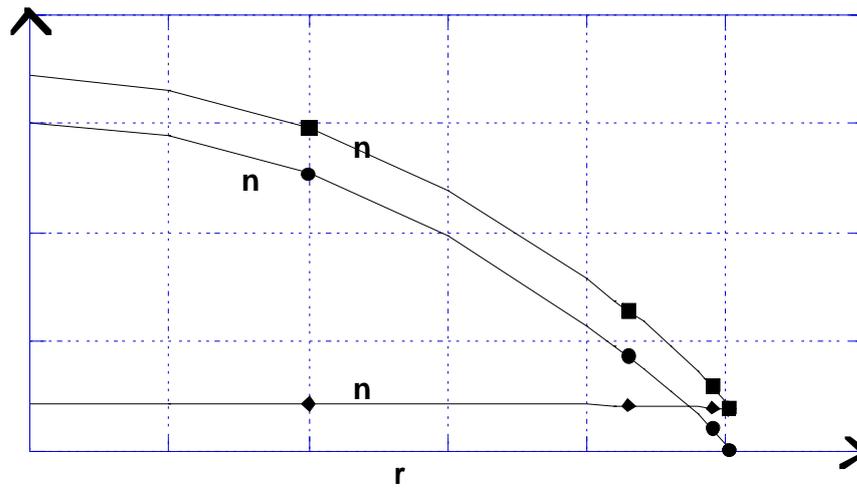


Figure 5.7 : Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 1.5 \cdot 10^7$

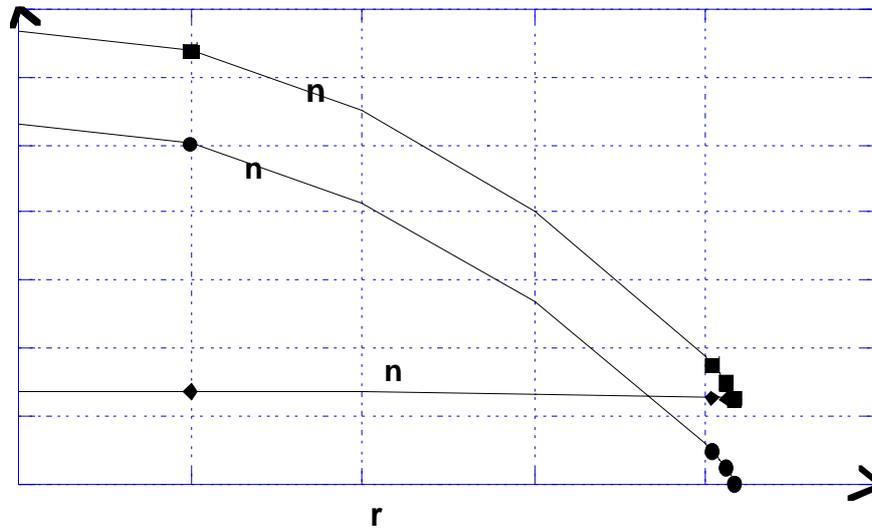


Figure 5.8 : Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 2.5 \cdot 10^7$

Cet effet est clairement visible sur la figure 9 où \tilde{n} croise n_c à des distances proches de la frontière du piège. On conclut que les atomes non-condensés naissent à la périphérie du piège. L'image est alors celle d'un nuage thermique entourant un ensemble d'atomes condensés.

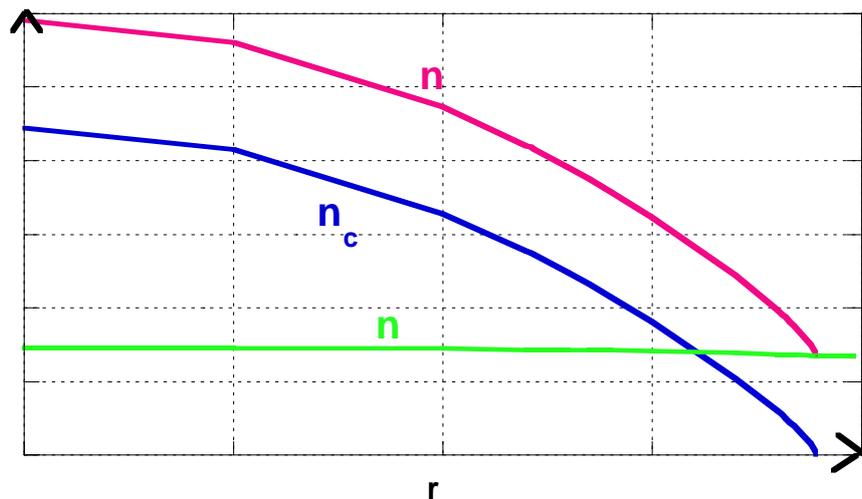


Figure 5.9: Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 3 \cdot 10^7$

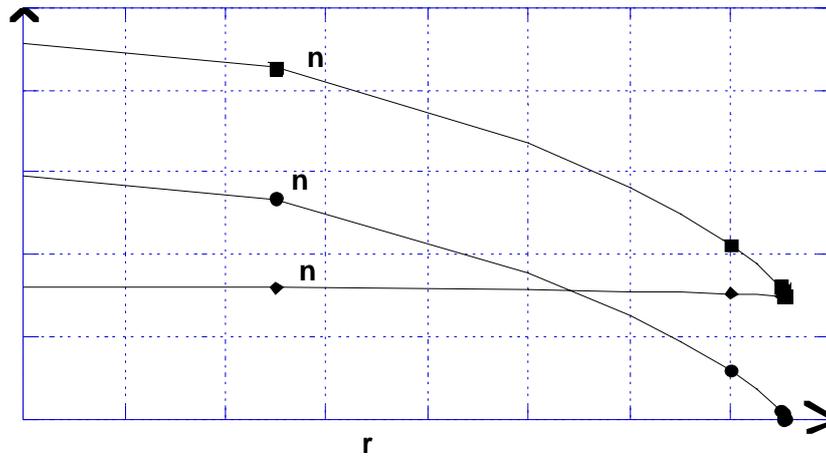


Figure 5.10: Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 3.6 \cdot 10^7$

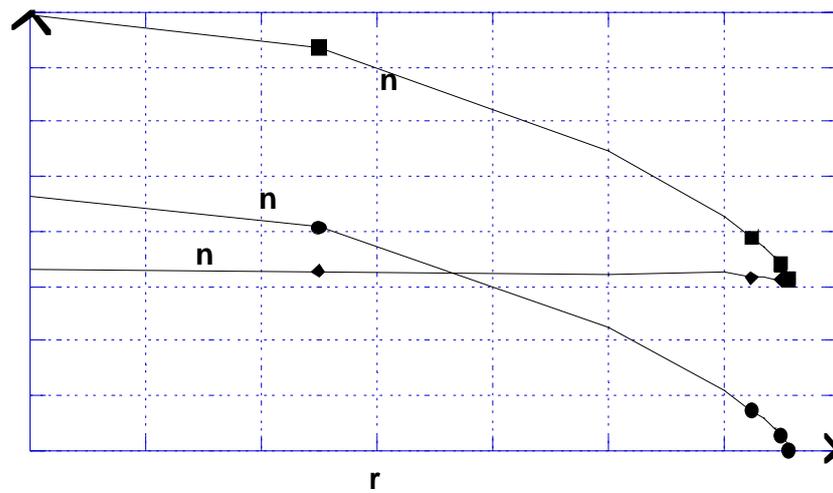


Figure 5.11: Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 3.9 \cdot 10^7$

En augmentant encore plus la température (figure 11), le nuage thermique devient de plus en plus dense et étend sur tout le volume du gaz, le croisement entre n_c et \tilde{n} a lieu pour des distances de plus en plus faibles.

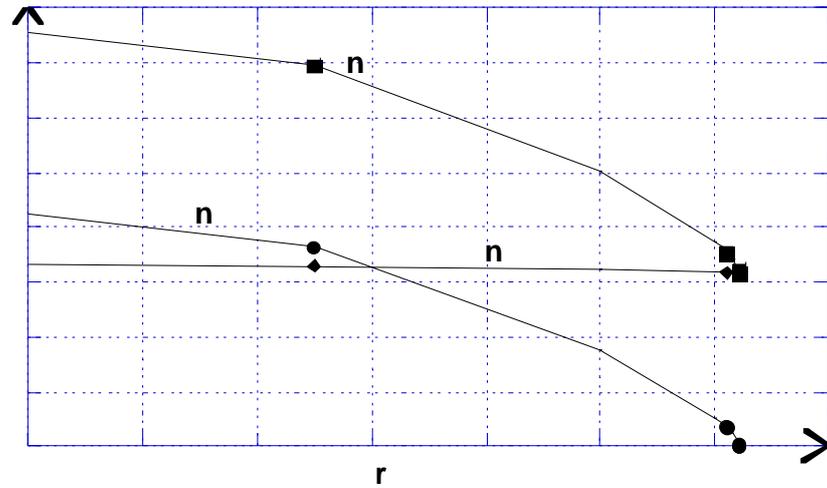


Figure 5.12 : Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 4 \cdot 10^7$

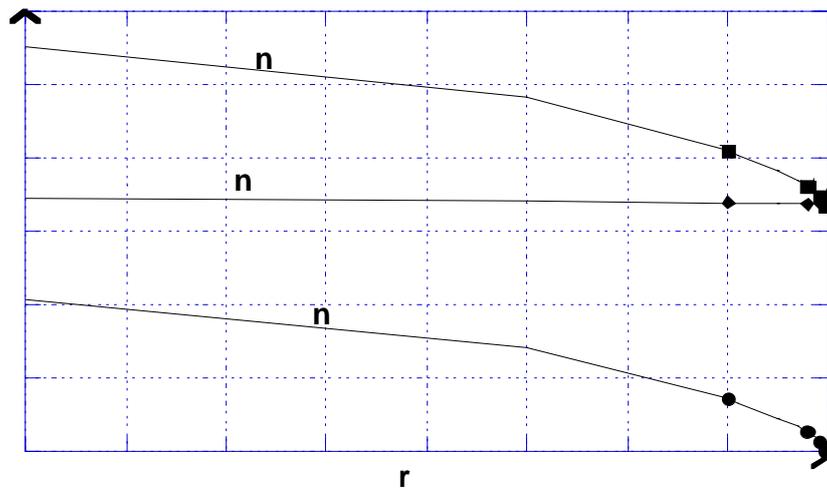


Figure 5.13 : Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 4.5 \cdot 10^7$

Au-delà de $I \sim 4.5 \cdot 10^7$, on constate une inversion de régime, la densité non-condensée devenant plus importante que la densité condensée sur tout le domaine occupé par le gaz

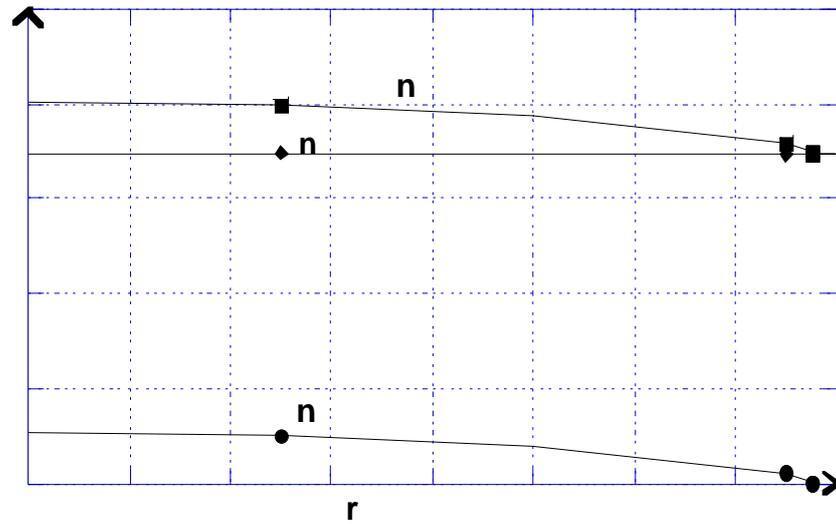


Figure 5.14: Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 4.8 \cdot 10^7$

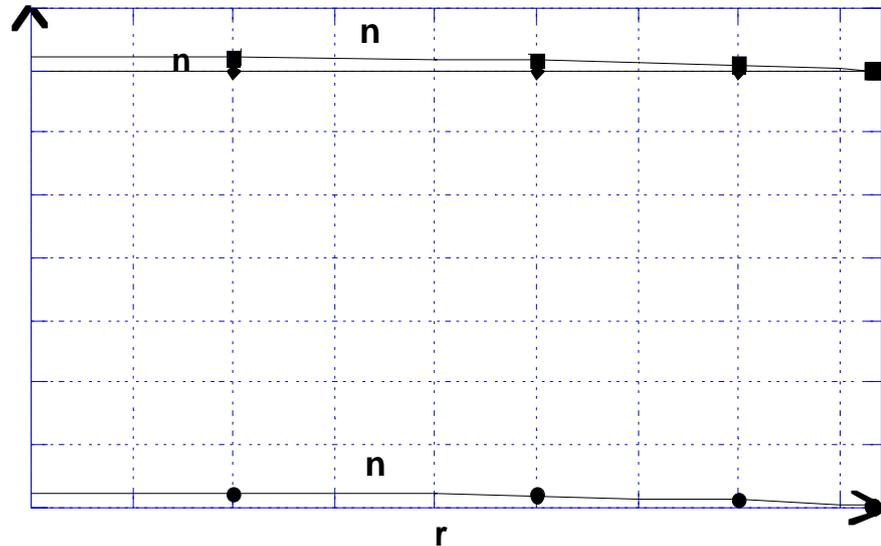


Figure 5.15: Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 4.85 \cdot 10^7$

Sur les figures 15 et 16, on remarque que \tilde{n} et n deviennent pratiquement égaux, n_c s'annulant quasiment. La température critique est donc atteinte. La remarque importante que l'on peut faire est que la fraction non-condensée a , tout au long de la variation de température, a une distribution homogène. Autrement dit, le nuage thermique est uniforme.

Bien qu'il soit difficile de mesurer cette densité, tout porte à croire que \tilde{n} ne peut pas être spatialement constant car le gaz est confiné et perd donc cette symétrie. Nous pouvons avancer que ce comportement est en partie dû à l'approximation de Thomas Fermi qui, on le sait, n'est valable que pour un nombre élevé d'atomes supérieur à 10^6 . Cette assertion pourra au futur être vérifiée, soit en faisant d'autres calculs avec un nombre élevé d'atomes, soit en mesurant expérimentalement \tilde{n} à fin de confirmer définitivement cette hypothèse.

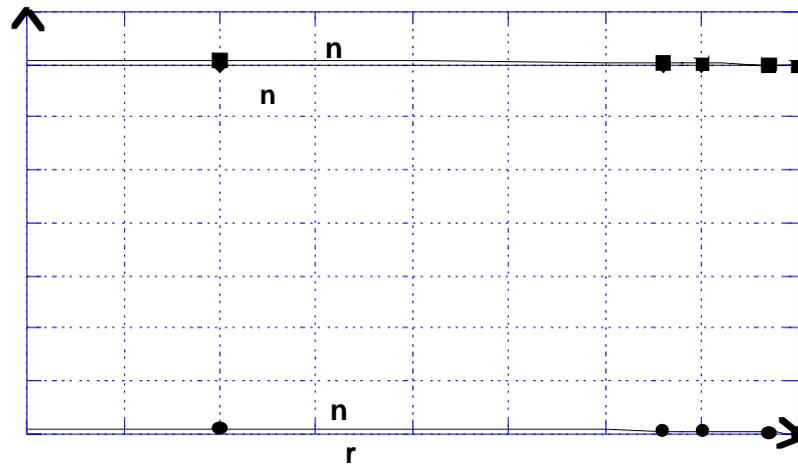


Figure 5.16 Profils des densités en fonction de la distance radiale à $I = 4.854 \cdot 10^7$

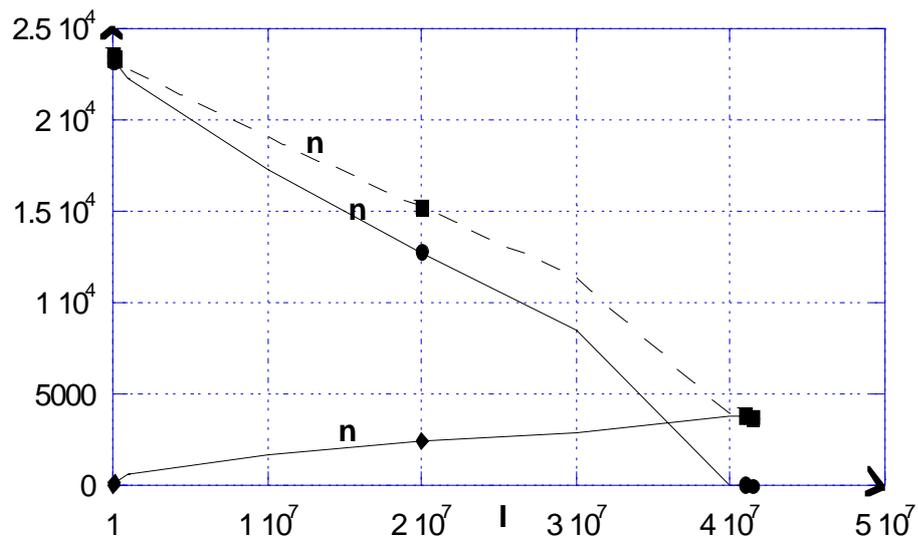


Figure 5.17: Profils des densités en fonction de la température au centre du piège ($r=0$)

On confirme sur la figure que le nuage thermique naît à la périphérie du piège et s'étale progressivement avec l'augmentation de la température jusqu' à envahir complètement l'enceinte du gaz.

Ces résultats, obtenus avec des méthodes numériques très simples, montrent que notre formalisme fournit une description assez réaliste du phénomène et nous encouragent à poursuivre l'étude dans des situations plus complexes.

Conclusion Générale et perspectives

La prédiction d'Albert-Einstein de la transition de phase dans les gaz parfaits, en dessous d'une certaine température critique T_c , n'est pas un simple effet thermique; c'est un pur effet de la statistique quantique bosonique. Pendant longtemps, la condensation de Bose-Einstein fut considérée comme un phénomène propre aux gaz parfaits, inaccessible expérimentalement, jusqu'à ce que Fritz London (1938) suggère que ce phénomène, pourrait être à l'origine de la transition superfluide de l'hélium 4, malgré la présence de fortes interactions entre les atomes d'hélium.

La recherche de système plus proche du modèle initial d'Einstein est devenue très active au cours des 20 dernières années. Le développement des techniques de piégeage et de refroidissement d'atomes par des faisceaux lumineux ou des champs magnétiques statiques a permis de faire sauter les verrous qui avaient auparavant bloqué cette recherche

Dans la première partie de ce mémoire, nous avons présenté un aperçu historique sur le phénomène, et aussi une étude sur les techniques utilisées dans la réalisation et la manipulation du BEC. Nous avons aussi présenté les mécanismes de refroidissement des atomes alcalins, et quelques résultats expérimentaux.

La deuxième partie du travail a été consacrée à l'approche théorique en rappelant les approximations historiques qui décrivent en partie cet étrange phénomène. C'est ainsi que dans le chapitre 2, l'on a exposé l'approximation de Bogoliubov à température nulle, utilisant un hamiltonien canonique avec des quasi-particules. En diagonalisant cet hamiltonien, grâce aux transformations de Bogoliubov, nous pouvons déduire les énergies d'excitation des quasi-particules. Puis l'on a présenté une extension de cette approximation, dite de Popov, qui traite d'un gaz de bosons piégés par un potentiel extérieur à température finie. Dans cette approximation, on introduit la fraction non-condensée, négligée dans l'approximation de Bogoliubov, et l'on suppose que la probabilité de collision entre un atome condensé et un autre non-condensé est faible de telle sorte que l'on peut négliger le terme de collision et donc la densité anormale. L'approximation de Popov améliore les prédictions de Bogoliubov, en offrant une bonne concordance avec les données expérimentales à des températures proches de la température critique de transition. Dans l'approximation de HFB, on a étudié le gaz de bosons condensés par le formalisme de la

fonction de Green, en utilisant la théorie de la réponse linéaire. On a montré que le potentiel chimique ne vérifie pas le théorème de Hugenholtz-Pines et nous avons ainsi pu montrer que les trois approximations ne sont pas consistantes car la dynamique des atomes non-condensés est imposée à priori. A l'opposé, notre approche basée sur le principe variationnel de Balian-Vénéroni, introduit une dynamique couplée des densités des atomes condensés et non-condensés ainsi que la densité anormale.

En choisissant des espaces d'essai relativement simples, mais physiquement acceptables, nous obtenons un système d'équations dynamiques que l'on a noté TDHFB (de l'anglais Time-Dependent-Hartree-Fock-Bogoliubov).

Nous appliquons alors ces équations TDHFB générales à un système de bosons piégés

Nous passons ensuite à l'analyse de nos équations où nous remarquons qu'étant hautement non-linéaires, il n'est pas aisé de les résoudre analytiquement. Aussi, nous nous concentrons sur une des approximations de ces équations, à savoir l'approximation de Thomas Fermi.

En second lieu, nous étudions les solutions statiques de ces équations. Non seulement retrouvons-nous les résultats des différentes approximations à température nulle, mais aussi on a réussi à obtenir des résultats à température finie. En particulier, nous avons pu calculé la densité condensée, la densité non-condensée et la densité anormale ainsi que la taille du condensat et le potentiel chimique.

Afin d'illustrer nos résultats, nous avons tracé une série de courbes qui décrivent l'évolution spatiale des différentes densités en fonction de la température. Nous concluons par deux remarques importantes.

En premier lieu, nos courbes suggérant une image bien claire du comportement du gaz piégé. Les atomes non-condensés, ou nuage thermique naissent à la périphérie du gaz pour envahir progressivement l'enceinte jusqu'à la transition où le gaz se "décondense" totalement.

En second lieu, nous observons un effet nuisible de l'approximation de Thomas-Fermi qui consiste à nous prédire une densité non-condensée quasiment uniforme. Le gaz étant confiné, ce comportement ne peut être accepté. Aussi, nous proposons de vérifier à cela, soit par la réalisation d'autres calculs avec un nombre d'atomes supérieur à 10^6 , soit

par la reformulation du problème (si $N < 10^6$) sans application de cette approximation. On comprendra aisément que ces calculs seront un peu plus complexes puisque les équations à résoudre seront des équations aux dérivées partielles non linéaires.

La suite logique de ce travail consistera à établir les petites oscillations du système, en utilisant les techniques RPA qui nous fourniront les modes d'excitations du condensat, et donc, les fréquences de résonance. Puis on passera à la résolution du système dynamique global qui nous permettra comment naît le condensat, se développe puis disparaît.

ANNEXE A

LES PROPRIETES MACROSCOPIQUES

Le nombre total des particules à faible température s'écrit

$$N = N_0 + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} Tr \left[\hat{\rho} (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) \right] \quad \text{A-1}$$

$\hat{\rho}$ étant l'opérateur densité définie par :

$$\hat{\rho} = \frac{\exp(-\beta \hat{H})}{Tr \exp(-\beta \hat{H})} \quad \text{A-2}$$

Où Tr dénote la sommation sur tous les états, et est invariante par une transformation canonique. En utilisant la transformation de Bogoliubov, on trouve deux espèces de quasi-particules : les espèces non-daigonales données $Tr \hat{\rho} (\alpha_k^+ \alpha_{-k}^+)$ et $Tr \hat{\rho} (\alpha_k \alpha_{-k})$ et qui s'annulent dans cette approximation, et celles diagonales qui s'écrivent :

$$Tr \hat{\rho} (\alpha_k^+ \alpha_k) = f(E_k) = 1/(\exp(\beta E_k) - 1) \quad Tr \hat{\rho} (\alpha_k \alpha_k^+) = 1 + f(E_k) \quad \text{A-3}$$

$f(E_k)$ étant la distribution de Bose-Einstein des quasi-particules. A l'équilibre thermique, à une température T , cette fonction ne contient pas le potentiel chimique car le nombre de particule n'est pas conservé.

Par combinaison de l'équation (A-1) avec (A-3) on trouve

$$N = N_0 + \sum_{k \neq 0} \left[(u_k^2 + v_k^2) f(E_k) + v_k^2 \right] \quad \text{A-4}$$

L'énergie du système s'écrit alors

$$E(k) = Tr (\hat{\rho} \hat{H}) = E_g + \sum_{k \neq 0} E_k f(E_k) \quad \text{A-5}$$

ANNEXE B :

OPERATEURS EXPONENTIELS DE FORMES QUADRATIQUES ET TRANSFORMATIONS DE BOGOLIUBOV

On rappelle dans cette annexe quelque propriété des opérateurs exponentiels de formes quadratiques (EFQ) de bosons. Une étude plus générale peut être trouvée dans les références [54,55].

1- Opérateurs de bosons

On considère l'espace de Fock engendré par n opérateurs de création de bosons $\{\alpha_i^+, i = 1, \dots, n\}$, vérifiant les règles de commutation usuelles,

$$[\alpha_i^+, \alpha_j^+] = \delta_{ij} \quad ; \quad [\alpha_i^+, a_j^+] = [a_i, a_j] = 0 \quad \text{B-1.1}$$

Afin d'obtenir des notations plus compactes, on introduit l'opérateur à $2n$ composantes α ,

$$\alpha = \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} \quad \text{B-1.2}$$

En terme des $\alpha_i, \{i = 1, \dots, 2n\}$, les relations de commutation s'écrivent :

$$[\alpha_i^+, \alpha_j] = \tau_{ij} \quad ; \quad \tau = i\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1_n \\ -1_n & 0 \end{pmatrix} \quad \text{B-1.3}$$

Où σ_2 est la deuxième matrice de Pauli à $2n$ dimensions, 1_n dénote la matrice identité ($n \times n$). La matrice τ vérifie,

$$\tilde{\tau} = -\tau \quad \tau^2 = -1 \quad \text{B-1.4}$$

Le passage de l'espace de Fock à l'espace de configuration se fait au moyen de la transformation usuelle :

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\omega_0} x \\ -ip/\sqrt{\omega_0} \end{pmatrix} = \sqrt{\hbar/2(1+\tau)} \alpha \quad \text{B-1.5}$$

Et le passage inverse par :

$$\alpha = \sqrt{1/\hbar} 2(1-\tau) \begin{pmatrix} \sqrt{\omega_0} x \\ -ip/\sqrt{\omega_0} \end{pmatrix} \quad \text{B-1.6}$$

Où l'on introduit le paramètre réel arbitraire ω_0 ainsi que les opérateurs à n composantes x et p afin de considérer des formes quadratiques pour les opérateurs α_i , introduisant la matrice complexe $S(2n \times 2n)$ vérifiant :

$$\tilde{S} = \tau S \tau \tag{B-1.7}$$

La propriété (A-1.7) entraîne que $tr(S) = 0$ et que les valeurs propres de S peuvent être groupées en paires de valeurs opposées. Par ailleurs, τS est une matrice symétrique. Le fait que τS puisse avoir une partie antisymétrique ne fera que rajouter un C-nombre à la forme quadratique.

2-Le groupe de Bogoliubov

Le groupe de Bogoliubov (GB) est le groupe des transformations linéaires (à coefficients complexe) qui préservent les relations de commutation. Considérons la transformation T et les opérateurs $\beta = T\alpha$; pour ce que ces opérateurs obéissent à (B-1.3), il faut que T satisfasse à

$$T^{-1} = -\tilde{T} \tau \tag{B-2.1}$$

(A-2.1) exprime le fait que le GB est isomorphe au groupe symplectique, donc, $\det(T) = 1$ et ses valeurs propres peuvent être groupées en paires inverses l'une de l'autre. Si l'on représente T par 4 sous-matrices $T_{\mu\nu}$,

$$T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}, \tag{B-2.2}$$

La propriété (B-2.1) est alors équivalente à l'ensemble des relations suivantes :

$$T_{11}\tilde{T}_{22} - T_{12}\tilde{T}_{21} = 1 \quad ; \quad T_{11}\tilde{T}_{12} = T_{12}\tilde{T}_{11} \quad ; \quad T_{22}\tilde{T}_{21} = T_{21}\tilde{T}_{22}$$

$$\tilde{T}_{11}T_{22} - \tilde{T}_{21}T_{12} = 1 \quad ; \quad \tilde{T}_{11}T_{21} = \tilde{T}_{21}T_{11} \quad ; \quad \tilde{T}_{22}T_{12} = \tilde{T}_{12}T_{22} \tag{B-2.3}$$

Remarquons que toute matrice S satisfaisant (A-1.7) définit une transformation de Bogoliubov par $T = \exp(S)$.

3. Operateurs exponentiels

L'opérateur exponentiel de la forme quadratique (EFQ) le plus général pour un système de n bosons peut s'écrire,

$$\wp = \exp(\nu) \exp(\tilde{\lambda} \tau \alpha) \exp\left(\frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau S \alpha\right) \quad \text{B-3.1}$$

Dans cette expression, interviennent le C-nombre ν , le vecteur (à $2n$ composantes) λ et la matrice $(2n \times 2n)S$. Sans restreindre la généralité de T , on peut considérer des matrices τS symétriques (obéissant à (A-1.7)).

L'action de la transformation \wp sur les opérateurs α s'écrit,

$$\wp^{-1} \alpha \wp \equiv \beta = T \alpha + \lambda ; \text{ avec } T = \exp(-S) \quad \text{B-3.2}$$

La variation de l'opérateurs (A-3.1) par rapport à ν, λ et S s'écrit :

$$\begin{aligned} \delta \wp &= \wp \left\{ \delta \nu + \delta \tilde{\lambda} \tau \left(T \alpha + \frac{1}{2} \lambda \right) - \frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau T^{-1} \delta T \alpha \right\} \\ &= \left\{ \delta \nu + \delta \tilde{\lambda} \tau \left(\alpha - \frac{1}{2} \lambda \right) - \frac{1}{2} (\tilde{\alpha} - \tilde{\lambda}) \tau \delta T T^{-1} (\alpha - \lambda) \right\} \wp \end{aligned} \quad \text{B-3.2}$$

4-Contractions élémentaires

Dans tout ce qui suivra, nous noterons Tr une trace dans l'espace de Fock. Sous la condition que $Tr(\wp)$ existe et soit non nulle, on peut définir les contractions élémentaires associées à l'opérateur \wp de (A-3.1) ; elles s'écrivent :

$$\langle \alpha_i \rangle \equiv Tr \wp \alpha_i Tr \wp \left(\frac{1}{1 - e^{-S}} \lambda \right) = \left(\frac{1}{1 - T} \lambda \right)_i \quad \text{B-4.1}$$

$$\langle \bar{\alpha}_{j_i} \rangle \equiv Tr \wp \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j / Tr \wp = \left(\frac{1}{1 - e^{-S}} \tau \right)_{ij} = \left(\frac{1}{1 - T} \tau \right)_{ij} \quad \text{B-4.2}$$

Où l'on a introduit les opérateurs $\bar{\alpha} = \alpha - \langle \alpha \rangle$, qui se transforment par l'action de T comme

$$\wp^{-1} \bar{\alpha} \wp = T \bar{\alpha} \quad \text{B-4.3}$$

Il est plus commode d'introduire la matrice densité à un corps (où plutôt la matrice des contractions) :

$$\rho_{ij} \equiv \left\langle \left(\tau \bar{\alpha} \tilde{\alpha} \right)_{ij} \right\rangle = \left(\frac{1}{1 - e^{-S}} \tau \right)_{ij} = \left(\frac{T}{1 - T} \right)_{ij} \quad \text{B-4.4}$$

Qui satisfait à la propriété

$$\tilde{\rho} = \tau(1 + \rho)\tau \quad \text{B-4.5}$$

En développant l'expression (B-4.4) à l'aide des opérateurs \bar{a} et \bar{a}^+ , la matrice $1 + 2\rho$ prend la forme :

$$1 + 2\rho = \begin{pmatrix} \langle \bar{a}\bar{a}^+ + \bar{a}^+\bar{a} \rangle & -2\langle \bar{a}\bar{a} \rangle \\ 2\langle \bar{a}^+\bar{a}^+ \rangle & -\langle \bar{a}\bar{a}^+ + \bar{a}^+\bar{a} \rangle \end{pmatrix} \quad \text{B-4.6}$$

5-Trace d'un opérateur EFQ

Considérons la fonction de partition de l'opérateur \wp défini en (B-3.1) : $Z = Tr \wp$. On a

$$\log Z \equiv \nu + \frac{1}{2} \tilde{\lambda} \tau \rho \lambda + \log Tr \left(\exp \left(\frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau \mathcal{S} \alpha \right) \right) \quad \text{B-5.1}$$

L'existence de $Tr \exp \left(\frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau \mathcal{S} \alpha \right)$ est une condition nécessaire pour que Z existe, il faut que

\mathcal{S} définisse une transformation de Bogoliubov acceptable. On peut vérifier que dans cette situation l'on a

$$Tr \exp \left(\frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau \mathcal{S} \alpha \right) = \sqrt{\det \sigma \rho_1} \quad ; \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1_n \\ 1_n & 0 \end{pmatrix} \quad \text{B-5.2}$$

Une variante de (B-5.1) s'obtient en éliminant λ en faveur de $\langle \alpha \rangle$ au moyen de (B-4.1), ceci donne,

$$\log Z = \nu - \frac{1}{2} \langle \tilde{\alpha} \rangle \tau \rho^{-1} \langle \alpha \rangle \lambda + \frac{1}{2} \log \det \sigma_1 \rho \quad \text{B-5.3}$$

REFERENCES

- [1] A. Pais, Albert Einstein, la vie et l'œuvre, InterEdition, (1993).
- [2] S.N. Bose, Z. Phys.26, 178 (1924).
- [3] A. Einstein, Sitzungsber. Kgl, Preuss. Akad. Wiss. 1924, 261 (1924) and 1925, 3 (1925).
- [4] Landon, F., Nature 141, 643. (1938)
- [5] Allan Griffin, Cond-mat/9911419, 25 Nov, (1999).
- [6] Cornell, E., J.Res.Natl. Stand. Techno.101, 419 (1996).
- [7] Myatt, E., C.J., E.A.Burt, R. W. Ghrist, E. A. Cornell and C.E.Wiman, Phys. Rev. Lett.78, 586,(1997).
- [8] M.H.Anderson, J.R.Ensher, M.R.Matthews, C.E.Wieman, and E.A. Cornell, Science 269, 198, (1995).
- [9] K.B.Davis, M.-O.Mewes, M.R.Andrews, N.J.Van Druten, D.S.Durfee, D.M.Kurn, and W.Ketterle, Phys.Rev.Lett. 75, 3969,(1995).
- [10] C.C.Bradley, C.A.Sackett, J.J.Tollett ,and R.G.Hulet. Phys.Rev.Lett. 75,1687 (1995) and Erratum 79,1170 (E) (1997).
- [11] E.Zaremba, A.Griffin,and T.Nikum, Phys. Rev.A 57, 4695 (1998).
- [12] B.Jackson and E. Zaremba, Phys. Rev. Lett. 88, 180402 (2002).
- [13] B.Jackson and E.Zaremba, New J.Phys, 5, 88 (2003).
- [14] F.Dalfovo S.giorgini, L.Pitaevskii, S.Strangari, Theory of Bose Einstein condensation in trapped gases,nReviews of Modern Physics, Vol. 71, No.3, avril, (1999).
- [15] K.B.Davis, M.O.Mewes, M.R.Andrews, N.JDruten, D.S.Durfee, D.M.Kwrn,and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. 75, 3969 (1995).
- [16] C.C.Bradly, C.A.Sackett, J.J.Tollett, and R.Hulet,Phys.Rev.Lett.75, 1686 (1995).
- [17] G.C.Wick ,Phys.Rev.80, 268 (1995).
- [18] T.T.Wu, Phys.Rev.115,1390 (1959).

- [19] K. Sawoda, Phys.Rev. 116, 1344 (1959).
- [20] K. Helmerson, D. Hutchinson, K. Burnett et W.D Phillips, atom lasers, Physics World , 31,Aout , (1999).
- [21] A. Castin, R. Dum, A. Sinatra, Bose condensates make quantum leaps and bounds, Physics World, 37, (1999) Aout.
- [22] N.N.Bogoluibov, J. Phys . USSR., 11,23 (1947).
- [23] A.Miller, D. Pines et P. Nozieres. Phys.Rev., 127, 1452 (1962).
- [24] A.L.Fetter.Ann. Phys. (N.Y.) 70,67 (1972).
- [25] A.L.Fetter and J.D.Walecka,Quantum Theory of many particle systems (NC Graw-Hill, New york), (1971).
- [26] V.N. Popov, Soviet Phys-JETP. 20,1185 (1964)
- [27] Functional Integrals and Collective Exitations (Cambridge University Press) (1987).
- [28] Allan Griffin,Cond-mat/9911419, 25 Nov, (1999).
- [29] G. Pitaevskii, Cond-mat/9806038, 12 oct, (1998).
- [30] Pitaevskii, L P,1961, Zh. EKSP. Teor. Fiz.40, 646 [Sov, Phys. JETP,13, 451 (1961)
- [31] Pitaevskii, LP. , Phys. Lett. A 221, 14. (1996)
- [32] Pitaevskii, L. P, Phys. L ETT A 229,406 (1997).
- [33] Pitaevskii, L.P., and S.Stringari,Phys. Lett. A 235, 398, (1997).
- [34] S. Giorgini, L. Pitaevskii, S. Stringari, Phys. Rev, A54 , 4633 (1996).
- [35] A.Griffin, Physical Review, (1996)
- [36] Griffin.A., and E.Zaremba, ,Phys. Rev. A 56,4839 (1997).
- [37] Griffin, A., Exitation in a Bose-Condensed liquid (Cambridge University Press, New York) , (1993).
- [38] N.M.Hughenoltz, D.Pines. Phys. Rev., 116 489 (1959) .

- [39] Griffin,A., W.-C. Wu and S. Stringari,. Phys. Rev. Lett. 78,18, University Press,New York) ,(1997).
- [40] R.Mattuck, a guide to Feynman diagram in the many-body problem.
- [41] A.Griffin, Cond-mat/9901172 v3, 20 Jan, (1999).
- [42] H. Shi, A. Griffin, Phys Rep, 304 (1998).
- [43] A.L.Fetter, J.D.Walecka, Quantum Theorie of Many-Particle Systems, (McGraw-Hill, New York , (1971).
- [44] Lord Rayleigh(Sir John William Strutt), the theory of sound, 2nd ed. Rev. 1945,Dover Publi., N. Y. 1877 (1945)
- [45] S.T.Beliaev, Soviet Phys..JETP 7, 289 (1958).
- [46] B. A. Lippmann, J. Schwinger, Phys. Rev, (1950).
- [47] J.P.Blaisot, G.Ripka, Phys. Lett. B105, (1981).
- [48] J. Frenkel, Wave mechanics, Advanced General Theory , (1934).
- [49] P.A.M.Dirac, Proc. Cambridge Philos , (1930).
- [50] R. Balian, M. Vénéroni, Phys Lett, (1981), ANN of Phys, (1985).
- [51] M. Benarous, Thèse de doctorat, IPN, Orasay, France, Oct, (1991).
- [26] R. Balian, M.Véneroni, Ann of Phys, (1992).
- [52] M. Bounif, Thèse de magistère, Univ Oran Es-Senia.
- [53] A. L.Fetter. Cond-mat, Nov, (1998).