

N° d'ordre: 06/2007-M/PH
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE D'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE.

Université des Sciences et de la Technologie

«Houari Boumediene »
FACULTE DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de Magister

En : PHYSIQUE

Spécialité: Physique Théorique des Basses et Moyennes Energies

Par: **BOUDJEMAA Abd el Aali**

Thème:

**Les condensats de Bose-Einstein au-delà de
l'approximation de Thomas-Fermi**

Soutenu le 14/02/2007, devant le jury composé de:

M. FELLAH	Professeur (U.S.T.H.B)	Président
M.BENAROUS	Maître de conférences (U.H.B. Chlef)	Directeur de thèse
N.H ALLAL	Professeur (U.S.T.H.B)	Examinatrice
S.KESSAL	Professeur (U.S.T.H.B)	Examineur
M.LADREM	Professeur (E.N.S. Kouba)	Examineur

Dédicace

Je dédie ce modeste travail à la mémoire de mon ami et compagnon de voyage Mr. HAFSI NIZAR, que la mort nous a trop rapidement pris, à la fleur de l'âge. Repose en paix, Nizar, et que la bénédiction du tout puissant, t'enveloppe jusqu'au jugement dernier. A dieu nous appartenons et à dieu, nous reviendrons.

Remerciements

Je suis profondément reconnaissant au Dr. Benarous Mohamed, qui avec beaucoup de gentillesse et d'enthousiasme, a su me guider et me faire confiance au cours de cette dernière année. Je ne le remercierais jamais assez pour la remarquable disponibilité dont il a toujours su faire preuve, ainsi que pour ses nombreux conseils qui ont été des plus enrichissants tant sur le plan physique que sur le plan humain. Je voudrais lui exprimer toute mon amitié et ma gratitude et lui dire combien j'ai été très heureux de travailler avec lui.

Je suis très honoré que Pr. M. Fellah ait accepté la lourde tâche de présider le jury de ma thèse, et qui est pour nous un guide d'une valeur inestimable. Je voudrais lui exprimer mes profonds remerciements.

Je remercie chaleureusement Pr. Allal. N.H, Pr. Kessel Salem et Pr. Ladrem Madjid de m'avoir fait l'honneur et le plaisir d'examiner mon travail.

Je suis également fort redevable envers Pr. N. H. Allal et Pr. Boudjemaa Mohamed, pour leur bienveillante attention à mon égard, et leur intérêt constant pour mon travail. Je leur exprime ma plus entière gratitude pour leur gentillesse ainsi que les multiples conseils qu'ils m'ont prodigués aux cours de nos discussions.

J'adresse en outre toute ma gratitude au Pr. A.Chouchaoui et Dr. F.Chafa pour leur gentillesse et leur intérêt pour mon travail.

Je tiens aussi à remercier Melle H. Chachou Sameut, Mr H. Boukabcha et Mr B. Said, pour leur aide et leur gentillesse et pour tous les moments de camaraderie et de détente. Je voudrais aussi m'excuser auprès de tous ceux que, faute de place, je n'aie pu citer. Qu'il soient assurés que leurs noms resteront dans mon cœur et dans ma mémoire, gravés à jamais.

Je tiens enfin à exprimer ma plus complète reconnaissance à mes chers parents aussi qu'à mes frères Yacine, Ahmed, Hadjar et Fathi et à mes grand-mères, pour leur soutien constant et leur bienveillante sollicitude.

TABLE DES MATIERES

REMERCIEMENTS

INTRODUCTION GENERALE

I. Condensation de Bose-Einstein: Histoire de la théorie.....	4
II. Condensation de Bose-Einstein: Histoire l'expérience.....	6
III. Condensation de Bose-Einstein: Principes.....	7
IV. Propriétés du condensat.....	8
VII. Objectifs et contenu du mémoire.....	9

CHAPITRE I : ASPECTS EXPERIMENTAUX ET THEORIQUES D'UN

CONDENSAT DE BOSE-EINSTEIN

I.1 Aspects expérimentaux.....	11
I.1.1 Introduction.....	11
I.1.2 Techniques de piégeage.....	11
I.1.3 Refroidissement des atomes.....	13
I.1.4 Refroidissement évaporatif.....	14
I.1.5 Comment voir un condensat.....	14
I.2 Aspects théoriques.....	16
I.2.1 Introduction.....	16
I.2.2 Diverses approximations théoriques pour l'étude du BEC.....	17
I.2.2.1 Approximation de Bogoluibov.....	17
I.2.2.2 Equation de Gross-Pitaevskii et approximations de Popov et de Bilaev.....	20
I.2.2.3 Approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov.....	22

CHAPITRE II: FORMULATION VARIATIONNELLE DES EQUATIONS DYNAMIQUES POUR UN GAZ DE BOSONS PIEGES A TEMPERATURE FINIE

II.1 Introduction.....	23
II.2 Principe variationnel de Balian-Vénéroni.....	23
II.3 Equation de Hartree-Fock-Bogoliubov dépendant du temps.....	24
II.4 Application à un système de bosons piégés	25

CHAPITRE III: EQUATIONS TDHFB STATIQUES ET APPROXIMATION DE THOMAS-FERMI

III.1 Introduction.....	28
III.2 Approximation de Thomas-Fermi à Température nulle.....	29
III.3 Approximation de Thomas-Fermi à Température finie.....	31

CHAPITRE IV: RESOLUTION NUMERIQUE DES EQUATIONS TDHFB STATIQUES AU DELA DE L'APPROXIMATION DE THOMAS-FERMI

IV.1 Introduction.....	32
IV.1 Equations TDHFB adimensionnées.....	32
IV.2 Conditions aux limites.....	33
IV.3 Description de la méthode numérique.....	34

CHAPITRE V: RESULTATS ET DISCUSSIONS

36

VI. CONCLUSION GENERALE

55

APPENDICE A: LA STATISTIQUE DE BOSE-EINSTEIN

I. Distribution de Bose-Einstein.....	57
II. Gaz de bosons et condensation de Bose.....	58
III. Température de transition d'Einstein.....	60

APPENDICE B: LA SUPERFLUIDITE

I. Un phénomène étrange: la superfluidité.....	61
II. Un modèle pour les superfluides et les condensats de Bose-Einstein.....	61

BIBLIOGRAPHIE

63

I. Condensation de Bose-Einstein : histoire de la théorie

Nous sommes en 1924. Cela fait 24 ans que Max Planck (1858-1947) a introduit en physique la notion de quanta d'énergie dans le but de concilier la théorie du rayonnement du corps noir avec les résultats expérimentaux. Même si la « formule » ou « loi » de Planck relative à la répartition spectrale de l'énergie de ce rayonnement constitue l'acte de naissance de la physique quantique, la théorie de M. Planck n'admet pas l'existence de particules associées au rayonnement. Depuis, de nombreuses autres démonstrations de cette loi ont été proposées, mais aucune n'est entièrement satisfaisante. C'est ce qui motive l'Indien Satyendranath Bose (1894-1974) à proposer une démonstration de la loi de Planck en prenant comme hypothèse de base que le rayonnement peut être considéré comme un gaz de photons de masse nulle.

En juillet 1924, S. Bose soumet à A. Einstein un article dans lequel il calcule selon une nouvelle méthode la répartition spectrale des photons dans le rayonnement du corps noir : il aboutit à la loi de Planck [2]. Chose curieuse, cette approche ne pouvait se justifier qu'en admettant que les photons étaient de bien étranges particules, la statistique gouvernant leur répartition étant différente de celle à laquelle obéissent des boules réparties au hasard dans des trous : alors que dans ce dernier cas, les boules se répartissent d'une manière statistiquement indépendantes les unes des autres, il était implicitement admis dans l'article de S. Bose que les photons ne se comportaient pas de manière indépendante et manifestaient une tendance au « grégarisme », la présence de photons dans un certain état quantique augmentant la probabilité de voir un nouveau photon venir occuper le même état. C'est ce phénomène de « condensation » dans le même état quantique que l'on appelle « condensation de Bose ».

Aussitôt, A. Einstein applique à un gaz parfait d'atomes la méthode employée par S. Bose pour étudier les photons. Il justifie son approche par le fait que si l'on admet avec

Louis De Broglie (1892-1987) l'existence d'ondes de matière associées aux particules[1], alors celles-ci devraient obéir à la même statistique que celle implicite dans la méthode de Bose qui semblait gouverner les photons : la statistique dite « de Bose ». Cela admis, Albert Einstein montre que si son approche est correcte, à très basse température, le comportement du gaz devrait dévier de celui donné par la loi des gaz parfaits : en dessous d'une certaine température critique fonction du nombre d'atomes par unité de volume, une fraction des atomes du gaz devraient « condenser » dans le même état quantique (l'état fondamental) et former ce que l'on appelle aujourd'hui un « condensat de Bose-Einstein », un nouvel état de la matière.

Par la suite, on a montré que le raisonnement et la conclusion d'A. Einstein ne pouvaient s'appliquer à tous les atomes, mais seulement à certains d'entre eux, ceux dont le spin est entier, les « bosons ». Les particules de spin demi-entier, les « fermions », obéissant à une autre statistique, celle dite de « Fermi-Dirac » découverte en 1926. Les atomes d'un condensat de Bose-Einstein sont à la matière ce que les photons d'une lumière laser sont à la lumière ordinaire. Aussi, un condensat de Bose-Einstein peut être considéré comme une source d'ondes de matière cohérentes, de même qu'un laser est une source d'ondes lumineuses cohérentes. En effet, les atomes dans le premier cas et les photons dans le second sont dans un état « cohérent », état caractérisé par l'ultime degré d'ordre qui y règne ; les particules y sont indiscernables, car identiques entre elles à tout point de vue, occupant toutes le même état quantique, se comportant de la même façon, évoluant exactement de la même manière... bref, formant ainsi ensemble une seule et même entité. Cela résulte du fait que pour une distance inter atomique suffisamment faible (atomes suffisamment confinés) et une longueur d'onde De Broglie suffisamment grande (atomes suffisamment froids), les ondes de matière de De-Broglie associées aux bosons se recouvrent : ces derniers deviennent donc indiscernables, une seule onde étant alors associée à la population d'atomes.

II. Condensation de Bose-Einstein : histoire de l'expérience

Jusqu'à la fin des années 1930, la condensation de Bose-Einstein, BEC en anglais abrégé, n'a présenté qu'un caractère purement formel, voire même spéculatif, sans aucun intérêt expérimental ou utilité pratique. En 1938, Fritz London [5] propose d'interpréter la transition de l'hélium vers la phase superfluide (découverte en 1928 par W. Keesom) comme résultant d'une BEC. Près de vingt ans plus tard, on interprète la transition vers l'ordre supraconducteur comme résultant également d'une BEC, celle des « paires de Cooper ». Cependant, aucune de ces deux transitions ne pouvait être attribuée de façon incontestable au BEC. En effet, une véritable condensation de Bose-Einstein devait obligatoirement mettre en jeu une population de particules sans interactions ; et il était difficile d'admettre qu'il en était bien ainsi dans les deux cas cités plus haut. Aussi, a-t-on cherché à partir de la fin des années 1970 à créer d'une manière incontestable un vrai et pur condensat de Bose-Einstein. Afin d'éviter tout problème lié aux interactions entre particules, l'effort s'est très naturellement porté vers l'expérimentation avec des gaz, d'abord l'hydrogène atomique dans sa forme dite « spin polarisé » incapable de former des molécules (afin d'éviter la liquéfaction), puis certains métaux alcalins. C'est l'équipe d'Eric Cornell et Carl Wieman à l'institut JILA du Colorado qui est la première, en juin 1995, à observer une BEC pendant quelques secondes dans un gaz d'atomes de rubidium refroidis à 20 nK (10^{-9} K), en employant les techniques expérimentales de piégeage et confinement magnéto-optique, et celles de refroidissement « laser » et « évaporatif » mises au point pour la condensation des atomes d'hydrogène. Ensuite, c'est l'équipe de W. Ketterle du MIT qui parvient au même résultat avec du sodium (1995), puis celle de l'université de R. Hulet du Rice avec du lithium (1995), et enfin l'équipe de Thomas Greytak et D. Kleppner du MIT avec l'hydrogène (1998).

Actuellement, une quarantaine d'équipes au monde mènent des travaux sur des condensats de Bose-Einstein : lasers à atomes (boser), interféromètre à atomes, ralentissement et arrêt de la lumière dans un condensat, simulation de l'explosion de supernova, condensation des bosons de Higgs, BEC des pions au cœur des étoiles à neutron... les sujets de recherche théoriques et expérimentales ne manquent pas. Et dire qu'en 1924 Albert Einstein se demandait : « la théorie est belle, mais contient-elle une vérité ? »...

III. Condensation de Bose-Einstein : Principes

Pour bien comprendre ce qu'est le condensat de Bose Einstein, il faut d'abord s'intéresser à la température : à quoi est due la température d'un objet ?

Tous les objets qui nous entourent sont faits d'atomes et de molécules. Ces atomes ne sont pas immobiles, ils se déplacent plus ou moins rapidement, dans des directions aléatoires. Lorsqu'un objet est chaud, les atomes se déplacent rapidement, et lorsqu'il est froid, ils se déplacent lentement. Ainsi, la température est en fait l'indicateur du mouvement atomique. Lorsqu'on chauffe de l'eau, par exemple, on fait s'agiter plus rapidement les molécules qui la composent. Maintenant, imaginons que nous refroidissons nos atomes énormément. Que se passe-t-il ? Et oui, ils ne bougent plus, c'est ce que l'on appelle le zéro absolu, 0° Kelvin, ou encore $-273,15^{\circ}\text{C}$. On pourrait penser alors qu'à cette température, les atomes forment un simple solide. Ça serait le cas si les atomes étaient régis par la mécanique classique, mais à cette température ce n'est pas le cas : il faut utiliser la mécanique quantique. Lorsque les atomes sont refroidis à des températures de l'ordre du millionième de Kelvin, ils sont tous dans le même état d'énergie, le plus bas (en effet, ils sont tous immobiles). Ces atomes sont tous identiques et tellement bien rangés qu'il est impossible de les distinguer : ils forment un super atome ou condensat de Bose-Einstein.

Mais voilà, ce n'est pas aussi simple que cela : la matière est regroupée en deux camps, les fermions et les bosons. Les premiers suivent le principe d'exclusion de Pauli, qui stipule que ceux-ci ne peuvent se trouver au même endroit dans le même état énergétique. Pour les fermions, donc, pas de condensat de Bose Einstein. Par contre, les bosons sont beaucoup plus "sociables", et peuvent se retrouver au même endroit dans le même état. Pourquoi est-il impossible de distinguer les atomes d'un condensat ?

Lorsqu'on arrive aux températures de condensation, la taille du paquet d'onde augmente, jusqu'à ce que les différents paquets d'ondes des atomes se recouvrent : il est alors impossible de distinguer un atome d'un autre, cela produit le phénomène de cohérence du condensat.

IV. Propriétés du condensat

Le condensat possède des propriétés stupéfiantes du fait de sa nature particulière. Lorsqu'un rayon lumineux le traverse, il s'oppose à son passage : c'est comme si pour laisser passer la lumière, il fallait que tous les atomes soient d'accord à l'unanimité, et aussi étrange que cela puisse paraître, c'est à peu de choses ce qui se produit. Pour se déplacer dans le condensat, les photons constituant la lumière pénètrent dans les électrons des atomes, ce qui excite l'électron qui saute d'un niveau d'énergie, puis étant instable dans ce niveau, il éjecte un photon en reprenant son niveau d'énergie de base. La lumière se déplace donc par petits sauts d'atome en atome, ce qui la ralentit drôlement. Une autre propriété fondamentale du condensat, est le fait que le super atome se comporte comme une onde, exactement comme la lumière. Cette propriété stupéfiante conduit à l'idée du laser à atomes, ainsi qu'une nouvelle discipline, l'optique atomique.

V. Objectifs et contenu du mémoire

Dans ce travail, nous présenterons une étude sur les propriétés des condensats de Bose-Einstein au-delà de l'approximation de Thomas-Fermi. En effet, dans les travaux de H.Chachou-Samet [54] et de M.Benarous [53], des équations variationnelles dynamiques ont été établies pour le condensat, le nuage thermique et la densité anormale pour un gaz de bosons piégés par un champ magnétique. Ces équations tiennent compte d'un couplage tout à fait inédit entre ces diverses quantités. Ce type de couplage n'a jamais été établi par ailleurs d'une façon consistante et complètement contrôlable. Alors que ces équations contiennent toutes les approximations existant dans la littérature, et en constituent donc une généralisation, elles doivent néanmoins être testées dans divers régimes, du fait même de leur nouveauté, afin de conclure quant à la pertinence des espaces variationnels utilisés. Un des tests intéressants qu'il est utile d'effectuer est ce que l'on peut appeler "approximation de Thomas-Fermi" (TF). Cette approximation consiste à négliger complètement le terme de l'énergie cinétique. Cela est parfaitement justifié à température nulle, mais cesse de l'être à température finie où le nuage thermique (atomes non condensés) est loin d'avoir une énergie cinétique négligeable.

La question est donc de savoir si le fait d'introduire le terme cinétique du nuage (exprimé par un Laplacien dans les équations variationnelles) influe d'une manière notable sur les prédictions de ces équations.

Les équations obtenues précédemment sont non linéaires mais de nature algébrique dans l'approximation de TF. Dans notre étude, elles constituent en plus un système d'équations aux dérivées partielles, devenant ainsi un problème aux limites hautement non trivial. Nous élaborerons un algorithme numérique pour les résoudre.

Après une introduction sur les condensats de Bose-Einstein, nous présenterons dans le premier chapitre de ce travail les aspects expérimentaux relatant les différentes techniques utilisées pour l'élaboration du BEC, en particulier les méthodes de refroidissement et de piégeage. Ensuite, nous abordons les approximations théoriques qui permettent d'étudier le comportement du condensat. On citera l'approche de Bogoliubov, Popov, Beliaev et de Hartree-Fock-Bogoliubov.

La formulation variationnelle des équations dynamiques pour un gaz de bosons piégés, ainsi que certaines de ces caractéristiques, sont discutées dans le deuxième chapitre. Elles ont été dénotées par l'acronyme TDHFB "Time Dependent Hartree-Fock-Bogoliubov". Elles sont bâties sur l'approximation du champ moyen.

Nous nous intéressons ensuite à la résolution des équations TDHFB statiques à température finie. Il est d'usage en physique de commencer par tester les différentes approximations sur des cas simples. A cet effet, nous présentons dans le chapitre III les propriétés statiques du BEC en utilisant l'approximation de Thomas-Fermi. Une telle approche consiste à négliger l'énergie cinétique devant l'énergie des self-interactions.

Le chapitre IV est consacré à la résolution numérique des équations TDHFB au-delà de l'approximation de TF. Dans ce cas, on peut non seulement vérifier la validité de TF, mais on peut aussi mieux appréhender le comportement physique du système étudié.

Au dernier chapitre, nous présentons les résultats numériques ainsi que les conclusions qui s'imposent quant aux régimes de validité de l'approximation de Thomas-Fermi.

La dernière partie de ce travail tient lieu de conclusion générale mais contient aussi des perspectives et des recommandations.

Afin de permettre aux lecteurs de se familiariser avec nos calculs, nous avons joint deux appendices. Le premier appendice contient des notions de base sur la statistique de Bose-Einstein, et le second dresse un aperçu sur le phénomène de superfluidité.

I.1 Aspects expérimentaux

I.1.1 Introduction

Dans un article publié en 1925 [3], A.Einstein démontra une propriété extraordinaire d'un système de particules matérielles : si sa densité spatiale est plus grande qu'une certaine valeur critique donnée par :

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

où k_B et $\hbar$ sont les constantes de Boltzmann et Planck, et m la masse des particules. 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 grande 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.

I.1.2 Techniques de piégeage

La recherche de systèmes plus proches du modèle initial d'Einstein est devenue très active au cours des vingt 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 bloqué cette recherche.

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 d'Einstein : 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/cm³, 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 [26], [27-29] : le confinement du gaz atomique ne peut pas se faire par des parois matérielles, car la totalité des atomes se colleraient 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 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.

Comment mettre des atomes dans un piège magnétique ? On prépare un nuage atomique le plus froid possible au voisinage du point 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 et 1960 [4, 9, 10]. 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 d'Einstein, 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 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.

I.1.3 Refroidissement des atomes

Pour créer un condensat, il faut refroidir les atomes, ensuite les compresser dans un piège magnétique jusqu'à ce que la longueur d'onde thermique de De-Broglie devienne comparable à la distance inter-atomique. Ensuite, on les isole thermiquement du milieu extérieur : c'est le confinement par un champ magnétique dans une chambre vide. Le piège peut garder les atomes pendant des secondes ou quelques minutes, ce qui constitue un temps suffisant pour le refroidissement.

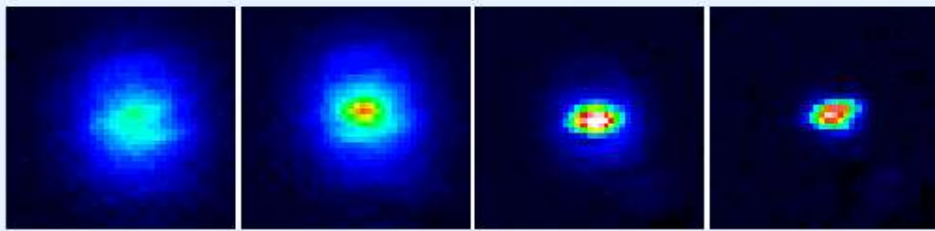
Le pré-refroidissement est nécessaire pour le piège car les atomes neutres ont une énergie de l'ordre du kelvin. Ce pré-refroidissement se fait par laser et le refroidissement final par évaporation.

I.1.4 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, 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 [41].

I.1.5 Comment voir un condensat ?

L'observation des condensats 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.



Formation d'un condensat de Bose-Einstein d'atomes de rubidium
(photos d'une expérience réalisée au laboratoire Kastler-Brossel)

Il est à noter que cette technique d'imagerie est la seule disponible avec suffisamment de pouvoir de résolution, pour l'observation des condensats. Elle pose néanmoins beaucoup de questions pertinentes. Parmi celles-ci, il en est qui sont liées aux hypothèses de travail.

Après extinction des pièges, le gaz évolue librement pendant un certain laps du temps, avant que l'on commence à prendre des "photos". On suppose donc implicitement que l'état du gaz entre les instants 0 et t reste inchangé, ce qui n'a pas encore été vérifié sérieusement. Pour ce faire, il faudra résoudre les équations dynamiques avec un état initial constitué des deux phases (condensée et non condensée), et sans piège.

Le sujet a connu un regain d'intérêt avec l'avènement des techniques de piégeage et de refroidissement d'atomes par laser. Grâce aux très basses températures (et donc aux grandes longueurs d'onde de De Broglie) atteintes, les chercheurs avaient bon espoir d'obtenir enfin la condensation de Bose-Einstein; cela pour des densités suffisamment basses pour que les interactions mutuelles entre atomes ne masquent pas l'effet de condensation.

I.2 Aspects théoriques

I.2.1 Introduction

L'étude théorique des gaz piégés a une longue histoire, commençant par l'étude de la fonction d'onde macroscopique pour de tels systèmes. Les dernières années ont vu une augmentation dramatique du nombre d'articles consacrés à la théorie des gaz piégés, soulevant de nombreuses questions non encore résolues, qui attirent l'intérêt de la communauté scientifique.

Comment décrire théoriquement le condensat ? Remarquons que pour un gaz avant la 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. Ces interactions jouent un rôle essentiel pour déterminer les propriétés statiques du condensat (taille, énergie), ainsi que les propriétés dynamiques (modes de vibration, superfluidité). Leur prise en compte semble à priori un problème ardu, car le potentiel d'interaction entre atomes est compliqué : attractif à longue distance, il devient répulsif quand les deux atomes sont suffisamment proches. 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 des self-interactions.

Celles-ci peuvent être répulsives ou attractives, selon l'espèce atomique considérée, et ce point joue un rôle essentiel pour le comportement du condensat. A titre d'exemple, pour

l'hydrogène, le sodium ou le rubidium, cette interaction est répulsive. On peut alors mettre un nombre arbitrairement élevé d'atomes dans le condensat, sa taille d'équilibre augmentant avec sa population. Au contraire, pour le lithium⁷, les interactions sont attractives ce qui limitent donc le nombre d'atomes condensés. 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.

1.2.2 Diverses approximations pour l'étude du condensat

Les propriétés dynamiques et statiques de BEC sont actuellement intensivement étudiées, aussi bien expérimentalement que théoriquement.

Différentes techniques théoriques ont été employées avec succès, prévoyant correctement un grand nombre de résultats expérimentaux. Parmi ces techniques, certaines sont très répandues. A titre d'exemple, on peut citer la méthode de Bogoliubov, Popov, Beliaev, l'approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov et l'équation de Gross-Pitaevskii.

1.2.2.1 Approximation de Bogoliubov [6]

En l'absence d'interactions, l'état fondamental d'un gaz parfait de bosons correspond à une situation où tous les atomes sont dans l'état fondamental $k=0$. En présence d'interactions, et si le gaz est suffisamment dilué pour que l'effet des interactions ne soit pas trop fort, on s'attend à ce que le nombre d'atomes dans l'état fondamental et dans les premiers états excités du système reste macroscopique, de l'ordre du nombre total de particules N .

La méthode de Bogoliubov consiste à se restreindre à un sous espace d'états caractérisés par une fonction d'onde Φ_0 de l'ordre de N , toutes les autres fonctions Φ_k étant de l'ordre de l'unité.

L'Hamiltonien du système s'écrit en seconde quantification sous la forme [15] :

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

a_k^+ et a_k sont les opérateurs de création et d'annihilation d'une particule dans l'état k , ε_k^0 est l'énergie de l'état fondamental, n la densité totale du système, g et V sont respectivement la constante de couplage et le volume du gaz.

On suppose dans (I.1) que le nombre d'atomes non condensés $\tilde{N} = N - N_c = \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k$ est beaucoup plus petit que celui des atomes condensés N_c . Cette hypothèse n'est justifiée qu'à très basse température.

Donc l'Hamiltonien du système a une forme quadratique relativement aux opérateurs a_k^+ et a_k . On peut alors le diagonaliser par une transformation canonique du type [14] :

$$\begin{aligned} a_k &= u_k \alpha_k - v_k \alpha_{-k}^+ \\ a_{-k}^+ &= u_k \alpha_{-k}^+ - v_k \alpha_k \end{aligned} \quad (I.2)$$

u_k et v_k étant des fonctions réelles de k .

Une substitution directe dans l'Hamiltonien (I.1) donne :

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} gn^2 V \sum_{k \neq 0} [(\varepsilon_k^0 + ng) v_k^2 - 2ng u_k v_k] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} [(\varepsilon_k^0 + ng) (u_k^2 + v_k^2) - 2u_k v_k] (\alpha_k^+ \alpha_k + \alpha_{-k}^+ \alpha_{-k}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} [ng(u_k^2 + v_k^2) - 2(\varepsilon_k^0 + ng) u_k v_k] (\alpha_k^+ \alpha_{-k}^+ + \alpha_k \alpha_{-k}) \end{aligned} \quad (I.3)$$

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

$$\begin{aligned} ng(u_k^2 + v_k^2) &= 2(\varepsilon_k^0 + ng) u_k v_k \\ u_k^2 - v_k^2 &= 1 \end{aligned} \quad (I.4)$$

En prenant $u_k = \cosh \theta_k$, $v_k = \sinh \theta_k$ et $\tanh 2\theta_k = \frac{ng}{\varepsilon_k^0 + ng}$, l'équation (I.4) donne :

$$v_k^2 = u_k^2 - 1 = \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_k^0 + ng}{E_k} - 1 \right), \quad (I.5)$$

E_k est l'énergie d'excitation du système s'écrit alors :

$$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k^0 + ng)^2 - (ng)^2} = \sqrt{(\varepsilon_k^0)^2 + 2ng \varepsilon_k^0}. \quad (I.6)$$

Dans la limite de grandes longueurs d'onde, les excitations élémentaires sont représentées par la loi de dispersion linéaire des phonons avec une vitesse donnée par

$$\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_k}{\partial k} = \sqrt{\frac{ng}{m}}. \quad (I.7)$$

Pour les petites longueurs d'onde, on retrouve la loi de dispersion des particules libres plus un terme dit de Hartree $E_k \cong \varepsilon_k^0 + gn$.

L'approximation de Bogoliubov décrit seulement la physique des basses températures pour un gaz de bosons uniforme. Par construction même, elle ignore l'effet des interactions entre les atomes condensés et les atomes excités qui forment le nuage thermique. A des températures plus élevées, en particulier près de la transition, le nuage thermique jouera un rôle important.

I.2.2.2 Equation de Gross-Pitaevskii [11] et approximations de Popov [13]

et de Belieav [7]

Le point de départ est l'Hamiltonien grand canonique en fonction des opérateurs champs $\Psi(r)$ et $\Psi^+(r)$ [16] :

$$\hat{H} - \mu\hat{N} = \int dr \hat{\Psi}^+(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext} - \mu \right) \hat{\Psi}(r) + \frac{g}{2} \int dr \hat{\Psi}^+(r) \hat{\Psi}^+(r) \hat{\Psi}(r) \hat{\Psi}(r) \quad (I.8)$$

Dans (I.8), $V_{ext}(r)$ est le potentiel extérieur de confinement et μ est le potentiel chimique des atomes.

Décomposons le système en deux parties : une partie condensée décrite par la valeur moyenne du champ $\Phi = \langle \hat{\Psi}(r) \rangle$ et une partie non condensée décrite par sa fluctuation

$\tilde{\Psi}(r) = \hat{\Psi}(r) - \Phi$ telle que $\langle \tilde{\Psi}(r) \rangle = 0$. Le terme d'interaction dans l'Hamiltonien (I.8)

devient :

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} \hat{\Psi} &= |\Phi|^4 + 2|\Phi|^2 \Phi^* \tilde{\Psi} + 2|\Phi|^2 \Phi \tilde{\Psi}^+ \\ &+ 4|\Phi|^2 \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi} + \Phi^{*2} \tilde{\Psi} \tilde{\Psi} + \Phi^2 \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi}^+ \\ &+ 2\Phi^* \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi} \tilde{\Psi} + 2\Phi \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi} + \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi} \tilde{\Psi}. \end{aligned} \quad (I.9)$$

Ecrivons l'équation de Heisenberg pour l'opérateur champ : $i\hbar \frac{d\hat{\Psi}}{dt} = [\hat{\Psi}, \hat{H}]$.

En utilisant les relations de commutation usuelles :

$$\begin{aligned} [\Psi(r), \Psi^+(r')] &= \delta(r - r'), \\ [\Psi(r), \Psi(r')] &= [\Psi^+(r), \Psi^+(r')] = 0. \end{aligned}$$

Les valeurs moyennes dans lesquelles intervient un nombre impair d'opérateurs ($\tilde{\Psi}$ ou $\tilde{\Psi}^+$) sont nulles par construction même. Les valeurs moyennes dans lesquelles intervient un nombre pair d'opérateurs ($\tilde{\Psi}$ ou $\tilde{\Psi}^+$) sont évaluées via le théorème de Wick [23].

Il ne reste à la fin que des termes du type $|\Phi|^2, \langle \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi} \rangle$ et $\langle \tilde{\Psi} \tilde{\Psi} \rangle$. Nous les identifions respectivement, avec la densité condensée $n_c = |\Phi|^2$, la densité non condensée $\tilde{n} = \langle \tilde{\Psi}^+(r) \tilde{\Psi}(r) \rangle$ et la densité anormale $\tilde{m} = \langle \tilde{\Psi}(r) \tilde{\Psi}(r) \rangle$.

A température nulle, le nuage thermique et la densité anormale sont très faibles devant la fraction des atomes condensés. En les négligeant, on aboutit à l'équation de Gross Pitaevskii:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext}(r) - \mu + gn_c \right) \Phi. \quad (\text{I.10})$$

C'est une équation qui a la structure de l'équation de Schrödinger avec un terme non linéaire additionnel.

On peut tout aussi bien ne négliger que les termes proportionnels à la densité anormale [12, 24], et laisser ceux contenant le nuage thermique. On obtient alors l'équation dite de Popov.

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext}(r) - \mu + gn_c + 2g\tilde{n} \right) \Phi. \quad (\text{I.11})$$

Cette équation décrit la dynamique du condensat couplée au nuage thermique. En effet, lorsque la température s'approche de la température critique de condensation, le terme qui exprime la corrélation entre les deux phases $\tilde{m}(r)$ devient négligeable devant le nuage thermique.

En suivant la même procédure mais en ne négligeant plus $\tilde{m}$, on aboutit à l'équation :

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext} - \mu + g(n_c + 2\tilde{n}) \right) \Phi + g\tilde{m}\Phi^* = 0. \quad (\text{I.12})$$

Cette équation est dite de Beliaev lorsque l'on considère $\tilde{m}$ constante.

1.2.2.3 Approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov [31]

Il s'agit dans cette approximation d'introduire une transformation linéaire du type :

$$\begin{cases} \tilde{\Psi} = \sum_j (u_j(r)\alpha_j - v_j^*(r)\alpha_j^+) \\ \tilde{\Psi}^+ = \sum_j (u_j^*(r)\alpha_j^+ - v_j(r)\alpha_j) \end{cases} \quad (\text{I.13})$$

On peut alors aisément écrire les expressions de $\tilde{n}$ et $\tilde{m}$ sous la forme :

$$\tilde{n} = \sum_j \left\{ [u_j^2(r) + v_j^2(r)]N + |v_j(r)|^2 \right\}, \quad (\text{I.14})$$

$$\tilde{m} = -\sum_j u_j(r)v_j^*(r)[2N+1], \quad (\text{I.15})$$

où N est le nombre de particules défini par $N = \sum_j \langle \alpha_j^+ \alpha_j \rangle$. En supposant que les quantités

u_j et v_j sont petites, l'utilisation de l'équation de Heisenberg pour $\hat{\Psi}^+\hat{\Psi}$ et $\hat{\Psi}\hat{\Psi}^+$ conduit aux équations de Bogoliubov- De Gennes (B d G), qui fournissent la dynamique de $\tilde{n}$ et $\tilde{m}$ et constituant donc une extension de (I.12).

On notera qu'exception faite de cette dernière approche, les équations de Gross-Pitaevskii, Popov et de Beliaev ne fournissent pas une dynamique à priori pour les quantités $\tilde{n}$ et $\tilde{m}$. On a donc recours à d'autres méthodes d'approximation afin de déduire une dynamique approchée pour ces quantités, allant d'une approche de Boltzmann à des approximations semi-classiques. Ces hypothèses sont très variées et conduisent à des résultats plus ou moins

satisfaisants en fonction des régimes considérés (basse et haute température, modèle de gaz uniforme ...).

Dans le chapitre suivant, nous allons explorer une formulation variationnelle qui permettra de s'affranchir de toutes les hypothèses subsidiaires, en permettant d'obtenir une dynamique cohérente et consistante pour traiter ces quantités.

II.1. Introduction

Les méthodes variationnelles ont prouvé leurs grandes capacités à traiter simultanément des problèmes difficiles réunissant les équations qui régissent le système, les conditions aux limites, et aussi des conditions de contrainte. Souvent, elles fournissent une nouvelle vision d'un problème donné et suggèrent de nouvelles extensions.

Dans ce contexte, le principe variationnel de Balian-Vénéroni (BV) optimise la valeur moyenne d'une observable mesurée. Utilisant le formalisme de la matrice densité, il s'attache plus particulièrement à l'étude des problèmes de la mécanique statistique quantique.

II.2. Principe variationnel de Balian-Vénéroni [18, 19, 21]

Le principe variationnel de Balian-Vénéroni [18], 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. 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. 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.

II.3. Equations de Hartree-Fock-Bogoliubov dépendant du temps [40]

Les équations générales du champ moyen dépendant du temps ont été dérivées, à l'aide du principe variationnel de Balian-Vénéroni [40]. Elles ont été écrites en termes des opérateurs de création et d'annihilation a^+ et a sous la forme suggestive suivante :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \langle a \rangle}{\partial t} &= \frac{\partial \xi}{\partial \langle a^+ \rangle} \\ i\hbar \frac{\partial \langle a^+ \rangle}{\partial t} &= - \frac{\partial \xi}{\partial \langle a \rangle} \end{aligned} \quad (\text{II.1.a})$$

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -2 \left[\rho, \frac{\partial \xi}{\partial \rho} \right] \quad (\text{II.1.b})$$

Dans l'équation (II.1, b), ρ est la matrice densité à un corps définie par la relation :

$$1 + 2\rho = \begin{pmatrix} \langle \bar{a}\bar{a}^+ + \bar{a}^+\bar{a} \rangle & -2\langle \bar{a}\bar{a} \rangle \\ \langle 2\bar{a}^+\bar{a}^+ \rangle & -\langle \bar{a}\bar{a}^+ + \bar{a}^+\bar{a} \rangle \end{pmatrix}, \quad (\text{II.2})$$

où $\bar{a} = a - \langle a \rangle$ et $\bar{a}^+ = a^+ - \langle a^+ \rangle$ sont les opérateurs centrés de valeurs moyennes nulles et $\xi \equiv \langle H \rangle$ est l'énergie du système. La valeur moyenne $\langle A \rangle$ d'un opérateur A est calculée via l'expression usuelle : $\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}AD}{\text{Tr}D}$ où D est l'opérateur densité du système et Tr dénote la trace.

II.4 Application à un système de bosons piégés [53]

Dans l'espace position, les opérateurs a et a^+ dénotent respectivement l'opérateur champ $\hat{\Psi}(\vec{r})$ et son conjugué $\hat{\Psi}^+(\vec{r})$. 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, et en tenant compte des expressions des diverses densités introduites dans la section I.2.2.2, 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 $n_c = |\Phi(r)|^2$.

Grâce à ces identifications, la matrice densité à un corps s'écrit alors :

$$1 + 2\rho = \begin{pmatrix} 1 + 2V\tilde{n} & -2V\tilde{m} \\ 2V\tilde{m}^* & -(1 + 2V\tilde{n}) \end{pmatrix}, \quad (\text{II.3})$$

où V est le volume du gaz.

On peut maintenant écrire (II.1.a, b) sous une forme plus explicite :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial \xi}{\partial \phi^*} \\ i\hbar \frac{\partial \phi^*}{\partial t} = -\frac{\partial \xi}{\partial \phi} \end{cases} \quad (\text{II.4.a})$$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} = 2 \left[\tilde{m}^* \frac{\partial \xi}{\partial \tilde{m}^*} - \tilde{m} \frac{\partial \xi}{\partial \tilde{m}} \right] \\ i\hbar \frac{\partial \tilde{m}}{\partial t} = 4 \left[\frac{\partial \xi}{\partial \tilde{n}} \tilde{m} + \frac{\partial \xi}{\partial \tilde{m}^*} \left(\tilde{n} + \frac{1}{2} \right) \right] \\ i\hbar \frac{\partial \tilde{m}^*}{\partial t} = -4 \left[\frac{\partial \xi}{\partial \tilde{n}} \tilde{m}^* + \frac{\partial \xi}{\partial \tilde{m}} \left(\tilde{n} + \frac{1}{2} \right) \right] \end{cases} \quad (\text{II.4.b})$$

Considérons l'Hamiltonien (I.8) d'un système de bosons piégés. 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 à température finie [23]. Son expression est alors donnée par :

$$\begin{aligned} \xi = \int_r \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Phi^* \Delta \Phi + (V_{ext} - \mu + 2g\tilde{n}) |\Phi|^2 + \frac{g}{2} |\Phi|^4 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \tilde{n} + (V_{ext} - \mu) \tilde{n} + g\tilde{n}^2 \right. \\ \left. + \frac{g}{2} (|\tilde{m}|^2 + \tilde{m}^* \Phi^2 + \tilde{m} \Phi^{*2}) \right] + \text{h.c} \end{aligned} \quad (\text{II.5})$$

En calculant les différentes dérivées qui interviennent dans (II.4.a, b), on obtient finalement les équations TDHFB:

$$\begin{cases} i\hbar\dot{\Phi} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext}(r) - \mu + gn_c + 2g\tilde{n} \right) \Phi + g\tilde{m}\Phi^*, \\ i\hbar\dot{\Phi}^* = -\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext}(r) - \mu + gn_c + 2g\tilde{n} \right) \Phi^* - g\tilde{m}^* \Phi, \end{cases} \quad (\text{II.6.a})$$

$$\begin{cases} i\hbar\dot{\tilde{m}} = g(2V\tilde{n} + 1)\Phi^2 + 4\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext}(r) - \mu + 2gn + \frac{g}{4}(2V\tilde{n} + 1) \right) \tilde{m}, \\ i\hbar\dot{\tilde{m}}^* = -g(2V\tilde{n} + 1)\Phi^{*2} - 4\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext}(r) - \mu + 2gn + \frac{g}{4V}(2V\tilde{n} + 1) \right) \tilde{m}^*, \\ i\hbar\dot{\tilde{n}} = g(\tilde{m}^* \Phi^2 - \tilde{m} \Phi^{*2}). \end{cases} \quad (\text{II.6.b})$$

Dans le système (II.6.a, b), le point indique la dérivée temporelle.

Ces équations self-consistantes constituent un résultat important. En effet, leur structure mathématique leur confère un aspect particulièrement intéressant, puisqu'elles forment un système couplé d'équations aux dérivées partielles. Elles engendrent donc une dynamique couplée du condensat, du nuage thermique et de la densité anormale.

Nous remarquons par ailleurs qu'elles généralisent naturellement les équations de Gross-Pitaevskii ($\tilde{n} = \tilde{m} = 0$), de Popov si l'on néglige $\tilde{m}$, et de Beliaev si $\tilde{m}$ est une constante. Les équations HFB-De Gennes semblent quant à elles, provenir du développement RPA des équations (II.6).

En outre, les seules hypothèses inhérentes aux équations TDHFB concernent la distance inter-atomique moyenne supposée grande (gaz fortement dilué), ainsi que l'aspect champ moyen dynamique. Ce dernier est d'ailleurs visible sur (II.6), où l'on constate qu'un état initialement pur, le restera durant son évolution. En effet, la quantité :

$$I = (1 + 2V\tilde{n})^2 - (2V|\tilde{m}|)^2, \quad (\text{II.7})$$

appelée invariant de Heisenberg et donnée en fonction de ρ par $\rho(\rho+1) = \frac{I-1}{4}$, est une constante du mouvement. Cette quantité est aussi directement liée à la température par la relation $\sqrt{I} = 1 + 2f_{BE}$, où f_{BE} est la fonction de distribution de Bose-Einstein.

Ainsi, $\sqrt{I} = \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)$ pour une distribution thermique à l'équilibre [37].

Finalement, on peut constater que les équations (II.6) sont cohérentes en ce sens qu'elles conservent l'énergie du système $\xi = \langle H \rangle$ et la densité totale de particules $n = n_c + \tilde{n}$, ce qui assure la conservation du nombre total de particules.

Nous allons exploiter ces équations afin d'étudier l'influence de l'approximation de Thomas-Fermi sur les propriétés du condensat dans une situations simple : le cas statique.

III.1 Introduction

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 confronter les prédictions de notre approximation aux résultats expérimentaux et théoriques. D'autre part, l'étude statique est un point de départ pour l'analyse globale des équations TDHFB dynamiques.

On peut obtenir aisément les équations TDHFB statiques en annulant les membres de gauche de (II.6). Cela donne :

$$\begin{cases} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext}(r) - \mu + g(n_c + 2\tilde{n}) \right) \Phi + g\tilde{m} \Phi^* = 0 \\ \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext}(r) - \mu + 2gn + \frac{g}{4V} (2V\tilde{n} + 1) \right) \tilde{m} + \frac{g}{4V} (2V\tilde{n} + 1) \Phi^2 = 0 \\ \tilde{m} \Phi^{*2} - \tilde{m}^* \Phi^2 = 0 \end{cases} \quad (III.1)$$

Rappelons que n est la densité totale du gaz, n_c la densité des atomes condensés et $\tilde{n}$ la densité des atomes non condensés (le nuage thermique). La quantité $\tilde{m}$, appelée la densité anormale, exprime la corrélation entre la phase condensée et la phase non condensée.

Nous supposons dans tout ce qui suit que $g > 0$, c'est-à-dire que les interactions sont répulsives, et que le nombre total de particules est suffisamment élevé $N \gg 1$. Il est alors légitime dans cette situation de négliger les termes du types $\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \right)$ dans les équations (III.1) qui correspondent à l'énergie cinétique du condensat et du nuage thermique. Une telle approximation est appelée approximation de Thomas-Fermi (TF). Elle a l'avantage de conduire à des prédictions analytiques pour plusieurs grandeurs physiques relatives au condensat (la densité, le potentiel chimique, l'énergie totale, la déplétion...etc.).

III.1 Approximation de Thomas-Fermi à température nulle [32, 33, 36, 39,42]

On sait qu'à $T=0$, tous les atomes s'accumulent dans l'état fondamental. La densité condensée devient alors égale à la densité totale du gaz ($n_c=n$), et $\tilde{n}=\tilde{m}=0$.

En fait, l'existence de corrélations et d'un nuage "thermique", même à température nulle, n'est pas interdite [34, 44]. Toute fois, en faisant les calculs, on se rend compte que ces effets sont tellement faibles qu'ils échappent à toute mesure expérimentale.

Avec ces hypothèses, seul le premier terme d'interaction de la première équation du système (III.1) persiste. Nous obtenons alors l'équation de Gross-Pitaevskii

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext} - \mu + g|\Phi|^2 \right) \Phi = 0 . \quad (\text{III.2})$$

De la discussion précédente, on déduit que l'on peut négliger le terme cinétique. La seule solution avec symétrie brisée s'écrit :

$$n(r) = n_c(r) = \frac{\mu - V_{ext}(r)}{g} . \quad (\text{III.3})$$

Pour un potentiel sphérique du type $V_{ext}(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$, la densité de particules a donc la forme

d'une parabole inversée avec un maximum $\frac{\mu}{g}$ en $r=0$ et s'annulant au-delà de $R_{TF} = \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega^2}}$.

La valeur centrale de n_c est dite densité de colonne et R_{TF} est le rayon du condensat.

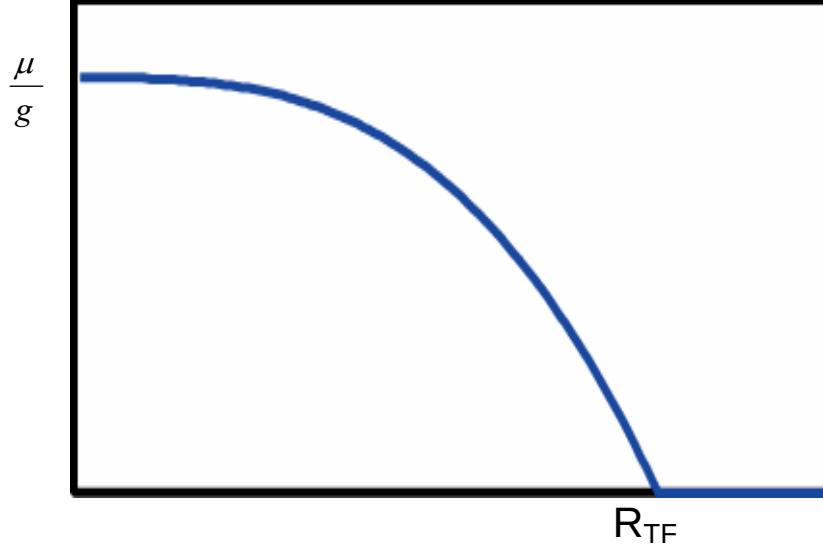


FIG.I : Densité atomique à $T=0$

Le rayon du condensat R_{TF} est déterminé par la condition $n_c(R_{TF}) = 0$, c'est aussi le point tournant classique $V_{ext}(r) = \mu(R_{TF})$. Le nombre total de particules est donné par la condition :

$$N = \int_0^{R_{TF}} d^3r n_c(r) = \int_0^{R_{TF}} d^3r n(r). \quad (\text{III.4})$$

Cela permet d'obtenir le potentiel chimique μ_{TF} et le rayon du gaz R_{TF} :

$$\begin{cases} R_{TF} = a_{H_0} \left(15 N \frac{a}{a_{H_0}} \right)^{1/5}, \\ \mu_{TF} = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(15 N \frac{a}{a_{H_0}} \right)^{2/5}, \end{cases} \quad (\text{III.5})$$

où $a_{H_0} = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}}$ 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 s . Le problème à température nulle est donc complètement résolu.

III.2 Approximation de TF à température finie

A température finie, le problème (III.1) est plus ardu, car il s'agit de traiter deux équations aux dérivées partielles non linéaires et couplées. Néanmoins, une première approche, aussi appelée approximation de TF, consiste à négliger les termes cinétiques dans les deux premières équations de (III.1). Cela conduit à des équations algébriques non linéaires [54].

Les résultats de cette étude montrent d'une part, que le nuage thermique naît aux bords du condensat et qu'il est quasiment uniforme [55]. D'autre part, il apparaît que la transition vers l'état normal (non condensé) est beaucoup plus due à "l'invasion" des atomes non condensés qu'à l'affaissement du condensat.

Cette dernière image semble compatible avec les résultats expérimentaux. Cependant, le fait que le nuage thermique reste uniforme, peut être un "artifact" de l'approche.

En effet, il semble hasardeux de négliger les fluctuations du nuage thermique, et même si tel était réellement le cas, rien ne saurait la justifier aux frontières du piège magnétique.

Nous allons tenter au chapitre suivant, d'apporter des éléments de réponses à ces interrogations en résolvant numériquement les équations TDHFB statiques au-delà de l'approximation de Thomas-Fermi.

IV.1 Introduction

Comme nous l'avons mentionné au chapitre III, la résolution exacte de ces équations statiques est impossible à faire analytiquement, même dans le cas d'un potentiel sphérique qui rend le problème à une dimension. Le terme non linéaire pose un problème difficilement soluble. Aussi, nous proposons-nous de résoudre numériquement ce problème, afin de répondre aux questions restées encore sans réponses. Commençons, pour simplifier l'analyse de ces équations, par l'écriture de (III.1) sous une forme adimensionnée.

IV.1 Equations TDHFB adimensionnées

Dans le cas d'un potentiel confinant sphérique $V_{ext} = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$, nous utilisons les variables sans dimension suivantes :

$$q = \frac{r}{a_{H_0}}, \quad \hat{\Psi} = q \sqrt{a_{H_0}^{-3}} \Phi, \quad \hat{\chi} = q a_{H_0}^{-3} \tilde{m}. \quad (\text{IV.1})$$

Le système (III.1) et l'équation (II.7) deviennent :

$$\left\{ \begin{aligned} & \left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 - \nu + 8\pi \frac{a}{a_{H_0}} \left(\frac{\hat{\Psi}^2}{q^2} + 2\hat{n} + \frac{\hat{\chi}}{q} \right) \right) \hat{\Psi} = 0 \\ & \left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 - \nu + 8\pi \frac{a}{a_{H_0}} \left(2\hat{n} + \frac{2\hat{n} + V^{-1}}{4} \right) \right) \hat{\chi} + 8\pi \frac{a}{a_{H_0}} \left(\frac{2\hat{n} + V^{-1}}{4} \right) \frac{\hat{\Psi}^2}{q} = 0 \end{aligned} \right. \quad (\text{IV.2.a})$$

Tandis que l'équation (II.7) devient

$$\hat{n} = \frac{1}{2V} \left[\left(I + 4V^2 \frac{\hat{\chi}^2}{q^2} \right)^{1/2} - 1 \right], \quad (\text{IV.2.b})$$

avec les définitions évidentes des nouvelles densités adimensionnées :

$$\begin{aligned}\hat{n}_c &= \hat{\Psi}^2 \\ \hat{\tilde{n}} &= a_{H0}^3 \tilde{n} \\ \hat{n} &= \hat{n}_c + \hat{\tilde{n}}. \\ \nu &= \frac{2\mu}{\hbar \omega}\end{aligned}$$

Nous rappelons que I est une mesure de la température via l'équation (II.7). Ainsi, $I=1$ est la situation à température nulle.

La forme (IV.2) est mieux adaptée pour l'analyse numérique. En particulier, l'apparition du rapport a/a_{H0} montre les effets antagonistes des self-interactions et du potentiel confinant.

IV.2 Conditions aux limites

S'agissant d'un système d'équations différentielles, (IV.2) peut être résolu par diverses méthodes numériques. Il doit en outre être soumis à des conditions aux limites. Celles-ci sont imposées par la physique du problème. En effet, on sait que les différentes densités ainsi que leurs dérivées doivent s'annuler à l'infini. Cela constituera nos conditions aux limites.

Cependant, ces conditions ne peuvent pas être appliquées rigoureusement dans un processus numérique, puisque toute discrétisation impliquera une subdivision finie, aussi petite soit-elle. Par ailleurs, si l'on considère des solutions nulles à l'infini, cela entraînera que l'algorithme ne pourra engendrer que des solutions triviales.

Les conditions aux limites que nous proposons sont tout à fait naturelles ; la valeur maximale de la densité de colonne apparaît donc comme une conséquence plutôt qu'une hypothèse de départ.

Afin de pouvoir démarrer notre algorithme, nous utilisons ces conditions aux limites pour analyser le comportement asymptotique des solutions. Les fonctions $\hat{\Psi}$ et $\hat{\chi}$ deviennent alors :

$$\begin{aligned}\hat{\Psi} &\approx e^{-q^2/2} \\ \chi &\approx e^{-q^2/2}\end{aligned}\tag{IV.2.1}$$

Nous allons donc considérer numériquement des formes gaussiennes à l'infini.

IV.3 Description de la méthode numérique

Nous avons commencé par utiliser la méthode des différences finies. Mais malheureusement, elle s'est avérée inefficace et instable.

L'idée est donc de transformer le problème en un problème de Cauchy en considérant les conditions aux limites comme des conditions " initiales". Cette idée a par ailleurs été exploitée dans [45-52] et [56] pour résoudre l'équation de Gross-Pitaevskii ; en utilisant des algorithmes de Runge-Kutta d'ordre 4, Crank-Nicholson, " Time splitting spectral method" et éléments finis respectivement.

Nous adoptons une idée analogue, mais nous utilisons un algorithme de Numerov, en partant de $q=q_{max}$ (une valeur suffisamment grande comparée au point tournant classique), puis en remontant vers le centre du piège en $q=0$.

On note que le potentiel chimique doit être déterminé d'une manière self-consistante de sorte à assurer la contrainte de normalisation. On peut alors adjoindre à l'algorithme de Numerov une méthode de gradient, qui à la fin de chaque essai avec un ν donné, vérifiera la condition $N = \int d^3q \hat{n}(q)$ et itérera le calcul jusqu'à convergence.

Mais cette procédure s'avère assez lourde car tout le processus devient rapidement instable vu les non-linéarités qui interviennent.

Aussi, préférons-nous une technique plus intuitive et moins coûteuse. Il suffit en effet, de démarrer tous nos calculs pour un gaz proche du gaz idéal pour lequel $a/a_{H0} \ll 1$. Dans ce

cas, nous savons que la valeur de μ est très voisine de celle du gaz idéal, soit $\mu = \frac{3}{2}\hbar\omega$, ce qui conduit à $\nu=3$. Il est facile par la suite d'étendre notre calcul, en augmentant progressivement le rapport a/a_{H0} , ce qui entraîne que μ s'éloignera lentement de sa valeur idéale. Cela nous permet, non seulement de déterminer rapidement et avec une bonne précision la valeur de ν , mais aussi et surtout, de pouvoir étudier les profils des densités en fonction des interactions. Nous verrons dans ce qui suit que cette approche fournit de très bon résultats en assurant une normalisation efficace.

Maintenant que l'on a mis en évidence certains aspects inédits des équations TDHFB, nous allons commencer par l'étude des différents profils de densités (en unité de a_{H0}^3) en fonction de la distance radiale (en unité de a_{H0}). Pour ce faire, il suffit d'augmenter progressivement les interactions via a/a_{H0} et la température via I .

Les courbes ci-dessous, présentent la densité condensée (n_c) en traits continus, le nuage thermique ($\tilde{n}$) en tirets et la densité totale (n) en pointillés.

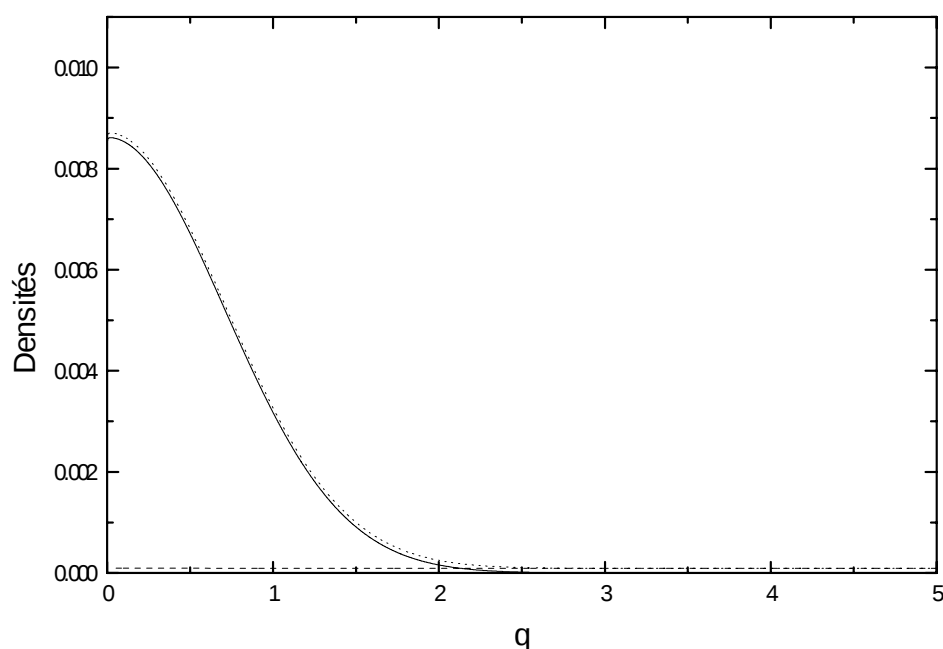


FIG. 1 : Profils des densités pour $I=1.2$ et $a/a_{H0}=10^{-3}$

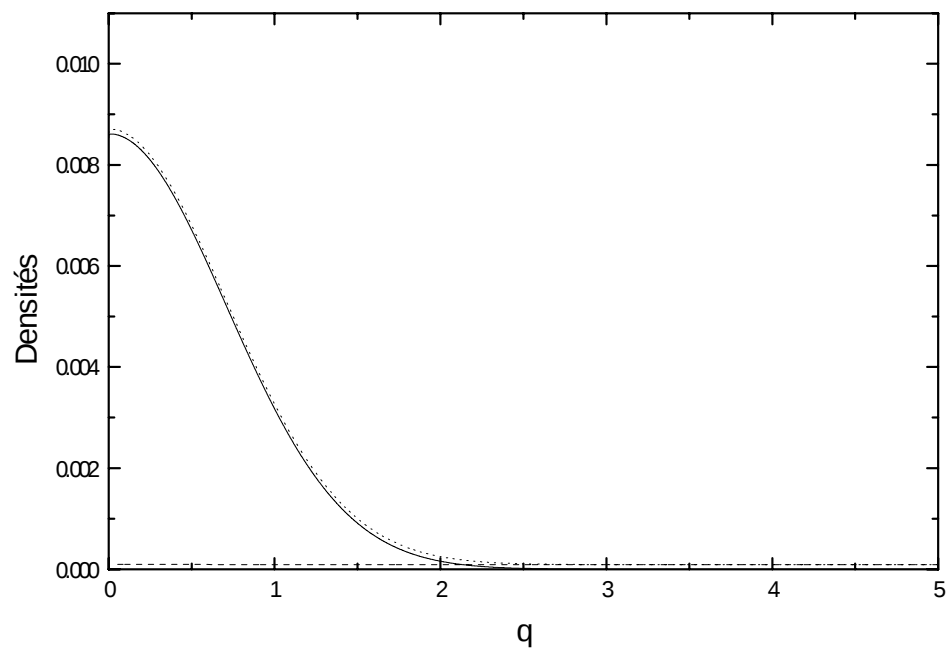


FIG. 2 : Profils des densités pour $I=1.2$ et $a/a_{H0}=10^{-2}$

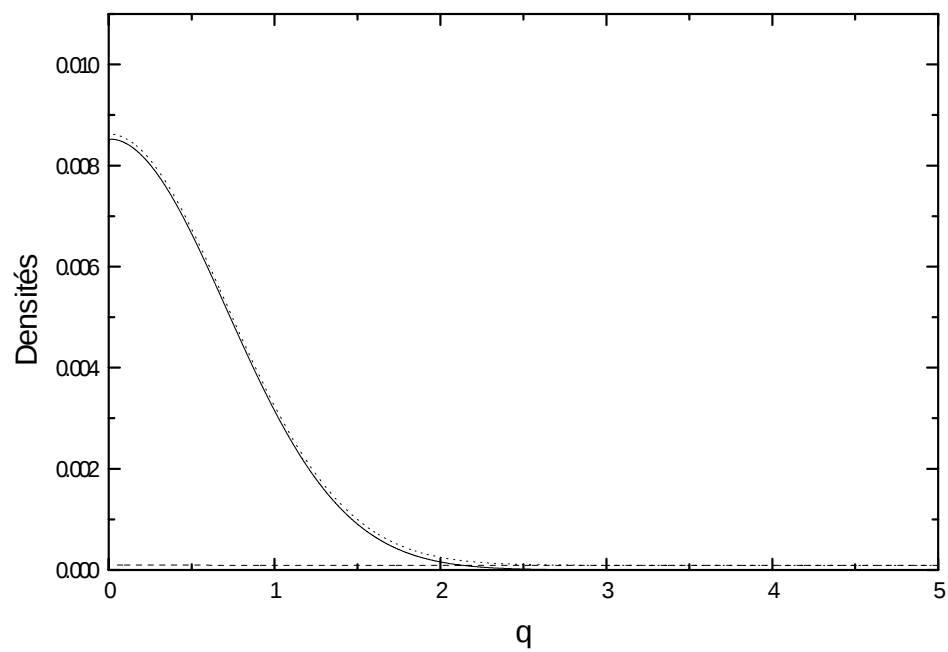


FIG. 3 : Profils des densités pour $I=1.2$ et $a/a_{H0}=10^{-1}$

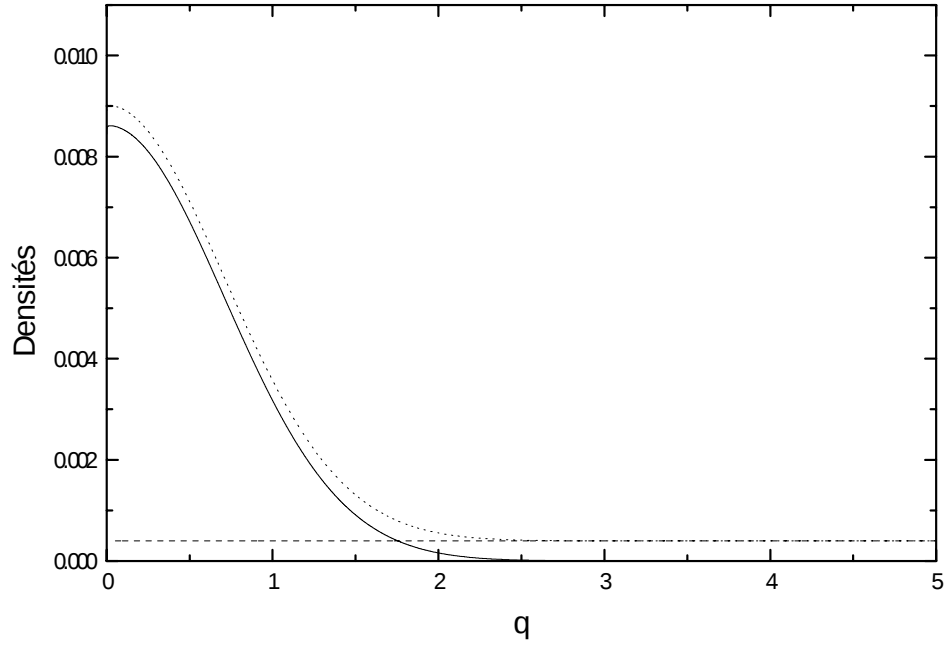


FIG. 4 : Profils des densités pour $I=2$ et $a/a_{H0}=10^{-3}$

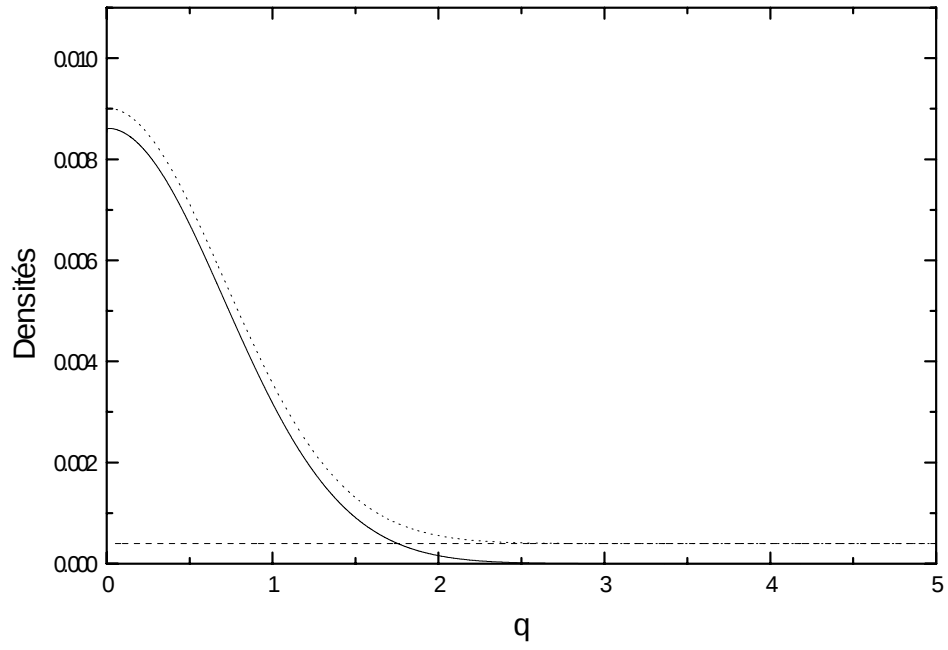


FIG. 5 : Profils des densités pour $I=2$ et $a/a_{H0}=10^{-2}$

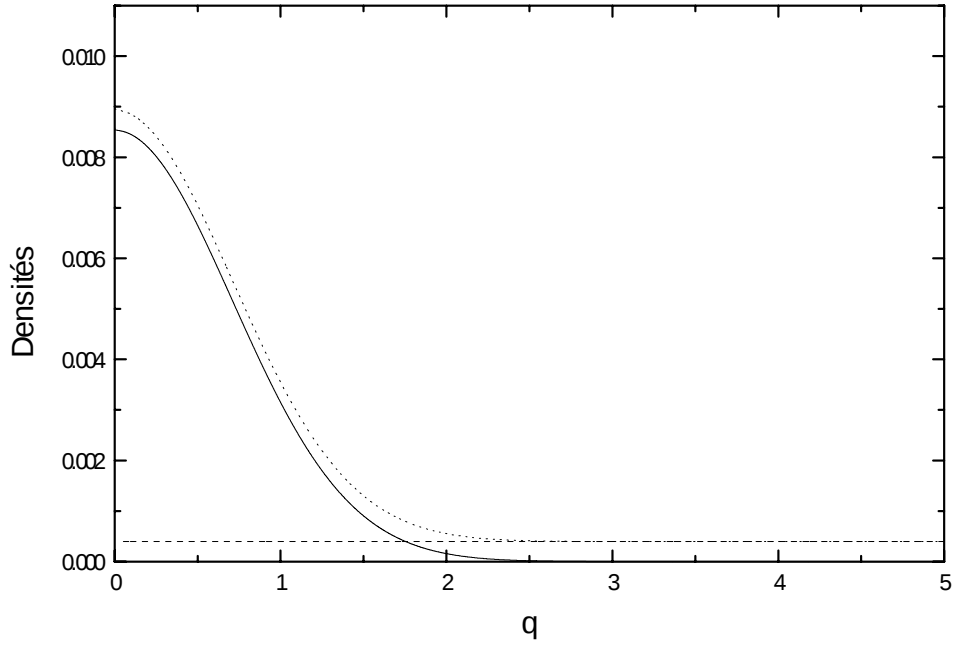


FIG. 6 : Profils des densités pour $I=2$ et $a/a_{H0}=10^{-1}$

Les figures 1 à 6 montrent que si la température est suffisamment basse $I=1.2-2$, la majorité des atomes se condensent au centre du piège. Par conséquent, la densité condensée est comparable à la densité totale de particules $n_c \approx n$. En revanche, la fraction non condensée du gaz est négligeable dans cette gamme de température. Les interactions ne jouent pratiquement aucun rôle quant aux profils de densités. En particulier, le nuage thermique reste uniforme pour toute cette plage d'interactions.

Afin de confirmer ces observations, augmentons la température et faisons varier les interactions de la même façon que précédemment.

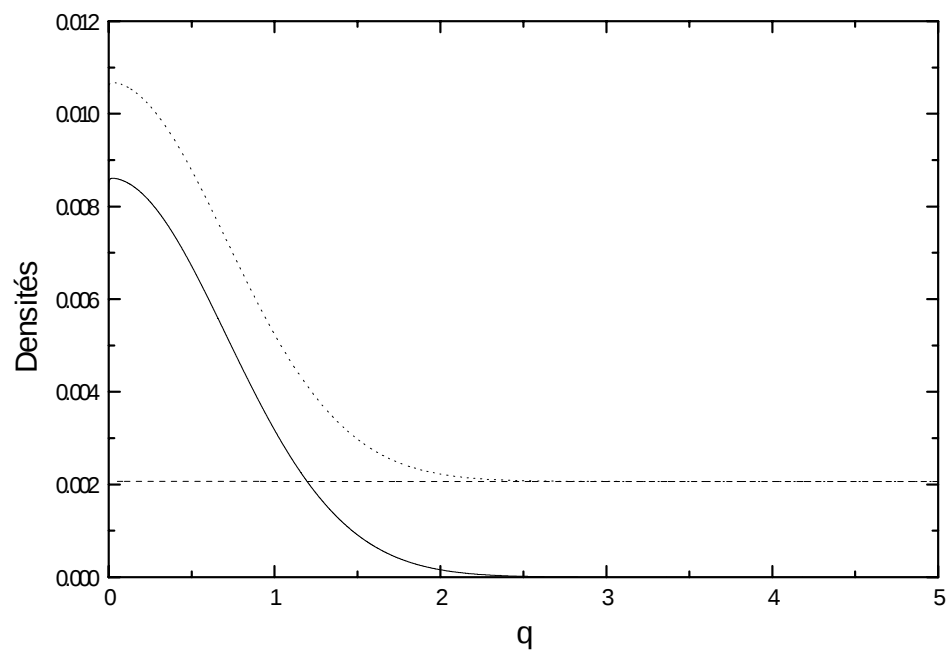


FIG. 7 : Profils des densités pour $I=10$ et $a/a_{H0}=10^{-3}$

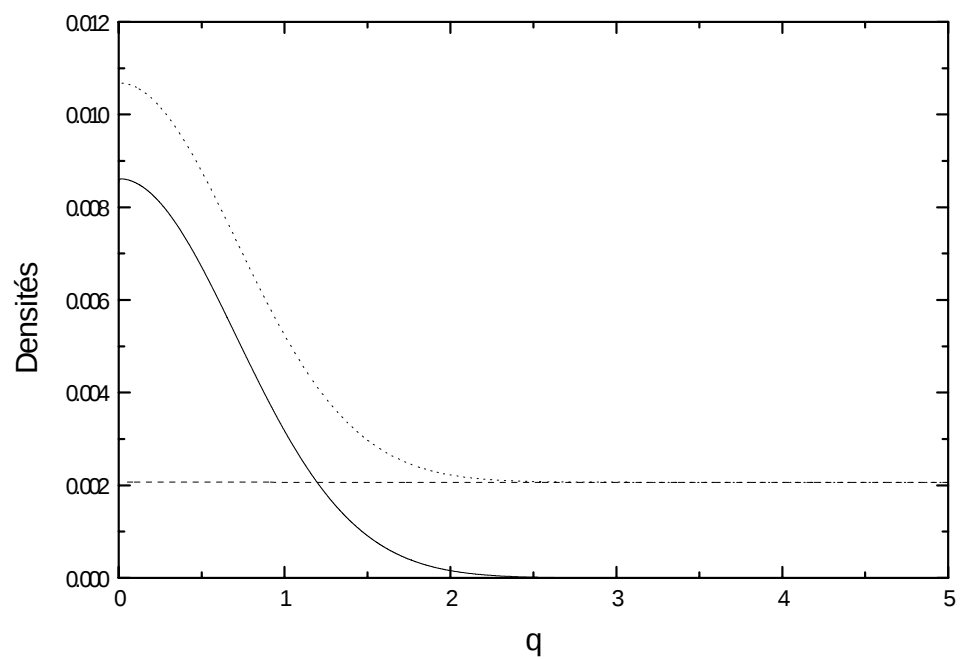


FIG. 8 : Profils des densités pour $I=10$ et $a/a_{H0}=10^{-2}$

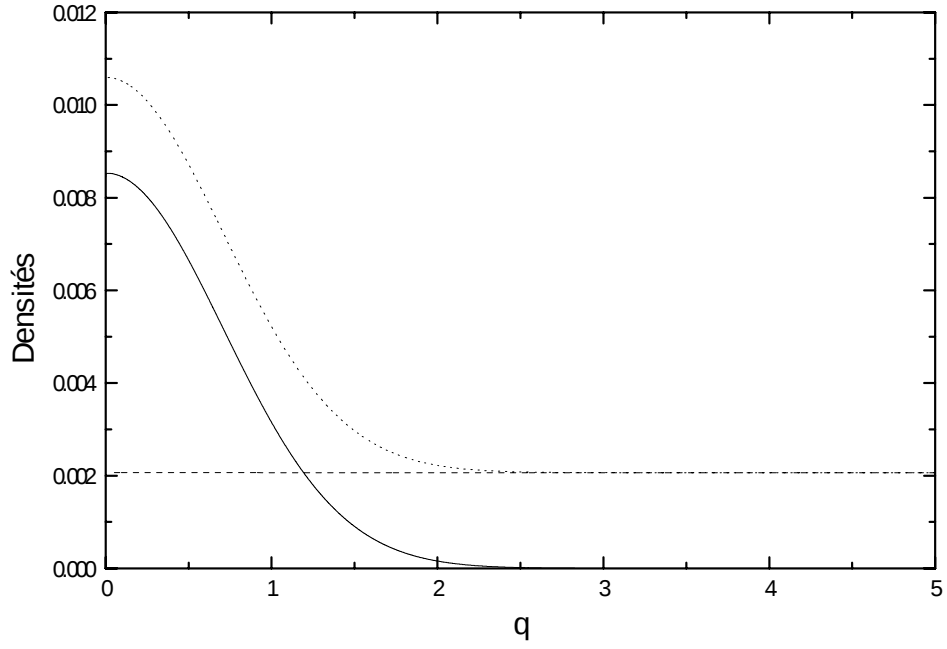


FIG. 9 : Profils des densités pour $I=10$ et $a/a_{H0}=10^{-1}$

On observe sur les figures 7 à 9, qu'à partir de $I=10$, les atomes non condensés deviennent de plus en plus nombreux. En effet, selon l'expression (IV.2), la densité non condensée croît linéairement en fonction de $\sqrt{I}$, car $\tilde{m}$ reste négligeable tout au long des calculs. Le nuage thermique uniforme semble persister même à ces températures.

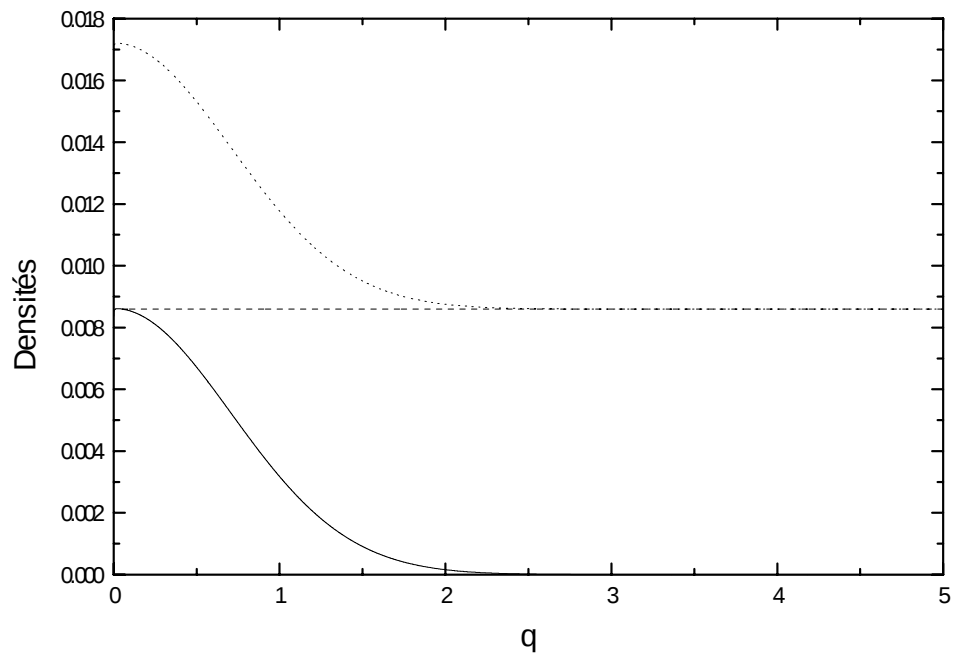


FIG. 10 : Profils des densités pour $I=10^2$ et $a/a_{H0}=10^{-3}$

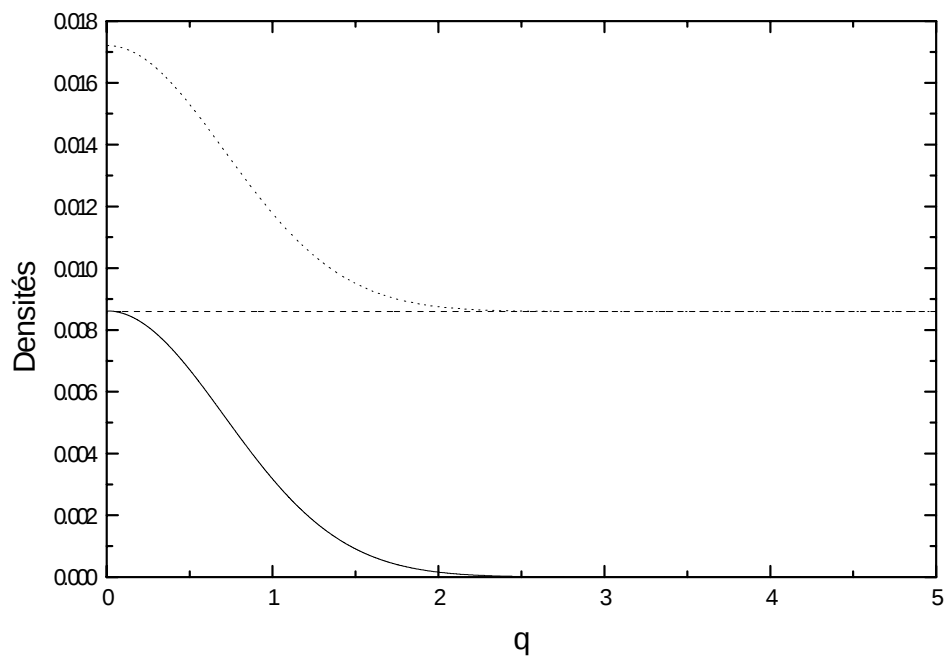


FIG. 11 : Profils des densités pour $I=10^2$ et $a/a_{H0}=10^{-2}$

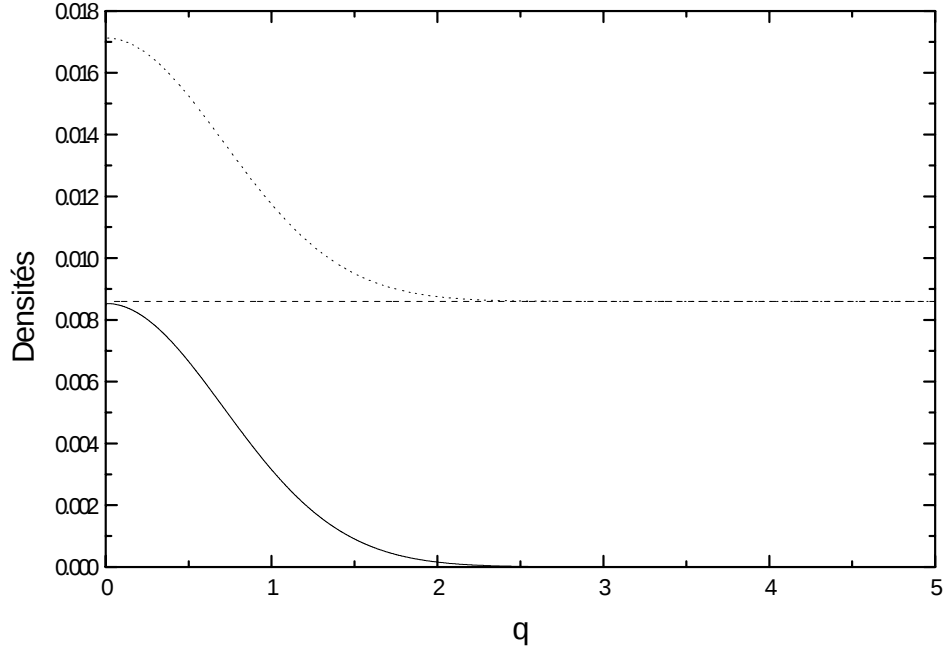


FIG. 12 : Profils des densités pour $I=10^2$ et $a/a_{H0}=10^{-1}$

Pour $I=100$, il est clairement visible sur les figures 10 à 12, que la tendance commence à s'inverser. On constate que les atomes non condensés commencent à recouvrir le condensat et occupent une partie importante du gaz. Le nuage thermique reste malgré tout uniforme et la densité de colonne n'est pratiquement pas sensible ni à la température ni aux interactions. Il semble donc à priori, qu'à cette température ($T_c \approx 25$ nK pour $\omega = 674.5$ rad.s⁻¹ [43]), la transition vers l'état normal a eu lieu. Noter bien que cette température est calculée par la

$$\text{relation } T_c = \frac{\hbar\omega}{k_B} \frac{1}{\ln\left(\frac{\sqrt{I}+1}{\sqrt{I}-1}\right)}.$$

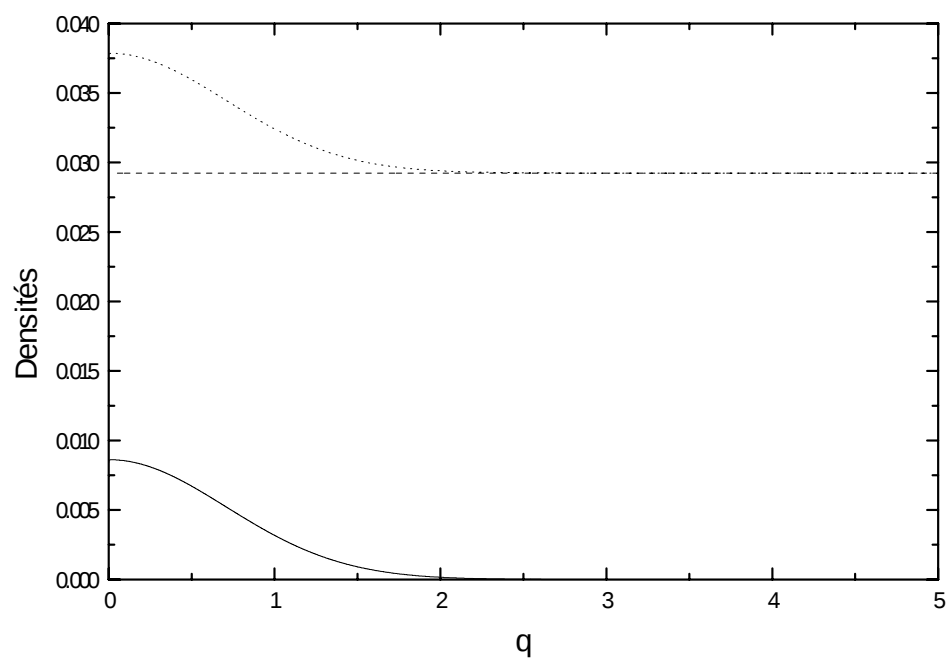


FIG. 13 : Profils des densités pour $I = 10^3$ et $a/a_{H0} = 10^{-3}$

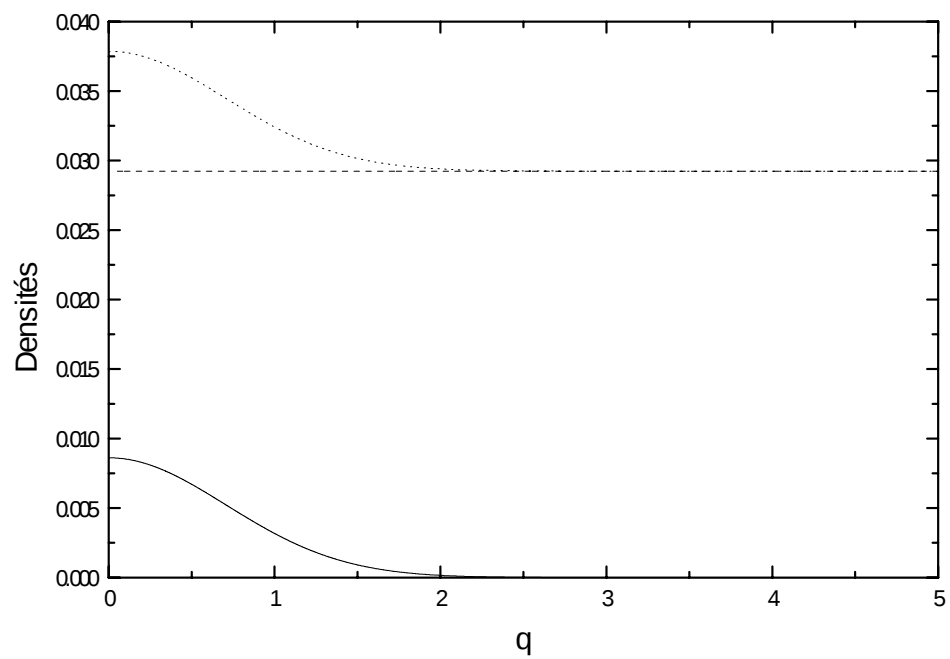


FIG. 14 : Profils des densités pour $I = 10^3$ et $a/a_{H0} = 10^{-2}$

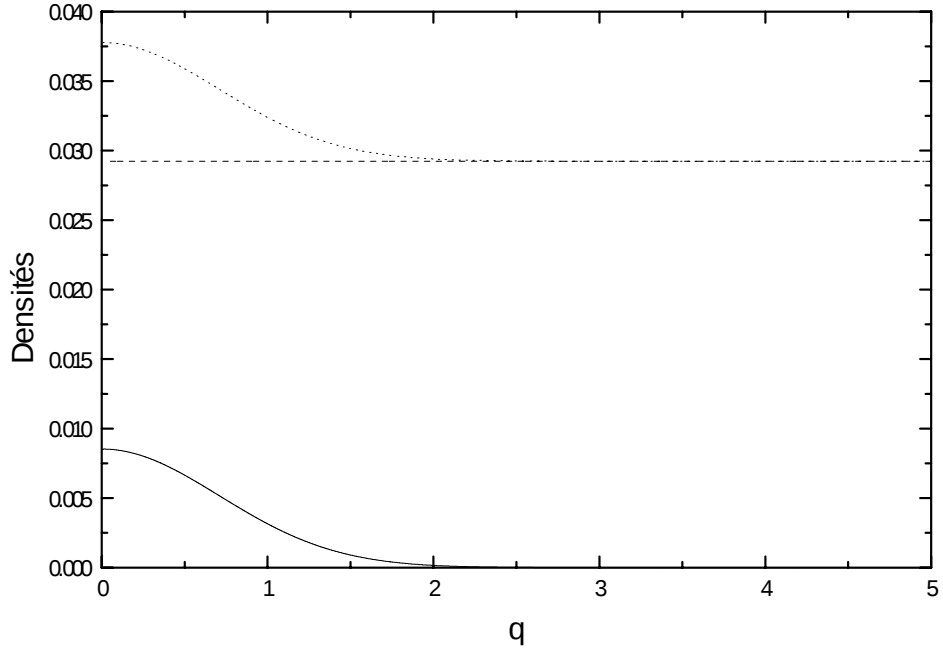


FIG. 15 : Profils des densités pour $I=10^3$ et $a/a_{H0}=10^{-1}$

En augmentant encore plus la température $I=1000$, ce phénomène ne fait que s'accroître. En effet, le nuage thermique devient très dense et s'étend sur tout le volume du gaz.

L'image finale est donc celle d'un ensemble d'atomes condensés submergés progressivement par des flots (uniformes) d'atomes excités.

Bien que ces plages de paramètres (a/a_{H0} et I) soient compatibles avec les expériences actuelles, il est intéressant d'étudier le comportement des diverses quantités lorsque l'on augmente suffisamment les interactions. L'objectif est non seulement de confirmer les conclusions précédentes mais aussi d'aborder un nouveau régime appelé « Tonk-Girardeau », pour lequel beaucoup de résultats nouveaux sont en train d'apparaître et beaucoup d'expériences sont en préparation.

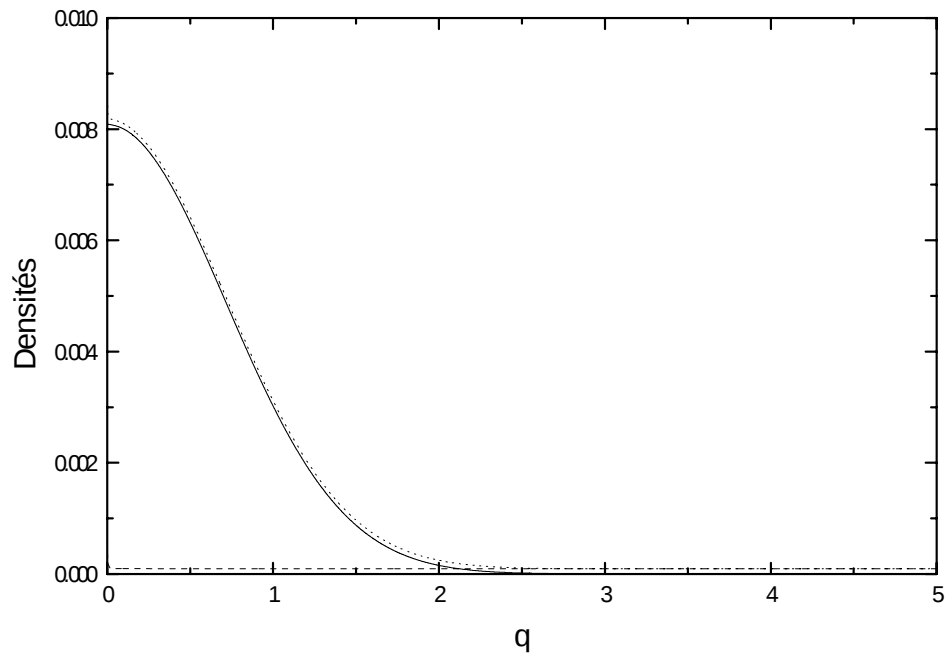


FIG. 16 : Profils des densités pour $I=1.2$ et $a/a_{H0}=0.5$

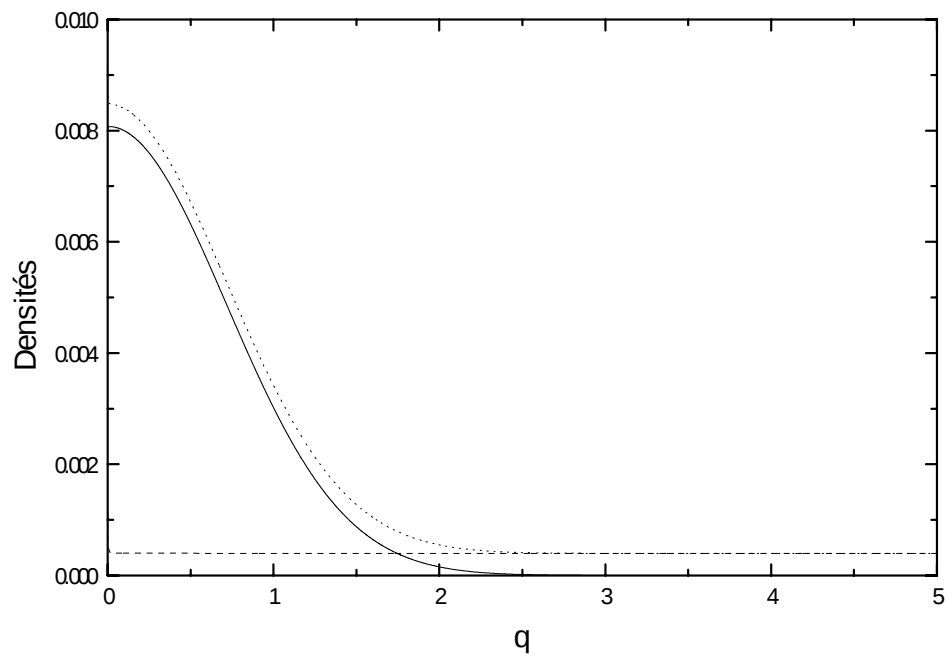


FIG. 17 : Profils des densités pour $I=2$ et $a/a_{H0}=0.5$

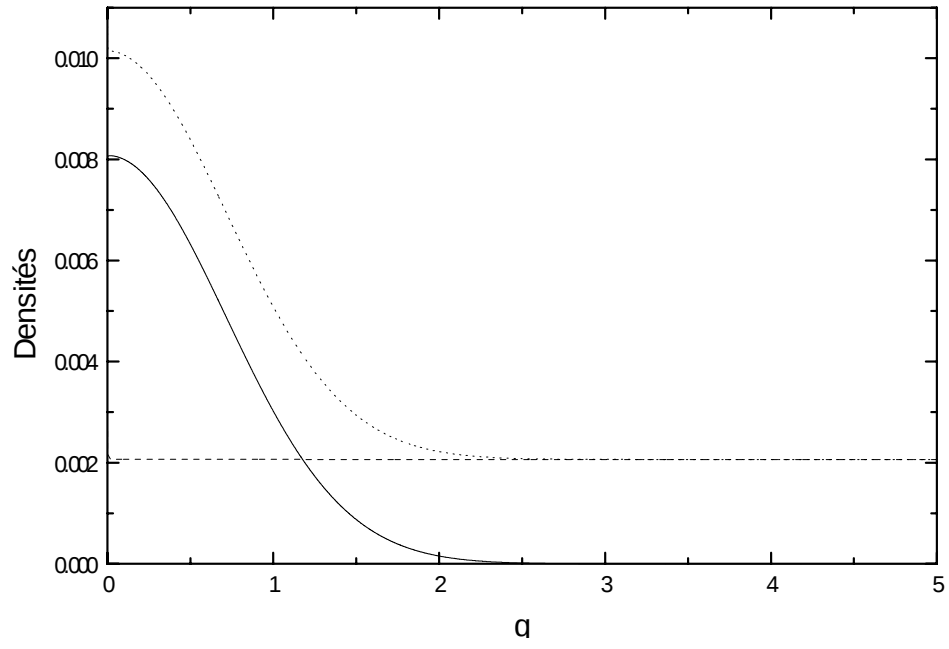


FIG. 18: Profils des densités pour $I=10$ et $a/a_{H0}=0.5$

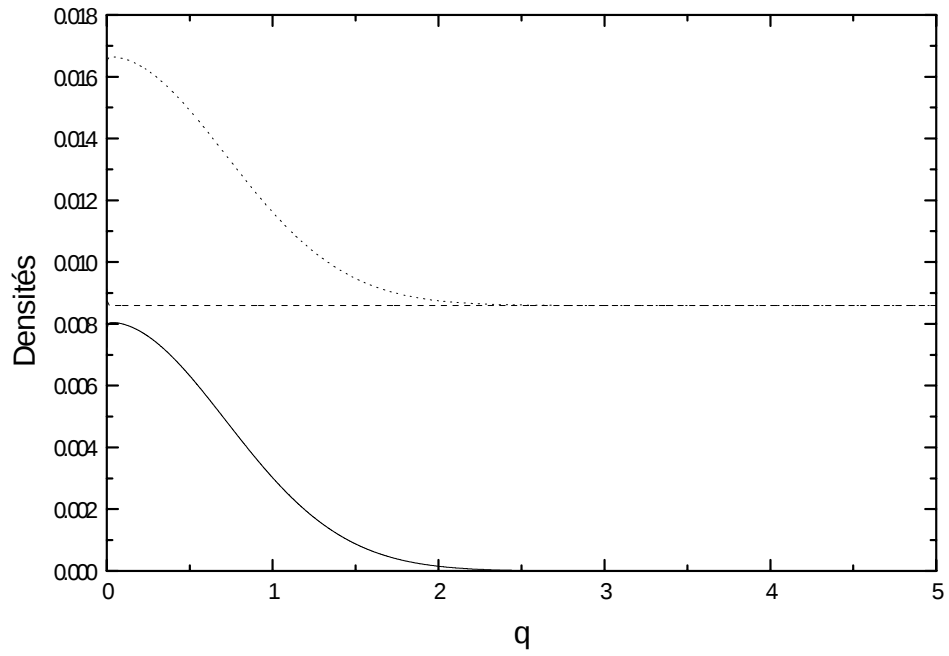
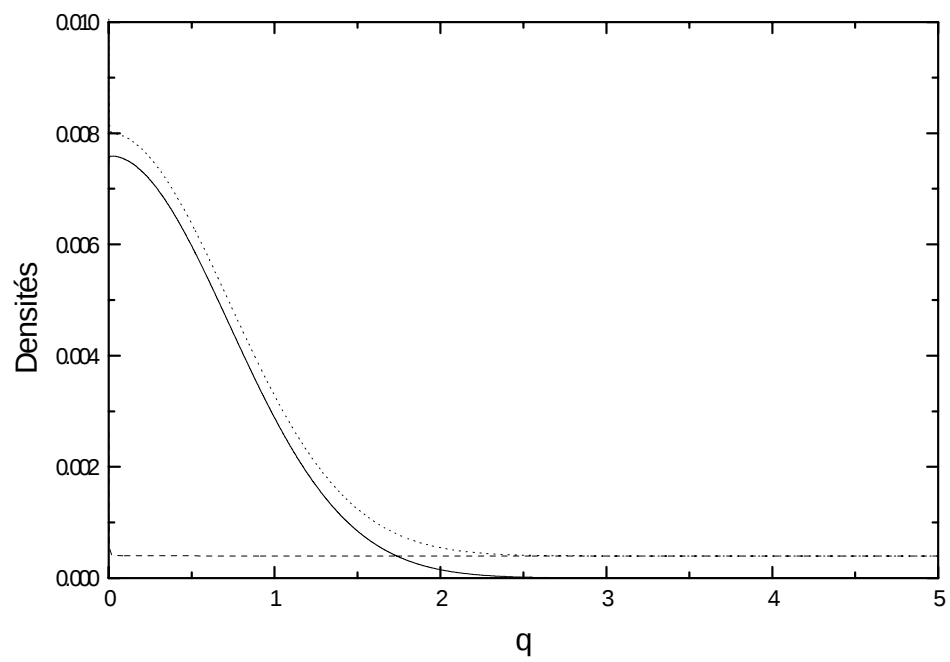
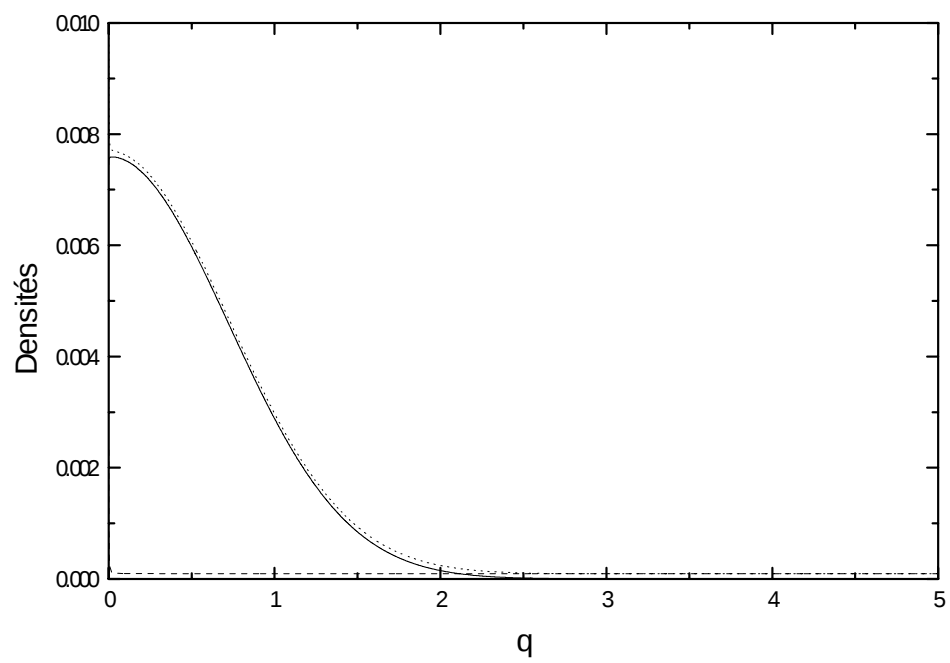


FIG. 19 : Profils des densités pour $I=100$ et $a/a_{H0}=0.5$



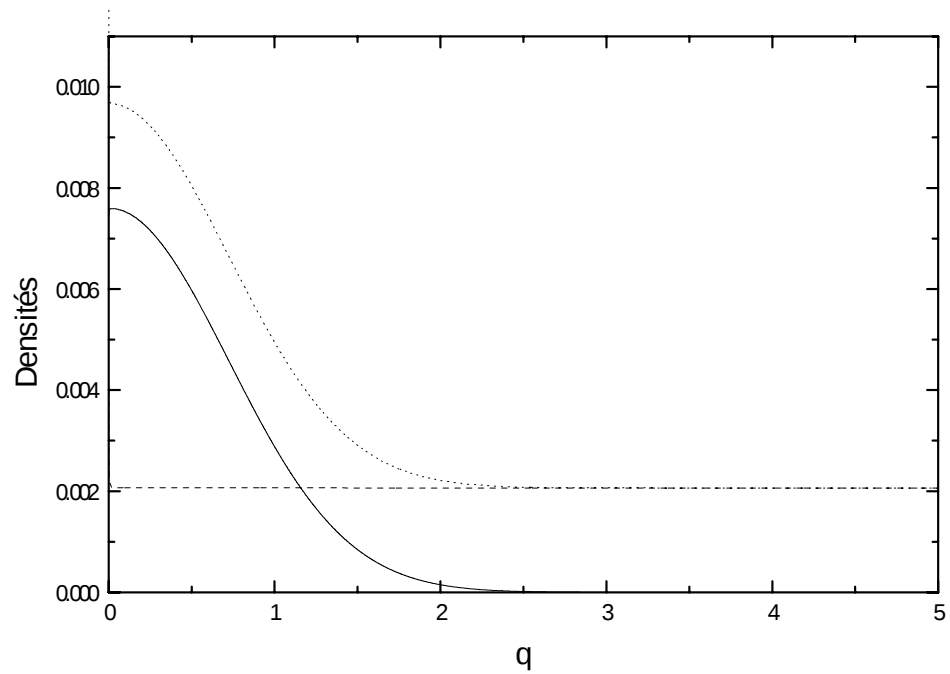


FIG. 22 : Profils des densités pour $I=10$ et $a/a_{H0}=1$

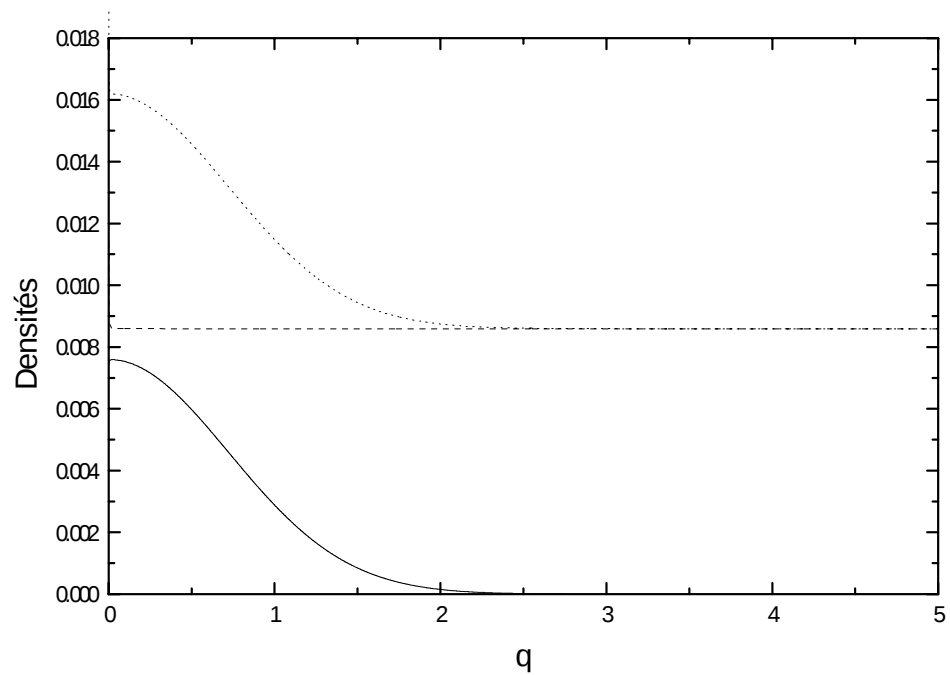


FIG. 23 : Profils des densités pour $I=100$ et $a/a_{H0}=1$

Nous présentons sur les figures 16 à 19, puis 20 à 23 avec les mêmes conventions que les courbes précédentes les profils des différentes densités obtenus pour diverses valeurs de températures croissantes jusqu'à la transition, et pour un rapport d'interaction a/a_{H0} allant de 0.5 à 1.

Ces figures montrent bien que les résultats précédents restent valides. En particulier, l'image d'un "îlot" d'atomes condensés, submergé progressivement par une "mer" d'atomes non condensés, au fur et à mesure que la température croît, reste vraie pour les fortes interactions.

La conclusion que l'on peut tirer de ces figures est double. En premier lieu, la densité de colonne $n_c(q=0)$ est une fonction décroissante des interactions. Par conséquent, sous l'effet des fortes interactions, la densité de colonne caractérisant les atomes condensés s'abaisse lentement et devient de plus en plus faible pour différentes valeurs de la température. Le rayon du gaz s'élargit progressivement. Les self-interactions tendent donc à "aplatir" le condensat et à l'étaler sur les bords. Afin d'étayer cette remarque, nous représentons sur la figure 24 la densité de colonne en fonction de a/a_{H0} pour une température correspondant à $I=1.2$. Nous voyons clairement la décroissance de $n_c(0)$ lorsque a/a_{H0} croît. L'allure générale de cette courbe reste vraie si l'on augmente I .

Le fait que $n_c(0)$ soit pratiquement constante en fonction de la température, montre que la transition est beaucoup plus due à l'invasion des atomes non condensés qu'à l'affaissement du condensat.

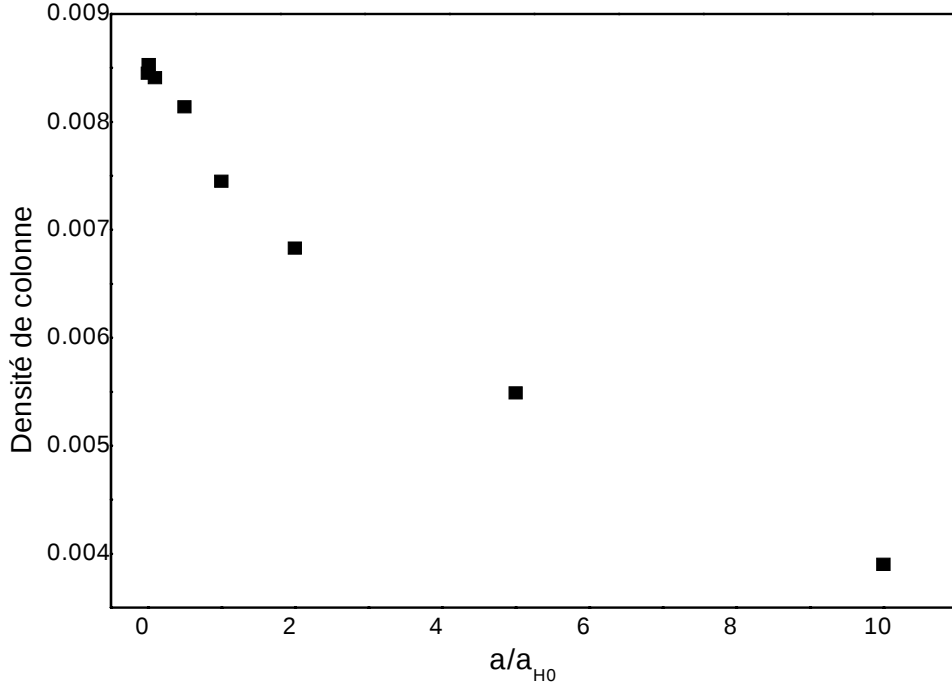


FIG. 24 : Densité de colonne en fonction de a/a_{H0} , pour $I=1.2$

Le deuxième fait important que l'on observe en augmentant les interactions est que l'inversion des populations condensées et non condensées a lieu plus tôt que prévu. En effet, alors que pour a/a_{H0} allant de 10^{-3} à 10^{-1} (cf. figures 1 à 15), la transition a lieu autour de $I=100$, on remarque pour $a/a_{H0}=0.5$ à 1, elle a lieu pour $I < 100$ (cf. figures 19 à 23).

Nous allons donc représenter la valeur de I correspondant à la situation où $\tilde{n}$ recouvre n_c , et que nous dénotons par I_c pour anticiper sa définition comme valeur critique, en fonction des interactions. Le résultat est présenté sur la figure 25 où il apparaît clairement que la température de transition est une fonction décroissante des interactions. En augmentant encore les self-interactions, la transition vers l'état normal devient de plus en plus facile.

Ces conclusions rejoignent les observations des groupes de JILA [30], ainsi que celles des théoriciens qui utilisent la théorie du champ moyen de Hartree-Fock [17, 20, 22], ou les simulations Monte-Carlo pour les systèmes homogènes [35].

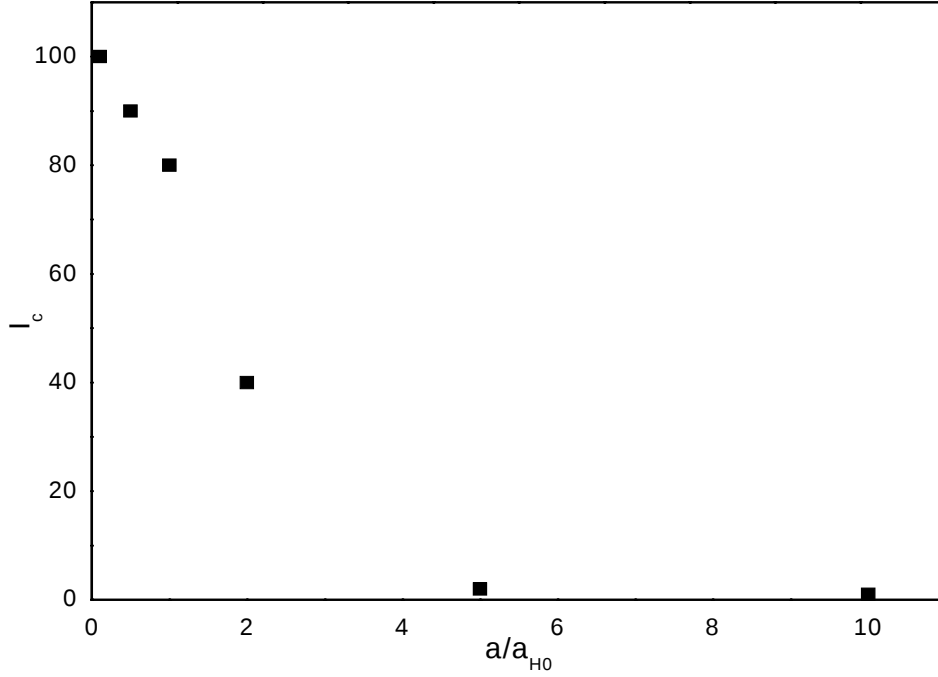


FIG. 25 : Température de transition T_c en fonction des interactions

Après avoir analysé les différents profils de densités dans divers régimes d'interactions et de températures, il est aussi sage d'examiner le potentiel chimique μ (ou sa forme adimensionnée, ν). Cette quantité est très peu connue à température finie aussi bien expérimentalement que théoriquement. En effet, mis à part quelques calculs effectués par Giorgini et al [33], et Benarous et al [53,54], on sait très peu de choses sur le potentiel chimique, bien que sa valeur précise soit déterminante pour la stabilité des solutions numériques. En effet, toutes les courbes que nous avons représentées précédemment reposent sur une détermination précise (au millième près) de μ .

Dans les tableaux 1 à 5, nous reportons toutes les valeurs de ν déterminées numériquement. Il à noter qu'un écart très faible par rapport aux valeurs tabulées conduit à des instabilités de la solution numérique. Par ailleurs les valeurs de ν fournissent bien la normalisation car en calculant $\int d^3q \hat{n}(q) = 1$, on trouve un nombre total de particules de l'ordre de 10^5 à 10^6 , ce qui est compatible avec le nombre de particules imposé au départ.

a /a_{H0}	ν	I
0.001	3.001785	1.2
	3.001795	2
	3.001840	10
	3.002150	100
	3.003150	1000

Tableau 1

a /a_{H0}	ν	I
0.01	3.00231	1.2
	3.00244	2
	3.00321	10
	3.00622	100
	3.01575	1000

Tableau 2

a /a_{H0}	v	I
0.1	3.00768	1.2
	3.00910	2
	3.01670	10
	3.04680	100
	3.14190	1000

Tableau 3

a /a_{H0}	v	I
0.5	3.035900	1.2
	3.042940	2
	3.081382	10
	3.231880	100
	3.707550	1000

Tableau 4

a /a_{H0}	v	I
1	3.06810	1.2
	3.08211	2
	3.15902	10
	3.45992	100
	4.41144	1000

Tableau 5

Au vu de ces tableaux, on constate que le potentiel chimique croit en fonction de la température et des interactions. Certains auteurs, en particulier [39], semblent prédire des effets inverses. La référence [55] (en voie de publication) semble confirmer nos résultats.

A l'issue de nos explorations numériques durant lesquelles une panoplie de résultats pour le moins inédits, sont apparus, il est utile de mettre un peu d'ordre dans les idées qui s'en ressortent. En premier lieu, la question première qui a motivé notre travail, et qui consistait à étudier l'influence de l'énergie cinétique du nuage thermique sur les prédictions des équations TDHFB statiques, s'est vue attribuer une réponse surprenante : le terme cinétique n'a pratiquement pas d'effet notable. Aussi, les conclusions auxquelles sont parvenues les auteurs de [53, 54], sont elles largement justifiées. En particulier, les profils des différentes densités, l'allure qualitative de la transition ainsi que l'homogénéité du nuage thermique sont des propriétés qui persistent au-delà de l'approximation de Thomas-Fermi.

L'image d'un condensat submergé par un nuage thermique grandissant avec la température est aussi maintenue.

Les différences que l'on a notées concernent surtout la nature quantitative de la transition puisque, dans notre approche, la température de transition reproduit bien les valeurs expérimentales. Le terme cinétique semble donc ne jouer de rôle important qu'au voisinage de la transition où il permet d'emballer suffisamment le nuage thermique pour lui permettre de submerger le condensat plus tôt que prévu par la limite Thomas-Fermi.

Désireux d'en savoir plus sur le régime des interactions relativement élevées, et sachant que ce régime attire de plus en plus la communauté des chercheurs, nous nous sommes "aventurés" dans l'exploration des gammes où a/a_{H0} est voisin ou plus grand que l'unité. Cela nous a permis non seulement de confirmer les résultats précédents, mais aussi de mettre en lumière un certain nombre de faits nouveaux.

En effet, le nuage thermique reste uniforme sauf au centre du piège où il développe une petite inhomogénéité. Cela nécessite certainement une autre étude afin de comprendre la raison d'être de cette inhomogénéité qui n'est visible que pour les fortes interactions. D'autant plus que dans les extrapolations expérimentales, un ansatz est proposé pour le nuage de sorte

à extraire le profil du condensat. Cette façon de procéder serait certainement entâchée d'erreurs et fausserait complètement les conclusions expérimentales si la "bosse" du nuage venait à s'avérer réelle.

Par ailleurs, en analysant le comportement de la température de transition en fonction des interactions, nous avons constaté qu'il s'agit d'une fonction décroissante, ce qui est bel et bien confirmé expérimentalement et même par un certain nombre de résultats basés sur l'approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov et des calculs perturbatifs.

Nous avons aussi pu déterminer numériquement le potentiel chimique qui se trouve être une fonction croissante des interactions et de la température. Les calculs effectués auparavant par [54] semblent aller dans le même sens. Il est étrange cependant, qu'il n'existe qu'une très maigre littérature à ce sujet. Ni les expérimentateurs, ni les théoriciens ne semblent trop s'inquiéter du potentiel chimique, dont la valeur est généralement prise du cas sans interaction. Ce genre d'approximations est à notre avis très hasardeux puisque nous avons constaté numériquement, qu'un faible écart du potentiel chimique par rapport à sa valeur réelle pouvait non seulement être source d'instabilité, mais produisait aussi parfois des solutions complètement erronées.

En conclusion, ces résultats pour le moins fascinants, révèlent une insoupçonnée richesse des équations TDHFB statiques.

Finalement, comme suite logique à notre travail, il serait intéressant de savoir si certains des effets que nous avons obtenus, en particulier l'homogénéité du nuage thermique, ne sont qu'une conséquence du champ moyen. Une façon de faire sera de revenir aux espaces variationnels de départ et de les modifier pour tenir compte des corrélations.

Mais cela est une autre histoire...

A.1 Distribution de Bose-Einstein

Considérons des bosons sans interactions en contact avec un réservoir. On suppose que les bosons sont de même espèce. Si E est l'énergie d'un état occupé par une particule, l'énergie de l'état occupé par N particules est NE . Ici encore, on considère le système avec un seul état, tous les autres états éventuels faisant partie du réservoir.

La somme de Gibbs s'écrit :

$$z = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\frac{\mu N - E}{k_B T}} = \sum_{N=0}^{\infty} \lambda^N e^{-\frac{NE}{k_B T}}, \quad (\text{A.1})$$

$$z = \sum_{N=0}^{\infty} \left(\lambda e^{-\frac{E}{k_B T}} \right)^N.$$

La limite supérieure de N est le nombre total de bosons dans le système global $s+R$. Le réservoir R est supposé aussi grand $N \rightarrow \infty$.

Posons $X = \lambda e^{-\frac{E}{k_B T}}$, alors $z = \sum_{N=0}^{\infty} X^N = \frac{1}{1-X}$,

si $X < 1$, condition toujours satisfaite en pratique. On a alors :

$$\bar{N} = f(E) = \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln z = X \frac{\partial}{\partial X} \ln z, \quad (\text{A.2})$$

soit

$$\bar{N} = f(E) = -X \frac{d}{dX} \ln(1-X) = \frac{X}{1-X}, \quad (\text{A.3})$$

ou

$$f(E) = \frac{\lambda e^{-\frac{E}{k_B T}}}{1 - \lambda e^{-\frac{E}{k_B T}}} = \frac{1}{\lambda^{-1} e^{\frac{E}{k_B T}} - 1}. \quad (\text{A.4})$$

Finalement, nous obtenons la distribution de Bose-Einstein :

$$f(E) = \bar{N} = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1} \quad (\text{A.5})$$

A.2 Gaz de bosons et condensation de Bose

Un effet remarquable se présente pour un gaz de bosons sans interactions à une température de transition, au dessous de laquelle une fraction notable du nombre total de particules occupe l'état fondamental, les états excités étant très peu peuplés. Ceci n'aurait rien de surprenant à une température $T \approx 10^{-4}$ K. Mais ce phénomène se produit à des températures bien plus élevées, de l'ordre de 3 K dans le cas de l'hélium qui est l'exemple le plus familier. Considérons donc un système de N bosons sans interactions avec $N \gg 1$. A $T = 0$, tous les bosons sont dans l'état fondamental d'énergie $E_0 = 0$ (nous choisissons le zéro des énergies pour l'état fondamental).

A température T , la fonction d'occupation de cet état est :

$$f(E_0, T) = \frac{1}{e^{\frac{E_0 - \mu}{k_B T}} - 1} \quad (\text{A.6})$$

La densité des états est donné par $D(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$, et donc le nombre total de bosons

dans l'état fondamental et dans les états excités est donné par :

$$N = \sum_i f_i = N_0 + \tilde{N} = N_0 + \int_0^\infty dE D(E) f(E, T), \quad (\text{A.7})$$

où N_0 est le nombre d'atomes dans l'état fondamental (phase condensée) et $\tilde{N}$ est le nombre d'atomes dans les états excités (la phase normale).

Nous savons que :

$$N_0 = \frac{1}{e^{\frac{-\mu}{k_B T}} - 1} = \frac{1}{\lambda^{-1} - 1}, \quad (\text{A.8})$$

$$\tilde{N} = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty dE \frac{E^{1/2}}{\lambda^{-1} e^{\frac{E}{k_B T}} - 1}. \quad (\text{A.9})$$

Posons $X = \frac{E}{k_B T}$, alors

$$\tilde{N} = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} \int_0^\infty dX \frac{X^{1/2}}{\lambda^{-1} e^X - 1}. \quad (\text{A.10})$$

Nous nous restreignons pour le moment aux très basses températures ; dans ces conditions N_0 est très grand et λ^{-1} est proche de l'unité. Ainsi, l'expression de l'intégrale dans (A.10) est peu sensible aux petites variations de λ par rapport à l'unité. On a :

$$\int_0^\infty dX \frac{X^{1/2}}{e^X - 1} = \int_0^\infty dX \frac{X^{1/2} e^{-X}}{1 - e^{-X}} = \sum_{k=1}^\infty \int_0^\infty X^{1/2} e^{-kX} dX = \xi\left(\frac{3}{2}\right) \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad (\text{A.11})$$

où $\xi(3/2)$: est la fonction zéta de Rieman ($\xi(3/2) = 2.612$). Le nombre d'atomes dans l'état excité est donc :

$$\tilde{N} = \frac{1.306}{4} V \left(\frac{2mk_B T}{\hbar^2 \pi} \right)^{3/2} = \frac{1.306}{4} V \left(\frac{8\pi mk_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (\text{A.12})$$

Si l'on fait apparaître la densité quantique,

$$n_Q = \left(\frac{2\pi mk_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (\text{A.13})$$

$$\tilde{N} = 2.612 V n_Q. \quad (\text{A.14})$$

La fraction d'atomes dans l'état excité est donc $\frac{\tilde{N}}{N} = 2.612 \frac{V}{N} n_Q = 2.612 \frac{n_Q}{n}$, (A.15)

A.3 Température de condensation d'Einstein

On définit la température de condensation d'Einstein T_c comme la température pour laquelle le nombre d'atomes dans l'ensemble des états excités est égal au nombre total d'atomes : $\tilde{N}=N$.

$$\text{On a donc d'après (A.15) : } T_c = \left(\frac{h^2}{2\pi m k_B} \right) \left(\frac{N}{V 2.612} \right)^{2/3} \quad (\text{A.16})$$

$$\text{On a encore } \frac{\tilde{N}}{N} = \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \text{ pour } T < T_c.$$

Le nombre d'atomes dans l'état fondamental est donné par :

$$N_0 = N - \tilde{N} = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right]. \quad (\text{A.17})$$

On peut également définir la déplétion :

$$\frac{N_0}{N} = \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right]. \quad (\text{A.18})$$

B.1 Un phénomène étrange : la superfluidité

Lorsque l'on refroidit de l'hélium gazeux (isotope ^4He), on observe d'abord, comme pour tous les corps, un passage à l'état liquide, à la température de 4.2 K, si l'on opère à la pression de l'atmosphère. Mais si l'on descend en dessous de 2.17K, ce liquide acquiert des propriétés tout à fait inhabituelles : il devient superfluide. Cela se manifeste entre autres par la perte de toute viscosité : le liquide s'écoule sans aucun frottement, si bien qu'un courant d'hélium superfluide lancé par exemple dans un anneau ne s'arrête plus jamais, et par l'apparition de vortex : on observe dans le liquide des tourbillons d'une sorte qu'on ne voit jamais dans l'eau, et qui présente certaines propriétés de quantification (la vitesse du fluide ne peut pas prendre n'importe quelle valeur). Si l'on déplace un objet au sein du fluide en dessous d'une certaine vitesse, il ne rencontre aucune résistance, comme si le fluide est infiniment ténu.

De telles propriétés, observées dans l'hélium 4 dès 1937, se retrouvent également dans l'hélium 3, à une température plus basse, et ont été obtenues pour divers métaux au cours des années 1990. Elles sont la manifestation macroscopique d'effets purement quantiques.

B.2 Un modèle pour les superfluides et les condensats de Bose-Einstein

Landau et Ginzburg [8] ont proposé, dans les années 1950, de modéliser les superfluides à l'aide de l'équation :

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta u^2 + u(|u|^2 - 1). \quad (\text{B.1})$$

Dans le cadre d'un modèle à deux fluides $|u|^2$ représente la densité du superfluide, qui s'écoule sans frottement, tandis que le reste de la matière est supposé être dans le fluide normal, qui s'écoule comme tout fluide .

Cette équation donne des prédictions relativement satisfaisantes, mais leur correction est limitée car les interactions dans un liquide tel que l'hélium sont fortes.

Cependant, on trouve de façon assez naturelle une équation dont celle de Landau-Ginzburg est un cas particulier lorsque l'on cherche à modéliser au premier ordre d'approximation le comportement des condensats de Bose-Einstein. Il s'agit de l'équation de Gross-Pitaevskii [38] :

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext} + g|\Phi|^2 \right) \Phi , \quad (\text{B.2})$$

où $|\Phi|^2$ est la densité des atomes, m la masse des atomes du condensat, V_{ext} le potentiel dans lequel ils se trouvent, g la constante de couplage. Cette équation est encore appelée équation de Schrödinger non linéaire.

- [1] S.N.Bose, Z.phys. 26 (1924) 178.
- [2] A.Einstein. Sitzunberg. KG1.press. Akad.Wiss, (1924) 226.
- [3] A.Einstein. Sitzunberg. KG1.press. Akad.Wiss, (1925) 3.
- [4] J. Frankel, Wave mechanics, Advanced General Theory, (1934)
- [5] F.London, nature. 141 (1938) 643.
- [6] Bogoliubov, J.phys.USSR, 11 (1947) 23.
- [7] S.T.Beliaev, Sov. Phys. JTEP7, (1958) 289.
- [8] V. L. Ginzburg, L. D. Landu, Sov. Phys, JTEP7, (1958) 858.
- [9] T.T.Wu, Phys.Rev.115 (1959) 1390.
- [10] K.Sawoda,Phys.Rev. 116 (1959) 1344.
- [11] E.P. Gross, Nuovo Cimento 20 (1961) 454;
L.Pitaevskii, Sov. Phys. JETP 13 (1961) 451.
- [12] A. Miller, D.Pines et P. Nozieres. Phys.Rev.127 (1962) 1452.
- [13] Popov, Sov. Phys, JETP 20 (1965). 1185
- [14] L.Landau et L.Lifchitz, Physique statistique, edition Mir (1967)
- [15] A.L.Fetter and J.D Waleka, quantum theory of many particle systems,
Mc Graw-Hill, NewYork (1971).
- [16] A.L.Fetter. Ann. Phys. (N.Y) 70 (1972) 67.
- [17] V.V Goldman, I.F. Silvera, and A.J. Leggett. Phy. Rev. B 24 (1981) 2870.
- [18] R. Balian and M.Vénéronei, Phys.Rev.Lett.47 (1981), 1353, 1765 (E).
- [19] R. Balian and M.Vénéronei, Ann.Phys. (N.Y) 164 (1985) 334.
- [20] V. Bagnato, D. E. Pritchard and D. Kleppner., Phys. Rev. 35 (1987) 4354.
- [21] R. Balian and M.Vénéronei, Ann.Phys. (N.Y) 187 (1988) 29.
- [22] J. Oliva, Phys. Rev. B39 (1989) 4197.
- [23] M. Benarous, Thèse de doctorat, IPN, Orsay, France, Oct, (1991).

- [24] A. Griffin. Excitations in Bose liquid (Cambridge University Press, N.Y), (1993).
- [25] M.Edwards and K. Brunett, Phys. Rev. A51 (1995) 1382.
- [26] C.C. Bradly, C.A.Sackett, J.J.Tollett, and R.Hulet, Phys.Rev.Lett.75, (1995)1686.
- [27] C.C. Bradly, C.A.Sackett, J.J.Tollett, and R.Hulet, Phys.Rev.Lett.75, (1995) 1687.
- [28] K.B.Davide, M.O.Mewes, M.R.Andrews, N.JDruten, D.S.Durfee, D.M.Kwrn, and W.Kettrele, phys. Rev.Lett.75, (1995) 3969.
- [29] G.C.Wick, phys. Rev.80 (1995) 268.
- [30] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman and E. A. Cornell.
Science 269 (1995) 198.
- [31] A.Griffin Phys. Rev, 53 (1996) 14.
- [32] F.Dalfovo, L. Pitaevskii, S.Stringari, Phys. Rev A54 (1996) 4213.
- [33] S. Giorgini, L. Pitaevskii, S.Stringari, Phys. Rev. A54 (1996) 4633.
- [34] E. Timmerman and P. Tommasini, Phys. Rev. A55 (1997) 5.
- [35] P. Grüter, D. Ceperley, and F. Laloë., Phys. Rev. Lett. A208 (1997) 188.
- [36] L.Pitaevskii, L.P and Stringari, Phys.Lett. A235 (1997) 398.
- [37] M. Benarous Ann. of. Phys. (NY) 269 (1998) 107.
- [38] G.Pitaevskii, Cond-mat/ 9806038, 12 Oct, (1998).
- [39] F.Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, S.Stringari.,Rev. Mod. Phys. 71 (1999) 463.
- [40] M. Benarous and H. Flocard, Ann. of. Phys. (NY) 273 (1999) 242.
- [41] K.Helmerson, D. Hutchinson, K.Brunett et W.D phillips, atom lasers,
Physics Word, 37, (1999).
- [42] A. Griffin, Cond-mat / 9911419, 25 Nov, (1999).
- [43] C. Deroulers, Rapport de stage du cursus mixte. ENS Paris, (1999).
- [44] P. Schuk, X. Vinas, Phys. Rev. A61 (2000) 43603.
- [45] S.K.Adhikari, Phys. Lett. A265 (2000) 91.

- [46] S.K.Adhikari, Phys. Rev. E62, (2000) 2937.
- [47] S.K.Adhikari, Phys. Rev. E65 (2002) 016703.
- [48] S.K.Adhikari, Phys. J. Phys. B35 (2002) 2831.
- [49] W.Bao, Shi Jin and P.A. Markowich, J. Comput Phys. 175 (2002) 487.
- [50] W.Bao, D. Jaksch and P. A. Markowich, J.Comput.Phys., (2002)
- [51] W.Bao, Shi Jin and P.A. Markowich,SIAM J.SCI, Comput. Phys., (2002)
- [52] W.Bao and W. Tang. Cond-mat/ 2180303, 12 Mar 2003.
- [53] M. Benarous, Ann. of Phys. (NY) 320 (2005) 226-230
- [54] H.Chachou.Samet, Thèse de magister. Université de Blida (2005)
- [55] H. Chachou Samet, M. Benarous "Static Properties of trapped Bose Gases at Finite Temperature". Submitted to Annals of Physics.
- [56] H. Moussa, Thèse de magister en cours, ENS Kouba.