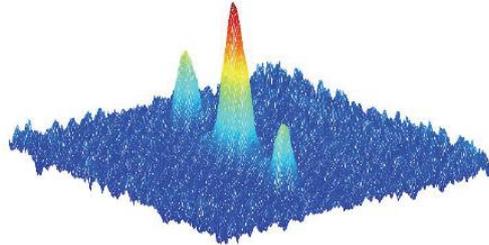


République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'enseignement supérieur et de la
recherche scientifique
Université Hassiba Ben Bouali Chlef

Thèse de Doctorat es sciences Physiques

Présentée par
Smain Kouidri
Pour obtenir le grade Docteur en physique

Sujet de Thèse :
Résolution numérique des équations HFB –De-Gennes
pour un gaz atomique piégé et ultra froid



Soutenue le 15/05/2012 devant le jury

Pr. Fellah Mohamed	USTHB	Président
Pr. Benarous Mohamed	UHBC	Directeur de thèse
Pr. Allal Nassima	USTHB	Examinatrice
Pr. Kessal Salem	USTHB	Examineur

Sommaire

Introduction		7
Chapitre I	Théorie du champ moyen à température nulle	10
1. Introduction		
2. L'approximation du champ moyen		
3. Equation de Gross Piteavskii standard (EGPS)		
4. Equation de Gross Pitaevskii dépendante du temps en représentation de Heisenberg		
5. Equation de Gross Pitaevskii en termes hydrodynamiques		
6. Conclusion		
Chapitre II	Extensions de la théorie du champ moyen à température finie	23
1. Introduction		
2. L'hamiltonien total		
3. L'approximation de Bogoliubov (BA)		
4. Décomposition de l'hamiltonien		
5. Equation de Gross Pitaevskii généralisée		
6. Transformation de Bogoliubov		
6.1 Les équations de Bogoliubov de Gennes		
6.2 Expression de la densité non condensée et de la densité anormale		
7. L'approximation de Popov		
8. Théorie GHFB1 et GHFB2		
9. Violation du théorème de Hugenholtz-Pines		
10. Conservation du nombre de particule		
11. Conclusion		
Chapitre III	Matrice T à N particules et divergence UV	34
1. Introduction		
2. La matrice T à deux particules		
3. La matrice T à N particules		
4. Divergence UV		
5. Divergence IR		
6. Conclusion		
Chapitre IV	Résultats et discussions	46
1. Résultats numériques		
2. Discussions		
3. Conclusion		
Conclusion et perspectives		80
Appendice A	Calcul statistique pour les gaz quantiques	82
Appendice B	Les harmoniques sphériques : relations d'orthogonalisation	92
Appendice C	Théorie de la diffusion : longueur de diffusion de l'onde s	95
Appendice D	L'hamiltonien à N particules	100
Appendice E	Dérivation de l'équation de Gross Piteavskii et limite TF	102
Appendice G	Programmes	105
Références		108

REMERCIEMENTS

Avant tout, je tiens à remercier Monsieur Benarous Mohamed, Professeur à l'université de Chlef pour m'avoir proposé un sujet de recherche aussi passionnant qu'est le problème des atomes ultra froids. Je n'aurais jamais pu imaginer un directeur de thèse avec plus de disponibilité et de meilleure qualité humaine.

Je tiens à remercier vivement Monsieur N. Van Giai de m'avoir aidé à passer des stages au sein de son laboratoire de physique nucléaire de l'université Paris Sud et de m'avoir donné un grand coup de main au niveau de la recherche scientifique par ses conseils. Je tiens aussi à le remercier pour m'avoir accueilli dans l'équipe des atomes piégés. Il a fait preuve d'une grande ouverture d'esprit que j'ai beaucoup appréciée au cours de mes dernières années.

Je remercie le Professeur Fellah Mohamed pour avoir accepté de présider mon jury de thèse ainsi que les Professeurs Allal Nassima et Kessal Salem pour m'avoir fait l'honneur d'examiner mon travail. Je leur suis très reconnaissant de l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail et du soin avec lequel ils ont relu le présent manuscrit.

Je voudrais revenir au Professeur Fellah car depuis ma rencontre avec lui, j'ai pu apprécier sa personnalité exceptionnelle comme ses qualités scientifiques et humaines, c'est un physicien d'une grande culture. Je le remercie pour ses conseils.

Je voudrais remercier particulièrement Peter Schuck pour m'avoir appris les moindres détails sur le phénomène de condensation des atomes, et ce toujours dans la bonne humeur lors de mes stages.

Je tiens également à remercier Monsieur le Recteur de l'Université de Hassiba Ben Bouali pour son soutien administratif. Je remercie aussi les membres de l'équipe de physique nucléaire de l'université de Paris Sud Orsay. En particulier, G. Marcella, E. Khan et M. Jamai pour leur soutien moral. Je tiens aussi à remercier l'équipe de recherche du laboratoire de physique théorique et de physique des matériaux de Chlef. En particulier, Messieurs A. Hocine, A. Touzène, A. Boudjemaa et H. Chachou-Samet.

Par ailleurs, je n'oublie pas Marie-Thérèse Commault qui m'a beaucoup aidé au niveau de l'IPN d'Orsay.

Enfin mes plus grands remerciements vont bien entendu à ma famille, mes parents, mon frère, mon ami S. Baghdad, mes sœurs et mes petits pour m'avoir encouragé pendant toutes ces années d'étude, pour leur confiance qu'ils ont eu en moi et pour avoir été mes meilleurs supports.

Abbreviations

GHFB	Generalized Hartree Fock Bogoliubov Approximation
BdG	Bogoliubov de Gennes Equation
HFA	Hartree Fock Approximation
EGPS	Standard Gross Pitaevskii Equation
EGPG	Generalized Gross Pitaevskii Equation
TFA	Thomas Fermi Approximation
BA	Bogoliubov Approximation
UV	Ultra Violet Divergence
IR	Infra Rouge Divergence

Liste des figures

Figure I-1 : Fonction d'onde de Thomas Fermi dans un potentiel harmonique à symétrie sphérique.

Figure III-1 : Diagramme de représentation de la matrice T à deux corps

Figure VI-1: La densité condensée (a), la densité non condensée (b) dans les conditions de la réf.[5]: $N=2000$, $a = 5.82 \times 10^{-9} m$. Les données de la réf.[5] sont représentées en pointillés.

Figure IV-2: La densité condensée et non condensée à $T=75nK$ pour $N=2000$ atomes.

Figure IV-3: Les fractions condensées et non condensées (N_c, \tilde{N}) en fonction de T/T_c

Figure IV-4 : Les fréquences d'excitations (en unité du piège) en fonction de la température pour différentes valeurs du nombre d'atome N valant de 2000 à 6000.

Figure IV-5 : Variation de la fréquence en fonction de la fraction T/T_c . Les courbes en étoiles et en croix résultent de nos calculs. Les données de la réf. [63] sont représentés en plus (+). Les données de la réf. [5] sont représentées en cercles.

Figure IV-6: La densité condensée (a), la densité non condensée (b) et la densité anormale (c) dans les conditions du réf. [5]: $N=2000$, $a = 5.82 \times 10^{-9} m$. Les données de la réf. [5] sont représentées en pointillés. Pour guider les yeux, le profil de Thomas-Fermi pour n_c est aussi tracé.

Figure IV-7: La densité condensée (a), la densité non condensée (b) et la densité anormale (c) pour $N=10000$, $a = 5.82 \times 10^{-9} m$. Pour guider les yeux, le profil Thomas-Fermi pour n_c est aussi tracé.

Figure IV-8: Idem. que la figure IV-7 pour $N=20000$.

Figure IV-9: Idem. que la figure IV-7 pour $N=40000$.

Figure IV-10: Idem. que la figure IV-7 pour $N=60000$.

Figure IV-11 : Idem. que la figure IV-7 pour $N=80000$.

Figure IV-12: Idem. que la figure IV-7 pour $N=100000$.

Figure IV-13: Idem. que la figure IV-7 pour $N=140000$.

Figure IV-14: La fraction condensée en fonction de la température critique pour différentes valeurs du nombre d'atomes N . La courbe en pointillés est celle d'un gaz idéal.

Figure IV-15: La fraction condensée en fonction de la fraction $\frac{T}{T_c}$. Notons que ces courbes sont tracées par rapport à la température critique du plus grand nombre d'atomes. La courbe en trait plein résulte de notre calcul par GHFB, la courbe en pointillée est celle d'un gaz idéal. Les données de la réf. [65] sont en cercles, les données de la réf.[5] sont en triangles et les données de la réf. [45] sont en étoiles.

Figure IV-16: La variation du rayon du condensat (radiale) en fonction de la fraction condensée avec N_c constante. La courbe en trait plein et en pointillé résultent du calcul GHFB. Les données de la réf. [7] sont en carré, en triangle et en cercle.

Figure IV-17 : Le rayon du condensat, \bar{R}/\bar{R}_{CD} , (Normalisé à la valeur obtenue par le modèle de Castin-Dum) en fonction de la fraction condensée. La valeur moyenne du rayon est définie par $\bar{R} = (R_x^2 R_z)^{1/3}$. La courbe en pointillée résulte de notre calcul par GHFB. Les données de la réf. [6] sont en étoiles celles de la réf. [7] sont en triangles et celles de la réf. [8] sont en carrés.

Figure IV-18 : Variation du rapport d'aspect en fonction de la fraction condensée avec N_c fixe. La courbe en trait plein résulte de notre calcul par GHFB. Les données en plus (+) sont celles de la réf.[7].

Figure IV-19: Variation du rapport d'aspect, à température finie, en fonction de la fraction condensée avec N_c fixe. Les courbes en pointillés résultent de nos calculs par GHFB.

Figure IV-20: Présentation de la température critique en fonction du nombre d'atomes N . La courbe en noir provient de l'expression (IV-47), la courbe en pointillé (rouge) est celle d'un gaz idéal et les données expérimentales de la réf.[74] sont en plus(+).

Figure IV-21: Les fréquences d'excitation (en unité du piège) fonction de la fraction en température pour $N=2000$

Figure IV-22: Idem. que la figure IV-21

Figure IV-23: Idem. que la figure IV-21.

Figure IV-24: Idem. que la figure IV-21.

Figure IV-25: Idem. que la figure IV-21.

Figure IV-26: Idem. que la figure IV-21.

Figure IV-27: Idem. que la figure IV-21

Figure IV-28 : Idem. que la figure IV-21.

Figure IV-29 : Les fréquences d'excitation du Rb pour N valant de 2000 à 8000 atomes à des différentes N_c . L'allure en haut représente le mode de respiration (Breathing mode) $l=0$. L'allure en bas est le mode quadripolaire $l=2$. Les données de JILA TOP [75] sont en (+).

Figure IV-30: Variation du potentiel chimique en fonction de la température.

Figure IV-31 : Variation du potentiel chimique déduit de (GHFB) et celle de TF en fonction du nombre d'atome à basse température.

Introduction

L'observation en 1995 du phénomène de condensation de Bose-Einstein (BEC) dans les gaz ultra froids [1-4] a marqué un tournant dans la physique des basses températures. En effet, la communauté scientifique a reconnu cet exploit par l'attribution d'un prix Nobel de physique en 2001 à E. Cornell, C. Wieman et W. Ketterle [4]. Les expériences effectuées initialement sur les atomes alcalins ont été étendues aux gaz dilués tels que le Rubidium, le Sodium ou le Lithium.

Depuis lors, le domaine des atomes ultra froids a vu fleurir une multitude de méthodes expérimentales et théoriques. D'une part, les expérimentateurs cherchaient à toujours tenter de mieux appréhender ce comportement étrange de la matière en confinant les gaz par différents types de potentiels de piège et en modifiant leurs géométries et leurs structures. Ils sont même arrivés à contrôler les interactions entre atomes en utilisant la résonnance de Feschbach. Ainsi des gaz initialement répulsifs pouvaient devenir attractifs et vice-versa. Il s'agit d'une avancée extraordinaire en physique atomique. Par ailleurs, les techniques de refroidissement sont devenues de plus en plus ingénieuses et on parvient à des températures de l'ordre du nanokelvin, repoussant ainsi les expériences vers le zéro absolu.

D'autre part, et avec l'avancée spectaculaire des techniques expérimentales, on a vu se développer des modèles théoriques de plus en plus élaborés. L'un des premiers modèles ayant eu un succès retentissant fut l'équation de Gross-Pitaevskii (GP) qui décrit le comportement du gaz à température exactement nulle. Cette équation, qui est typiquement une équation de Schrödinger non linéaire, parvient à prédire correctement beaucoup de propriétés d'équilibre des gaz quantiques. Le paramètre d'ordre qui y intervient est en fait la fonction d'onde macroscopique du condensat. Il s'agit d'une description en champ moyen ayant l'avantage d'être très simple, mais aussi l'inconvénient d'être classique (c'est une équation pour un champ classique) et de ne pas tenir compte de la population d'atomes non condensés. De ce fait, les effets de température et de corrélation entre atomes condensés (dans l'état fondamental) et atomes non condensés (excités) sont complètement ignorés dans cette approximation. Par contre, elle tient bien compte des interactions entre atomes condensés et prédit avec grand succès les excitations collectives du condensat à température nulle.

Cependant, ne tenant pas compte du nuage thermique, elle restait quand même assez faible conceptuellement. Des généralisations ont été proposées [5,10-37], allant de l'approximation de Popov, qui fait intervenir explicitement la densité non condensée, à celle de Beliaev où l'on voit clairement apparaître pour la première fois les effets à N-corps via la moyenne anormale, elle-même directement reliée aux self-énergies et donc à la matrice T .

Ces approximations sont très difficiles et prédisent un certain nombre de propriétés de corrélation et d'excitation à température finie que l'équation GP est incapable de prédire. Néanmoins, elles souffrent toutes de deux handicaps majeurs: d'une part, elles sont limitées aux très basses températures (loin de la transition) et d'autre part, les densités non condensées et anormales sont soit considérées comme des quantités classiques (hypothèse d'un gaz thermique classique), soit traitées comme des quantités quantiques. De plus, la densité anormale est toujours considérée comme une correction extrêmement faible.

Une autre façon de faire est de construire une généralisation consistante de l'équation de GP. Cela fut réalisé grâce à l'approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) qui est rappelons-le, une théorie de champ moyen self-consistant. L'intérêt est alors évident puisque l'on obtient un système d'équations fermées où les diverses densités sont traitées sur un même pied d'égalité. On obtient alors foule de propriétés à l'équilibre des condensats, telles que les profils de densité en fonction de la température ainsi que les spectres d'excitation thermiques. On obtient même certaines propriétés de la transition vers l'état normal.

Néanmoins, cette approximation présente un certain nombre d'inconsistances dues à l'utilisation d'un potentiel de contact décrivant les collisions binaires. Plusieurs variantes ont été proposées [33,38-41]

afin de pallier à ces anomalies et tenir compte des effets à N-corps. En effet, l'approximation HFB a été jugée très acceptable dans le cas du problème nucléaire. Mais son application aux gaz ultra froids s'est heurtée à des difficultés conceptuelles. D'une part, ces gaz sont fortement dilués, ce qui justifierait une approche type champ moyen, mais leurs interactions sont faibles (les effets de longue portée dus au potentiel sont quasiment nuls). Par contre, les effets de corrélation sont eux très importants à cause de la statistique bosonique. D'ailleurs, ce sont ces effets de corrélation (vus d'une façon simple comme le recouvrement des fonctions d'onde individuelles des atomes), qui sont responsables du phénomène de condensation de Bose-Einstein. Aussi, une question très pertinente se pose: Comment peut-on appliquer une théorie de champ moyen, qui par essence même, néglige les corrélations, à un problème où les corrélations sont dominantes. En fait, c'est là tout le miracle de la théorie HFB. Elle arrive non seulement à décrire beaucoup des propriétés des gaz ultra froids, mais elle parvient même à prédire les paramètres de la transition.

Afin de pallier aux inconsistances de la théorie HFB, des généralisations ont été proposées. Ainsi, des théories GHFB (G pour Generalized) ont vu le jour. Ces théories sont bâties sur l'idée même que les anomalies constatées proviennent de l'oubli des effets à N-corps. Les équations sur l'idée même consistent en une équation de GP généralisée à laquelle on adjoint les équations de Bogoliubov-De Gennes. Ce système d'équations a plusieurs avantages. En particulier, il tient compte des effets mutuels entre condensat et nuage, et des corrélations entre atomes condensés et atomes excités. Du point de vue pratique, il consiste en un système non linéaire d'équations aux dérivées partielles couplées.

La résolution numérique d'un tel problème ne pose pas de difficultés majeures tant que le nombre de particules est relativement petit. Cependant, il ne faut pas oublier qu'afin de comparer aux résultats expérimentaux, il est nécessaire de considérer des gaz contenant un grand nombre d'atomes (des centaines de milliers, voire des millions). Or, à température finie, le nombre de modes excités occupés augmente avec le nombre de particules. Ainsi, plus le gaz contient d'atomes, et plus la température augmente, plus la manipulation numérique des équations devient délicate ; les modes excités devenant de plus en plus hauts en énergie, conduisant même à des divergences ultra-violettes comme en théorie des champs. Résoudre un tel problème devint donc un véritable challenge numérique.

L'intérêt pour ce type de problème provient de résultats expérimentaux récents [6-9] montrant une claire déviation du modèle d'expansion de Castin-Dum [48]. Ce modèle stipule qu'une fois le piège éteint, le gaz se répendra grosso modo d'une façon isotrope. Autrement dit, les images prises après un certain temps de vol seront des représentations fidèles de l'état du gaz dans le piège, modulo un changement d'échelle. Cela suppose en particulier que le rapport d'aspect sera constant (le gaz ne subit pas de déformation tout au long de son vol). C'est ce que l'on appelle l'expansion Thomas-Fermi. Ce modèle néglige donc les corrélations entre atomes condensés et nuage thermique tout au long de l'expansion libre. Ceci ne sera évidemment vrai qu'après un temps suffisamment long. Mais juste après l'extinction du piège, cette hypothèse n'a pas de justification physique.

L'idée est donc d'abord de résoudre les équations GHFB pour des nombres d'atomes de l'ordre de ceux utilisés dans les expériences, ce qui nous permettra d'accéder à des grandeurs typiques du gaz telles que le rayon du condensat et le rapport d'aspect. Ces grandeurs seront cruciales pour la validation de ce modèle Thomas-Fermi. Nous avons été surpris en consultant la littérature qu'il n'existait aucune référence traitant cette question. Les expérimentateurs ont dû soit se limiter à l'équation de GP, soit utilisé des modèles semi-empiriques ou heuristiques afin de confronter leurs résultats à des modèles théoriques. Il était donc urgent de présenter un calcul complet qui puisse être directement exploité par les expérimentateurs.

Objectifs et Plan de travail

Ce travail a été effectué au laboratoire de physique théorique et de physique des matériaux (LTPM) de l'université Hassiba Ben Bouali de Chlef, en collaboration avec l'institut de physique nucléaire d'Orsay, groupe de physique théorique, Université Paris-sud. Son objectif est d'étudier un gaz de bosons, en l'occurrence le Rb composé d'un très grand nombre d'atomes.

Nous nous intéressons dans ce travail, à analyser ce système numériquement en utilisant en premier lieu l'approximation Hartree-Fock (HFA) [42,43]. Le traitement des interactions sous la forme d'un potentiel de contact, nous aide à déterminer le champ moyen créé par les atomes et une de ses conséquences est l'équation de Gross-Pitaevskii standard [33]. Nous étudions l'effet de ce potentiel moyen quand le nombre de particules condensées est grand ce qui conduit à la limite Thomas-Fermi (TF). Nous étendrons ensuite notre étude aux températures finies où, en plus de ce potentiel moyen, il apparaît d'autres potentiels créés par les particules non condensées. Ceci nous permet d'aller au-delà de ces approximations en utilisant la transformation de Bogoliubov. Cette approche fournit toutes les informations sur l'état fondamental et les premiers états excités du système qui ne sont autres que les excitations élémentaires auxquelles on associe les quasi-particules. Muni de cette transformation, nous aboutissons à une forme plus générale de l'équation de Gross-Pitaevskii (EGPG) et aux équations couplées de Bogoliubov- De Gennes (BdG) [5,33].

Le présent travail est constitué de quatre chapitres. Dans le premier chapitre, nous exposons les fondements du formalisme à température nulle où nous étudions l'approximation Hartree Fock, l'équation de Gross Pitaevskii standard (EGPS) ainsi que certaines limites telles que l'approximation Thomas Fermi. Nous étudions aussi les excitations élémentaires. Nous terminons ce chapitre par la formalisme hydrodynamique qui constitue une autre vision très intéressante du problème.

Dans le second chapitre, le formalisme est étendu à température finie en utilisant les méthodes de Bogoliubov et de Popov. Nous discutons les équations couplées obtenues ainsi que la forme la plus générale de l'équation de Gross-Pitaevskii qui découle de la décomposition de H .

Le troisième chapitre est consacré à l'étude de la matrice T à N particules et de la divergence ultraviolette qui apparaît dans la densité anormale. Nous présentons les différentes méthodes de renormalisation utilisées par divers auteurs [33,38-41]. Nous n'oublierons pas de mentionner la divergence infrarouge qui apparaît lorsque le gaz est libre mais qui disparaît lorsque le gaz est piégé.

Dans le quatrième chapitre, nous mettons au point un algorithme numérique self-consistant afin de résoudre les équations couplées. Nous testons notre algorithme sur un cas déjà étudié où le nombre de particules de Rb est de 2000. Puis nous augmentons le nombre de particules afin de se rapprocher des situations réalistes. Nous calculons la densité condensée, la densité non condensée, la densité anormale, la fraction condensée, le rapport d'aspect,... Le potentiel chimique est déterminé itérativement afin de permettre de conserver le nombre total de particules. Les résultats que nous obtenons reproduisent d'une façon très satisfaisante les données expérimentales [6-9] et justifient le fait que l'expansion n'est pas du type Thomas-Fermi.

Finalement, nous concluons notre travail par un ensemble de perspectives à plus ou moins long terme.

Chapitre I Théorie du champ moyen à température nulle

Plan du chapitre

1. Introduction
2. L'approximation du champ moyen
 - 2.1 Principe variationnel
 - 2.2 L'approximation de Hartree Fock
 - 2.2.1 Energie de Hartree-Fock
 - 2.2.2 Les équations de Hartree Fock
- 3- Equation de Gross Pitaevskii standard (EGPS)
 - 3.1 L'effet des interactions : limite Thomas Fermi
 - 3.2 Le potentiel chimique et énergie totale par particule
 - 3.3 Rayon du condensat et rapport d'aspect (aspect ratio)
4. Equation de Gross Pitaevskii dépendante du temps en représentation de Heisenberg
 - 4-1 La limite des faibles excitations
 - 4-2 L'étude des excitations
5. Equation de Gross Pitaevskii en termes hydrodynamique
 - 5.1 Cas d'un piège harmonique dépendant du temps
6. Conclusion

1. Introduction

L'étude d'un système à N particules identiques en interaction revient à l'étude du comportement de sa fonction d'onde totale. Cette fonction d'onde totale est une superposition de toutes les permutations possibles de la fonction d'onde relative à une particule. Dans le cas des bosons ces permutations sont paires ce qui laisse la fonction d'onde totale symétrique. Dans le cas des fermions, en revanche, elles sont impaires et par conséquent la fonction d'onde totale sera antisymétrique. Nous allons l'écrire dans la base du nombre d'occupation, en utilisant les opérateurs de création et d'annihilation d'une particule. Les kets représentant ces fonctions d'ondes appartiennent à un espace de Fock de dimension infini. Puisque nous nous intéresserons aux phénomènes qui se passent à des basses températures, il est préférable d'étudier le phénomène à température nulle puis faire une extension à des températures finies.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude de ce système dans le cadre de l'approximation du champ moyen du fait que cette approximation consiste à transformer l'étude d'un système à N particules en interaction en une particule dans un champ moyen créée par les N-1 autres particules. Nous commencerons par la présentation de l'approximation de Hartree-Fock [42,43], qui constitue une méthode de type champ moyen à une particule. Nous écrivons l'interaction comme un potentiel de contact en passant à l'équation de Gross Pitaevskii standard qui décrit correctement l'état fondamental à T=0.

2- L'approximation du champ moyen

L'approximation du champ moyen joue un rôle primordial pour l'étude des systèmes à N particules. Elle consiste à transformer l'étude du système à N particules en interaction à l'étude d'une particule de ce système dans un champ moyen créée par les N-1 autres particules. Ce champ moyen, qui peut être traité par le principe variationnel ou les fonctions d'onde d'essai sont des produits de N fonctions d'onde liée à une particule, constitue le point essentiel de ce chapitre. Nous en donnerons ici un bref aperçu :

2-1 Le principe variationnel

Le principe variationnel est l'un des grands principes de la physique générale. Ce dernier stipule : étant donné un système quantique défini par son hamiltonien H, les fonctions d'onde $|\psi\rangle$ états propres de H sont des kets qui rendent stationnaire (minimum pour l'état fondamental) la quantité $E[\psi]$ défini par :

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (\text{I-1})$$

La méthode variationnelle de Ritz [44] consiste à restreindre le domaine variationnel et de résoudre l'équation :

$$\langle \delta\psi | H - E | \psi \rangle + \langle \psi | H - E | \delta\psi \rangle = 0 \quad (\text{I-2})$$

Si nous effectuons le changement $|\delta\psi\rangle \rightarrow i|\delta\psi\rangle$, nous en déduisons :

$$-i\langle \delta\psi | H - E | \psi \rangle + i\langle \psi | H - E | \delta\psi \rangle = 0 \quad (\text{I-3})$$

A partir de (I-2) et (I-3), nous obtenons :

$$\langle \delta\psi | H - E | \psi \rangle = \langle \psi | H - E | \delta\psi \rangle \quad (\text{I-4})$$

Ainsi, résoudre une équation de Schrödinger revient à minimiser la valeur moyenne de l'Hamiltonien concerné. De plus, pour n'importe quel état dynamique d'un système, la valeur moyenne de son énergie est supérieure ou égale à l'énergie propre de son état fondamental :

$$E[\psi] \geq E_0 \quad (\text{I-5})$$

Par conséquent, nous pouvons trouver l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ en minimisant la fonctionnelle $E[\psi]$. Le succès de la méthode dépend d'un choix judicieux de l'espace des fonctions d'essai : ce choix doit être guidé par la physique du problème et conduire à des calculs faisables. Tant que la vraie fonction n'est pas dans cet ensemble, la solution minimale n'est pas la fonction propre exacte, mais seulement une approximation. En ce

qui concerne les états excités, on peut procéder de la même manière. Ainsi, pour le premier état excité, il faut considérer le sous espace entièrement orthogonal à $|\psi_0\rangle$.

2.2 L'approximation de Hartree Fock

Dans cette approximation on suppose l'existence d'un potentiel moyen mono particulaire, appelé potentiel de Hartree-Fock qui permet de décrire avec une bonne approximation l'état fondamental, à température nulle, où l'influence des particules thermiques est pratiquement négligeable. L'hamiltonien du système s'écrit :

$$H = \sum_i h_0(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} V(r_i - r_j) \quad (\text{I-6})$$

Où $h_0(r_i) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta(i) + V_{\text{trap}}(r_i)$ est l'hamiltonien relatif à une particule (i), $V_{\text{trap}}(r_i)$ le potentiel du piège et $V(r_i - r_j)$ le potentiel d'interaction.

En absence d'interaction, $V(r_i - r_j) = 0$, l'état fondamental (T=0) correspondant aux N particules est obtenu en minimisant la fonctionnelle d'onde de l'hamiltonien de (I-6), elle considérée comme un produit de fonctions d'onde à une particule :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{k=1}^N \phi_{v_k}(r_k) \quad (\text{I-7})$$

Dont l'énergie est :

$$E = \sum_{v=1}^N n_v \varepsilon_v \quad (\text{I-8})$$

Où $\sum_{v=1}^N n_v = N$, avec n_v est le nombre d'état possible et ε_v est l'énergie de la particule v .

Du fait que la densité relative à cette fonction d'onde est invariante par l'opérateur permutation P :

$$\rho = |P\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 = |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 \quad (\text{I-9})$$

On distingue alors deux cas :

$$P\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \pm \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (\text{I-10})$$

Pour le cas des bosons, la fonction d'onde est symétrique. Elle s'écrit comme :

$$\psi_{\text{Bosons0}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots}{N!}} \sum_P P(\prod_{i=1}^N \phi_{0i}(r_i)) \quad (\text{I-11a})$$

Le cas des fermions la fonction d'onde est antisymétrique. Elle est considérée comme un déterminant de Slater si nous respectons le principe de Pauli :

$$\psi_{\text{Fermions0}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P P(\prod_{i=1}^N \phi_{0i}(r_i)) \quad (\text{I-11b})$$

L'inclusion des interactions modifie légèrement l'état fondamental et l'énergie correspondante mais cela n'empêche pas de toujours les considérer comme un produit de fonctions d'ondes à une particule :

$$\psi_{\text{Bosons}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots}{N!}} \sum_P P(\prod_{i=1}^N \phi_i(r_i)) \quad (\text{I-12a})$$

$$\psi_{\text{Fermions}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P P(\prod_{i=1}^N \phi_i(r_i)) \quad (\text{I-12b})$$

Les fonctions d'onde sont une représentation dans l'espace des coordonnées de l'état propre k du Hamiltonien mono particulaire. Très souvent, on travaille dans l'espace de configuration sous-tendu par un ensemble de fonctions d'onde monoparticulaires complet et orthogonal. La fonction d'onde peut être développée dans la base $\{\chi_l\}$:

$$\varphi_k = \sum_l D_{lk} \chi_l \quad (\text{I-13})$$

Si pour chaque fonction d'onde on définit les opérateurs de création et d'annihilation de particules (fermions ou bosons) correspondants, on peut d'une manière similaire exprimer les opérateurs

$$c_k^+ = \sum_l D_{lk} a_k^+ \quad (\text{I-14})$$

Où c_k^+ et c_k sont les opérateurs qui correspondent aux fonctions d'onde mono particulaires et sont solutions de l'hamiltonien à une particule $h(r_i)$.

Puisque les deux ensembles $\{\varphi_k\}$ et $\{\chi_l\}$ sont complets et orthogonaux, la transformation D doit être unitaire :

$$D^+ D = 1 \quad (\text{I-15})$$

Ce qui permet aux opérateurs de préserver les relations d'anticommutations des fermions et de commutations des bosons.

Il est souvent plus commode de représenter le déterminant de Slater, par sa matrice densité à une particule :

$$\rho_{ll'} = \langle \psi | a_l^+ a_l | \psi \rangle \quad (\text{I-16a})$$

En tenant compte de (I-15) et (I-16a), on obtient :

$$\rho_{ll'} = \sum_{kk'} D_{lk} D_{l'k'}^* \langle \psi | c_l^+ c_l | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N D_{li} D_{l'i}^* \quad (\text{I-16b})$$

2.2.1 Energie de Hartree-Fock

Avant de pouvoir effectuer la variation qui nous permettra de déterminer la fonction d'onde ψ ($\psi_{Bosons} \equiv \psi$, $\psi_{Fermions} \equiv \psi$,) nous devons calculer l'énergie de Hartree-Fock donnée par :

$$E_{HF} = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (\text{I-17a})$$

$$E_{HF} = N \frac{\langle \varphi | h_0 | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} + \frac{N(N-1)}{2} \frac{\langle \varphi | \langle \varphi | V | \varphi \rangle | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle \langle \varphi | \varphi \rangle} \quad (\text{I-17b})$$

En seconde quantification, ce Hamiltonien, utilisé habituellement dans le traitement des problèmes à N particules, s'écrit à l'aide des opérateurs de base a_i^+ , a_i comme suit :

$$H_{HF} = \sum_{l_1, l_2} t_{l_1 l_2} a_{l_1}^+ a_{l_2} + \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} v_{l_1 l_2 l_3 l_4} a_{l_1}^+ a_{l_2}^+ a_{l_4} a_{l_3} \quad (\text{I-18})$$

Où $t_{l_1 l_2}$ et $v_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ représentent les éléments matriciels des opérateurs énergie cinétique et potentiel d'interaction.

En appliquant le théorème de Wick, on peut exprimer l'énergie de Hartree-Fock comme une fonctionnelle de la densité mono particulaire :

$$E_{HF}[\rho] = \sum_{l_1, l_2} t_{l_1 l_2} \langle \psi | a_{l_1}^+ a_{l_2} | \psi \rangle + \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} v_{l_1 l_2 l_3 l_4} \langle \psi | a_{l_1}^+ a_{l_2}^+ a_{l_4} a_{l_3} | \psi \rangle \quad (\text{I-19a})$$

$$E_{HF}[\rho] = \sum_{l_1, l_2} t_{l_1 l_2} \rho_{l_2 l_1} + \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \rho_{l_3 l_1} v_{l_1 l_2 l_3 l_4} \rho_{l_4 l_2} \quad (\text{I-19b})$$

$$E_{HF}[\rho] = \text{Tr}(t\rho) + \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \text{Tr}_1(\rho v \rho) \quad (\text{I-19c})$$

Puisque l'équation est indépendante de la base, on peut l'utiliser pour donner une expression de l'énergie HF dans la base où ρ est diagonale :

$$E_{HF}[\rho] = \sum_i t_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij,ij} \quad (\text{I-20})$$

Où t_{ii} et $v_{ij,ij}$ représentent les éléments diagonaux des matrices $t\rho$ et $\rho v \rho$ respectivement.

2-2.2 Les équations de Hartree Fock

Pour déterminer la base $\{\psi\}$, nous devons minimiser la fonctionnelle énergie (I-19) par rapport à toutes les densités, avec la condition que $\rho^2 = \rho$ (pour ρ nulle, donc état pur). Ceci est équivalent à la minimisation de l'énergie de l'équation (I-19) dans l'espace des déterminants de Slater pour les fermions et dans l'espace des produits de fonctions pour les bosons. Puisque la densité à laquelle on ajoute une petite variation est aussi un projecteur

$$(\rho + \delta\rho)^2 = \rho + \delta\rho \quad (\text{I-21})$$

Nous négligeons les termes quadratiques en $\delta\rho$, on obtient :

$$\delta\rho = \rho\delta\rho + \delta\rho\rho \quad (\text{I-22})$$

Dans la base $\{\psi\}$, où la densité est diagonale, cela signifie que les éléments de matrice particule-particule doivent être nuls :

$$\rho\delta\rho = 0 \quad (\text{I-23})$$

Par conséquent, pour s'assurer que nous restons dans l'ensemble de la base (lié au déterminant pour les fermions, et lié aux produits pour les bosons), nous pouvons ne tenir compte que des variations $\delta\rho_{mi}$ des éléments de matrices particule trou (ph) et trou particule (hp) de la matrice densité ρ dans la base $\{\psi\}$.

La variation de l'énergie (I-20) est alors donnée par :

$$\delta E_{HF} = E_{HF}(\rho + \delta\rho) - E_{HF}(\rho) = \sum_{kk'} h_{kk'} \delta\rho_{kk'} \quad (\text{I-24})$$

On peut dire alors que la méthode de Hartree Fock consiste à considérer la dynamique d'un système comme un mouvement de particules indépendantes. L'état du système est soit un déterminant de Slater pour les fermions où soit un produit de fonctions symétrique pour les bosons, et le hamiltonien de Hartree Fock est un hamiltonien mono particulaire.

3. Equation de Gross Pitaevskii standard

Revenons à l'équation (I-17b), le terme $N(N-1)/2$ provient de la somme du terme d'interaction sur l'ensemble des paires possibles dans le système. L'évaluation de la somme sur tous les $V(r_i - r_j)$ est un peu délicate. Un choix possible est de décrire les interactions et la diffusion des particules dans l'approximation de Born. On considère ainsi un pseudopotentiel de la forme

$$V(r - r') = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(r - r') = g\delta(r - r') \quad (\text{I-25})$$

Où a est la longueur de diffusion des ondes s , m la masse de la particule et g est l'interaction.

Cette approximation pour les selfs interaction est en fait une simplification grossière puisqu'elle consiste à ne considérer que des collisions binaires ponctuelles. Autrement dit, tous les effets de longue portée sont négligés. Le modèle de sphères dures sera en fait d'autant plus valable que le système est dilué. Ce potentiel est caractérisé par un seul paramètre scalaire : longueur de diffusion de l'onde s . En substituant cette

expression dans l'équation (I-17a) nous aboutissons à l'équation de Gross Pitaevskii (EGP). Cette dernière décrit avec succès le phénomène de condensation de Bose-Einstein. Une de ces caractéristiques est l'apparition d'un état macroscopiquement occupé. Elle représente simplement l'équation d'Euler-Lagrange de la fonctionnelle d'énergie et s'écrit :

$$(h_0 - \mu)\varphi_0(r) + (N_c - 1)g|\varphi_0(r)|^2\varphi_0(r) = 0 \quad (I-26)$$

D'après (I-26) l'équation de Gross Pitaevskii est en fait une équation de champ classique.

Où μ est le potentiel chimique du système, N_c le nombre de particules condensées et $\varphi_0(r)$ la fonction d'onde condensée.

3.1 L'effet des interactions : limite Thomas Fermi

En général, les interactions jouent un rôle non négligeable dans l'apparition de la fraction condensée et dans sa stabilité, selon qu'elles sont attractives ou répulsives. Si les interactions sont suffisamment fortes et répulsives le terme cinétique, $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi_0(r)$ devient négligeable dans l'équation (I-

26) qui devient alors, en remplaçant $V_{trap}(r)$ par $\frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ et $N_c - 1$ par N_c :

$$\frac{1}{2}m\omega^2 r^2\varphi_0(r) + N_c g|\varphi_0(r)|^2\varphi_0(r) = \mu\varphi_0(r) \quad (I-27)$$

On en déduit :

$$|\varphi_0(r)|^2 = \frac{1}{gN_c}\left(\mu - \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right) \quad (I-28)$$

La densité de particules $n_c(r) = N_c|\varphi_0(r)|^2$ a la forme d'une parabole inversée (voir figure I-1) qui s'annule au delà de r_{\max} où :

$$r_{\max} = \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega^2}} \quad (I-29)$$

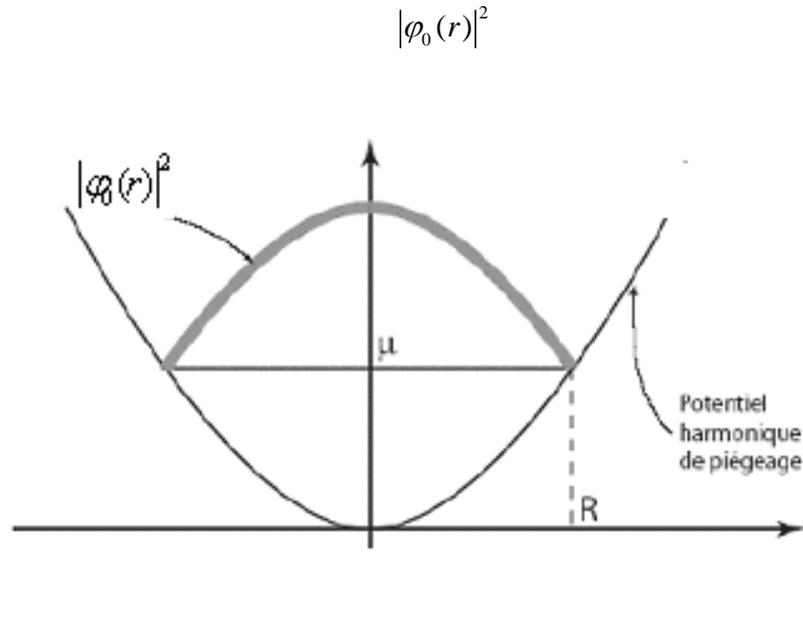


Figure I-1 : Fonction d'onde de Thomas Fermi dans un potentiel harmonique à symétrie sphérique.

Notons que l'approximation de Thomas Fermi n'est plus valable au voisinage de $r = r_{\max}$. Le fait de tenir compte du terme cinétique au voisinage de ce point arrondit les angles et supprime la discontinuité de la dérivée de $n(r)$ en $r = r_{\max}$ [45,46].

L'approximation de Thomas Fermi est une limite à température pratiquement nulle.

La condition de normalisation de $\varphi(r)$:

$$\int d^3r |\varphi_0(r)|^2 = 1 \quad (\text{I-30})$$

Conduit à l'expression du potentiel chimique :

$$\mu = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{15N_c a}{d} \right)^{\frac{2}{5}} \quad (\text{I-31})$$

Où d est la longueur d'oscillateur :

$$d = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (\text{I-32})$$

Soit $E(N)$ l'énergie totale moyenne du système des N particules. Par définition même de μ :

$$\mu = \frac{\partial E(N)}{\partial N} \quad (\text{I-33})$$

Comme ω , a , d ne dépendent pas de N , on déduit alors par intégration que :

$$E(N) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(15 \frac{a}{d}\right)^{2/5} \frac{N^{7/5}}{7/5} \quad (\text{I-34})$$

et par suite pour l'énergie totale par particule

$$\frac{E(N)}{N} = \frac{5}{7} \mu \quad (\text{I-35})$$

3.2 Rayon du condensat et rapport d'aspect (aspect ratio)

Nous prendrons pour un rayon du condensat la valeur maximale r_{\max} de r écrite en (I-29). En reportant la valeur (I-31) du potentiel chimique dans cette expression, on obtient :

$$r_{\max} = \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega^2}} = d \left(\frac{15aN_c}{d}\right)^{1/5} \quad (\text{I-36})$$

Le cas d'un piège anisotrope, à symétrie de révolution autour de Oz, est caractérisé par des fréquences ω_z (axiale) et ω_{\perp} (perpendiculaire). Alors, en remplaçant dans le membre de gauche de (I-28), $\frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ par $\frac{1}{2}m(\omega_z^2 z^2 + \omega_{\perp}^2 r^2)$. Les valeurs maximales z_{\max} et r_{\max} de z et r sont alors donnés par les équations

$$\mu - \frac{1}{2}m\omega_z^2 z_{\max}^2 = 0 \quad (\text{I-37a})$$

$$\mu - \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2 r_{\max}^2 = 0 \quad (\text{I-37b})$$

Ce qui conduit pour le rapport d'aspect du condensat en présence d'interaction :

$$\frac{z_{\max}}{r_{\max}} = \frac{\omega_{\perp}}{\omega_z} \quad (\text{I-38})$$

En absence d'interactions, les dimensions du condensat sont données par $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_z}}$ le long de Oz et

$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\perp}}}$ dans les directions radiales, ce qui conduit au rapport d'aspect :

$$\frac{d_z}{d_{\perp}} = \sqrt{\frac{\omega_{\perp}}{\omega_z}} \quad (\text{I-39})$$

Comme $\frac{\omega_{\perp}}{\omega_z} \succ \sqrt{\frac{\omega_{\perp}}{\omega_z}}$ on en déduit, en comparant (I-38) et (I-39), que les interactions augmentent l'anisotropie du condensat.

4. Equation de Gross Pitaevskii dépendant du temps en représentation de Heisenberg

Pour obtenir l'EGP il existe plusieurs méthodes, soit par le principe de moindre action (voir appendice C) soit par les équations de Heisenberg. Le but de cette section est de déterminer la forme que prend l'EGP dans diverses limites (faibles excitations, forte densité). Cette équation sera ensuite utilisée dans le dernier chapitre pour interpréter divers résultats expérimentaux [6-9].

Dans la représentation de Heisenberg, l'équation de Schrödinger dépendant du temps de N particules identiques en interaction, piégées dans un potentiel dépendant du temps est obtenue (voir appendice E) en écrivant :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r_1, r_2, \dots, t) = [H, \psi] \quad (\text{I-40})$$

En injectant l'expression de la fonction d'un système bosonique :

$$\psi(r, t) = \sum_{i=1}^N \dot{\varphi}(r_i, t) \prod_{i \neq j} \varphi(r_j, t) \quad (\text{I-41})$$

On aura :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(r, t) + V_{\text{trap}}(r, t) \varphi(r, t) + Ng |\varphi(r, t)|^2 \varphi(r, t) \quad (\text{I-42})$$

On note que, si l'on cherche une solution stationnaire du type $\varphi(r, t) = \varphi_0(r) e^{-i\mu t / \hbar}$ on retrouve l'équation indépendante du temps. L'équation (I-42) est hautement non triviale. En effet, dans le cas général, elle ne peut pas se ramener à une équation aux valeurs propres standard du fait du terme non linéaire. Cependant, dans le cas des faibles interactions, il est possible de linéariser l'équation autour d'une solution stationnaire. Physiquement cela correspond aux excitations de basse énergie du condensat.

4-1 La limite des faibles excitations

Une façon de linéariser cette équation est d'ajouter au potentiel du piège une petite perturbation $\delta V(r, t)$:

$$V_{\text{trap}}(r, t) = V_{\text{trap}0}(r) + \delta V(r, t) \quad (\text{I-43})$$

Où $V_{\text{trap}0}(r)$ est le potentiel statique.

Lorsque $\delta V(r, t) = 0$, les solutions de l'équation de Gross Pitaevskii dépendante du temps (I-42) sont de la forme :

$$\varphi(r, t) = \varphi_0(r) e^{-i\mu t / \hbar} \quad (\text{I-44})$$

Où $\varphi_0(r)$ est solution de l'équation de Gross Pitaevskii indépendante du temps correspondant à $V_{\text{trap}0}(r)$ et μ le potentiel chimique :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_0(r) + V_{\text{trap}0}(r) \varphi_0(r) + Ng |\varphi_0(r)|^2 \varphi_0(r) = \mu \varphi_0(r) \quad (\text{I-45})$$

Si maintenant $\delta V(r, t)$ est très petit, on s'attend à ce que $\varphi(r, t)$ soit peu différent de (I-44). Plus précisément, si l'on pose :

$$\varphi(r, t) = \tilde{\varphi}(r, t) e^{-i\mu t / \hbar} \quad (\text{I-46})$$

On s'attend à ce que $\tilde{\varphi}(r, t)$ soit peu différent de $\varphi_0(r)$. Reportons (I-43) et (I-46) dans (I-42), il vient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi}(r, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}0}(r) + \delta V(r, t) - \mu + Ng |\tilde{\varphi}(r, t)|^2 \right) \tilde{\varphi}(r, t) \quad (\text{I-47a})$$

Posons également :

$$\tilde{\varphi}(r, t) = \varphi_0(r) + \delta \varphi(r, t) \quad (\text{I-47b})$$

Soit $\mathcal{E} = \frac{\delta V}{V_{\text{trap}0}}$ et $\delta \varphi$ est au moins d'ordre 1 en \mathcal{E} .

Reportons (I-47b) dans (I-47a). A l'ordre 0 en \mathcal{E} , on retrouve (I-45). A l'ordre 1, on obtient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta\varphi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{trap0}(r) - \mu + 2Ng |\varphi_0(r)|^2\right) \delta\varphi + Ng\varphi_0^2(r) \delta\varphi^* + \delta V(r,t) \varphi_0(r) \quad (\text{I-48})$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \delta\varphi \\ \delta\varphi^* \end{pmatrix} = L_{GP} \begin{pmatrix} \delta\varphi \\ \delta\varphi^* \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} +s \\ -s^* \end{pmatrix} \quad (\text{I-49})$$

Où L_{GP} est une matrice 2×2 indépendante du temps :

$$L_{GP} = \begin{pmatrix} h_0 - \mu + 2Ng |\varphi_0|^2 & Ng\varphi_0^2 \\ -Ng\varphi_0^{*2} & -(h_0 - \mu + 2Ng |\varphi_0|^2) \end{pmatrix} \quad (\text{I-50a})$$

Avec $h_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{trap0}(r)$ et où $\begin{pmatrix} s \\ -s^* \end{pmatrix}$ est un terme source avec

$$s = \delta V(r,t) \varphi_0(r) \quad (\text{I-50b})$$

L'équation (I-50a) représente une linéarisation de l'équation de Gross Pitaevskii dépendant du temps valable à la limite $\delta V \ll V_{trap0}$.

4-2 Etude des excitations

La linéarisation de l'équation (I-50), nous donne accès au spectre des excitations de basse énergie d'un condensat dans un cadre plus simple que celui de la théorie de Bogoliubov [12]. On obtient les modes propres en diagonalisant L_{GP} , c'est-à-dire en cherchant les fréquences propres et les vecteurs propres (u,v) du système tels que :

$$L_{GP} \begin{pmatrix} u(r) \\ v(r) \end{pmatrix} e^{-i\omega t} = \hbar\omega \begin{pmatrix} u(r) \\ v(r) \end{pmatrix} e^{-i\omega t} \quad (\text{I-51})$$

L'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$\begin{aligned} \hbar\omega u(r) &= [h_0 - \mu + 2g\varphi_0^2(r)]u(r) + g\varphi_0^2(r)v(r) \\ -\hbar\omega v(r) &= [h_0 - \mu + 2g\varphi_0^2(r)]v(r) + g\varphi_0^2(r)u(r) \end{aligned} \quad (\text{I-52})$$

Qui ne sont autres que les équations couplées de Bogoliubov de Gennes (BdG) [33].

Cette procédure est aussi équivalente à la diagonalisation de l'hamiltonien dans l'approximation de Bogoliubov, dans lequel on exprime l'opérateur champ $\psi(r)$ en termes d'opérateurs de quasi particules α_j et α_j^+ à travers :

$$\psi(r) = \sum_j [u_j(r)\alpha_j + v_j^*(r)\alpha_j^+] \quad (\text{I-53})$$

En imposant que α_j et α_j^+ obéissent aux relations de commutation canoniques. Les amplitudes des quasi particules doivent obéir à la condition de normalisation :

$$\int dr [u_i^*(r)u_j(r) - v_i^*(r)v_j(r)] = \delta_{ij} \quad (\text{I-54})$$

Les équations (I-52) permettent alors décrire la situation générale sous la forme :

$$\varphi(r, t) = \left[\varphi(r) + u(r)e^{-i\omega t} + v^*(r)e^{i\omega t} \right] e^{-i\mu t / \hbar} \quad (\text{I-55})$$

Regardons comment l'on procède dans le cas d'un gaz homogène.

4-3 Gaz homogène

Prenons le cas d'un condensat libre uniforme. La solution à l'équilibre est très simple car il s'agit d'une constante :

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{V}}, \quad \mu = \rho g \quad (\text{I-56})$$

On cherche alors $u(r)$ et $v(r)$ sous une forme d'onde planes, e^{ikr} , ce qui donne la relation de dispersion de Bogoliubov [45] :

$$\hbar\omega_k^{Bogo} = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho g \right)} \quad (\text{I-57})$$

Cette relation de dispersion donne deux limites selon l'ordre de grandeur k . Posons

$\hbar\omega_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et $2\mu = 2\rho g$, on distingue deux cas :

Si $\hbar\omega_k^0 \leq \mu$, la relation (I-57) devient :

$$\hbar\omega_k^{Bogo} = \sqrt{2\hbar\omega_k^0 \rho g} = k \sqrt{\frac{\rho g}{m}} \quad (\text{I-58})$$

D'où la vitesse des phonons :

$$c = \sqrt{\frac{\rho g}{m}} \quad (\text{I-59})$$

Il s'agit d'ondes de densité à travers le condensat.

Si $\hbar\omega_k^0 \geq \mu$, on déduit une relation de la forme :

$$\hbar\omega_k^{Bogo} = \hbar\omega_k^0 + \rho g \quad (\text{I-60})$$

On dit qu'on est dans un cas de particule libre. L'effet du condensat ne se traduit que par une simple translation des énergies du gaz de l'ordre du potentiel chimique.

5. Equation de Gross Pitaevskii en termes hydrodynamique

Une des complications qui survient lorsqu'on examine l'équation (I-42) est que la fonction d'onde est nécessairement complexe. En effet, dans le cas statique on peut toujours se ramener à une fonction réelle qui traduit le fait que le courant de probabilité est nul (état stationnaire). Pour un problème dépendant du temps ce n'est en général pas le cas. Nous présentons ici une description hydrodynamique des condensats. Cette description est basée sur un formalisme où il nous sera possible de séparer les fluctuations de phase et de densité. Pour ce faire, il suffit de changer le point de vue en écrivant la fonction d'onde dans la représentation *phase-densité* :

$$\varphi(r, t) = \sqrt{\rho(r, t)} e^{iS(r, t)} \quad (\text{I-61})$$

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

Cette transformation est appelée transformation de Madelung [47]. On voit immédiatement que ρ est la densité locale d'atomes. En reportant cette expression dans l'équation de Gross Pitaevskii dépendante du temps, et en séparant partie réelle et partie imaginaire, on obtient un jeu de deux équations totalement équivalentes à :

$$\vec{v}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \vec{\nabla} S(\vec{r}, t) \quad (\text{I-62a})$$

Déduite de l'expression $j = \rho \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi$ donnant la densité du courant de la fonction d'onde.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho \cdot \vec{v}) = 0 \quad (\text{I-62b})$$

$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \vec{\nabla} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\rho}} \Delta \sqrt{\rho} - \frac{1}{2} m v^2 - V_{\text{trap}}(r, t) - \rho g \right] \quad (\text{I-62c})$$

Dans cette équation (I-62c), il apparaît un seul terme proportionnel à \hbar^2 qu'on appelle pression quantique. L'approximation de Thomas Fermi revient à négliger le terme de pression quantique. En effet, ce terme est analogue au terme cinétique que nous avons négligé dans l'équation (I-27). Il provient des gradients de densité; un autre terme cinétique, provenant des gradients de phase (absents dans un nuage au repos), apparaît sous la forme classique de $\frac{1}{2} m v^2$: ce dernier ne pourra pas être négligé, même dans l'approximation de

Thomas Fermi.

L'équation hydrodynamique (I-62) prend finalement la forme :

$$m \frac{\partial}{\partial t} \vec{v} + \vec{\nabla}(V_{\text{trap}}(r, t) + g \rho + \frac{m v^2}{2}) = \vec{0} \quad (\text{I-63})$$

5.1 Cas d'un piège harmonique dépendant du temps

Les équations hydrodynamiques prennent une forme particulière quand le potentiel du piège est harmonique à tout instant :

$$V_{\text{trap}}(r, t) = \sum_i \frac{1}{2} m \omega_i^2(t) x_i^2 \quad (\text{I-64})$$

Castin et Dum, ainsi que Kagan, Shlyapnikov et Walraven, ont montré que le condensat garde un profil de densité parabolique [48,49], avec des rayons de Thomas Fermi R_i qui dépendent du temps : $R_i(t) = \lambda_i(t) R_i(0)$. Les paramètres $\lambda_i(t)$ décrivent complètement l'évolution du système, sous forme de lois d'échelle. En injectant ce profil de Thomas Fermi dans les équations hydrodynamiques, on obtient un ensemble d'équations différentielles non linéaires pour les $\lambda_i(t)$:

$$\lambda''_i(t) + \omega_i^2 \lambda_i(t) = \frac{\omega_i^2(0)}{\lambda_x \lambda_y \lambda_z \lambda_i} \quad (\text{I-65})$$

Ces équations (I-65) permettent d'obtenir des solutions exactes pour l'évolution du condensat. Elles donnent ainsi accès au comportement de certains modes comme le mode de respiration transverse. Par ailleurs, on peut aussi utiliser ce formalisme pour confronter un certain nombre de modèles à des résultats expérimentaux. En effet, le modèle d'évolution (I-65) peut représenter l'expansion du condensat lorsqu'il est relâché du piège. On verra néanmoins plus tard que cette vision est loin de représenter la réalité.

6. Conclusion

Maintenant que le formalisme à température nulle à été présenté, nous nous concentrerons au chapitre suivant sur le formalisme à température finie. Nous verrons que l'effet de la température est loin d'être négligeable bien que l'on considère toujours des gaz ultra froids.

Chapitre II Extensions de la théorie du champ moyen à température finie

Plan du chapitre II

1. Introduction
2. L'hamiltonien total
3. L'approximation de Bogoliubov (BA)
4. Décomposition de l'hamiltonien
5. Equation de Gross Pitaevskii généralisée
6. Transformation de Bogoliubov
- 6.1 Les équations de Bogoliubov de Gennes
- 6.2 Expression de la densité non condensée et de la densité anormale
7. L'approximation de Popov
8. Théorie GHFB1 et GHFB2
9. Violation du théorème de Hugenholtz-Pines
10. Conservation du nombre de particule
11. Conclusion

1. Introduction

Nous avons vu au chapitre I, la théorie du champ moyen à température nulle, où nous obtenons comme conséquence l'équation de Gross Pitaevskii standard. Bien que ce formalisme ne décrive pas les corrélations qui existent au niveau de l'état fondamental, il fournit une description assez précise de l'état fondamental à température nulle. Pour étudier l'effet des atomes qui peuplent les états excités (ou nuage thermique), plusieurs formulations ont été développées [5,10,12]. Parmi ces formulations on va citer l'approximation généralisée de Hartree Fock Bogoliubov [5]. Elle nous donne toutes les informations possibles sur l'évolution de ce nuage thermique en fonction de la température. Cependant, en incluant la contribution des termes d'ordre élevé en champ des atomes non condensés à l'hamiltonien du système on aboutit à une forme quadratique. Puis avec une transformation de Bogoliubov, nous allons le réécrire sous une forme diagonale dans la base des quasi particules. Il est bien connu, que cette nouvelle forme de H va nous aider à déterminer les différentes quantités physiques telles que la densité des atomes condensés, la densité des atomes non condensés et la densité anormale.

2. L'hamiltonien total

L'hamiltonien total H s'écrit dans le formalisme de la seconde quantification comme :

$$H = \int dr \psi^\dagger(r) (h_0 - \mu) \psi(r) + \frac{1}{2} \int dr dr' \psi^\dagger(r) \psi^\dagger(r') V(r-r') \psi(r) \psi(r') \quad (\text{II-1})$$

Où $h_0(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}}(r)$ est l'hamiltonien à une particule.

Nous choisissons pour ce travail un potentiel harmonique isotrope de forme $\frac{1}{2} m \omega^2 r^2$. Les opérateurs champs qui décrivent les atomes obéissent aux relations de commutations :

$$[\psi(r), \psi(r')] = [\psi^\dagger(r), \psi^\dagger(r')] = 0 \quad (\text{II-2a})$$

$$[\psi(r), \psi^\dagger(r')] = \delta(r-r') \quad (\text{II-2b})$$

Ils sont normalisés au nombre total d'atomes, en effet :

$$\int dr \psi^\dagger(r) \psi(r) = \hat{N} \quad (\text{II-3})$$

Le deuxième terme de l'équation (II-1) correspond à l'interaction de deux corps. Nous négligeons les collisions à 3 corps et à 4 corps pour pouvoir rester dans le contexte collision binaire. Le meilleur choix est d'écrire le potentiel comme une interaction de contact [50] :

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

Notons ici, que compte tenu des conditions de très basse température il est possible de faire des approximations efficaces pour faire traiter le problème d'une manière rigoureuse. En particulier, la grande délocalisation des particules (grandes longueur d'onde de De Broglie) et le fait que les collisions ont lieu à très basse énergie nous permettent de caractériser les collisions binaires par un seul paramètre scalaire : la longueur de diffusion de l'onde a (voir appendice C).

Avec l'expression (II-4) l'hamiltonien H (II-1) se simplifie à :

$$H = \int dr \psi^\dagger(r) (h_0 - \mu) \psi(r) + \frac{1}{2} g \int dr \psi^\dagger(r) \psi^\dagger(r) \psi(r) \psi(r) \quad (\text{II-5})$$

Cette forme est considérée comme une bonne approximation pour l'étude de ce système, mais on devrait être prudent avec la constante de couplage g , du fait, qu'elle est déterminée à partir de la théorie de la diffusion à deux corps et dans l'approximation de Born. Ce qui n'est pas normalement exact du fait qu'il y a plusieurs

processus de diffusion et qu'on doit normalement utiliser la matrice T à N corps. De toute façon cette interprétation est l'objectif du chapitre suivant.

3. L'approximation de Bogoliubov (BA)

Puisque nous nous sommes intéressés par le cas où la majorité des particules doivent occuper l'état fondamental, alors nous devons séparer la partie qui décrit les atomes condensés de la partie qui décrit les atomes non condensés. Pour procéder, nous développons la fonction d'onde totale dans la base relative à une particule :

$$\psi(r) = \sum_{i=0} a_i \varphi_i(r) = \phi(r) + \tilde{\psi}(r) \quad (\text{II-6})$$

Où a_i et a_i^+ sont les opérateurs d'annihilation et de création d'une particule. Ces opérateurs vérifient aussi les relations de commutations relatives aux bosons :

$$[a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0 \quad (\text{II-7a})$$

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij} \quad (\text{II-7b})$$

De l'équation (II-6), la partie $\sqrt{N_c} \phi_0(r) \equiv \phi(r)$ représente les atomes dans l'état fondamental alors que

$\sum_{i \neq 0} a_i \varphi_i(r) \equiv \tilde{\psi}(r)$ représente les atomes dans les différents états excités et donc non condensés. Le nombre

d'atomes condensés $N_c = \int dr \phi^*(r) \phi(r)$ (avec $\int dr |\phi_0(r)|^2 = 1$) est supposé suffisamment grand pour faire l'approximation classique :

$$a_0 \approx a_0^+ = \sqrt{N_c} \quad (\text{II-8})$$

En effet, ceci est lié en fait à la très grande présence d'atomes condensés dans l'état fondamental d'où la différence, entre N_c et $N_c + 1$ qui découle de la relation (II-7b), est pratiquement négligeable. Cette approximation classique (II-8) conduit à une violation de la conservation du nombre d'atomes. Pour remédier à ce handicap on devrait travailler dans l'ensemble grand canonique en introduisant une translation par rapport à notre hamiltonien (II-5) de vecteur $-\mu N$, N est l'opérateur nombre d'atomes. Le nouveau hamiltonien qui répond à la symétrie U(1) (groupe unitaire de dimension 1) est :

$$H = H - \mu N \quad (\text{II-9})$$

4 Décomposition de l'hamiltonien

En substituant l'expression (II-6) dans (II-5) on aboutit à une somme de quatre termes. Les détails de ce calcul sont donnés dans l'appendice D.

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + H_3 + H_4 \quad (\text{II-10})$$

Où

$$H_0 = \int dr \phi^* (h_0 - \mu + \frac{g}{2} |\phi|^2) \phi \quad (\text{II-11a})$$

$$H_1 = \int dr \left[\tilde{\psi}^+ (h_0 - \mu + g |\phi|^2) \phi + \phi^* (h_0 - \mu + g |\phi|^2) \tilde{\psi} \right] \quad (\text{II-11b})$$

$$H_2 = \int dr \left[\tilde{\psi}^+ (h_0 - \mu + 2g |\phi|^2) \tilde{\psi} + \frac{g}{2} (\phi^2 \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ + \phi^{*2} \tilde{\psi} \tilde{\psi}) \right] \quad (\text{II-11c})$$

$$H_3 = g \int dr \left[\phi \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} + \phi^* \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \tilde{\psi} \right] \quad (\text{II-11d})$$

$$H_4 = \frac{g}{2} \int dr \left[\tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \tilde{\psi} \right] \quad (\text{II-11e})$$

Avec le théorème de Wick [47], et l'approximation du champ moyen, on aura :

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \tilde{\psi} &\approx 2\tilde{n}\tilde{\psi} + \tilde{m}\tilde{\psi}^+ \\
\tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} &\approx 2\tilde{n}\tilde{\psi}^+ + \tilde{m}^* \tilde{\psi} \\
\tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \tilde{\psi} &\approx 4\tilde{n}\tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} + \tilde{m}\tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ + \tilde{m}^* \tilde{\psi} \tilde{\psi} - 2\tilde{n}^2 - |\tilde{m}|^2
\end{aligned} \tag{II-11}$$

La quantité $\tilde{n}(r) = \langle \tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}(r) \rangle$ représente manifestement la densité d'atomes dans les états excités ; elle est dite densité non condensée. Par contre, la quantité $\tilde{m}(r) = \langle \tilde{\psi}(r)\tilde{\psi}(r) \rangle$, analogue au terme d'appariement pour les fermions est dite densité anormale, en vertu de la relation $n(r) = n_c(r) + \tilde{n}(r)$. En retenant que les termes d'ordre 2 au plus de $\tilde{\psi}(r)$ (voir appendice D), l'hamiltonien (II-7) s'écrit :

$$\begin{aligned}
H_{HFB} &= \int d^3r \varphi^*(r)(h_0 - \mu + \frac{1}{2}gn_c(r))\varphi(r) + \int dr \tilde{\psi}^+(r)L\tilde{\psi}(r) \\
&+ \frac{g}{2} \int dr (\varphi^2(r) + \tilde{m}(r))\tilde{\psi}^+(r)\tilde{\psi}^+(r) + \frac{g}{2} \int dr (\varphi^{*2}(r) + \tilde{m}^*(r))\tilde{\psi}(r)\tilde{\psi}(r)
\end{aligned} \tag{II-12}$$

Où $L = h_0 + 2gn(r) - \mu$.

5. Equation de Gross Pitaevskii généralisée

Ce nouveau hamiltonien est constitué d'une partie qui décrit les atomes condensés et de plusieurs termes qui sont quadratiques en termes d'opérateurs des atomes non condensés. Pour que (II-12) soit stationnaire, il faut que la fonction d'onde des atomes condensés satisfasse l'équation suivante [51-55] :

$$(h_0 - \mu)\phi(r) + g(n_c(r) + 2\tilde{n}(r))\phi(r) + g\tilde{m}(r)\phi^*(r) = 0 \tag{II-13}$$

Cette équation est connue sous le nom d'équation de Gross Pitaevskii généralisée (EGPG) relative aux atomes condensés. Elle nous décrit l'effet des collisions des atomes condensés avec le nuage thermique. Elle peut être écrite en termes de l'opérateur des atomes non condensés avec un changement au niveau du potentiel chimique :

$$(h_0 - \varepsilon_i)\tilde{\psi}(r) + g(n_c(r) + 2\tilde{n}(r))\tilde{\psi}(r) + g\tilde{m}(r)\tilde{\psi}^*(r) = 0 \tag{II-14}$$

Dont ε_i n'est plus le potentiel chimique.

6. Transformation de Bogoliubov

Afin de déterminer les états propres et les valeurs propres de l'hamiltonien (II-12), nous allons utiliser une transformation unitaire qui mélange les opérateurs de création et de destruction de telle manière que l'hamiltonien soit diagonal. Donc l'idée est d'écrire la fonction d'onde qui décrit les atomes non condensés comme :

$$\tilde{\psi}(r) = \sum_i [u_i(r)\alpha_i - v_i^*(r)\alpha_i^+] \tag{II-15a}$$

$$\tilde{\psi}^+(r) = \sum_i [u_i^*(r)\alpha_i^+ - v_i(r)\alpha_i] \tag{II-15b}$$

Où les opérateurs α_i et α_i^+ obéissent aux relations de commutation des bosons. Les fonctions $u_i(r)$ et $v_i(r)$ représentent les amplitudes des quasi particules. Avec la relation de commutations ces fonctions $u_i(r)$ et $v_i(r)$ vérifient [33]:

$$\int d^3r \{u_i(r)u_j^*(r) - v_i(r)v_j^*(r)\} = \delta_{ij} \tag{II-16}$$

En substituant l'expression (II-15) dans (II-12) et après un calcul, on aboutit à la forme diagonale :

$$\hat{H}_{HFB} = \int dr \phi(r)(h_0 - \mu + \frac{1}{2}gn_c(r))\phi(r) + \sum_i E_i \alpha_i^+ \alpha_i - \sum_i E_i \int d^3r |v_i(r)|^2 \tag{II-17}$$

A condition que $u_i(r)$ et $v_i(r)$ vérifient les équations ci-dessus.

L'hamiltonien H_{HFB} est composé de trois termes dont le premier est relatif à l'équation de Gross Pitaevskii standard déjà décrit au chapitre I. Le second terme décrit le système des quasi particules sans interaction et le troisième est une constante en énergie.

6.1 Les équations de Bogoluibov de Gennes

Pour que H_{HFB} soit diagonal les amplitudes $u_i(r)$ et $v_i(r)$ doivent vérifier [5,33] :

$$L(r)u_i(r) - g(\phi^2(r) + \tilde{m}(r))v_i(r) = E_i u_i(r) \quad (\text{II-18})$$

$$L(r)v_i(r) - g(\phi^{2*}(r) + \tilde{m}^*(r))u_i(r) = -E_i v_i(r) \quad (\text{II-19})$$

Soit en représentation matricielle comme :

$$\begin{pmatrix} L & -M \\ -M^* & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} = E_i \begin{pmatrix} u_i \\ -v_i \end{pmatrix} \quad (\text{II-20})$$

6.2 Expression de la densité non condensée et de la densité anormale

La substitution de la transformation de Bogoliubov dans les expressions de la densité non condensée et de la densité anormale donne :

$$\begin{aligned} \tilde{n}(r) &= \left\langle \sum_{i,j} \{ (u_i^* \alpha_i^+ - v_i \alpha_i) (u_j \alpha_j - v_j^* \alpha_j^+) \} \right\rangle \\ &= \sum_{i,j} \{ (u_i^* u_j \langle \alpha_i^+ \alpha_j \rangle + v_i v_j^* \langle \alpha_i \alpha_j^+ \rangle - v_i u_j \langle \alpha_i \alpha_j \rangle - u_i^* v_j^* \langle \alpha_i^+ \alpha_j^+ \rangle) \} \\ &= \sum_{i,j} \{ (u_i^* u_j + v_i v_j^*) \langle \alpha_i^+ \alpha_j \rangle - v_i u_j^* \delta_{ij} + v_i u_j \langle \alpha_i \alpha_j \rangle - u_i^* v_j^* \langle \alpha_i^+ \alpha_j^+ \rangle \} \end{aligned} \quad (\text{II-21})$$

Ici nous avons utilisé les relations de commutations des opérateurs vus ci-dessus. En remplaçant :

$$\langle \alpha_i^+ \alpha_i \rangle = f_B(E_i) = \frac{1}{z^{-1} \exp \beta E_i - 1} \quad (\text{I-22})$$

Avec $\beta = \frac{1}{k_B T}$ est l'inverse de la température et z est la fugacité. Elle est donnée par $z^{-1} = 1 + N_c^{-1}$ [33,5].

On déduit que :

$$\tilde{n}(r) = \sum_i \{ (|u_i(r)|^2 + |v_i(r)|^2) f_B(E_i) + |v_i(r)|^2 \} \quad (\text{II-23})$$

De la même manière, la densité anormale a l'expression suivante:

$$\begin{aligned}
\tilde{m}(r) &= \left\langle \sum_{i,j} \{ (u_i \alpha_i - v_i^* \alpha_i^+) (u_j \alpha_j - v_j^* \alpha_j^+) \} \right\rangle \\
&= \sum_{i,j} \{ (u_i u_j \langle \alpha_i \alpha_j \rangle + v_i^* v_j^* \langle \alpha_i^+ \alpha_j^+ \rangle - v_i^* u_j \langle \alpha_i^+ \alpha_j \rangle - u_i v_j^* \langle \alpha_i \alpha_j^+ \rangle) \} \quad (\text{II-24}) \\
&= - \sum_i \{ u_i v_i^* (1 + 2f_B(E_i)) \}
\end{aligned}$$

En résumé on peut déduire l'expression de ces deux quantités, $\tilde{n}(r)$ et $\tilde{m}(r)$, densité non condensée et densité anormale en utilisant la notion de produit scalaire dans la base des quasi particules. Cela nous permettra d'affecter à l'axe des fonctions $u_i(r)$ le facteur $f_B(E_i)$ et à l'axe des fonctions $v_i(r)$ le facteur $(1 + f_B(E_i))$.

Dans ce qui suit, nous allons présenter les approximations communes à cette théorie de HFB, car les équations de HFB telles qu'elles se présentent, conduisent à des divergences ultraviolettes et infrarouges. Cela est lié à l'interaction entre les atomes condensés et les atomes non condensés. En effet, les atomes condensés interagissent avec le nuage thermique *via* des collisions binaires. Dans le but de surmonter ces problèmes nous utilisons deux moyens le premier est connu sous le nom d'approximation de Popov, qui consiste à négliger la densité anormale et le second est la théorie GHFB1 et GHFB2 qui inclut cette densité aux calculs d'une manière rigoureuse en introduisant la matrice T à deux corps.

7. L'approximation de Popov

Cette approximation traite les collisions entre les atomes d'une manière self consistante. Elle consiste à négliger la densité anormale $\tilde{m}(r)$ dans les équations ce qui conduit à :

$$(h_0 - \mu)\phi(r) + g(n_c(r) + 2\tilde{n}(r))\phi(r) = 0 \quad (\text{II-25})$$

L'équation de Gross Pitaevskii standard qui décrit le cas statique des atomes condensés.

Et aux équations couplées de Bogoliubov de Gennes réduit :

$$L(r)u_i(r) - gn_c(r)v_i(r) = E_i u_i(r) \quad (\text{II-26a})$$

$$L(r)v_i(r) - gn_c(r)u_i(r) = -E_i v_i(r) \quad (\text{II-26b})$$

Où $L = h_0 + 2gn(r) - \mu$.

Il est bien connu que dans cette approximation l'effet des interactions à N corps est négligé.

8. La théorie GHFB1 et GHFB2

Cette théorie consiste à prendre en compte l'effet des collisions des atomes condensés avec le nuage thermique. En suivant les idées de Morgan [33] dans sa dérivation d'une méthode heuristique basée sur l'utilisation de la matrice T à deux particules (pour plus de détails voir le chapitre suivant) on aura :

$$g_c(r) = g \left(1 + \frac{\tilde{m}(r)}{\varphi_0^2(r)} \right) \quad (\text{II-27})$$

Cette expression introduit la densité anormale d'une manière explicite. L'idée donc est de remplacer l'interaction g par g_c ce qui nous amène à écrire maintenant l'équation de Gross Pitaevskii (II-13) comme :

$$\left[h_0 - \mu + g(|\varphi_0(r)|^2 + 2\tilde{n}(r)) \right] \varphi_0(r) + g\tilde{m}(r)\varphi_0^* = 0 \quad (\text{II-28})$$

En regroupant les termes $|\varphi_0(r)|^2 \varphi_0(r)$ et $\tilde{m}(r)\varphi_0^*$ ceci donne :

$$g(|\varphi_0|^2 \varphi_0 + \tilde{m}(r)\varphi_0^*) = g\left(1 + \frac{\tilde{m}}{\varphi_0^2}\right)|\varphi_0|^2 \varphi_0 \quad (\text{II-29})$$

On obtient alors :

$$\left[h_0 + g_c(r)(|\varphi_0(r)|^2 + 2\tilde{n}(r)) \right] \varphi_0(r) = \mu\varphi_0(r) \quad (\text{II-30})$$

9. Violation du théorème de Hugenholtz-Pines [19]

Dans le but de prouver que l'énergie des quasi particules est non nulle à l'état fondamental, nous allons poser les fonctions $u_0(r)$ et $v_0(r)$ égale à :

$$u_0(r) = \varphi_0(r), \quad v_0(r) = -\varphi_0^*(r) \quad (\text{II-31})$$

Où $\varphi_0(r)$ est la fonction d'onde condensée. En substituant l'expression (II-31) dans les équations couplées de Bogoliubov de Gennes (II-18) et (II-19) tout en utilisant la condition de normalisation de la fonction condensée $\int dr |\varphi_0(r)|^2 = 1$, nous obtenons :

$$E_0\varphi_0(r) = (h_0 - \mu + 2g(|\varphi_0(r)|^2 + \tilde{n}(r))\varphi_0(r) - g(\tilde{m}(r) + \varphi_0^2)\varphi_0^* \quad (\text{II-32})$$

Or, d'après l'équation de Gross Pitaevskii généralisée (II-13), nous aurons :

$$E_0\varphi_0(r) = g|\varphi_0|^2 \varphi_0(r) - 2g\tilde{m}(r)\varphi_0^*(r) + \varphi_0^2\varphi_0^*(r) \quad (\text{II-33})$$

En multipliant les deux membres de cette équation par $\varphi_0^*(r)$ et en intégrant sur tout l'espace nous obtenons :

$$E_0 = g|\varphi_0|^2 - 2g \int dr (\tilde{m}(r)\varphi_0^{*2}(r) + \varphi_0^2\varphi_0^{*2}(r)) \neq 0 \quad (\text{II-34})$$

Du fait que l'énergie de l'état fondamental est différente de zéro, nous concluons que l'approximation de Popov et au-delà viole le théorème de Goldstone [23].

10. Conservation du nombre de particule

Pour montrer que la conservation du nombre de particules est violée par l'approximation de Popov et au-delà, nous considérons un volume V limité par une surface S, et nous prenons deux champs scalaires $\phi(r)$ et $\psi(r)$ tels que :

$$\nabla \phi(r) = \nabla \psi(r) = 0 \quad (\text{II-35})$$

Alors l'intégrale sur tout l'espace de la différence $\phi(r)\Delta\psi(r) - \psi(r)\Delta\phi(r)$ est :

$$\int d^3r \{ \phi(r)\Delta\psi(r) - \psi(r)\Delta\phi(r) \} = \oint dS \{ \phi(r)\nabla\psi(r) - \psi(r)\nabla\phi(r) \} \quad (\text{II-36})$$

En utilisant l'expression (II-36) on aura :

$$\int d^3r \phi(r)\Delta\psi(r) = \int d^3r \psi(r)\Delta\phi(r) \quad (\text{II-37})$$

Revenons maintenant à l'hamitonien relatif à une particule, h_0 , et vérifiant le résultat ci dessous :

$$\left\langle \int d^3r \{ \psi^+(r,t)h_0(r)\psi(r,t) - (h_0^*(r)\psi^+(r,t))\psi(r,t) \} \right\rangle = 0 \quad (\text{II-38})$$

En insérant l'approximation de Bogoliubov (II-6) dans (II-38), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \left\langle \int d^3 r \left\{ \psi^+(r,t) h_0(r) \psi(r,t) - (h_0^*(r) \psi^+(r,t)) \psi(r,t) \right\} \right\rangle &= \int d^3 r (\phi^* h_0 \phi - \phi h_0^* \phi^*) \\ &+ \left\langle \int d^3 r (\tilde{\psi}^+ h_0 \tilde{\psi} - (h_0^* \tilde{\psi}^+) \tilde{\psi}) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{II-39})$$

Alors les deux champs $\phi(r,t)$, $\tilde{\psi}(r,t)$ vérifient bien les deux expressions suivantes dont l'une est relative au champ condensé :

$$\int d^3 r \left\{ \phi h_0 \psi - \psi h_0^* \phi \right\} = 0 \quad (\text{II-40})$$

$$\int d^3 r \left\{ \phi h_0 \phi - \phi h_0^* \phi \right\} = 0 \quad (\text{II-41})$$

Dont l'autre est relatif au champ non condensé :

$$\int d^3 r (\tilde{\psi}^+ h_0 \tilde{\psi} - (h_0^* \tilde{\psi}^+) \tilde{\psi}) = 0 \quad (\text{II-42})$$

Mais pour montrer cela on devrait passer au développement de la fonction d'onde non condensée dans la base des quasi particules vue précédemment :

$$\begin{aligned} \int d^3 r (\tilde{\psi}^+ h_0 \tilde{\psi} - (h_0^* \tilde{\psi}^+) \tilde{\psi}) &= \sum_{kl} \int d^3 r (v_k h_0 u_l - u_l h_0^* v_k) \alpha_k \alpha_l \\ &+ \int d^3 r (v_k h_0 v_l^* - v_l^* h_0^* v_k) \alpha_k \alpha_l^+ + \int d^3 r (u_k^* h_0 u_l - u_l h_0^* u_k^*) \alpha_k^+ \alpha_l + \int d^3 r (u_k^* h_0 v_l^* - v_l^* h_0^* u_k^*) \alpha_k^+ \alpha_l^+ = 0 \end{aligned} \quad (\text{II-43})$$

Pour la densité condensée nous allons utiliser l'équation de Gross Pitaevskii généralisée, nous trouvons pour le nombre total de particules condensés $N_c(t) = \int d^3 r |\phi(r,t)|^2$ que :

$$i\hbar \frac{d}{dt} N_c(t) = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 r (-\phi \Delta \phi^* + \phi^* \Delta \phi) + g \int d^3 r (n_c + 2\tilde{n}) (|\phi|^2 - |\phi|^2) + g \int d^3 r (\tilde{m} \phi^{*2} - \tilde{m}^* \phi^2) \quad (\text{II-44})$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} N_c(t) = g \int d^3 r (\tilde{m} \phi^{*2} - \tilde{m}^* \phi^2) \quad (\text{II-45})$$

L'équation relative à la densité non condensée se déduit des équations couplées de BdG. Alors écrivons les deux équations et leurs complexes conjugués, nous obtenons pour l'amplitude u_q :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \int d^3 r |u_q|^2 &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 r (-u_q \Delta u_q^* + u_q^* \Delta u_q) + 2g \int d^3 r (n_c + \tilde{n}) (|u_q|^2 - |u_q|^2) \\ &+ g \int d^3 r ((\phi^2 + \tilde{m}) v_q u_q^* - (\phi^{*2} + \tilde{m}) u_q v_q^*) \end{aligned} \quad (\text{II-46})$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \int d^3 r |u_q|^2 = g \int d^3 r ((\phi^2 + \tilde{m}) v_q u_q^* - (\phi^{*2} + \tilde{m}) u_q v_q^*) \quad (\text{II-47})$$

De la même manière on trouve pour la fonction v_q :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \int d^3 r |v_q|^2 = g \int d^3 r ((\phi^2 + \tilde{m}) v_q u_q^* - (\phi^{*2} + \tilde{m}) u_q v_q^*) \quad (\text{II-48})$$

Pour pouvoir obtenir la densité non condensée, multiplions l'équation (II-47) par la fonction de distribution n_q et l'équation (II-48) par $(1+n_q)$ et faisons la somme sur tous les q nous obtenons :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \int d^3r \left(\sum_q (n_q + 1) |v_q|^2 + n_q |u_q|^2 \right) = g \int d^3r \sum_q (2n_q + 1) ((\phi^2 + \tilde{m})v_q u_q^* - (\phi^{*2} + \tilde{m})u_q v_q^*) \quad (\text{II-49})$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{N} = g \int d^3r (\tilde{m}^* \phi^2 - \tilde{m} \phi^{*2}) = -i\hbar \frac{d}{dt} N_c \quad (\text{II-50})$$

De l'équation (II-50) nous pouvons dire que le nombre total de particules est indépendant du temps dans l'approximation de Popov.

Pour passer à des relations plus générales des théories GHFB1 et GHFB2 et celle de Popov, utilisons l'équation de Gross Pitaevskii généralisée (II-13) et les équations couplées de Bogoliubov de Gennes généralisées (II-18) et (II-19) et essayons de les réécrire à nouveau dans l'approximation de Popov et dans GHFB1 et GHFB2 :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_0(r,t)}{\partial t} = (h_0 + g_c |\varphi_0(r,t)|^2 + 2g_e \tilde{n}(r)) \varphi_0(r,t) \quad (\text{II-51})$$

et

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} u_i(r,t) \\ v_i(r,t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L & M \\ -M & L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i(r,t) \\ v_i(r,t) \end{bmatrix} \quad (\text{II-52})$$

Où $L = h_0 - \mu + 2g_c n_c(r,t) + 2g_e \tilde{n}(r,t)$, $M = g_c \varphi_0^2(r,t)$

Avec :

$$g_c(r,t) = g \left(1 + a \frac{\tilde{m}(r,t)}{\varphi_0^2(r,t)} \right), \quad g_e(r,t) = g \left(1 + b \frac{\tilde{m}(r,t)}{\varphi_0^2(r,t)} \right) \quad (\text{II-53})$$

Où $a = \begin{cases} 0 & \text{Popov} \\ 1 & \text{GHFB}_1 \\ 1 & \text{GHFB}_2 \end{cases}$ $b = \begin{cases} 0 & \text{Popov} \\ 0 & \text{GHFB}_1 \\ 1 & \text{GHFB}_2 \end{cases}$ (II-54)

Avec cette nouvelle description l'équation (II-51) deviendrait :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_0(r,t)}{\partial t} = (h_0 + g(|\varphi_0(r,t)|^2 + 2\tilde{n}(r))) \varphi_0(r,t) + ga\tilde{m}(r,t)\varphi_0^*(r,t) + 2gb \frac{\tilde{m}(r,t)\tilde{n}(r,t)}{\varphi_0(r,t)} \quad (\text{II-55})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} u_i(r,t) \\ v_i(r,t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L & M \\ -M & L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i(r,t) \\ v_i(r,t) \end{bmatrix} \quad (\text{II-56})$$

Où $L = h_0 - \mu + 2g(n_c(r,t) + \tilde{n}(r,t)) + 2g\tilde{m}(r,t) \frac{(a|\varphi_0|^2 + b\tilde{n})}{\varphi_0^2}$, $M = g(\varphi_0^2(r,t) + a\tilde{m}(r,t))$

En multipliant les deux membres de l'équation (II-55), par $\varphi_0^*(r)$, et en utilisant son conjugué puis en intégrant sur tout l'espace, avec $\int dr |\phi(r)|^2 = N_c$, nous obtenons pour :

$$\frac{dN_c}{dt} = ia \frac{g}{\hbar} \int dr (\tilde{m} \varphi_0^{*2} - \tilde{m} \varphi_0^2) + 2i \frac{g}{\hbar} b \int dr \tilde{n} (\tilde{m} \frac{\varphi_0^*}{\varphi_0} - \tilde{m}^* \frac{\varphi_0}{\varphi_0^*}) \quad (\text{II-57})$$

Et pour :

$$\frac{d\tilde{N}}{dt} = i \frac{g}{\hbar} \int dr (\tilde{m}^* \varphi_0^2 - \tilde{m} \varphi_0^{*2}) + 2ia \frac{g}{\hbar} \int dr \tilde{n} (\tilde{m}^* \frac{\varphi_0}{\varphi_0^*} - \tilde{m} \frac{\varphi_0^*}{\varphi_0}) + 2ib \frac{g}{\hbar} \int dr \tilde{n}^2 (\frac{\tilde{m}^*}{\varphi_0^{*2}} - \frac{\tilde{m}}{\varphi_0^2}) \quad (\text{II-58})$$

On déduit de l'approximation de Popov (a=b=0) que :

$$\frac{dN_c}{dt} = 0 \quad (\text{II-59a})$$

La densité condensée est conservée.

$$\frac{d\tilde{N}}{dt} = i \frac{g}{\hbar} \int dr (\tilde{m}^* \varphi_0^2 - \tilde{m} \varphi_0^{*2}) \quad (\text{II-59b})$$

$$\frac{d(\tilde{N} + N_c)}{dt} = i \frac{g}{\hbar} \int dr (\tilde{m}^* \varphi_0^2 - \tilde{m} \varphi_0^{*2}) \quad (\text{II-59c})$$

La variation du nombre total d'atomes, N, au cours du temps est la même que celle de \tilde{N} . De la théorie GHFB1 (a=1,b=0), on déduit que :

$$\frac{dN_c}{dt} = i \frac{g}{\hbar} \int dr (\tilde{m} \varphi_0^{*2} - \tilde{m} \varphi_0^2) \quad (\text{II-60a})$$

$$\frac{d\tilde{N}}{dt} = i \frac{g}{\hbar} \int dr (\tilde{m} \varphi_0^2 - \tilde{m} \varphi_0^{*2}) + 2i \frac{g}{\hbar} \int dr \tilde{n} (\tilde{m}^* \frac{\varphi_0}{\varphi_0^*} - \tilde{m} \frac{\varphi_0^*}{\varphi_0}) \quad (\text{II-61b})$$

$$\frac{d(\tilde{N} + N_c)}{dt} = 2i \frac{g}{\hbar} \int dr \tilde{n} (\tilde{m}^* \frac{\varphi_0}{\varphi_0^*} - \tilde{m} \frac{\varphi_0^*}{\varphi_0}) \quad (\text{II-62c})$$

Ainsi que de la théorie GHFB2 (a=1,b=1) :

$$\frac{dN_c}{dt} = i \frac{g}{\hbar} \int dr (\tilde{m} \varphi_0^{*2} - \tilde{m} \varphi_0^2) + 2i \frac{g}{\hbar} \int dr \tilde{n} (\tilde{m} \frac{\varphi_0^*}{\varphi_0} - \tilde{m}^* \frac{\varphi_0}{\varphi_0^*}) \quad (\text{II-63a})$$

$$\frac{d\tilde{N}}{dt} = i \frac{g}{\hbar} \int dr (\tilde{m}^* \varphi_0^2 - \tilde{m} \varphi_0^{*2}) + 2i \frac{g}{\hbar} \int dr \tilde{n} (\tilde{m}^* \frac{\varphi_0}{\varphi_0^*} - \tilde{m} \frac{\varphi_0^*}{\varphi_0}) + 2i \frac{g}{\hbar} \int dr \tilde{n}^2 (\frac{\tilde{m}^*}{\varphi_0^{*2}} - \frac{\tilde{m}}{\varphi_0^2}) \quad (\text{II-63b})$$

$$\frac{d(\tilde{N} + N_c)}{dt} = 2i \frac{g}{\hbar} \int dr \tilde{n}^2 (\frac{\tilde{m}^*}{\varphi_0^{*2}} - \frac{\tilde{m}}{\varphi_0^2}) \quad (\text{II-63c})$$

En résumé, la variation du nombre total d'atomes N au cours du temps dépend de la variation du nuage thermique.

11. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons formulé des méthodes inspirées de l'extension de la théorie du champ moyen à température finie où l'effet du nuage thermique a joué un rôle essentiel pour décrire les interactions avec les

atomes condensés. Nous avons suivi la même stratégie que celle de la théorie du champ moyen à température nulle mais juste avec un ajout de l'effet des atomes qui peuplent les états excités. Ce chapitre nous a permis de déterminer explicitement la densité anormale *via* l'interaction de contact. Bien que ce potentiel ne nous permette pas de décrire toutes les collisions, nous allons voir au chapitre suivant comment peut-on le calculer suivant différentes méthodes en s'appuyant sur la matrice T à N particules.

Chapitre III Matrice T à N particules et divergence UV

Plan du chapitre

- 1- Introduction
- 2- La matrice T à deux particules
- 3- La matrice T à N particules
 - a- Interprétation de \tilde{m}_{ij}
- 4- Divergence ultra violette (UV)
 - a- Méthodes exactes
 - b- Méthodes heuristiques
5. Divergence infra rouge (IR)
6. Conclusion

1- Introduction

Dans les chapitres précédents, nous avons utilisé un potentiel inter atomique $V(r)$ pour décrire les interactions. A basse température ce potentiel peut être représenté par un potentiel effectif dépendant d'un paramètre dit longueur de diffusion de l'onde s (voir appendice C). Ce paramètre joue un rôle essentiel dans la description de la diffusion des particules. L'objectif de ce chapitre est de s'interroger sur l'efficacité d'un tel potentiel à décrire les interactions atomiques. En fait, il est facile de se rendre compte qu'un potentiel de contact ne peut être correct qu'à basse énergie. Cependant, afin de conserver au formalisme sa simplicité, nous allons maintenir cette forme, tout en s'appliquant à éliminer rigoureusement toute inconsistance qui pourrait apparaître. Il faut savoir que le pseudopotentiel de contact est la matrice T_{2b} à deux corps qui décrit la diffusion dans le vide de deux corps et que, pour des potentiels singuliers (tel que la sphère dure), les éléments de matrice $\langle ij|V|km \rangle$ sont très grands ou mal définis pour les états de basses énergies et on ne peut pas faire des calculs. Nous en donnerons ici un bref aperçu :

2- La matrice T à deux corps

La matrice T à deux corps, qui décrit la diffusion dans le vide, est définie par l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$T_{2b}(r, z) = V + V \frac{1}{z - H^{sp}} T_{2b}(r, z) \quad (\text{III-1})$$

En utilisant la relation de fermeture $\sum_{pq} |pq\rangle \langle pq| = 1$, nous obtenons :

$$T_{2b}(r, z) = V + \sum_{pq} V |pq^{sp}\rangle \frac{1}{z - (\epsilon_p^{sp} + \epsilon_q^{sp})} \langle pq| T_{2b}(r, z) \quad (\text{III-2})$$

Où $\epsilon_{p,q}$ sont les énergies des particules. Les kets $|pq\rangle$ correspondent aux états propres des deux particules, ils décrivent les états intermédiaires dans la collision de deux particules. La sommation est sur tous les états, l'état fondamental inclus. La matrice T_{2b} est représentée schématiquement par la figure III-1.

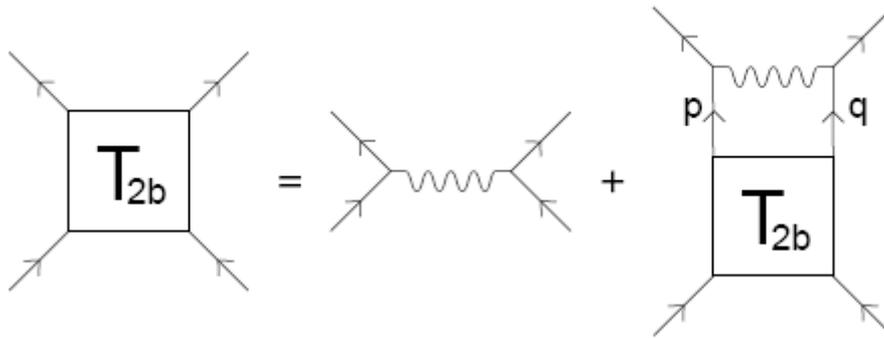


Figure III-1 : Diagramme de représentation de la matrice T à deux corps

Les états intermédiaires de l'équation (III-2) correspondent aux fonctions d'onde relatives à une particule. Pour un gaz piégé, ils sont différents des fonctions de bases que nous avons utilisées dans les chapitres précédents car ils ne sont pas orthogonaux aux fonctions d'onde des condensats mais ils ne peuvent pas créer

des difficultés pour la théorie utilisée, puisque l'équation (III-2) sert simplement à définir les opérateurs dont les éléments de matrice sont considérés comme des paramètres. De plus, le fait que la matrice T_{2b} définit pour le piège n'est pas la même que dans la limite homogène, les opérateurs $h_0 = H^{sp}$ de l'équation (III-1) sont différents dans les deux cas. Dans le cas homogène, les états intermédiaires de l'équation (III-2) sont des ondes planes et la matrice T_{2b} peut s'écrire :

$$T_{2b}(k', k, z) = V(k'-k) + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k'' \frac{V(k'-k'')T_{2b}(k'', k, z)}{z - \frac{\hbar^2 k''^2}{2m}} \quad (\text{III-3})$$

Où :

$$\begin{aligned} V(k'-k) &= \int d^3r V(r) e^{i(k-k')r} \\ T_{2b}(k', k, z) &= \int d^3r e^{-ik'r} T_{2b}(r, z) e^{ikr} \end{aligned} \quad (\text{III-4})$$

$\hbar k$ et $\hbar k'$ sont respectivement les impulsions initiales et finales des particules en collision ; $m'=m/2$ est la masse réduite et nous redéfinissons z pour inclure l'énergie du centre de masse des paires de particules. Il est montré dans la référence [33], que la matrice T_{2b} à la limite homogène de l'équation (III-3) peut s'écrire en terme des déphasages partiels comme :

$$\lim_{\substack{\delta \rightarrow 0 \\ k=k'}} T_{2b}(k', k, \varepsilon_k + i\delta) = -\frac{4\pi\hbar^2}{m} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{k} e^{i\phi_l(k)} \sin \phi_l(k) P_l(\cos \theta) \quad (\text{III-5})$$

Où $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et θ est l'angle entre k et k' . A basse énergie, l'onde s de diffusion est importante. Alors pour $k \ll \frac{1}{a}$, nous avons :

$$\lim_{\substack{\delta \rightarrow 0 \\ k=k'}} T_{2b}(k', k, \varepsilon_k + i\delta) = -\frac{4\pi\hbar^2 a}{m} + O(ka) \quad (\text{III-6})$$

La matrice T_{2b} en représentation r peut être considérée comme un potentiel de contact, en effet :

$$T_{2b}(r, z=0) \approx \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(r) = g\delta(r) \quad (\text{III-7})$$

Le potentiel de contact n'est qu'une approximation à la matrice T pour les atomes neutres à trois dimensions et ne doit pas être appliqué aux bosons chargés ou aux systèmes de basses dimensions. Il est aussi considéré comme une approximation pour des basses énergies où la matrice T globale s'annule pour des hautes énergies de diffusion ($k \gg \frac{1}{a}$). Afin de corriger cette approximation, on peut lui adjoindre un *cutoff* ultra violet ($k=1/a$). On verra par la suite que les résultats finaux ne dépendent pas de la valeur précise de k qui peut être pris infini. En fait, l'approximation du potentiel de contact est d'autant meilleure qu'elle est appliqué à T_{2b} et non pas $V(r)$. Bien que le résultat de l'équation (III-7) a été établi pour la matrice T dans la limite homogène, nous supposons que le potentiel de contact peut également être utilisé pour calculer les éléments de la matrice T_{2b} , dans le cas des gaz piégés.

3- La matrice T à N corps

Pour un système de bosons condensés en interaction, les collisions particule-particule se produisent en présence des condensats et elles sont décrites par la matrice T à N particules. Dans cette section, nous définissons cette matrice T et nous la relierons à la matrice T à deux corps. La matrice T à N corps, $T_{mb}(r, z)$, qui convient ici est définie par l'équation de Lippmann-Schwinger [33]:

$$T_{mb}(r, z) = V + \sum_{pq \neq 0} V |pq\rangle^{sp} \frac{(1+n_p+n_q)}{z - (\varepsilon_p + \varepsilon_q^s)} {}^{sp} \langle pq | T_{mb}(r, z) \quad (\text{III-8})$$

Où z est un paramètre complexe, ε_p , et n_p , sont l'énergie et la population des quasi particules. Nous notons, toutefois, que les états intermédiaires $|pq\rangle^{sp}$ correspondent aux fonctions d'ondes relatives à une particule. Pour un gaz piégé, la définition de l'équation (III-8) ne s'applique qu'à la limite des hautes énergies où les fonctions d'onde relatives à une particule et à une quasi particule sont identiques. La matrice T à N particules décrit les collisions de deux particules en présence d'un champ moyen condensé, ainsi que la population thermique des quasi particules. En comparaison, les équations (III-2) et (III-8) montrent que les deux effets de l'environnement sont inclus. Tout d'abord, les états intermédiaires de la collision peuvent être occupés et on dit qu'il y a une augmentation de la diffusion dans et au delà de ces niveaux d'énergie qui sont pondérés par le facteur :

$$(1+n_p+n_q) = (1+n_p)(1+n_q) - n_p n_q \quad (\text{III-9})$$

En second, l'existence des condensats d'énergie moyenne et des populations des états intermédiaires correspond aux quasi particules plutôt qu'aux particules. Le caractère complet des quasi particules des états intermédiaires n'est pas pris en compte dans la matrice T à N particules de l'équation (III-8). La matrice T, la plus générale inclut les fonctions d'onde des quasi particules qui ont été discutées par Bijlsma et Stoof [38]. Elle est analogue à celle de l'équation (III-8) qui apparaît au dernier ordre de ce calcul. Pour donner une relation entre ces deux matrices T à deux et à N particules, nous réécrivons $T_{mb}(r, z)$ en termes de $T_{2b}(r, z)$. Pour cela revenons à l'équation (III-2) et mettons celle-ci sous la forme suivante :

$$T_{2b}(r, z) = V + \sum_{pq} T_{2b}(r, z) |pq\rangle^{sp} \frac{1}{z - (\varepsilon_p^{sp} + \varepsilon_q^{sp})} {}^{sp} \langle pq | V \quad (\text{III-10})$$

En substituant cette expression dans l'équation (III-8) cela donne :

$$T_{mb}(r, z) = T_{2b}(r, \bar{z}) + \sum_{pq \neq 0} T_{2b}(r, \bar{z}) |pq\rangle^{sp} \frac{(1+n_p+n_q)}{z - (\varepsilon_p + \varepsilon_q^s)} {}^{sp} \langle pq | T_{mb}(r, z) - \sum_{pq} T_{2b}(r, \bar{z}) |pq\rangle^{sp} \frac{1}{\bar{z} - (\varepsilon_p^{sp} + \varepsilon_q^{sp})} {}^{sp} \langle pq | T_{mb}(r, z) \quad (\text{III-11})$$

Où $\bar{z} = 2\varepsilon_0^{sp}$. Ce résultat simplifie grandement le calcul de $T_{mb}(r, z)$ en termes des longueurs de diffusion des ondes s . En outre, même le développement de Born de $T_{2b}(r, z)$ et $T_{mb}(r, z)$ en termes de $V(r)$ est insuffisant à basse énergie, un développement de $T_{mb}(r, z)$ en termes de $T_{2b}(r, z)$ basé sur l'équation (III-11) devrait être une bonne approximation pour un gaz dilué près de son point critique.

a- Interprétation de \tilde{m}_{ij}

Dans cette section, nous discutons l'interprétation physique de \tilde{m}_{ij} , du fait qu'elle est considérée comme un terme essentiel dans l'équation de Gross Pitaevskii et les équations de Bogoliubov de Gennes respectivement. Elle contient la divergence ultra violette inspirée par le potentiel de contact qui est utilisé comme une approximation du potentiel inter atomique. Nous allons montrer que ce terme modifie la description des

collisions des particules et introduit la matrice T à N particules définie ci-dessus. La discussion de cette section est basée sur le cas homogène bien que les résultats s'appliquent aussi aux gaz piégés.

Il est néanmoins préférable de l'exprimer en fonction de la matrice d'interaction, les énergies et les populations des quasi particules. Ainsi, à haute énergie, on obtient :

$$\tilde{m}_{ij} \approx \frac{(1 + n_i + n_j)N_0 \langle ij | V_{sy} | 00 \rangle}{-(\varepsilon_i + \varepsilon_j)} \quad (\text{III-12})$$

Ou nous avons utilisé la forme quadratique de l'équation (II-14) pour M_{ij} du chapitre II.

Dans la limite homogène, ce résultat peut être calculé à tous les ordres de l'équation de Lippmann-Schwinger pour $T_{mb}(r, z)$ car les équations de BdG qui déterminent \tilde{m}_{ij} peuvent être résolus analytiquement. Dans ce cas pour tout i, j nous obtenons le résultat suivant :

$$\tilde{m}_{ij} = \frac{(1 + n_i + n_j)M_{ij}}{-(\varepsilon_i + \varepsilon_j)} \quad (\text{III-13})$$

Les éléments M_{ij} s'écrivent sous la forme suivante :

$$M_{ij} = N_0 \langle ij | V_{sy} | 00 \rangle + \sum_{km \neq 0} \langle ij | V_{sy} | km \rangle \tilde{m}_{km} \quad (\text{III-14})$$

En substituant l'équation (III-13) dans l'équation (III-12), nous obtenons une expression pour la densité anormale en termes de la matrice T à N particules :

$$\tilde{m}_{ij} = \frac{(1 + n_i + n_j)N_0 \langle ij | T_{mb}(z=0) | 00 \rangle}{-(\varepsilon_i + \varepsilon_j)} \quad (\text{III-15})$$

L'interprétation de la densité anormale est basée sur l'introduction de la matrice T à N particules dans la description des collisions condensats-condensats de l'EGPG et dans les équations BdG des éléments non diagonaux. Les résultats des équations (III-12), (III-14) et (III-15) reliant \tilde{m}_{ij} , M_{ij} et $T_{mb}(r, z)$ sont exactes dans la limite homogène et s'appliquent pour tout potentiel d'interaction et pour toutes les équations BdG. La seule restriction est que les matrices L et M ne dépendent pas explicitement de l'énergie de tous les modes des quasi particules.

4- La divergence ultra violette

Le fait que la divergence ultra violette qui apparaît dans la sommation sur \tilde{m}_{ij} par l'introduction du potentiel de contact, et le fait que cette quantité introduite des corrections à la matrice T, prouve qu'il existe une relation entre cette divergence et la matrice T. Ce qui nous laisse à réfléchir à la question suivante : pourquoi de telles divergences se produisent ? Comme nous l'avons discuté ci dessus, le potentiel de contact est vraiment une bonne approximation et on devrait travailler avec T_{2b} plutôt qu'avec V (V est le potentiel de contact). Il existe en fait des corrections sur \tilde{m}_{ij} même dans la limite extrême d'un gaz dilué et elles correspondent à la contribution de cette matrice T. Il est donc incorrect d'utiliser le potentiel de contact avec l'expression complète de \tilde{m}_{ij} , car cela équivaut à un double comptage des effets de diffusion. Nous montrerons dans la section suivante que l'utilisation correcte du potentiel de contact comme une approximation pour T_{2b} évite ce double comptage et conduit directement à la renormalisation de \tilde{m}_{ij} . La matrice T à deux particules est décrite par une quantité calculable, à savoir la longueur de diffusion de l'onde s. Les équations (III-14) et (III-15) montrent que les éléments de matrice $\langle ij | T_{mb}(z=0) | 00 \rangle$ peuvent être écrits en termes de la densité anormale et du potentiel d'interaction V. Cependant, l'équation (III-11) montre que T_{mb} peut aussi être exprimée en termes de T_{2b} . La comparaison de l'équation (III-15) montre que, pour

$z=0$, le second terme du membre de droite de l'équation (III-11) peut s'écrire en termes de \tilde{m}_{ij} , pour $\bar{z} = 2\varepsilon_0^{sp}$, le terme final peut être écrit en termes de limites à deux particules de \tilde{m}_{ij} ($n_p \rightarrow 0, \varepsilon_p \rightarrow \varepsilon_p^{sp} - \varepsilon_0^{sp}$). Nous avons alors deux expressions pour les éléments de matrice $\langle ij|T_{mb}(z=0)|00\rangle$ qui sont :

$$\begin{aligned} N_0 \langle ij|T_{mb}(z=0)|00\rangle &= N_0 \langle ij|V_{sy}|00\rangle + \sum_{km \neq 0} \langle ij|V_{sy}|km\rangle \tilde{m}_{km} \\ &= N_0 \langle ij|T_{2b}(2\varepsilon_0^{sp})|00\rangle + \sum_{km \neq 0} \langle ij|T_{2b}(2\varepsilon_0^{sp})|km\rangle \tilde{m}_{km}^R \end{aligned} \quad (III-16)$$

Ou \tilde{m}_{km}^R est la densité anormale renormalisée. Elle s'écrit comme :

$$\tilde{m}_{ij}^R = \tilde{m}_{ij} - \frac{N_0^{sp} \langle ij|T_{mb}(z=0)|00\rangle}{2\varepsilon_0^{sp} - (\varepsilon_i^{sp} + \varepsilon_j^{sp})} \quad (III-17)$$

La renormalisation de \tilde{m}_{ij} supprime les effets de haute énergie et conduit à une expression finie dans l'équation de Gross Pitaevskii et dans les équations BdG. Le résultat de l'équation (III-16) donne une justification directe pour le remplacement de V par T_{2b} dans les éléments de matrice d'interaction et montre que cela doit être accompagné par la renormalisation de la densité anormale. L'équation (III-16) montre également que cette procédure est valable pour tous les ordres de l'équation de Lippmann-Schwinger et il n'est pas basé sur l'approximation de Born. C'est important car l'approximation de Born ne devrait pas être valable pour la diffusion à basses énergies. Malheureusement, cet argument n'est pas suffisant. C'est parce que la relation entre \tilde{m}_{ij} et la matrice T à N particules que nous avons utilisées est exacte seulement dans la limite homogène. En outre, l'argument ne s'applique qu'aux éléments non diagonaux de la forme $\langle ij|V_{sy}|00\rangle$.

Revenons à l'hamiltonien initial de l'équation (II-1) et divisons les états de base d'une particule, $\varphi(r)$, en deux régions, une région de basse énergie 'Low' et une région de haute énergie 'High'. Dans le sous-espace généré par la première région, les interactions entre les particules peuvent être significatives et la technique des quasi particules que nous avons discutée dans les chapitres précédents est nécessaire. Dans la région des hautes énergies l'effet d'interaction est petit et est caractéristique du temps d'échelle de l'évolution qui est rapide comparé aux basses énergies. Nous remplaçons le potentiel d'interaction entre deux particules à basse énergie avec une interaction effective qui a la même forme que celle de la matrice T à deux particules, l'hamiltonien initial de l'équation (II-1) sera alors plus efficace pour les calculs qui se suivent. Écrivons-le, dans le sous espace de basse énergie :

$$H_{eff} = \sum_{ij}^{Low} H_{ij}^{sp} a_i^+ a_j + 1/2 \sum_{ijkm}^{Low} \langle ij|T_H|km\rangle a_i^+ a_j^+ a_k a_m \quad (III-18)$$

La restriction de la matrice T à deux particules T_H qui décrit les interactions à basse énergie est définie par Lippmann-Schwinger comme :

$$T_H = V + \sum_{pq}^{High} V|pq^{sp}\rangle \frac{1}{-(\varepsilon_p^{sp} + \varepsilon_q^{sp})} {}^{sp} \langle pq|T_H \quad (III-19)$$

Celle ci est l'expression usuelle pour la matrice T à deux particules. Tous les résultats précédents restent valables en utilisant les substitutions :

$$\langle ij|V_{sy}|km\rangle \rightarrow \langle ij|T_H|km\rangle \text{ et } \sum \rightarrow \sum^{Low} \quad (III-20)$$

Puisque le hamiltonien maintenant a un *cuttoff* explicite lié aux hautes énergies, le problème de la divergence ultra violette est remplacé par le fait que les quantités physiques peuvent dépendre du *cuttoff*. La seconde

étape de cette procédure est de remplacer la matrice T restreinte T_H avec la matrice globale T à deux particules de (III-2). En faisant ce changement on aura :

$$T_{2b}(z) = T_H + \sum_{pq}^{Low} T_U |pq\rangle^{sp} \frac{1}{z - (\varepsilon_p^{sp} + \varepsilon_q^{sp})} \langle pq|T_{2b}(z) \rangle \quad (III-21)$$

L'importance de ce résultat est que T_H doit être approximativement égale à T_{2b} pour un système où la densité et la température sont basses. Dans ce cas le second terme de l'équation (III-21) doit être petit comparé avec le premier, et le développement de T_H en termes de T_{2b} doit être valable. Nous introduisons la matrice T globale par l'écriture de l'équation (III-22) en second ordre de l'approximation de Born ce qui donne :

$$T_H \approx T_{2b}(z) - \sum_{pq} T_{2b}(z) |pq\rangle^{sp} \frac{1}{z - (\varepsilon_p^{sp} + \varepsilon_q^{sp})} \langle pq|T_{2b}(z) \rangle \quad (III-22)$$

La contribution du premier terme est de remplacer T_H avec $T_{2b}(z)$ dans tous les éléments de matrice d'interaction. La renormalisation revient alors à l'addition et à la soustraction du second terme de l'équation (III-22). L'addition de cette contribution donne une bonne approximation de T_{2b} dans les éléments de matrice du premier ordre tandis que la soustraction des termes d'ordre élevé renormalisé assure que les effets des deux particules ne sont pas doublement comptés. Puisque la théorie est maintenant bien définie dans la limite des hautes énergies, toutes les sommations sont convergentes et elles peuvent être alors étendues à l'infini. Quoique cette procédure soit valable mathématiquement pour toute valeur de z , les valeurs physiques convenables sont celles qui sont introduites naturellement par \tilde{m}_{ij} dans les deux limites. Dans ce cas nous avons $\varepsilon_p \rightarrow \varepsilon_p^{sp} - \varepsilon_0^{sp}$ ainsi l'équation (III-12) montre que dans les éléments matriciels $\langle ij|T_{2b}(z)|00\rangle$ nous devons avoir $z = \varepsilon_p^{sp} + \varepsilon_0^{sp}$. Pour les éléments matriciels d'ordre élevé, la valeur z doit être prise égale à l'énergie limite des deux particules correspondant au processus de collision. Nous pouvons dire que c'est cette matrice T qui apparaît dans la théorie, en principe, que devons calculer tous ces éléments matriciels $T_{2b}(z)$ d'une façon explicite. Cela est difficile en pratique, et nous supposons que la matrice T pour un piège harmonique peut être remplacée par le potentiel de contact.

a- Méthodes exactes

Morgan a utilisé la formulation suivante [33]. Il a commencé par définir l'expression explicite de \tilde{m}_{ij}^{sp} :

$$\tilde{m}_{ij}^{sp} = \frac{N_c \langle ij|T_{2b}(2\varepsilon_0^{sp})|00\rangle}{2\varepsilon_0^{sp} - (\varepsilon_i^{sp} + \varepsilon_j^{sp})} \quad (III-23)$$

\tilde{m}_{ij}^{sp} correspond à la matrice T à deux particules, qui représente une limite perturbative de \tilde{m}_{ij} . Il écrit la densité anormale renormalisée, \tilde{m}_{ij}^R , comme :

$$\sum_{ij \neq 0} |ij\rangle \tilde{m}_{ij}^R \equiv \sum_{ij \neq 0} |ij\rangle \tilde{m}_{ij} - \sum_{ij \neq 0} |ij\rangle^{sp} \tilde{m}_{ij}^R \quad (III-24a)$$

Selon la notation suivante : dans la limite homogène $|ij\rangle = |ij\rangle^{sp}$, l'équation (III-24a) se réduit à :

$$\tilde{m}_{ij}^R \equiv \tilde{m}_{ij} - \tilde{m}_{ij}^R \quad (III-24b)$$

En utilisant la représentation position, elle devient :

$$\tilde{m}_i^R(r) \equiv \tilde{m}(r) - \tilde{m}^R(r) \quad (III-24c)$$

Avec

$$\tilde{m}^R(r) = N_c g \sum_{ij} \varphi_i^{sp}(r) \varphi_j^{sp}(r) \frac{\int d^3 r' \varphi_i^{sp*}(r') \varphi_j^{sp}(r') \varphi_0^2(r')}{2\varepsilon_0^{sp} - (\varepsilon_i^{sp} + \varepsilon_j^{sp})} \quad (\text{III-25})$$

Ces définitions permettent d'obtenir l'équation de Gross Pitaevskii généralisée sous une forme renormalisée, où la sommation réduite \sum^{Low} est remplacée par une somme sur tous les niveaux car \tilde{n}_{ij} et \tilde{m}_{ij}^R sont négligeables au dessus du *cutoff*. Les valeurs z dans le terme \tilde{n}_{ij} sont calculées (appendice D). Cette forme de l'équation de Gross Pitaevskii ne contient pas de divergences UV, même si le potentiel de contact est utilisé pour T_{2b} . Notons ici que les fonctions d'onde $\varphi_0(r)$ sont solutions de l'EGP ordinaire :

$$(T + V_{trap}(r) + N_c g |\varphi_0(r)|^2) \varphi_0(r) = \mu \varphi_0(r) \quad (\text{III-26})$$

Et que les fonctions $\varphi_i(r)$ et $\varphi_j(r)$ vérifient :

$$(T + V_{trap}(r) + N_c g |\varphi_0(r)|^2) \varphi_i(r) = \varepsilon_i \varphi_i(r) \quad (\text{III-27})$$

Par contre Hutchinson [5] a proposé une autre formulation pour la renormalisation de la densité anormale. Cette formulation consiste à insérer la matrice T à N particules dans les termes diagonaux en remplaçant les éléments de matrice $\langle 0i | T_{2b} | j0 \rangle$ par $\langle 0i | T_{mb} | j0 \rangle$. Elle est aussi équivalente à l'hamiltonien effectif de Bijlsma et Stoof [38]. La matrice T à deux particules est approchée par un potentiel de contact dans la limite des basses énergies. Les éléments matriciels diagonaux de T_{mb} s'écrivent :

$$\langle 0i | T_{mb} | j0 \rangle = \int d^3 r \varphi_i^*(r) \varphi_j(r) T_{mb}(r) |\varphi_0(r)|^2 \quad (\text{III-28})$$

En écrivant l'équation (III-28) dans la représentation position cela donne :

$$\begin{aligned} N_c \int d^3 r \varphi_i^*(r) \varphi_j^*(r) T_{mb}(r) \varphi_0^2(r) &= \int d^3 r \varphi_i^*(r) \varphi_j^*(r) \left[N_c g \varphi_0^2(r) + g \tilde{m}^R(r) \right] \\ &= N_c \int d^3 r \varphi_i^*(r) \varphi_j^*(r) g \left[1 + \frac{\tilde{m}^R(r)}{N_c \varphi_0^2(r)} \right] \varphi_0^2(r) \end{aligned} \quad (\text{III-29})$$

Cela revient à remplacer g par $T_{mb}(r)$:

$$T_{mb}(r) = g \left[1 + \frac{\tilde{m}^R(r)}{N_c \varphi_0^2(r)} \right] \quad (\text{III-30})$$

Ainsi, la théorie se divise en deux approches (GHFB1) et (GHFB2), dans la première approche (GHFB1), les collisions restent décrit par g de la matrice T à deux particules, alors que dans la seconde approche (GHFB2) les effets à N particules sont introduits par le remplacement de g avec $T_{mb}(r)$. Les deux théories GHFB1 et GHFB2 peuvent donc se résumer par l'équation suivante qui n'est autre que celle de Gross Pitaevskii déjà décrite au chapitre précédent :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_0(r) + V_{trap}(r) + N_c T_{mb}(r) |\varphi_0(r)|^2 \varphi_0(r) + 2g \tilde{n}(r) \varphi_0(r) = \mu \varphi_0(r) \quad (\text{III-31})$$

La théorie GHFB1 correspond à poser $g = g_{ex}$, tandis que la théorie GHFB2 correspond à prendre $g_{ex} = T_{mb}(r)$. Notons qu'il peut y avoir des difficultés numériques dans la mise en œuvre de la

théorie GHFB2 car les équations de Bogoliubov de Gennes contiennent le terme $2N_c \left[1 + \frac{\tilde{m}^R(r)}{N_c \phi_0^2(r)} \right] \tilde{n}(r)$, qui ne peut pas être bien défini au bord du condensat. Un tel problème n'apparaît pas dans la théorie GHFB1 parce que dans ce cas $T_{mb}(r)$ est toujours multipliée par $\phi_0^2(r)$.

Cette renormalisation revient à négliger 1 devant $(2f_B(E_k) + 1)$ dans l'expression de la densité anormale du chapitre II, ce qui nous permet d'écrire l'expression de $\tilde{m}(r)$ dans la limite des hautes énergies comme :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \tilde{m}(r) = \lim_{k \rightarrow \infty} \int dk u_k v_k (2f_B(E_k) + 1) \approx \lim_{k \rightarrow \infty} \int dk u_k v_k (1) \quad (\text{III-32})$$

Cette formulation rend la théorie HFB non-divergente, mais elle laisse toujours un gap dans le spectre d'excitation. Ce gap est dû à l'incohérence dans le traitement des interactions entre les particules [32]. Il a retenu la nature du gap des équations HFB-Popov, qui négligent $\tilde{m}(r)$ dans les deux équations de Gross-Pitaevskii généralisées et les équations HFB, par la modification de l'interaction g par [33] :

$$g \rightarrow g \left(1 + \frac{\tilde{m}(r)}{n_c(r)} \right) \quad (\text{III-33})$$

La forme de cette équation a été déjà discutée par Stoof [38] et Proukakis [39] et est équivalente à la limite des basses énergies de la matrice T à N particules pour un système homogène [56]. De toute façon, cette expression (III-38) se calcule d'une façon auto cohérente dans la partie numérique (dernier chapitre). En effet, elle est considérée comme un potentiel efficace qui traite les interactions entre particules au-delà de l'approximation de Popov.

b- Méthodes heuristiques

Traitement semi-classique

Pour simplifier la formulation dans cette section, Gies et *al.* [57] ont introduit un traitement semi-classique basé sur l'écriture de la densité anormale sous la forme d'une somme de trois quantités $\tilde{m}(r)$, $\tilde{m}_1(r)$ et $\tilde{m}_2(r)$:

$$\tilde{m}^R(r) = \tilde{m}(r) + \tilde{m}_1(r) - \tilde{m}_2(r) \quad (\text{III-34})$$

Pour le calcul du premier terme \tilde{m} , ils ont utilisé l'expression de la densité anormale vue au chapitre II au dessous d'un *cutoff* lié à l'énergie qui se détermine par une différence entre les niveaux d'énergies $E(n)$ et $E(n+1)$.

Pour la seconde partie, \tilde{m}_1 , ils l'ont défini par :

$$\tilde{m}_1(r) = \int_{\mathcal{E}_{cut}}^{\infty} dE (\tilde{m}_{sc}(r) - \tilde{m}_r(r)) \quad (\text{III-35})$$

Cette quantité contient la contribution des niveaux d'énergies au dessus du *cutoff* \mathcal{E}_{cut} , donné par la soustraction du terme renormalisé \tilde{m}_r du terme anormal semi classique \tilde{m}_{sc} .

Le troisième terme, \tilde{m}_2 , est la renormalization de \tilde{m} . Les deux termes \tilde{m}_1 et \tilde{m}_2 sont calculés dans l'approximation semi classique.

Pour le terme semi classique \tilde{m}_{sc} , ils ont utilisé la même expression que pour la densité non condensée dans le cas à deux dimensions [58-59]. L'expression non renormalisée pour la densité anormale s'écrit comme:

$$\tilde{m}_{sc}(r) = -\frac{1}{2\pi} \left[\frac{gn_c(r)(1+2f_B(E))}{\sqrt{E^2 - (gn_c(r))^2}} \right] \theta(E - \sqrt{(V_{trap} - \mu + 2gn)^2 - (gn_c)^2}) \quad (\text{III-36})$$

Où θ est la fonction de Heaviside.

Le terme renormalisé \tilde{m}_r se calcule dans la limite où il n'y a pas de condensat où l'énergie du quasi particules sera remplacée par l'énergie relative à une particule :

$$\tilde{m}_r(r) = -\frac{1}{2\pi} \frac{gn_c(r)}{E + \mu} \quad (\text{III-37})$$

La partie \tilde{m}_1 :

$$\tilde{m}_1(r) = -\frac{1}{2\pi} \int_{\varepsilon_{cut}}^{\infty} dE gn_c(r) \left[\frac{(1+2f_B(E))}{\sqrt{E^2 - (gn_c(r))^2}} - \frac{1}{E + \mu} \right] \quad (\text{III-38})$$

Où la limite inférieure de l'intégrale est déterminée par la fonction de Heaviside θ et par l'énergie du *cutoff*.

$$E_{\min} = \max(\varepsilon_{cut}, \sqrt{(V_{trap} - \mu + 2gn)^2 - (gn_c)^2}) \quad (\text{III-39})$$

Puisque la somme dans $\tilde{m}(r)$ a un *cutoff*, elle ne peut pas diverger. Elle contient la contribution de la limite des températures nulles et doit être renormalisée en retranchant de l'intégrale la quantité \tilde{m}_r au dessous du *cutoff*. \tilde{m}_2 s'écrit :

$$\tilde{m}_2(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\varepsilon_{cut}} dE \frac{gn_c(r)}{E + \mu} \quad (\text{III-40})$$

Pour l'évaluation de $\tilde{m}_1(r)$ ils ont utilisé l'approximation de Thomas Fermi où ils ont déterminé :

$$(T + V_{trap}(r) + gn_c(r))\varphi_0(r) = \mu\varphi_0(r) \quad (\text{III-41})$$

Dans la limite de Thomas Fermi : à T=0 l'équation (III-41) devienne :

$$(V_{trap}(r) + gn_c(r))\varphi_0(r) = \mu\varphi_0(r) \quad (\text{III-42})$$

La même procédure de calcul s'applique à \tilde{m}_2

$$(V_{trap}(r))\varphi_0(r) = (E + \mu)\varphi_0(r) \quad (\text{III-43})$$

Traitement quantique

Les procédés de renormalisation décrits précédemment présentent néanmoins l'inconvénient majeur de ne pas s'adapter aux calculs concrets dès que le nombre de particules dépasse quelques dizaines de milliers. En effet, Hutchison et al. [5] ont tout essayé pour résoudre GHFB pour N > 20000 mais n'y ont pas réussi (la renormalisation choisit est insuffisante). Tous les codes self consistants deviennent inefficaces pour de grands nombres de particules. La méthode du pseudo potentiel utilisé par Castin [40] consiste à écrire :

$$\tilde{m}(r) = -\lim_{r' \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r'} (r' \langle \tilde{\psi}(r'+r) \tilde{\psi}(r'-r) \rangle) \quad (\text{III-44})$$

qui doit être combinée à celle de Gies [57] pour reformuler le problème d'une façon mathématiquement plus consistant. En effet, on peut d'abord ajouter et retrancher à l'équation (III-44), la quantité $\tilde{m}(r)G_\mu^0(r)$, où

$G_\mu^0(r)$ est la fonction de Green associée à l'hamiltonien relatif à une particule définie au chapitre II. Elle s'écrit pour un potentiel chimique μ comme :

$$G_{\mu}^0(r, r') = \sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}^0(r+r')\varphi_{\alpha}^{0*}(r-r')}{\varepsilon_{\alpha}^0 - \mu} \quad (\text{III-45})$$

Où φ_{α}^0 est la fonction d'onde de l'oscillateur harmonique de l'hamiltonien relatif à une particule et $\varepsilon_{\alpha}^0 - \mu$ son énergie. En exprimant $\tilde{m}(r)$ en termes d'amplitude des quasi particules $u_{\alpha}(r)$ et $v_{\alpha}(r)$, on aboutit :

$$\tilde{m}(r) = -\lim_{r' \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r'} \left[r' \sum_{\alpha} (u_{\alpha}(r+r')v_{\alpha}^*(r-r')(1+2f_B(E_{\alpha})) - \tilde{m}(r) \frac{\varphi_{\alpha}^0(r+r')\varphi_{\alpha}^{0*}(r-r')}{\varepsilon_{\alpha}^0 - \mu}) + \tilde{m}(r)G_{\alpha}^0(r, r') \right] \quad (\text{III-46})$$

La somme n'est pas divergente, puisque la partie divergente de $\tilde{m}(r)$ s'annule avec le terme $\tilde{m}(r)G_{\mu}^0(r)$.

Ainsi, nous pouvons prendre la limite $r' \rightarrow 0$. D'un autre côté, la divergence du dernier terme est renormalisée par la méthode du pseudopotentiel, où nous choisissons la partie régulière de la fonction de Green G_{μ}^0 :

$$\lim_{r' \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r'} (r' G_{\mu}^0(r, r')) \equiv G_{\mu}^{0reg}(r) \quad (\text{III-47})$$

Finalement, nous pouvons écrire $\tilde{m}(r)$ sous la forme suivante:

$$\tilde{m}(r) = - \left[\sum_{\alpha} (u_{\alpha}(r)v_{\alpha}^*(r)(1+2f_B(E_{\alpha})) - \tilde{m}(r) \frac{|\varphi_{\alpha}^0(r)|^2}{\varepsilon_{\alpha}^0 - \mu}) + \tilde{m}(r)G_{\mu}^{0reg}(r) \right] \quad (\text{III-48})$$

Un moyen simple de calculer $G_{\mu}^{0reg}(r)$ est donné par la référence [40]. Ecrivons maintenant G_{μ}^0 en appliquant l'approximation de Thomas Fermi pour la somme sur les états correspondant aux énergies de l'oscillateur harmonique ε_{α}^0 au dessus de ε_{cut} :

$$G_{\mu}^{0reg}(r) = \sum_{\substack{\alpha \\ \varepsilon_{\alpha}^0 > \varepsilon_{cut}}} \frac{\varphi_{\alpha}^0(r)\varphi_{\alpha}^{0*}(r)}{\varepsilon_{\alpha}^0 - \mu} + \int_{\varepsilon_{cut}}^{+\infty} \left(-\frac{1}{2\pi} \right) \frac{n_c(r)}{\tilde{m}(r)\sqrt{E^2 - (gn_c(r))^2}} dE \quad (\text{III-49a})$$

Où ε_{cut} est déterminé par la différence des énergies $E(n)$ et $E(n+1)$, c'est-à-dire en tronquant la matrice hamiltonienne, en calculant les différences :

$$\Delta = |E(n+1) - E(n)| \quad (\text{III-49b})$$

Si cette différence (III-49b) est inférieure à une précision alors le *cutoff* est égale à $E(n)$ ou $E(n+1)$ sinon on recalcule cette différence à nouveau.

En évaluant l'intégrale sur E et en sommant sur tous les α , nous obtenons :

$$G_{\mu}^{0reg}(r) = \sum_{\substack{nl \\ \varepsilon_{nl}^0 > \varepsilon_{cut}}} \frac{(2l+1)R_{nl}^2(r)}{4\pi(\varepsilon_{nl}^0 - \mu)} + \int_{\varepsilon_{cut}}^{+\infty} \left(-\frac{1}{2\pi} \right) \frac{n_c(r)}{\tilde{m}(r)\sqrt{E^2 - (gn_c(r))^2}} dE \quad (\text{III-50})$$

Où les $R_{nl}(r)$ sont les fonctions radiales de l'oscillateur harmonique.

Finalement l'expression renormalisée s'écrit :

$$\tilde{m}^R(r) = - \sum_{\substack{nl \\ \varepsilon_{nl}^0 > \varepsilon_{cut}}} \frac{(2l+1)}{4\pi} u_{nl}(r)v_{nl}(r)(1+2f_B(E_{nl})) - \frac{1}{2\pi} \int_{\varepsilon_{cut}}^{+\infty} dE \frac{n_c(r)}{\sqrt{E^2 - (gn_c(r))^2}} \quad (\text{III-51})$$

5. La divergence infrarouge

Nous donnerons ici un petit détail sur ce point du fait qu'on travaille avec des hautes énergies et qu'on est dans un espace direct. Alors, cette difficulté qui apparaît pour ce système physique qui est la divergence

infrarouge persiste dans l'espace des k et plus précisément dans les gaz homogènes. De même, pour un gaz piégé ce problème de divergence infrarouge correspond à une dépendance de la densité anormale de la fréquence du piège. Son origine mathématique provient du fait que les amplitudes des quasi particules prennent la forme suivante quand k tend vers zéro:

$$\lim_{k \rightarrow 0} u_k \rightarrow \frac{1}{k} \quad (\text{III-52a})$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} v_k \rightarrow \frac{1}{k} \quad (\text{III-52b})$$

L'énergie des quasi particules a une forme quadratique en u et v et seule leur combinaison deviendrait finie quand k tend vers zéro, en effet :

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \quad (\text{III-53})$$

Selon la description de Bogoliubov, la résolution des équations BdG assure que les énergies de quasi particules ne dépendent que de cette combinaison particulière et sont donc bien définies. Si nous modifions ces équations tout en les traitant à travers la théorie des perturbations ordinaires, alors nous aurons des changements au niveau des énergies qui auront encore une forme quadratique en u et v , mais qui ne sont pas nécessairement proportionnel à $u_k^2 - v_k^2$.

6- Conclusion

En conclusion, nous avons présenté les différentes méthodes de renormalisation de la densité anormale. En particulier nous avons étudié les méthodes exactes, qui traitent les interactions atome condensé-nuage thermique, et les méthodes heuristiques inspirées des travaux de Morgan, Hutchinson, Gastin et *al.* [5, 33, 40]. Du fait qu'ils constituent les outils essentiels pour lever cette indétermination de la densité anormale. Maintenant que nous avons toute les équations possibles nous allons les convertir en expressions numériques à l'aide des algorithmes inspiré par des programmes numériques ou on doit opérer par itérations jusqu'à convergence ce qui est l'objectif du chapitre suivant.

Chapitre IV Résultats et discussions

Plan du chapitre

- 1- Résultats numériques
 - 1-1 Méthodes et algorithmes numériques
 - a- Avec l'approximation de Popov
 - b- Au delà de l'approximation de Popov
 - c- Les formulations mathématiques
 - 1-2 Etapes du calcul
 - 1-3 Le schéma des itérations pour des températures finies
 - 1-4 Programme numérique
 - 1-5 Organigramme
- 2- Discussion des résultats
 - 2-1 Avec l'approximation de Popov
 - a- La densité condensée et la densité non condensée
 - b- La fraction condensée et la fraction non condensée
 - c- Les excitations
 - 2-2 Au-delà de l'approximation de Popov
 - a- La densité condensée, la densité non condensée et la densité anormale
 - b- La fraction condensée
 - c- Le rayon du condensat
 - d- Le rapport d'aspect
 - e- La température critique
 - f- Les excitations
 - g- Le potentiel chimique
- 3- Conclusion

1- Résultats numériques

Dans cette partie, nous exposons l'essentiel de nos résultats numériques dans l'approximation de Popov [30,35] où la densité anormale est pratiquement nulle, ensuite nous effectuons les calculs au-delà de l'approximation de Popov où la densité anormale est prise en compte. Nous montrons ainsi la façon dont nous avons procédé pour résoudre le système d'équations couplées HFB BdG [5,33]. Nous les comparons nos résultats avec ceux déjà obtenus par Hutchinson et *al.* [5] et aussi avec les données expérimentales de JILA et MIT [5-9].

Rappelons d'abord les équations HFB et BdG pour le cas d'un potentiel harmonique à symétrie sphérique. Le cas anisotrope fera l'objet d'un travail futur.

1-1 Méthodes et algorithmes numériques

a- Avec l'approximation de Popov

La résolution des équations de Hartree Fock pour un système d'atomes bosoniques confinés dans un potentiel à symétrie sphérique, $V = V_{trap}(r)$ est basée sur le principe variationnel décrit au chapitre I où l'on détermine la meilleure fonction d'onde qui minimise l'énergie du système. Le calcul s'effectue à température finie. Nous allons montrer comment l'on va procéder numériquement. Nous commencerons par la solution de l'équation de Gross Pitaevskii standard [33,60]. Nous imposons à la fonction d'onde condensée d'être réelle. Nous allons néanmoins conserver la distinction du mode du condensat et de son complexe conjugué dans une nouvelle notation. Il est convenable de définir une fonction radiale réduite du condensat, $u(r)$, qu'il ne faut pas la confondre avec le mode $u_i(r)$ des quasi particules.

Nous appelons $n_c(r)$ la densité radiale laquelle est définie par :

$$\varphi_0(r) = \left(\frac{N_c}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{u(r)}{r}, \quad (\text{IV-1})$$

Les équations de base qui doivent être résolues sont non couplées. En utilisant le formalisme de Dirac ces équations s'écrivent :

$$(h_0 - \mu)^2 |\psi_i^+\rangle + 2gn_c(r)(h_0 - \mu) |\psi_i^+\rangle = E_i^2 |\psi_i^+\rangle \quad (\text{IV-2})$$

$$(h_0 - \mu)^2 |\psi_i^-\rangle + 2(h_0 - \mu)gn_c(r) |\psi_i^-\rangle = E_i^2 |\psi_i^-\rangle \quad (\text{IV-3})$$

Où $|\psi_i^+\rangle$ et $|\psi_i^-\rangle$ sont reliées par l'équation suivante :

$$(h_0 - \mu) |\psi_i^+\rangle = E_i |\psi_i^-\rangle \quad (\text{IV-4})$$

Où h_0 est l'hamiltonien à une particule :

$$h_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{trap}(r) + g(n_c(r) + 2\tilde{n}(r)) \quad (\text{IV-5})$$

$$[h_0 - \mu] |\varphi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\varphi_\alpha\rangle \quad (\text{IV-6})$$

Les $|\varphi_\alpha\rangle$ sont les états propres et les ε_α leurs énergies propre. L'utilisation de ce hamiltonien (IV-6) consiste à connaître facilement les kets propres φ_α et les énergies propres ε_α en se reposant sur l'analyse des cas limites :

- Pour des constantes de couplages g pratiquement nulles, on rencontre le cas de l'oscillateur harmonique.
- Pour des constantes de couplages g assez fortes de telle manière que le terme énergie cinétique deviendrait négligeable : on tend vers la limite de Thomas Fermi.

De toute façon, ces kets propres φ_α forment une base ce qui va nous permettre d'y développer ψ_i^+ et ψ_i^- :

$$|\psi_i^+\rangle = \sum_{\alpha \neq 0} c_\alpha^{(i)} |\varphi_\alpha\rangle \quad (\text{IV-7})$$

$$|\psi_i^-\rangle = \sum_{\alpha \neq 0} d_\alpha^{(i)} |\varphi_\alpha\rangle \quad (\text{IV-8})$$

Où nous avons exclu les $|\varphi_0\rangle$ décrivant la partie condensée. Nous déduisons de l'équation (IV-4) la relation :

$$d_\alpha^{(i)} = \frac{\varepsilon_\alpha}{E_i} c_\alpha^{(i)} \quad (\text{IV-9})$$

Nous substituons ce résultat dans l'équation, nous obtenons l'équation aux valeurs propres :

$$(h_0 - \mu)^2 |\psi_i^+\rangle + 2gn_c(r)(h_0 - \mu)|\psi_i^+\rangle = E_i^2 |\psi_i^+\rangle \quad (\text{IV-10})$$

En multipliant par le $\langle \varphi_\beta |$, nous obtenons :

$$\langle \varphi_\beta | \sum_\alpha c_\alpha^{(i)} (h_0 - \mu)^2 |\varphi_\alpha\rangle + \langle \varphi_\beta | \sum_\alpha c_\alpha^{(i)} 2gn_c(r)(h_0 - \mu) |\varphi_\alpha\rangle = \langle \varphi_\beta | E_i^2 \sum_\alpha c_\alpha^{(i)} |\varphi_\alpha\rangle \quad (\text{IV-11a})$$

$$\sum_\alpha c_\alpha^{(i)} \varepsilon_\alpha^2 \delta_\alpha^\beta + \sum_\alpha c_\alpha^{(i)} 2g\varepsilon_\alpha \langle \varphi_\beta | n_c(r) |\varphi_\alpha\rangle = E_i^2 c_\beta^{(i)} \quad (\text{IV-11b})$$

$$\sum_\beta (M_{\alpha\beta} + \varepsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta}) \varepsilon_\beta c_\beta^{(i)} = E_i^2 c_\alpha^{(i)} \quad (\text{IV-11c})$$

Où la matrice $M_{\alpha\beta}$ est définie comme :

$$M_{\alpha\beta} = 2g \int d^3r \varphi_\alpha^*(r) n_c(r) \varphi_\beta(r) \quad (\text{IV-12})$$

Il ne faut pas la confondre avec celle de M_{ij} définie précédemment au chapitre II.

L'équation (IV-12) peut être vue sous une forme symétrique par l'utilisation de la transformation suivante :

$$\omega^{(i)} = D^{1/2} c^{(i)} \quad (\text{IV-13})$$

Où D est une matrice diagonale :

$$D_{\alpha\beta} = \varepsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{IV-14})$$

Et l'équation (IV-11c) s'écrit alors :

$$(D^2 + D^{1/2} M D^{1/2}) \omega^{(i)} = E_i^2 \omega^{(i)} \quad (\text{IV-15})$$

La matrice $D^2 + D^{1/2} M D^{1/2}$ est hermitique en effet :

$$D^2 + D^{1/2} M D^{1/2} = D^{2+} + D^{1/2+} M + D^{1/2+} \quad (\text{IV-16})$$

Les valeurs propres E_i^2 sont donc réelles.

De plus, la matrice M+D est définie positive alors les énergies propres E_i sont positives. Nous passons aux amplitudes des quasi particules $(u_i(r), v_i(r))$ et nous déduisons leurs expressions :

$$\psi_i^\pm(r) = \frac{1}{2} (u_i(r) \pm v_i(r)) \quad (\text{IV-17a})$$

$$u_i(r) = \frac{1}{2} \sum_\alpha (1 + \frac{\varepsilon_\alpha}{E_i}) c_\alpha^{(i)} \varphi_\alpha(r) \quad (\text{IV-17b})$$

$$v_i(r) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\alpha}}{E_i}\right) c_{\alpha}^{(i)} \varphi_{\alpha}(r) \quad (\text{IV-17c})$$

Les amplitudes $(u_i(r), v_i(r))$ ne sont pas indépendantes puisque la normalisation de l'état impose qu'ils satisfassent la relation :

$$\int d^3r (u_i^*(r)u_i(r) - v_i^*(r)v_i(r)) = \delta_{ij} \quad (\text{IV-18})$$

De plus $(|u_i(r)|^2, |v_i(r)|^2)$ représentent des probabilités.

Nous substituons les relations de $(u_i(r), v_i(r))$ dans l'équation (II-5) pour l'hamiltonien quadratique du chapitre II, ce qui nous donne :

$$\sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{(i)*} c_{\alpha}^{(j)} = E_i \delta_{ij} \quad (\text{IV-19})$$

Cette équation (IV-19) se résout d'une manière self consistante avec le fait que l'équation (IV-15) est un problème aux valeurs propres.

Pour la détermination des différentes densités, nous avons utilisé le développement de la fonction d'onde en termes de fonctions radiales et de fonctions angulaires.

Ecrivons :

$$\begin{aligned} \varphi_{\alpha}(\vec{r}) &= \sum_{l=0} \sum_{m=-l} R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \\ &= \sum_{l=0} \sum_{m=-l} \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (\text{IV-20})$$

Les $Y_{lm}(\theta, \phi)$ sont des harmoniques sphériques et $R_{nl}(r)$ les fonctions radiales.

Les densités non condensées $\tilde{n}_1(r)$, à température finie, et $\tilde{n}_2(r)$, à température nulle, prennent la forme suivante :

$$\tilde{n}_1(r) = \frac{1}{8\pi} \sum_{vl} (2l+1) \left[\left| \sum_n c_n^{vl} R_{nl}(r) \right|^2 + \left| \sum_n d_n^{vl} R_{nl}(r) \right|^2 \right] f_B(E_{vl}) \quad (\text{IV-21})$$

et

$$\tilde{n}_2(r) = \frac{1}{16\pi} \sum_{vl} (2l+1) \left[\left| \sum_n (c_n^{vl} - d_n^{vl}) R_{nl}(r) \right|^2 \right] \quad (\text{IV-22})$$

Avec $f_B(E_{vl}) = \frac{1}{z^{-1} \exp \beta E_{vl} - 1}$ et $\beta = \frac{1}{k_B T}$. La fugacité z est donnée par $z^{-1} = 1 + N_c^{-1}$ (où N_c est

le nombre de particules condensées).

Leurs intégrales sur tout l'espace donnent :

$$\tilde{N}_1 = \frac{1}{8\pi} \sum_{vl} (2l+1) \left[\left| \sum_n c_n^{vl} \right|^2 + \left| \sum_n d_n^{vl} \right|^2 \right] f_B(E_{vl}) \quad (\text{IV-23})$$

$$\tilde{N}_2 = \frac{1}{16\pi} \sum_{vl} (2l+1) \left[\left| \sum_n (c_n^{vl} - d_n^{vl}) \right|^2 \right] \quad (\text{IV-24})$$

b- Au-delà de l'approximation de Popov

Pour généraliser le problème on ajoute la quantité $\tilde{m}(r)$ dans l'équation de Gross Pitaevskii ceci nous permettra de traiter toutes les corrélations possibles entre quasi particules. Son expression a été déjà déterminée au chapitre II. En utilisant l'expression (IV-20) et en se referant à l'appendice B, nous obtenons une expression analytique facile à manipuler numériquement :

$$\tilde{m}(r) = -\frac{1}{16\pi} \sum_{vl} (2l+1) \sum_n c_n^{vl} d_n^{vl} |R_{nl}(r)|^2 (1 + 2f_B(E_{vl})) \quad (IV-25)$$

Dont l'intégrale sur tout l'espace donne :

$$\tilde{M} = -\frac{1}{16\pi} \sum_{vl} (2l+1) \sum_n c_n^{vl} d_n^{vl} (1 + 2f_B(E_{vl})) \quad (IV-26)$$

Le formalisme est maintenant écrit sous une forme bien adaptée à la renormalisation.

c-Les formulations mathématiques

Nous écrivons les équations sous une forme adimensionnée, pour cela commençons par l'équation de Gross Pitaevskii et les équations de Bogoliubov de Gennes :

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dr^2} \right] + V_{trap}(r) + g \frac{N_c}{4\pi} \left| \frac{u(r)}{r} \right|^2 \right] u(r) = \mu u(r) \quad (IV-27)$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + V_{trap}(r) + 2g \frac{N_c}{4\pi} \left| \frac{u(r)}{r} \right|^2 \right] u_i(r) - g \frac{N_c}{4\pi} \left[\frac{u(r)}{r} \right]^2 v_i(r) = (\mu + E_i) u_i(r) \quad (IV-28)$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + V_{trap}(r) + 2g \frac{N_c}{4\pi} \left| \frac{u(r)}{r} \right|^2 \right] v_i(r) - g \frac{N_c}{4\pi} \left[\frac{u^*(r)}{r} \right]^2 u_i(r) = (\mu - E_i) v_i(r) \quad (IV-29)$$

Divisons le potentiel $V_{trap}(r)$ par $\hbar\omega$ et utilisons la longueur de l'oscillateur harmonique $d = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ comme unité de longueur, nous obtenons des variables adimensionnées :

$$\tilde{\mu} = \frac{\mu}{\hbar\omega}, \quad \tilde{V}_{trap}(r) = \frac{V_{trap}(r)}{\hbar\omega} \quad (IV-30)$$

$$\left[\left[-\frac{d^2}{2dr^2} \right] + \tilde{V}_{trap}(r) + \frac{a}{d} n_c(r) \right] u(r) = \tilde{\mu} u(r) \quad (IV-31)$$

$$\left[\left[-\frac{1d^2}{2dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \tilde{V}_{trap}(r) + \frac{a}{d} 2n_c(r) \right] \right] u_i(r) - \frac{a}{d} n_c(r) v_i(r) = (\tilde{\mu} + E_i) u_i(r) \quad (IV-32a)$$

$$\left[\left[-\frac{1d^2}{2dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \tilde{V}_{trap}(r) + \frac{a}{d} 2n_c(r) \right] \right] v_i(r) - \frac{a}{d} n_c(r) u_i(r) = (\tilde{\mu} - E_i) v_i(r) \quad (IV-32b)$$

Le formalisme est maintenant écrit sous une forme bien adaptée au traitement numérique.

1-2 Etapes du calcul

On étudie dans ce travail un gaz atomique de Rb dont les caractéristiques sont : la masse $m(^{87}\text{Rb}) = 1.44 \times 10^{-25} \text{ kg}$, la longueur de diffusion de l'onde $a = 5.82 \times 10^{-9} \text{ m}$ et la fréquence du piège $\omega = 2\pi \times 200 \text{ Hz}$ [5].

a- Le premier algorithme

1. Nous résolvons (IV-6), (IV-2) et (IV-3) pour un gaz sans interaction afin de déterminer $\varphi_0(r)$, $u_i(r)$, $v_i(r)$ et E_i .
2. Ces résultats sont alors réinjectés dans (IV-2) et (IV-3), avec, $g = 2.7 \cdot 10^{-3} (\hbar\omega)(a^3)$, ce qui donne $\varphi_0(r)$ et donc $n_c(r)$.
3. Les équations (IV-2) et (IV-3) sont maintenant résolues pour déterminer les nouvelles amplitudes $u_i(r)$, $v_i(r)$ et les énergies E_i et par conséquent les nouvelles valeurs des densités $\tilde{n}(r)$ et $\tilde{m}(r)$.
4. On cherche les valeurs de la fugacité z qui satisfont à la relation $N - \tilde{N} = \frac{z}{1-z}$ où $\tilde{N} = \int d^3r \tilde{n}(r)$ est calculée en intégrant l'équation (IV-21) et (IV-22).
5. Cette procédure est itérée d'une manière self consistante tout en imposant une condition liée à la densité non condensée : $\frac{\Delta(\tilde{n}_{new}(r) - \tilde{n}_{old}(r))}{\tilde{n}_{old}(r)}$ doit être inférieure à une certaine précision que nous prenons égale à 10^{-6} .

A chaque itération, le potentiel chimique est calculé par la relation $N\mu = N_c\mu_c + \tilde{N}\tilde{\mu}$, où μ_c et $\tilde{\mu}$ sont les potentiels chimiques associés respectivement aux atomes condensés et aux atomes non condensés. Cette relation est discutée en détail dans la référence [61].

1-3 Le schéma des itérations pour des températures finies

Nous utilisons les équations de Bogoliubov standard décrites au chapitre II. Alors en tenant compte de la distribution stationnaire de la densité et en se limitant au cas des états liés, nous déterminons la solution radiale réduite $u(r)$ de l'EGP (IV-31), son potentiel chimique μ et les amplitudes des quasi particules $(u_i(r), v_i(r))$ qui correspondent à l'énergie E_i . La première itération est de calculer la densité non condensée (IV-21) et (IV-22) et la densité anormale (IV-25). Nous insérons les expressions explicites (IV-27) pour les états liés des quasi particules dans les équations des densités. Puisque les énergies sont les mêmes pour tous les nombres quantiques azimutaux m ceci est justifié par la relation (B-17) (théorème d'addition pour les harmoniques sphériques). D'une manière identique que les condensats nous pouvons introduire les densités radiales $\tilde{n}_1(r)$ et $\tilde{n}_2(r)$. Les modes $(u_i(r), v_i(r))$ des quasi particules sont réels, alors toutes les densités calculées sont réelles et à symétrie sphérique. Nous calculons à nouveau le nombre de particules condensées :

$$N_c = N - \tilde{N} \quad (\text{IV-33})$$

Nous continuons notre procédure d'itération avec le calcul de la nouvelle fonction d'onde condensée radiale pour des densités données $\tilde{n}(r)$ et $\tilde{m}(r)$. L'équation de Gross Pitaevskii généralisée s'écrit :

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dr^2} \right] + V_{trap}(r) + \frac{g}{4\pi} [n_c(r) + 2\tilde{n}(r) + \tilde{m}(r)] \right] u(r) = \mu u(r) \quad (\text{IV-34})$$

Les nouveaux modes des quasi particules sont obtenus par l'équation de Bogoliubov standard en remplaçant $n_c(r)$ par sa valeur trouvée précédemment :

$$\left[\left[-\frac{1d^2}{2dr^2} \right] + \tilde{V}_{trap}(r) + \frac{a}{d} (n_c(r) + 2\tilde{n}(r) + \tilde{m}(r)) \right] u(r) = \tilde{\mu} u(r) \quad (\text{IV-35})$$

$$\left[\left[-\frac{1d^2}{2dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \tilde{V}_{trap}(r) + \frac{a}{d} (2n_c(r) + 2\tilde{n}(r)) \right] \right] u_i(r) - \frac{a}{d} (n_c(r) + \tilde{m}(r)) v_i(r) = (\tilde{\mu} + E_i) u_i(r) \quad (\text{IV-36a})$$

$$\left[\left[-\frac{1d^2}{2dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \tilde{V}_{trap}(r) + \frac{a}{d} (2n_c(r) + 2\tilde{n}(r)) \right] \right] v_i(r) - \frac{a}{d} (n_c(r) + \tilde{m}(r)) u_i(r) = (\tilde{\mu} - E_i) v_i(r) \quad (\text{IV-36b})$$

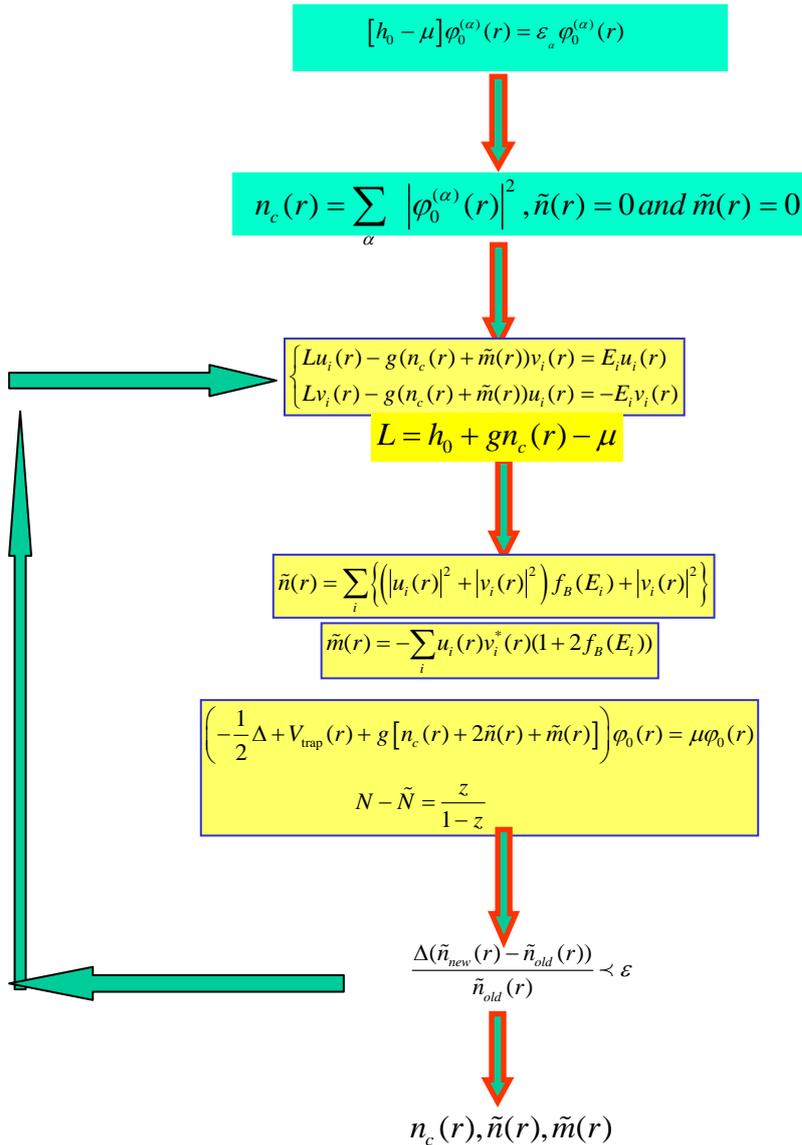
La solution des équations (IV-21), (IV-22) et (IV-25) permet alors de déterminer la nouvelle fonction condensée réduite. Nous arrêtons le calcul si le critère (5) est satisfait.

1-4 Programme numérique

Pour effectuer le calcul numérique, nous avons écrit deux programmes en Fortran 77. Un premier programme calcule la densité condensée par l'utilisation de l'équation de Gross Pitaevskii, le deuxième calcule les densités $\tilde{n}(r)$ et $\tilde{m}(r)$ d'une manière self consistante en se reposant sur les équations de Bogoliubov de Gennes. Tous ces programmes fournissent l'énergie fondamentale, les énergies d'excitation et les potentiels chimiques.

Nous commençons le calcul par un cas très particulier qui a déjà été étudié par Hutchinson et *al.* [5]. La particularité de ce cas provient du fait qu'il a été étudié par plusieurs auteurs et cela nous permettra de tester notre programme. Le calcul de $n_c(r)$, $\tilde{n}(r)$ et $\tilde{m}(r)$ a été effectué pour $N=2000$ atomes pour des températures variant de 0 à 100 nK.

1-5 Organigramme



Organigramme de calcul

2- Discussions des résultats

2-1 Avec l'approximation de Popov

a- La densité condensée et la densité non condensée

On rappelle que dans cette approximation, la densité anormale, $\tilde{m}(r)$, est totalement négligée. Cela constitue une bonne approximation pour un petit nombre de particules, plus précisément pour des valeurs de N inférieures à 10000. A priori, cela peut être justifié par le fait que pour des N relativement faibles, les modes excités des hautes énergies ne sont pratiquement pas occupés. Mais pour des grands nombres de particules l'effet des interactions augmente et les corrélations augmentent aussi et l'approximation deviendrait alors injustifiable. Nous présentons la densité condensée et la densité non condensée en fonction de la température variant de 0 nK à T à température critique, T_c , au dessus de laquelle la densité condensée s'annule. Les

résultats sont tracés dans les figures VI-1(a), (b), où nous observons un bon accord avec la référence [5]. On remarque que la densité condensée prend une valeur maximale au centre du piège pour $r=0$. Pour la densité non condensée, on constate une croissance monotone pour des températures $T \leq T_c$.

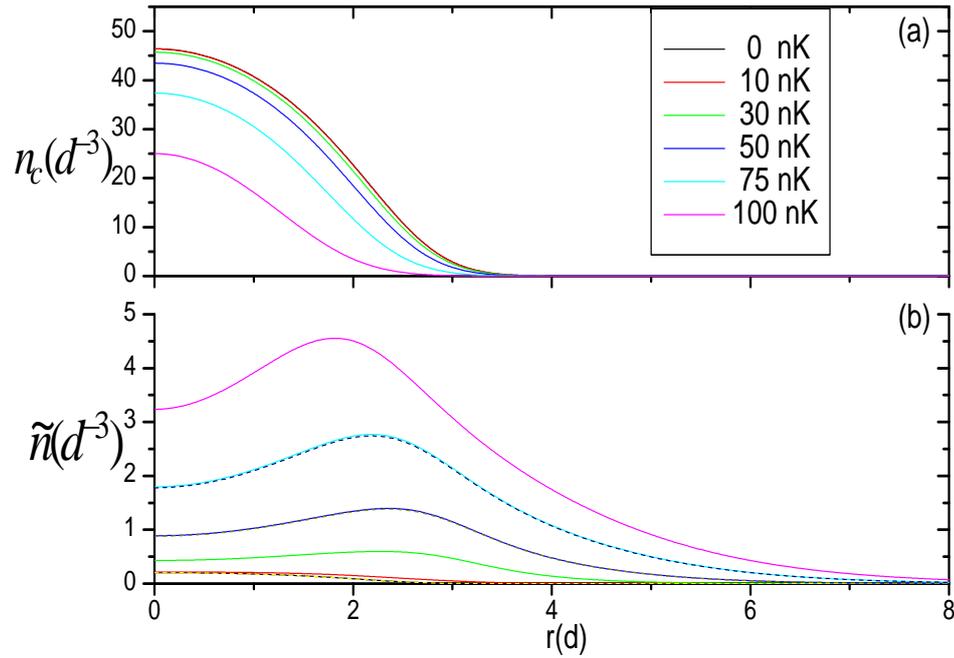


Figure IV-1: La densité condensée (a), la densité non condensée (b) dans les conditions de la réf.[5]:

$N=2000$, $a = 5.82 \times 10^{-9} m$. Les données de la réf.[5] sont représentées en pointillés.

En particulier, $\tilde{n}(r)$ est maximale au bord du condensat, ce qui justifie l'image expérimentale que le condensat est entouré par le nuage thermique (voir figure IV-2).

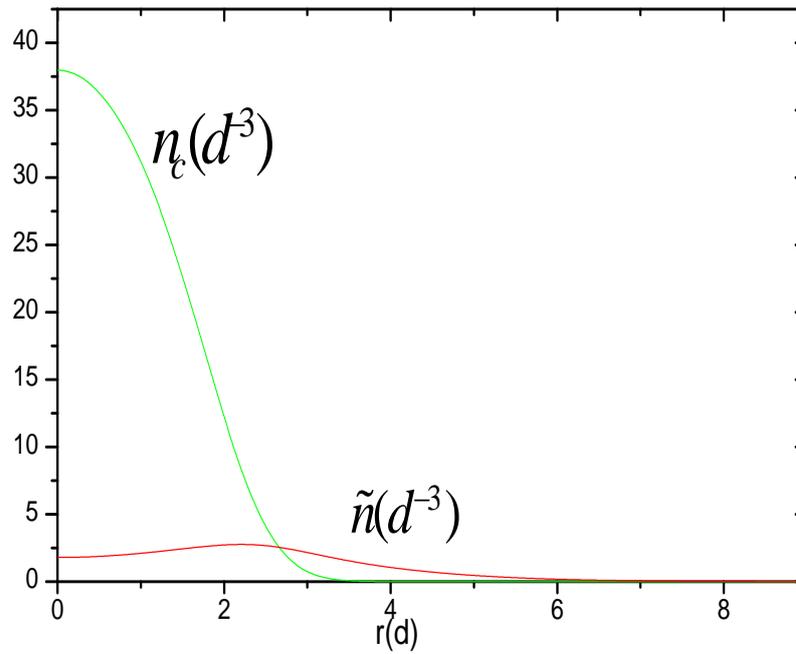


Figure IV-2: La densité condensée $n_c(r)$ et la densité non condensée $\tilde{n}(r)$ à une température $T=75\text{nK}$ pour $N=2000$ atomes.

b- La fraction condensée et la fraction non condensée

La figure IV-3, montre clairement qu'à basse température le nuage thermique est pratiquement absent et la fraction condensée est maximale. Mais en s'approchant de la température critique, elle deviendrait presque nulle laissant le nuage thermique prendre une valeur maximale.

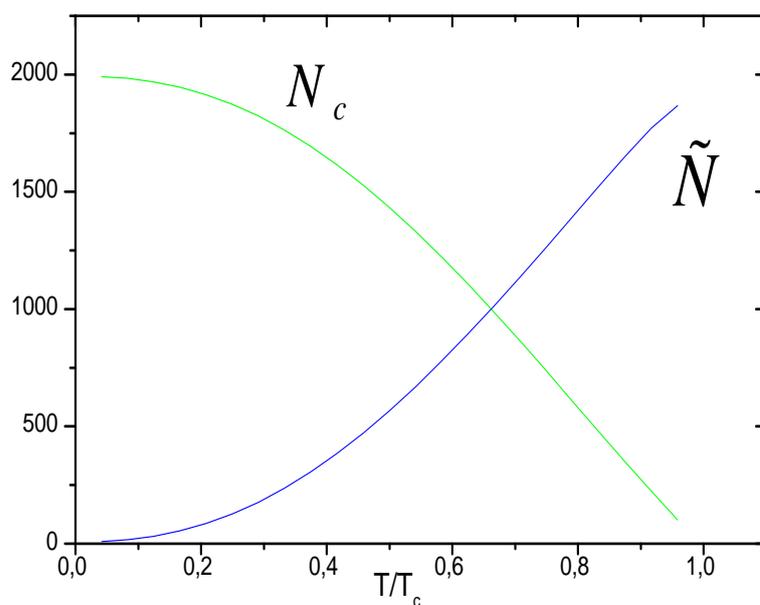


Figure IV-3: Les fractions condensée et non condensée (N_c , \tilde{N}) en fonction de T/T_c

c- Les excitations

Nous présentons les modes de respirations de quasi particules (breathing mode) pour un moment angulaire $l=0, 1, 2$ et pour un nombre de particules N valant de 2000 à 6000 pour pouvoir comparer avec Huchinson *et al.* [5].

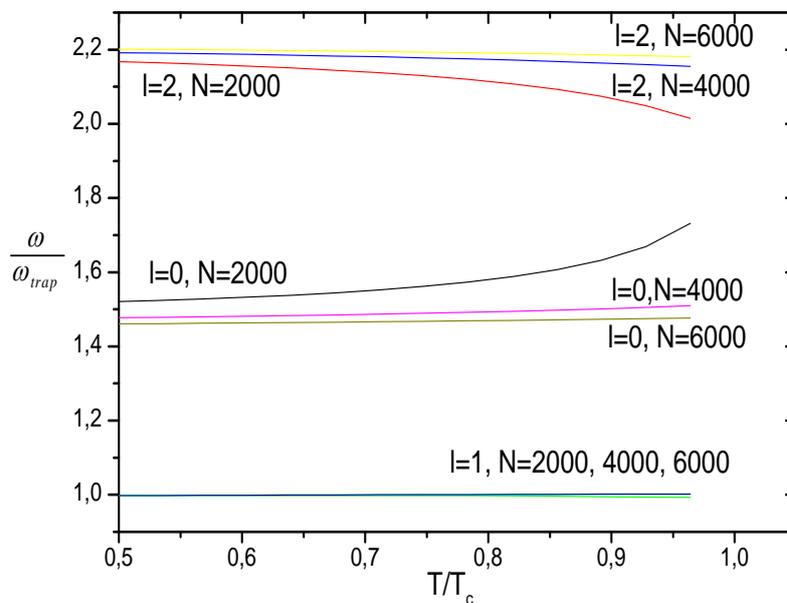


Figure IV-4 : Les fréquences d'excitations (en unité du piège) en fonction de la température pour différentes valeurs du nombre d'atomes N valant de 2000 à 6000.

La figure IV-4, montre les fréquences d'excitation en fonction du rapport T/T_c . Les modes $l=0$ et 2 se séparent en deux parties caractérisant la valeur propre dégénérée du potentiel harmonique 2ω . Le mode $l=0$, appelé aussi mode de respiration (Breathing mode), est influencé par la compressibilité des condensats, et son augmentation est le résultat des interactions répulsives entre atomes. D'autre part, le mode, $l=2$, ou mode quadripolaire diminue en fréquence en augmentant N . Le mode $l=1$ est relatif au centre de masse et est précisément localisé à ω . Selon le théorème de Kohn [62] pour un piège harmonique on s'attendait à un mode $l=1$ qui correspondra à un cas où toutes les particules sont condensées. Toutefois, dans l'approximation de HFB Popov, le condensat se meut effectivement dans un potentiel externe $V_{trap}(r) + 2g\tilde{n}(r)$ qui le dévie de sa forme parabolique idéale. Le théorème de Kohn généralisé [62] est vérifié à des basses températures où le potentiel $2g\tilde{n}(r)$ est considéré comme une petite perturbation. En conclusion, nous pouvons dire qu'en augmentant N , le mode $l=2$ croît alors que le mode $l=0$ décroît et le mode $l=1$ est presque constant.

Nous représentons sur la figure IV-5, les modes d'excitation $l=0$ et $l=2$ que nous comparons aux données expérimentales JILA [5,63]. On constate un bon accord jusqu'à $0.6T_c$ mais dès qu'on dépasse cette valeur un désaccord apparaît ceci est dû au fait que le potentiel créé par le nuage thermique écarte la fréquence d'excitation de sa valeur exacte.

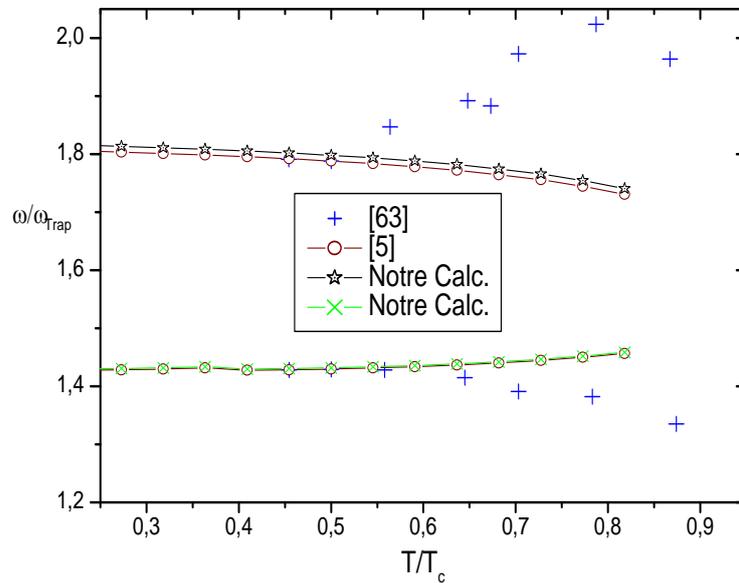


Figure IV-5 : Variation de la fréquence en fonction de la fraction $\frac{T}{T_c}$. Les courbes en étoiles et en croix résultent de nos calculs. Les données de la réf. [63] sont représentées en plus (+). Les données de la réf. [5] sont représentées en cercles.

2-2 Au-delà de l'approximation de Popov

a- La densité condensée, la densité non condensée et la densité anormale

Comme nous l'avons mentionné précédemment, l'approximation HFB généralisée (GHFB) tend à améliorer les prédictions de HFB-Popov en introduisant la moyenne thermique anormale, ou tout simplement densité anormale. Cette quantité qui tient compte des corrélations entre atomes condensés et atomes non condensés est nécessaire pour une bonne description du problème. Cependant, $\tilde{m}(r)$ présente une divergence UV qu'on devrait la renormaliser. Nous avons montré au chapitre précédent les méthodes de renormalisations possibles. Nous représentons sur les figures VI-6 à VI-13 les diverses densités pour un nombre d'atomes allant de 2000 à 140000.

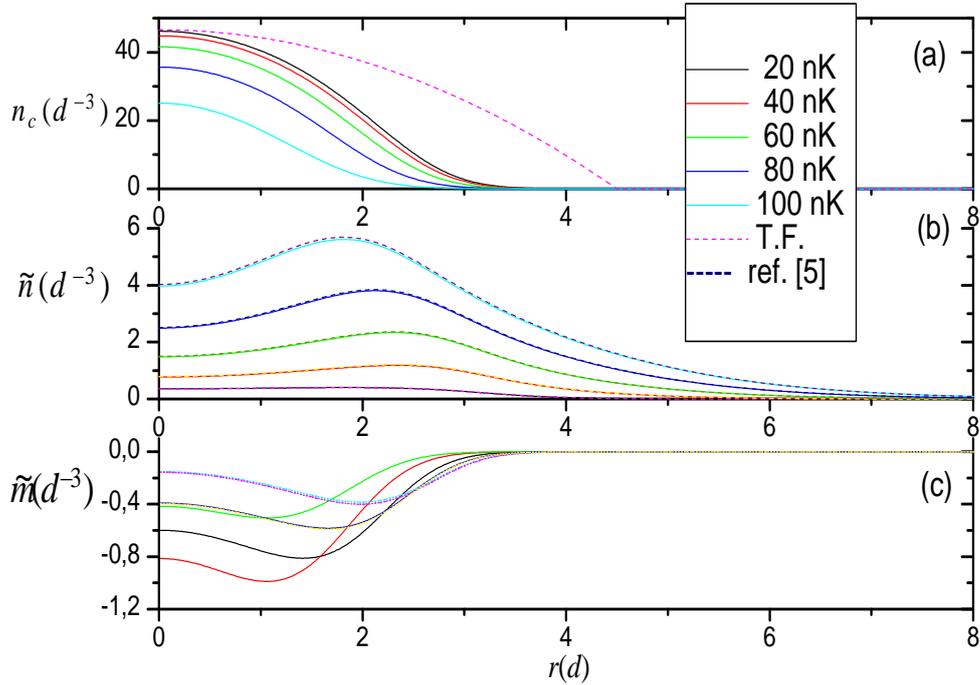


Figure IV-6: La densité condensée (a), la densité non condensée (b) et la densité anormale (c) dans les conditions de la réf. [5]: $N=2000$, $a = 5.82 \times 10^{-9} m$. Les données de la réf. [5] sont représentées en pointillés. Pour guider les yeux, le profil de Thomas-Fermi pour n_c est aussi tracé.

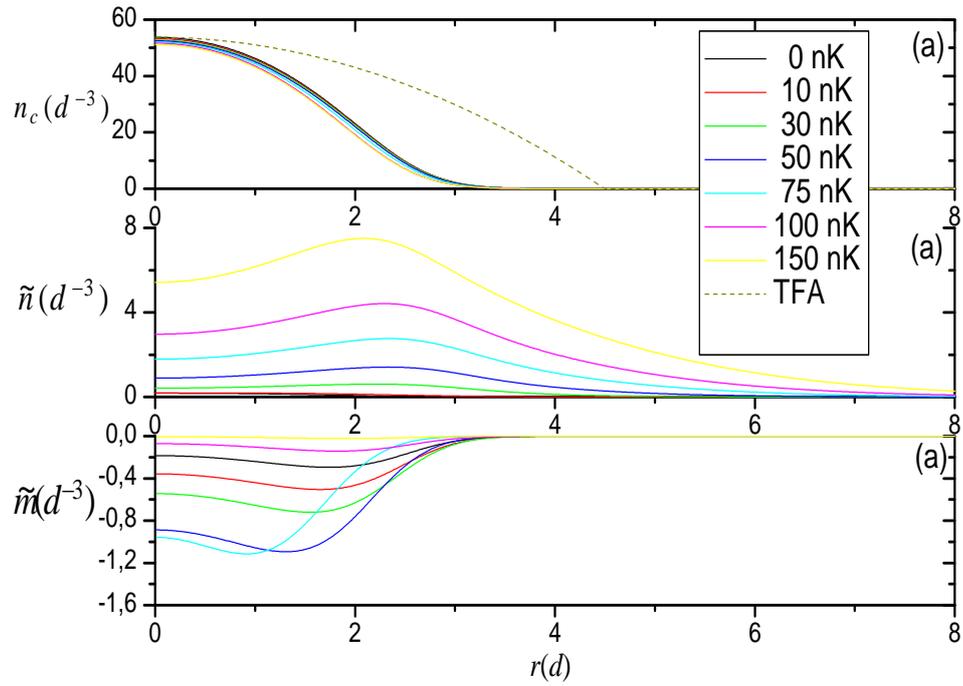


Figure IV-7: La densité condensée (a), la densité non condensée (b) et la densité anormale (c) pour $N=10000$, $a = 5.82 \times 10^{-9} m$. Pour guider les yeux, le profil Thomas-Fermi pour n_c est aussi tracé.

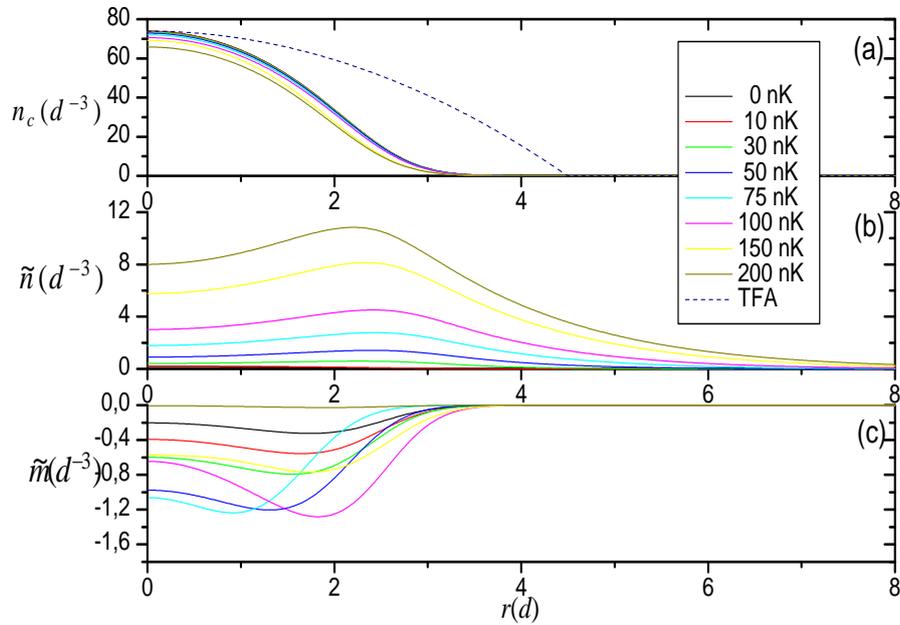


Figure IV-8: Idem. que la figure IV-7 pour $N=20000$.

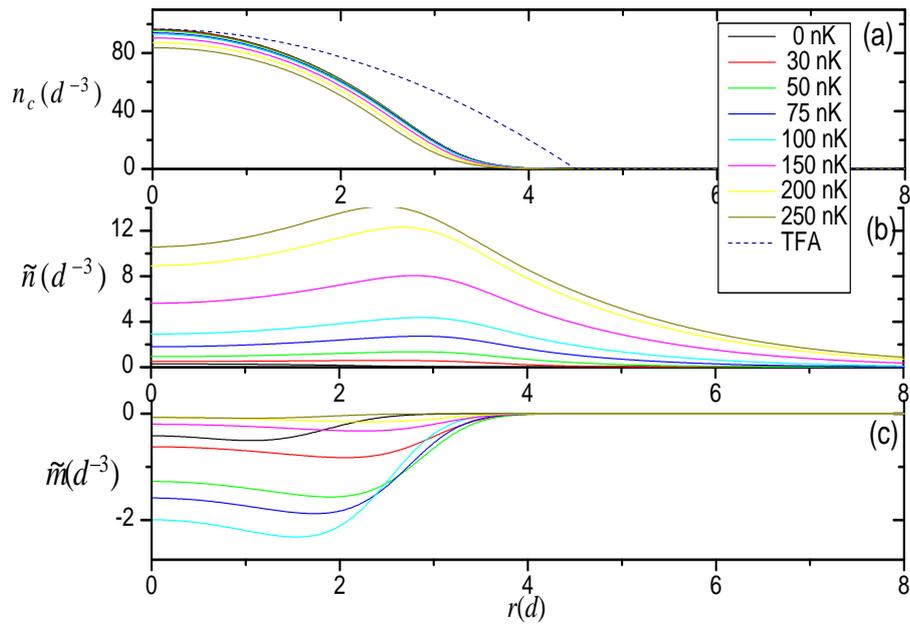


Figure IV-9: Idem. que la figure IV-7 pour $N=40000$.

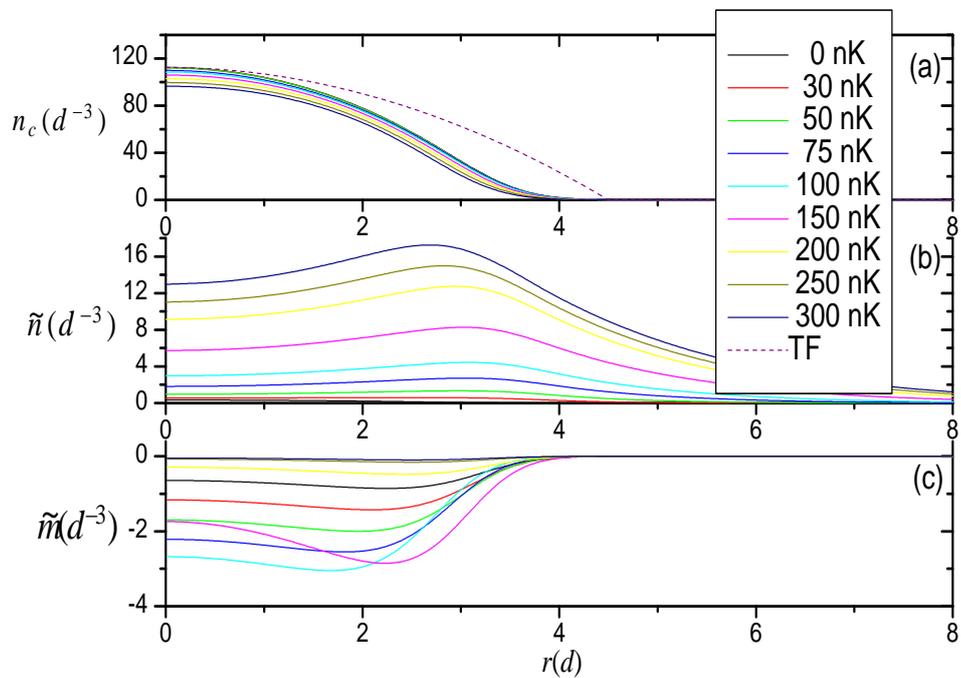


Figure IV-10: Idem. que la figure IV-7 pour $N=60000$.

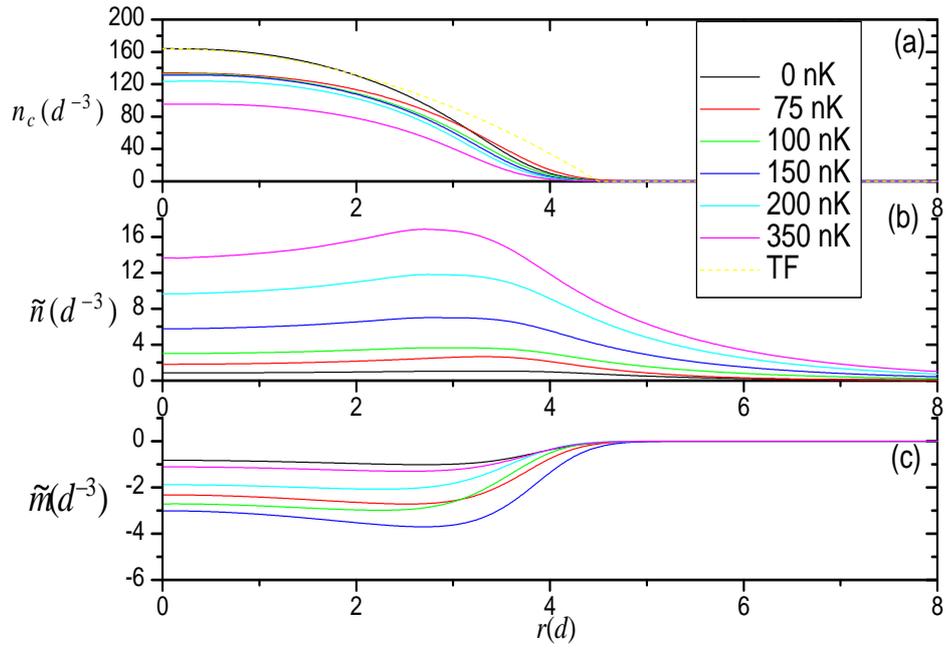


Figure IV-11 : Idem. que la figure IV-7 pour $N=80000$.

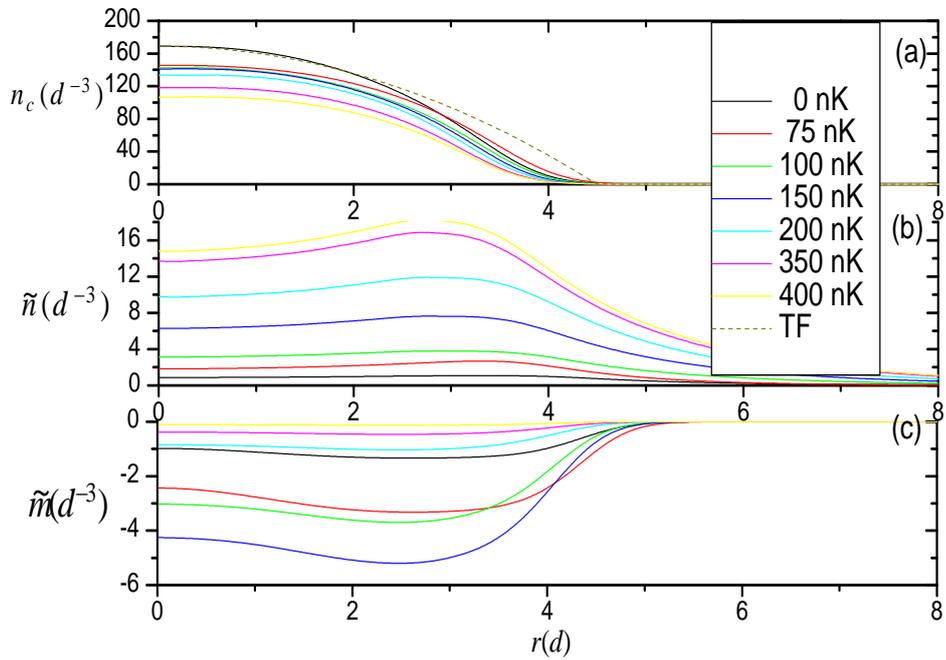


Figure IV-12: Idem. que la figure IV-7 pour $N=100000$.

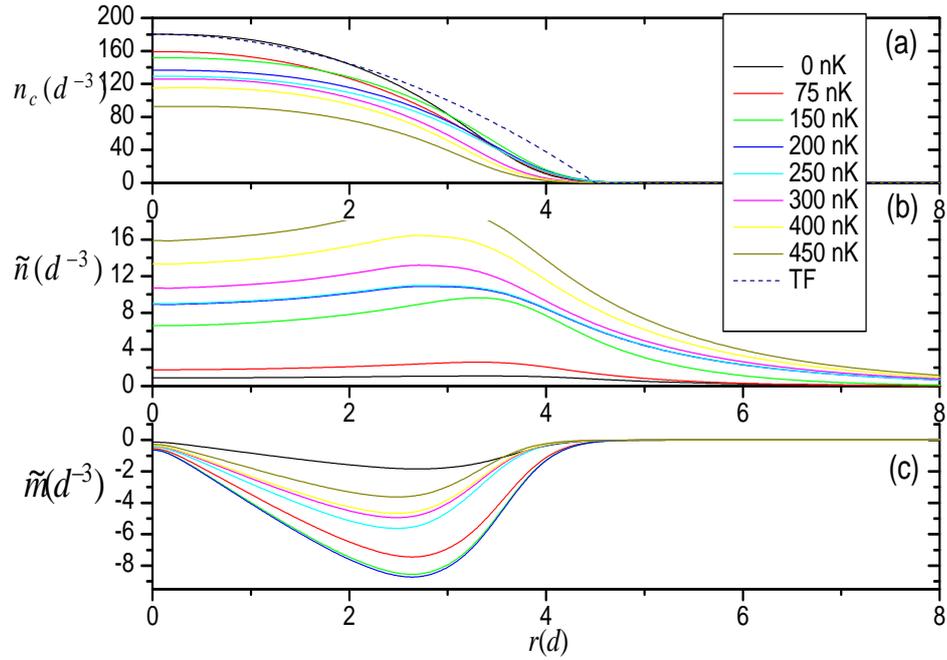


Figure IV-13: Idem. que la figure IV-7 pour $N=140000$.

Pour aller plus loin dans le calcul, et afin de tester si notre code est capable de résoudre les équations GHFB vues précédemment pour des nombres d'atomes très élevés, nous avons présenté les densités condensées, les densités non condensées et les densités anormales pour différentes températures allant de 0 à T_c (température au delà de laquelle la densité condensée s'annule). Les figures de IV-8 à IV-13 montrent la même tendance que celle de la figure VI-7, la densité non condensée augmente de façon monotone avec la température tandis que la densité anormale augmente jusqu'à $T \approx 0.5T_c$ puis commence à diminuer jusqu'à ce qu'elle s'annule à une température proche de la température critique. Notons que même pour la figure (IV-13) le régime TF n'est pas encore atteint sauf près du centre du piège pour des températures assez basses. Les écarts sont plus apparents aux frontières du piège où l'approximation TF brise les profils de la densité. Les profils de la densité que nous avons déterminés comme fonction de la température ont les mêmes structures malgré que le nombre d'atomes change jusque ce que l'on atteigne le régime TF. Ceci est en contradiction avec [64], où en particulier $\tilde{n}(r)$ et $\tilde{m}(r)$ ne présentent pas de structure près du centre du piège.

b- La fraction condensée

La fraction condensée N_c / N est un des paramètres qui indique quantitativement l'écart par rapport au gaz parfait. Il est intéressant de noter que la forme de la loi pour un gaz parfait (voir figure IV-14) est donnée par :

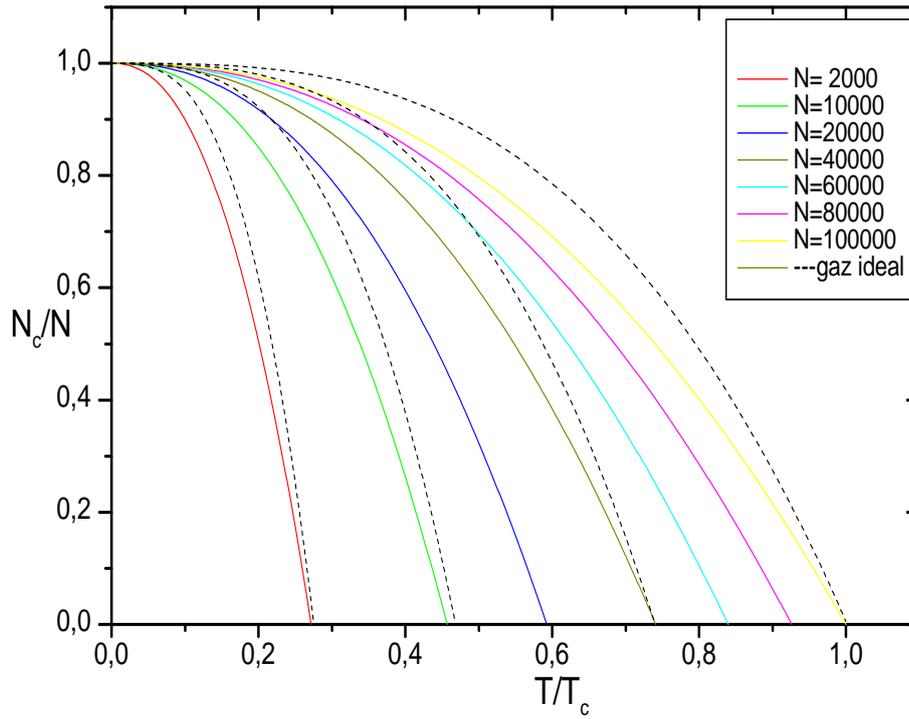


Figure IV-14: La fraction condensée en fonction de la fraction $\frac{T}{T_c}$ pour différentes valeurs du nombre d'atomes N . La courbe en pointillés est celle d'un gaz idéal.

$$\frac{N_c}{N} = \left(1 - \left[\frac{T}{T_c} \right]^\alpha \right), \quad (\text{IV-37})$$

Il s'agit donc d'une loi universelle où α est un paramètre d'ajustage. L'effet des interactions réduit ce paramètre de sa valeur idéale 3.0 à 2.3 et conduit à une fraction maximale à basse température.

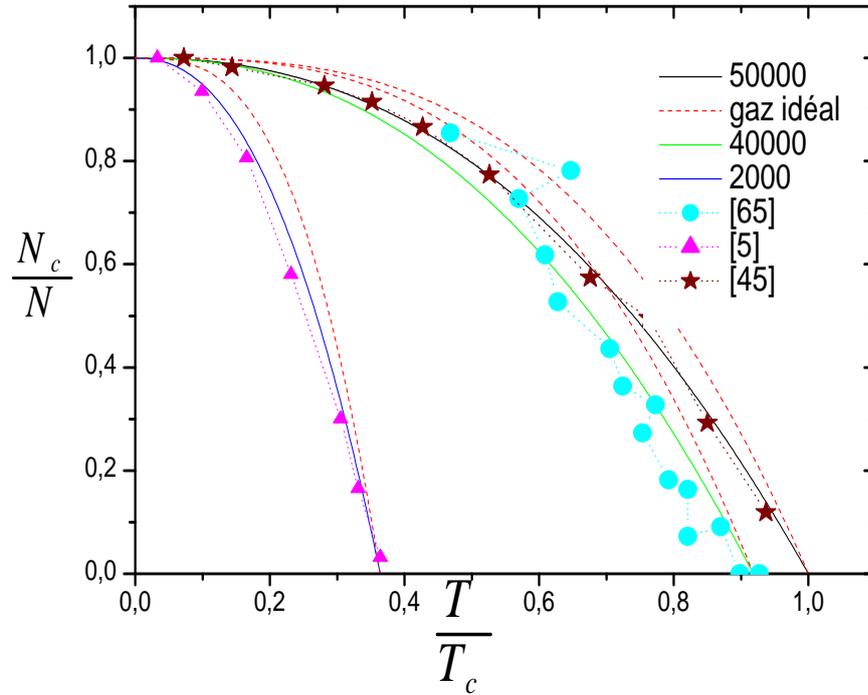


Figure IV-15: La fraction condensée en fonction de la fraction $\frac{T}{T_c}$. Notons que ces courbes sont tracées par rapport à la température critique du plus grand nombre d'atomes. La courbe en trait plein résulte de notre calcul par GHFB, la courbe en pointillés est celle d'un gaz idéal. Les données de la réf. [65] sont en cercles, les données de la réf.[5] sont en triangles et les données de la réf. [45] sont en étoiles.

A titre d'illustration, nous avons porté sur la figure IV-15, nos résultats pour $N=2000$, 40000 et 50000 comparés aux résultats de Hutchinson et *al.*, [5] Griffin et *al.* [45] et Shymal et *al.* [65]. A part ces derniers, l'accord est bon. L'écart prévu par ces derniers est la conséquence du traitement classique de la fraction condensée à la limite thermodynamique.

c- Le rayon du condensat

Pour poursuivre nos explorations numériques, il est également intéressant d'analyser différentes quantités à l'équilibre quand N varie. Le rayon du condensat est l'un des quantités les plus importantes du fait qu'il mesure les interactions entre les composantes condensées et non condensées, en particulier l'effet de compression discuté dans [7-9]. Ce paramètre est défini comme le point au-delà duquel la densité condensée s'annule. Dans l'approximation de Thomas Fermi (TF), il est donné par

$$R_c(T=0) \equiv R_{TF} = d \left(15N \frac{a}{d} \right)^{1/5}. \quad (\text{IV-38})$$

Récemment de nouvelles données expérimentales (Zawada et *al.* [7]) montrent des écarts par rapport à l'expression de (TF) qui persistent même pour des hautes températures [8]. Ces derniers auteurs présentent un modèle heuristique afin d'expliquer ces écarts en raison de l'absence des résultats théoriques dans le régime non TF. Dans la figure IV-16, nous présentons le rayon du condensat en fonction de la fraction condensée. Afin de les comparer avec [7], nous avons choisi trois valeurs distinctes pour N_c , à savoir $N_c=75000$, 85000 et

95000. En outre, étant donné que nos calculs sont effectués pour un piège harmonique isotrope, alors que la référence [7] considère un piège anisotrope nous projetons les résultats dans le plan $z=0$ et nous traçons seulement le rayon radial du condensat.

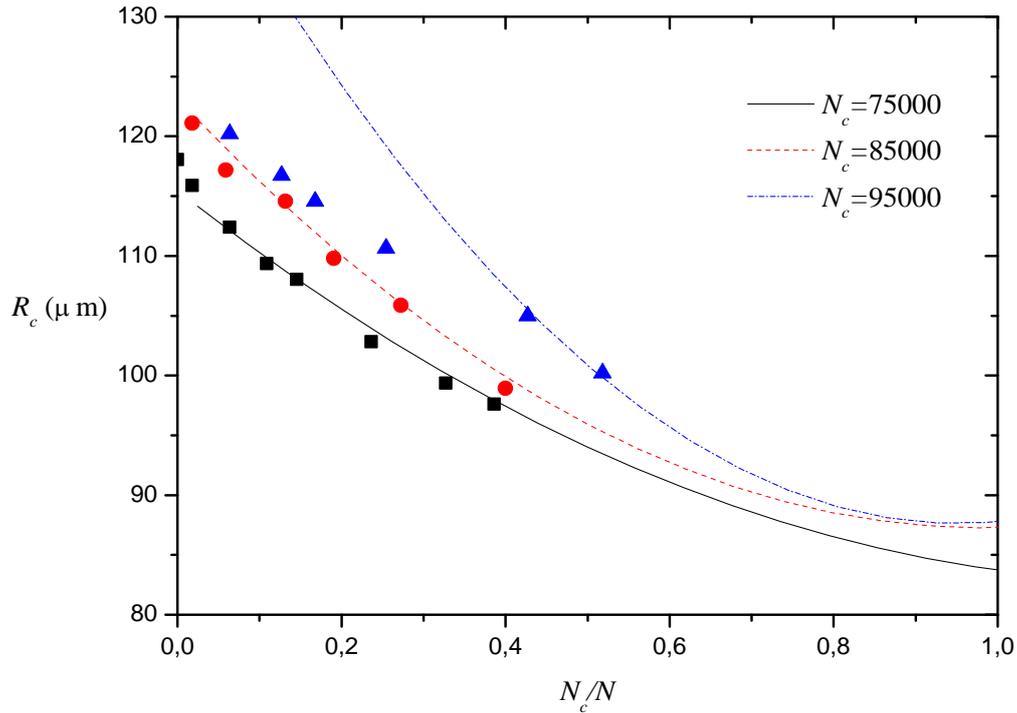


Figure IV-16: La variation du rayon du condensat (radiale) en fonction de la fraction condensée avec N_c constante. Les courbes en trait plein et en pointillé résultent du calcul GHFB. Les données de la réf. [7] sont en carré, en triangle et en cercle.

Nous observons un bon accord entre les résultats HFB-BdG et les données expérimentales sauf pour $N_c = 95000$, ce qui confirme le fait que notre formalisme prend correctement en compte les interactions mutuelles entre le condensat et le nuage, et en particulier les effets de compression représenté ici par la réduction de R_c quand N_c diminue à T constante.

En fait, les pièges utilisés dans [7] étant anisotropes, il est plus sage l'utiliser comme rayons du condensat la valeur $\bar{R} = (R_\perp^2 R_z)^{1/3}$ où R_\perp et R_z sont les rayons radial et axial.

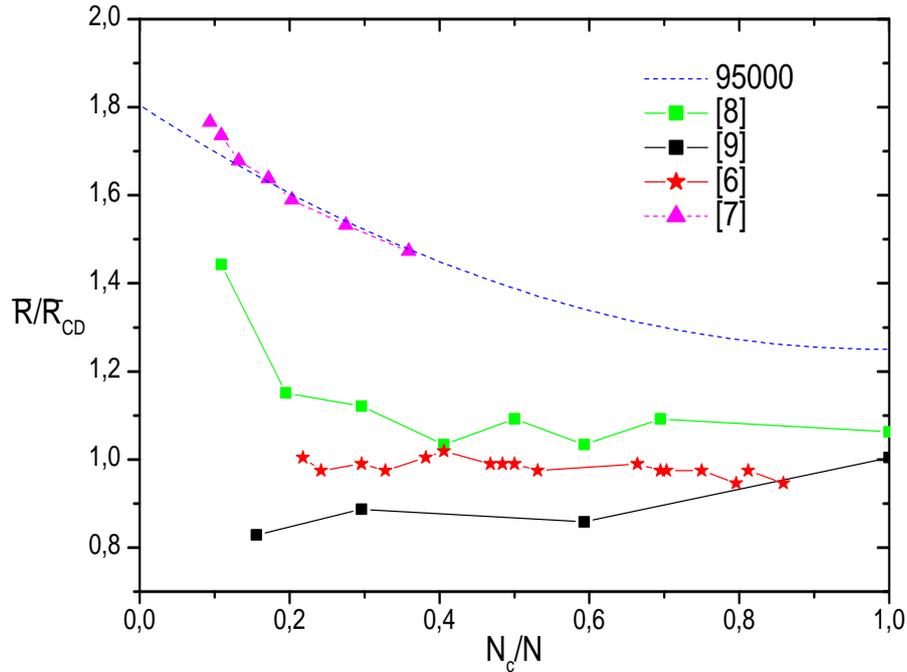


Figure IV-17 : Le rayon du condensat, \bar{R}/\bar{R}_{CD} , (Normalisé à la valeur obtenue par le modèle de Castin-Dum) en fonction de la fraction condensée. La valeur moyenne du rayon est définie par $\bar{R} = (R_{\perp}^2 R_z)^{1/3}$. La courbe en pointillé résulte de notre calcul par GHFB. Les données de la réf. [6] sont en étoiles, celles de la réf. [7] sont en triangles et celles de la réf. [8] sont en carrés.

La figure IV-17 présente le rayon du condensat R_c normalisé à la valeur obtenue par le modèle de Castin-Dum. Les courbes expérimentales [6-9] montrent une allure décroissante de R_c lorsque la fraction condensée augmente (lorsque la température décroît), ce qui est tout à fait contraire à ce que trouvent Gawryluk et *al.* [9] qui ont utilisé un modèle théorique simplifié. Par contre, Caracankas et *al.* [8] en utilisant un modèle amélioré obtiennent la bonne tendance mais pas les bonnes valeurs numériques. Nos résultats, représentés en tirets sur la figure IV-17 reproduisent non seulement la tendance mais aussi les valeurs expérimentales avec une très bonne précision. Il est à noter que les données de Gerbier [6] correspondent à $N_c \neq 95000$ ce qui explique l'écart. Par ailleurs, puisque nos calculs sont effectués pour un piège isotrope, et que [7] considère un piège anisotrope, nous avons utilisé l'effet de l'expansion pour pouvoir comparer. Ce dernier est représenté par un facteur [8,48] :

$$C_{TOF} = \left[(1 + \varepsilon^2 (\tau \arctan \tau) - \ln \sqrt{1 + \tau^2}) \right] (1 + \tau^2)^{1/3} \quad (\text{IV-39})$$

Où $\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\omega_r}{\omega_z}$ et $\tau = t\omega_z$ t est le temps de l'expansion.

En utilisant les valeurs expérimentales de Zawada et *al.* [7], on trouve $C_{TOF} = 1.46$ pour $t=22\text{ms}$.

d- Le rapport d'aspect

Une autre quantité qui mesure aussi les interactions mutuelles entre le condensat et le nuage est le rapport d'aspect noté (AR). Il est défini comme le rapport entre l'énergie cinétique et l'énergie du champ moyen. En

négligeant le potentiel supplémentaire, du fait que l'on travaille à très basse température, nous pouvons l'écrire maintenant sous la forme suivante :

$$AR = \frac{T}{\langle gn_c(r) \rangle} \quad (IV-40)$$

Où T est l'énergie cinétique du condensat. La figure IV-18, présente ce rapport en fonction du nombre d'atomes condensés comme prédit par les calculs GHFB et les mesures de [7] pour un BEC pur. En outre, l'approximation GHFB conduit à un bon accord avec l'expérience et confirme le modèle de TF de Gatin Dum [48,66] qui prédit un rapport constant. Il convient de mentionner, que l'équation de Gross Pitaevskii à 3 dimensions donne également un bon accord avec le rapport d'aspect donné par l'expérience [7]. La raison est que ces données expérimentales sont effectuées pour un BEC pur où l'effet du nuage thermique est pratiquement négligeable.

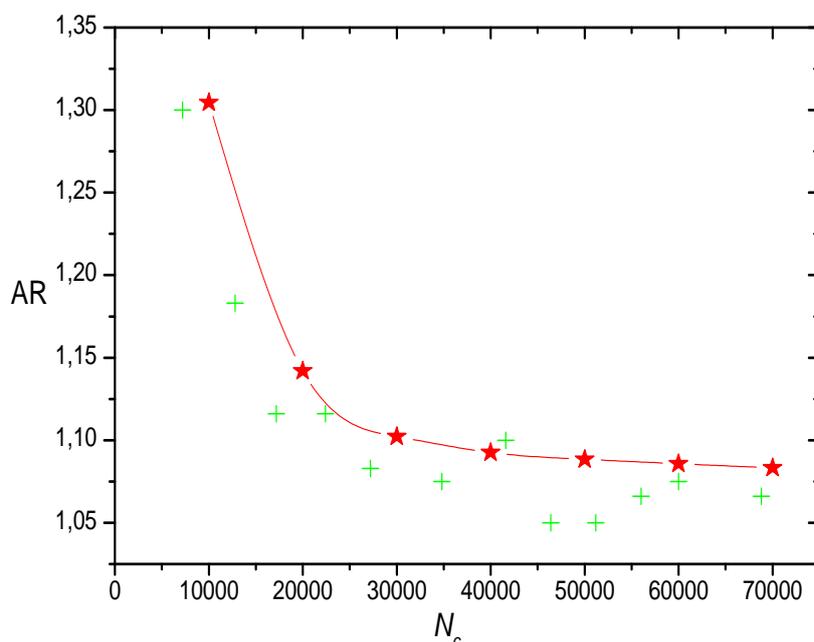


Figure IV-18 : Variation du rapport d'aspect en fonction de la fraction condensée avec N_c fixe. La courbe en trait plein résulte de notre calcul par GHFB. Les données en plus (+) sont celles de la réf.[7].

Nous présentons maintenant sur la figure IV-19, le rapport d'aspect en fonction de la fraction atomique $\frac{N_c}{N}$ à température finie où l'effet du nuage thermique est non négligeable. Pour cela on détermine d'abord la température T qui garde N_c constant (valant 75000, 85000 et 95000) par l'utilisation de l'équation (IV-37)-, le rapport d'aspect est :

$$AR_{\bar{n}} = \frac{T}{\langle gn_c(r) + 2g\bar{n}(r) \rangle} \quad (IV-41)$$

On constate une influence considérable du nuage thermique, mais dès que $\frac{N_c}{N}$ dépasse la valeur 0.5, l'effet du nuage devient de moins en moins important et une stabilisation des courbes autour d'une valeur critique égale à 1.43. Ce fait est justifié par l'approximation suivante :

$$AR_{\tilde{n}} \approx AR_{s\tilde{n}} \left(1 - \frac{2\tilde{n}(r)}{n_c(r)}\right) \quad (\text{IV-42})$$

Où $AR_{s\tilde{n}} = \frac{T}{\langle gn_c(r) \rangle}$ représente le rapport d'aspect calculé quand l'effet du nuage thermique est négligeable.

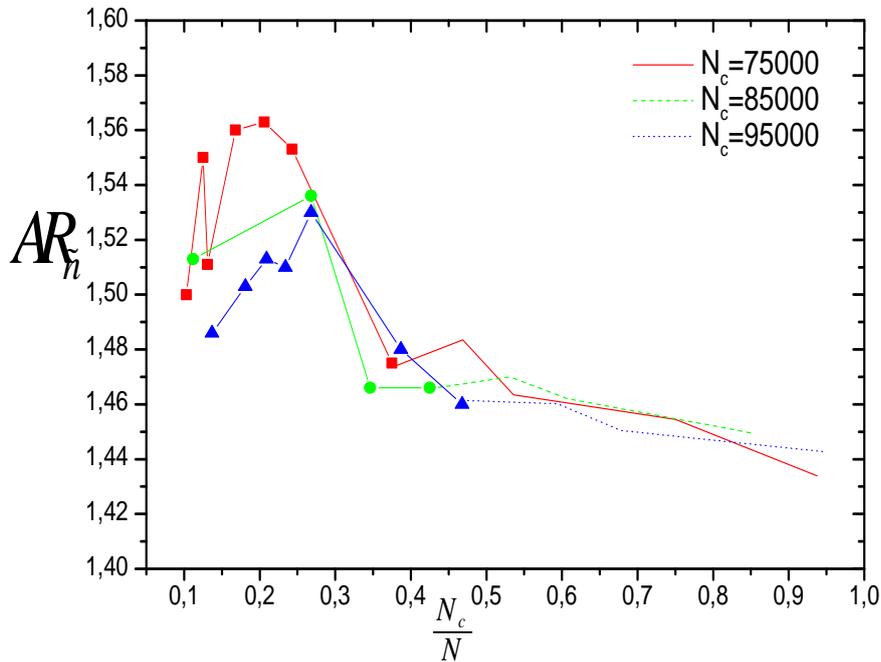


Figure IV-19: Variation du rapport d'aspect, à température finie, en fonction de la fraction condensée avec N_c fixe. Les courbes en pointillés résultent de nos calculs par GHFB.

e- La température critique

Passons à la détermination de la température critique pour un gaz atomique piégé. La présence des interactions pour ce système atomique a pour effet de modifier la température critique par rapport à sa valeur pour un gaz idéal. En traitant les interactions dans l'approximation du champ moyen qui consiste à supposer les atomes comme des bosons "sans interaction" se déplaçant dans un champ moyen créé par les autres atomes [67-70], l'hamiltonien de Hartree Fock relatif à ce système s'écrit :

$$H_{HF} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{trap}(r) + 2gn(r) \quad (IV-43)$$

Cet hamiltonien coïncide avec l'hamiltonien à une particule, qui décrit les excitations de l'équation de Gross-Pitaevski dépendant du temps en négligeant l'amplitude des quasi particules $v(r)$ dans les équations du mouvement (voir chapitre II) à température, nulle :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{trap}(r) + 2gn(r)\right)u(r) + gn(r)v(r) = \hbar\omega u(r) \quad (IV-44)$$

Le terme $V_{trap}(r) + 2gn(r)$ est appelé potentiel effectif, $V_{eff}(r)$, et $2gn(r)$ est un champ moyen créé par les interactions causées par les autres atomes. Nous utilisons l'approximation semi-classique du chapitre II, où nous pouvons facilement calculer les moyennes thermiques sur les états propres de l'hamiltonien (IV-43). La densité thermique du système est donnée par la formule d'un gaz idéal :

$$n_T(r) = \lambda_T^{-3} g_{3/2}(e^{-(V_{eff}-\mu)/k_B T}) \quad (IV-45)$$

Où nous avons remplacé $V_{trap}(r)$ par $V_{eff}(r) - \mu$. La condensation de Bose Einstein se produit à une température pour laquelle la condition suivante sera satisfaite :

$$N = \int dr n_T(r, T_c, \mu_c) \quad (IV-46)$$

Où μ_c prend sa valeur minimale, valeur propre de l'hamiltonien de Hartree Fock qui est égale pour un grand nombre de particules à $2gn(0)$. En développant le membre de droite de l'équation (IV-45) au voisinage de $\mu_c = 0$ et $T_c = T_c^{ideal}$, nous obtenons la variation relative de la température critique [71-74] :

$$T_c(N) = T_c^{ideal} \left(1 - 1.3 \frac{a}{d} N^{1/6}\right) \quad (IV-47)$$

Avec $T_c^{ideal} = \frac{\hbar\omega}{k_B} \left(\frac{N}{\zeta(3)}\right)^{1/3}$ est la température d'un gaz idéal.

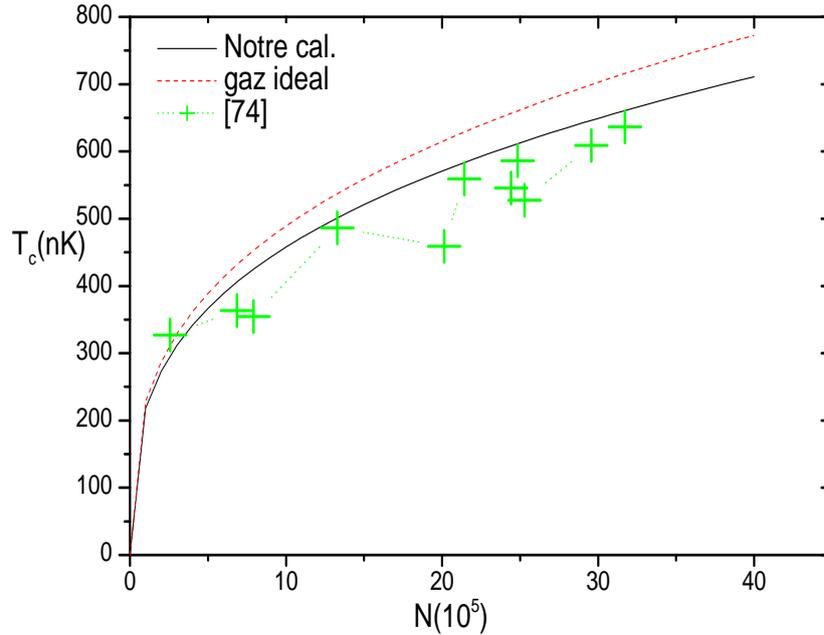


Figure IV-20: Présentation de la température critique en fonction du nombre d’atomes N . La courbe en noir provient de l’expression (IV-47), la courbe en pointillé (rouge) est celle d’un gaz idéal et les données expérimentales de la réf.[74] sont en plus(+).

On note alors, que bien que les interactions modifient considérablement la densité condensée, elles influent très faiblement sur les propriétés thermodynamiques en particulier sur la température critique qui n’est que légèrement décalées par rapport à la celle d’un gaz idéal. La figure VI-20, montre cet écart par rapport au gaz idéal, qui est compatible avec la prédiction théorique :

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = -1.3 \frac{a}{d} N^{1/6} \quad (\text{IV-48})$$

f- Les excitations

Les excitations élémentaires constituent une des caractéristiques importantes des systèmes à N particules en interaction [33]. Nous présentons dans les figures de IV-21 à IV-28, les modes de respirations pour les différents moments angulaires $l=0,1$ et 2 pour N valant de 2000 à 140000 atomes. Une augmentation considérable pour le mode $l=2$ qui passe de 2.18 pour 2000 atomes à 2.50 pour 140000 atomes. En revanche une diminution pour le mode $l=0$ qui passe de 1.50 pour 2000 atomes à 1.38 pour 140000 atomes. Une variation pratiquement constante pour le mode $l=1$ quelque soit la nombre d’atomes. En conclusion, dès que

$\frac{T}{T_c}$ dépasse la valeur 0.74, l’effet du nuage devient de moins en moins prépondérant donnant une valeur

critique de $\frac{T}{T_c}$ déduite de l’égalité suivante :

$$\frac{N_c}{N} = \frac{\tilde{N}}{N} \quad (\text{IV-49})$$

Où $\frac{N_c}{N}$ est celle de l'équation (IV-37) et $\frac{\tilde{N}}{N} = \left(\frac{T}{T_c}\right)^\alpha$ est la fraction non condensée.

En effet, le potentiel créé par le nuage thermique deviendrait dominant, $2g\tilde{n}(r) \ll g n_c(r)$, ce qui viole le théorème de Khon [62] qui le traite comme une petite perturbation. Il est bien connu que pour des nombres d'atomes valant de 2000 à 10000 l'allure de $l=0$ et $l=2$ commence à converger près de la température critique, alors que pour des nombres d'atomes valant de 20000 à 140000 la convergence reste presque non atteinte. Cela est dû à la présence d'un grand nombre d'atomes.

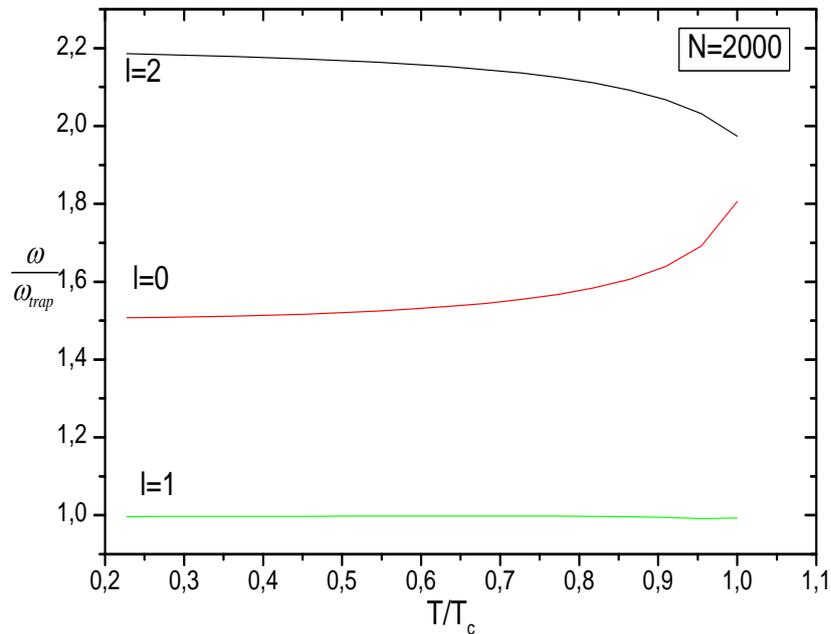


Figure IV-21: Les fréquences d'excitation (en unité du piège) fonction de la fraction en température pour $N=2000$

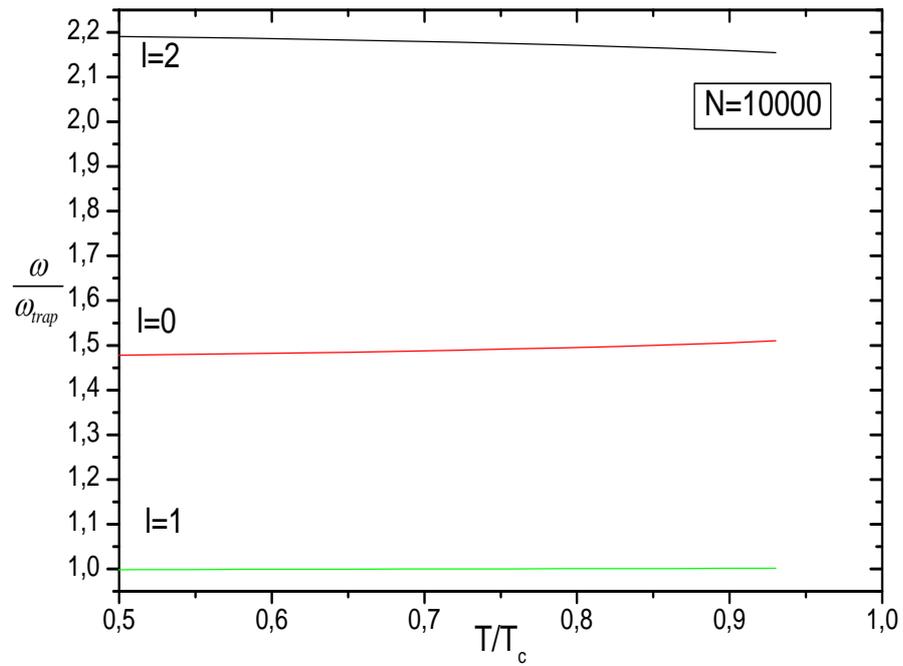


Figure IV-22: Idem. que la figure IV-21

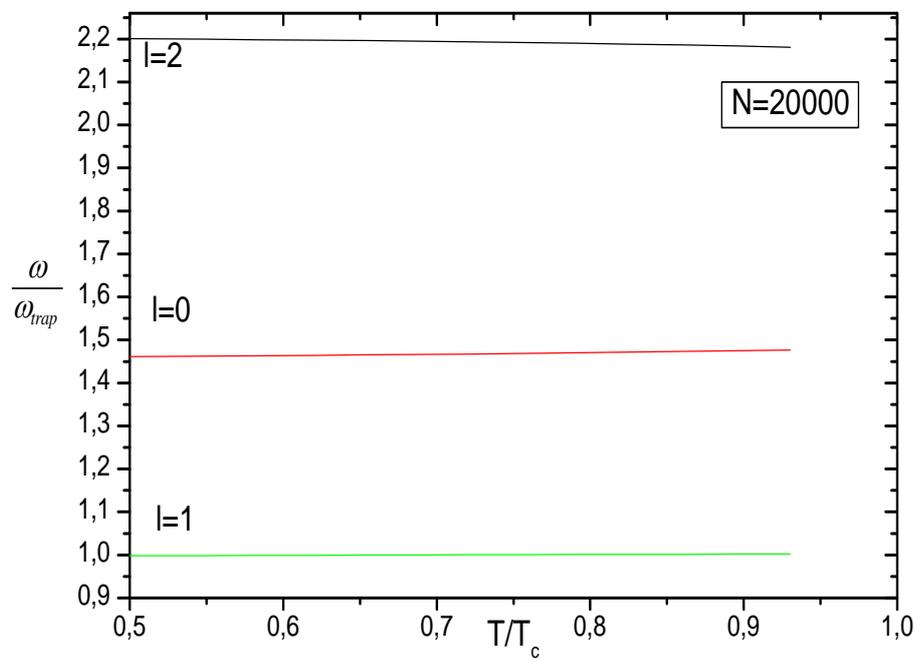


Figure IV-23: Idem. que la figure IV-21.

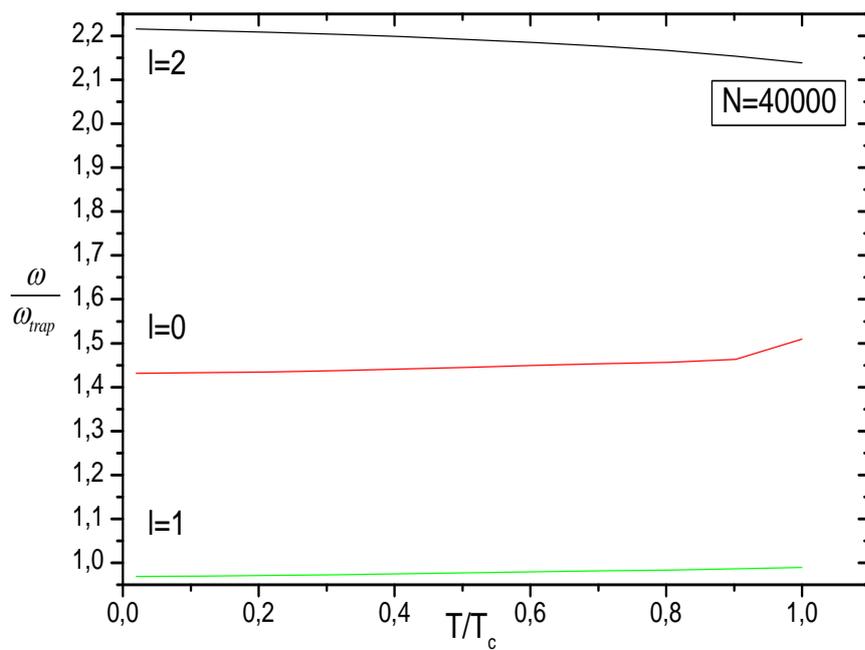


Figure IV-24: Idem. que la figure IV-21.

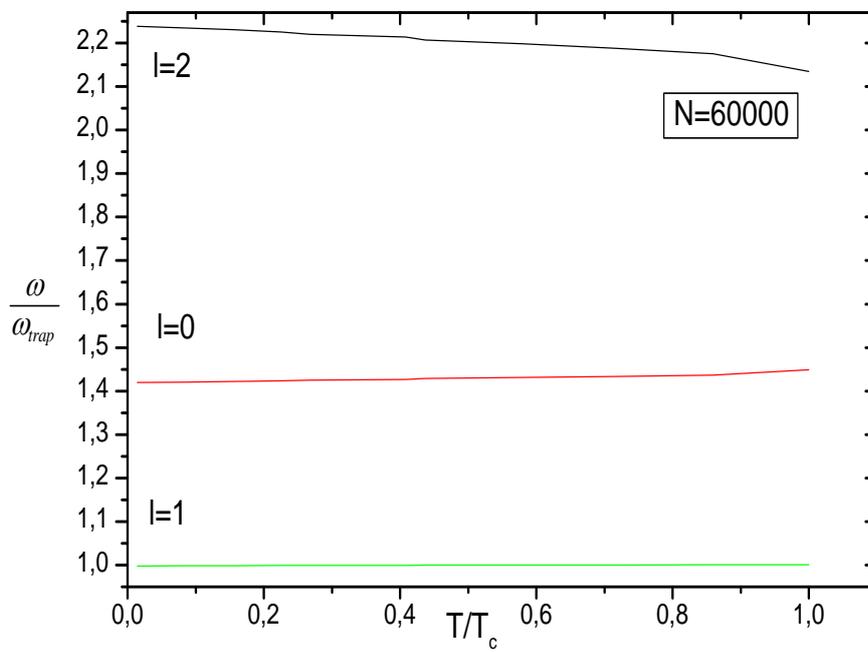


Figure IV-25: Idem. que la figure IV-21.

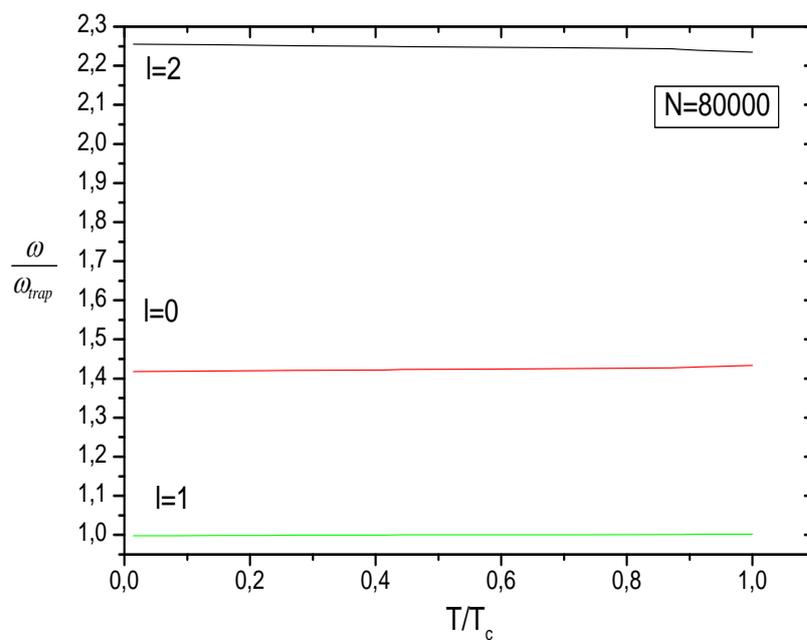


Figure IV-26: Idem. que la figure IV-21.

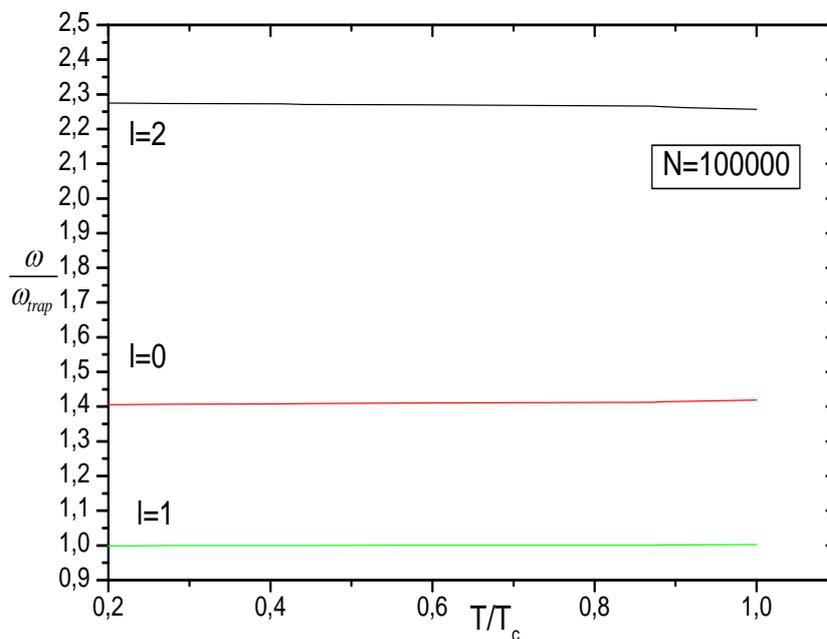


Figure IV-27: Idem. que la figure IV-21

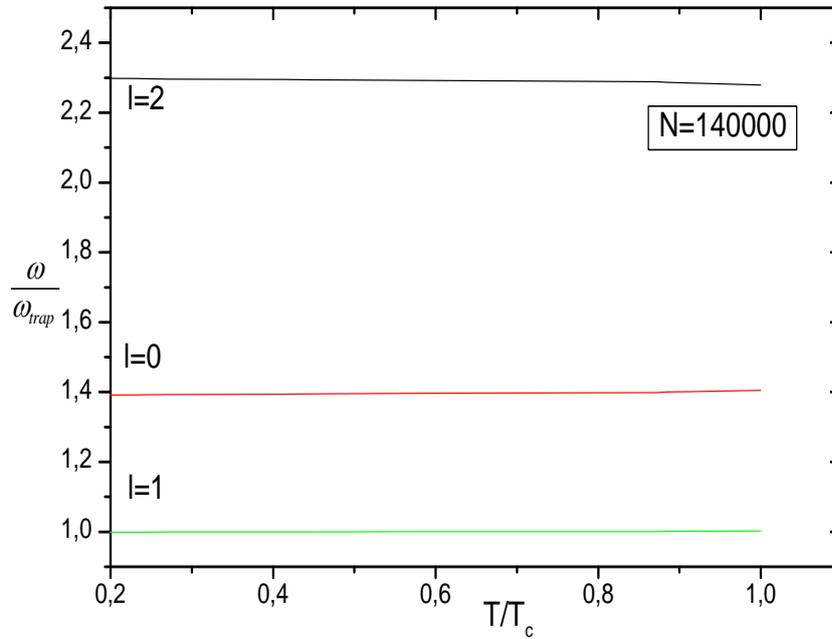


Figure IV-28 : Idem. que la figure IV-21.

Nous représentons sur la figure IV-29, les fréquences d'excitation pour les modes $l=0$ et $l=2$ dans le cas où N valant de 2000 à 8000, que nous comparons aux résultats expérimentaux JILA et MIT [75]. Un bon accord est observé jusqu'à la valeur de $N_c = 6500$. Notons qu'on a utilisé la valeur moyenne de la fréquence :

$$\langle \omega_{trap} \rangle = (\omega_{\perp}^2 \omega_z)^{1/3} \quad (\text{IV-50})$$

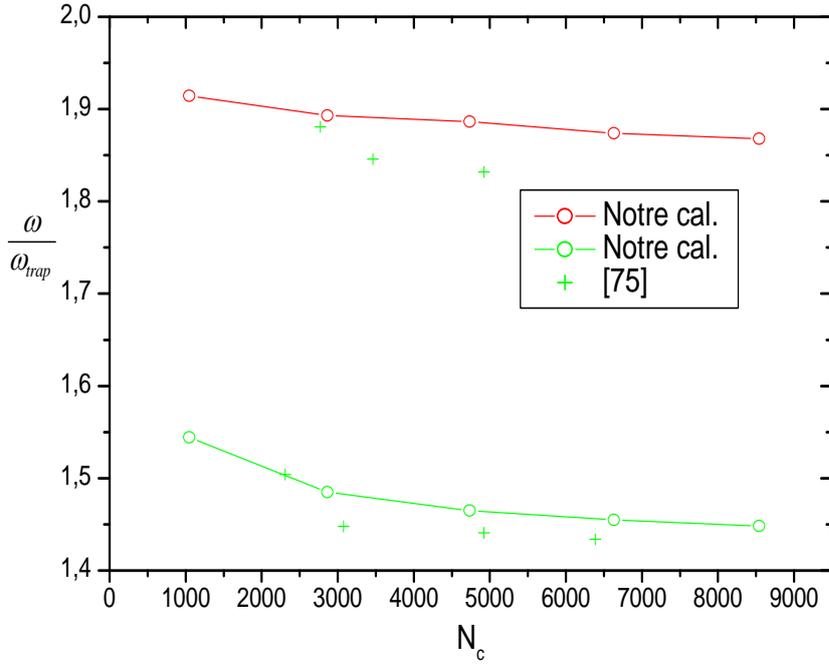


Figure IV-29 : Les fréquences d'excitation du Rb pour N valant de 2000 à 8000 atomes à différentes valeurs de N_c . L'allure en haut représente le mode de respiration (breathing mode) $l=0$. L'allure en bas est le mode quadripolaire $l=2$. Les données de JILA TOP [75] sont en (+).

f- Le potentiel chimique

Il est aussi intéressant d'étudier le potentiel chimique de façon à mieux comparer nos résultats avec d'autres travaux [5,76]. Cela nous permet d'étudier la validité des approximations utilisées en particulier celle de Popov qui considère le potentiel chimique total égal au potentiel chimique condensé. Avant de présenter nos résultats nous allons donner un calcul analytique basé sur la relation de Yukalov [61] :

$$\mu = \rho_c \mu_c + \rho_{nc} \mu_{nc} \quad (\text{IV-51})$$

Où $\rho_c = \frac{N_c}{N}$ et $\rho_{nc} = \frac{\tilde{N}_{nc}}{N}$ représentent les concentrations condensées et non condensées respectivement.

On déterminera alors les deux potentiels μ_c et μ_{nc} en fonction de la densité condensée N_c , de la densité non condensée \tilde{N} et de la densité anormale \tilde{M} de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \mu_c &= (N_c + \tilde{N}_{nc} + \tilde{M})g \\ \mu_{nc} &= (N_c + \tilde{N}_{nc} - \tilde{M})g \end{aligned} \quad (\text{IV-52})$$

Dans l'approximation de Popov, nous négligeons la densité anormale, $\tilde{m}(r) = 0$, et alors une violation du théorème de Goldstone [23]. Le potentiel chimique est alors :

$$\mu = (\rho_c (N_c + \tilde{N}_{nc}) + \rho_{nc} (N_c + \tilde{N}_{nc}))g = (N_c + \tilde{N}_{nc})g = Ng = \mu_c = \mu_{nc} \quad (\text{IV-53})$$

et est égal au potentiel chimique condensé. Au delà de l'approximation de Popov ($\tilde{m}(r) \neq 0$), le potentiel chimique total deviendra :

$$\mu = \left(\frac{1 + (\rho_c - \rho_{nc})}{2}\right)\mu_c + \left(\frac{1 - (\rho_c - \rho_{nc})}{2}\right)\mu_{nc} \quad (\text{IV-54})$$

Il est donné en fonction du potentiel condensé et du potentiel non condensé. Connaissant les expressions de μ_c en fonction de la densité condensée, N_c , et de μ_{nc} en fonction de la densité non condensée, \tilde{N} nous en déduisons μ .

Pour plus de détail nous introduisons la fonction de Bose-Einstein (voir appendice A), qui nous donne comment distribuer un système de bosons (résultant de la symétrisation de la fonction d'onde des bosons) et en utilisant la relation suivante

$$\exp(\beta\mu) = \left(1 + \frac{1}{N}\right)$$

On en déduit que :

$$\mu = \frac{1}{\beta} \ln\left(1 + \frac{1}{N}\right) = \rho_c \mu_c + \rho_{nc} \mu_{nc} \quad (\text{IV-55})$$

$$\mu_c = \frac{1}{\beta} \ln\left(1 + \frac{1}{N_c}\right) \text{ et } \mu_{nc} = \frac{1}{\beta} \ln\left(1 + \frac{1}{\tilde{N}}\right), N_{nc} = \tilde{N} \quad (\text{IV-56})$$

et l'équation (IV-56) devienne :

$$\mu = \frac{1}{\beta} \ln\left(\left(1 + \frac{1}{N_c}\right)^{\rho_c} \left(1 + \frac{1}{\tilde{N}}\right)^{\rho_{nc}}\right) \quad (\text{IV-57})$$

Dans le but d'étudier le potentiel chimique d'une manière numérique, la figure IV-30 montre l'effet de la température sur le comportement de cette quantité. Une augmentation monotone de ce potentiel est observée lorsqu'on augmente N et T respectivement. Bien que, ces deux paramètres jouent un rôle essentiel pour décrire ce gaz atomique, ils influent considérablement sur le potentiel chimique relatif à la loi de Yukalov.

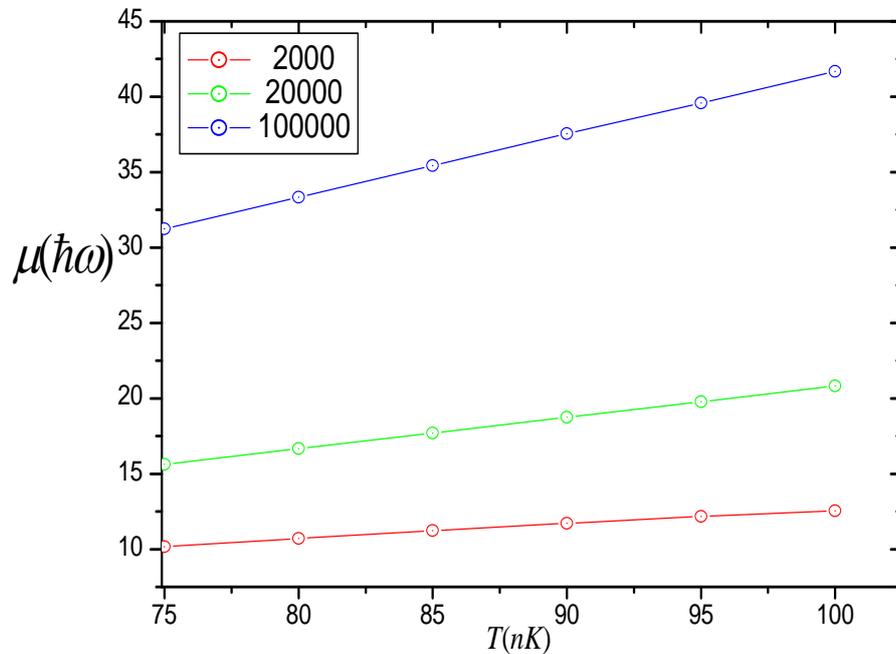


Figure IV-30: Variation du potentiel chimique en fonction de la température.

Nous présentons sur la figure IV-31, le potentiel chimique μ en fonction du nombre d'atomes pour $N = 2 \times 10^3, 2 \times 10^4$ et 10×10^4 à basse température que nous comparons au potentiel déduit de l'approximation de Thomas Fermi de l'équation (I-) du chapitre I. Un excellent accord avec les résultats des références [33,5,39] et un comportement équivalent à celle de Thomas Fermi avec un écart prédit par l'approximation de la densité locale [76].

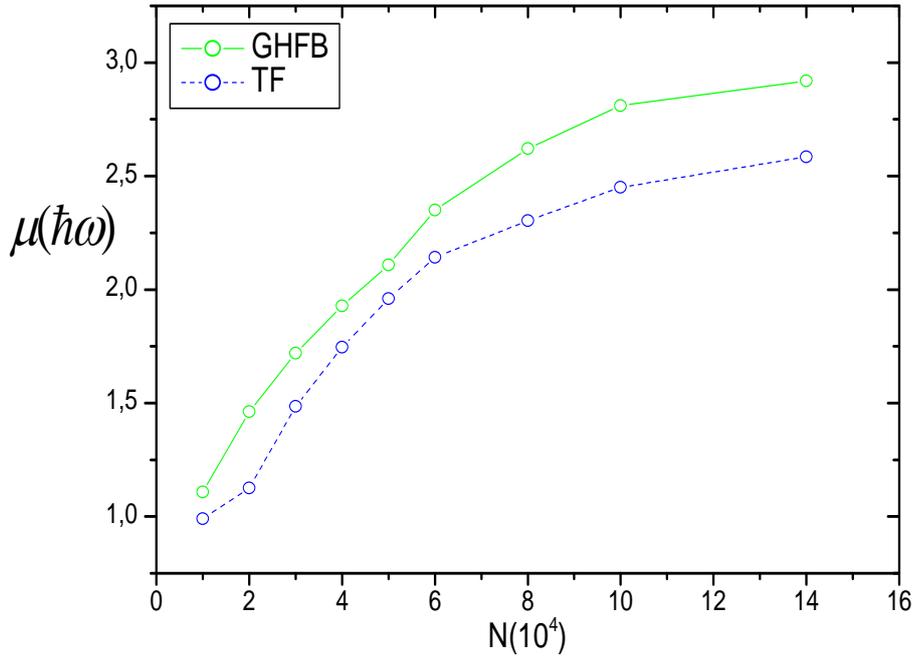


Figure IV-31 : Variation du potentiel chimique déduit de (GHFB) et celle de TF en fonction du nombre d'atome à basse température.

3- Conclusion

Dans cette étude nous nous sommes intéressés, à la résolution numérique des équations GHFB pour un gaz atomique en l'occurrence le Rb. La comparaison des résultats de l'approximation HFB-Popov avec ceux obtenus à l'aide d'autres auteurs, à savoir Hutchinson et Morgan [33,5], a montré que cette approximation constitue réellement un outil très puissant. En effet, lors de son application à l'étude de la condensation des systèmes bosoniques elle a produit de très bons résultats pour toutes les observables physiques considérées telles que les densités condensées, les densités non condensées, les densités anormales et les potentiels chimiques. Nous avons aussi déterminé les températures critiques pour différents nombres de particules.

Nous avons poussé nos calculs en augmentant le nombre de particules, en utilisant une approximation qui va au-delà de Popov. Cette dernière nous a donné aussi de très bons résultats du fait qu'elle permet de traiter les corrélations dans l'état fondamental et aussi dans les états excités d'une façon cohérente, mais elle présente un certain inconvénient au niveau de la densité anormale. En effet, cette densité diverge à haute

énergie. Ce problème nous a poussés à trouver une renormalisation qui lève cette divergence. Nous avons réussi à trouver cette renormalisation qui est vraiment discutée avec précision au chapitre précédent. Nous avons vu que l'analyse des modes d'excitation données par nos calculs diffère de celles de Kohn seulement pour des nombres de particules supérieures à 10000. Cela est dû en fait à l'effet du potentiel créé par le nuage thermique sur les condensats qui doit être traité, avec plus de précision, avec la théorie des perturbations.

Enfin, nous pouvons dire que notre discussion sur la validité de la théorie GHFB a mis l'accent sur le régime au dessous de la température critique et plus précisément pour des températures inférieures à $0.60T_c$ ou $0.74T_c$ en particulier pour les excitations. Mais en général, elle nous a fournis de très bons résultats concernant les potentiels chimiques.

Conclusion et perspectives

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude d'un gaz de bosons piégés et ultra froid, à température finie, contenant un grand nombre d'atomes. La question principale à laquelle on a tenté de répondre a été en fait soulevée par un certain nombre de résultats expérimentaux et de simulation numérique [5-9]. En effet, tous ces travaux montrent clairement une déviation visible par rapport à l'expansion Thomas-Fermi telle que prévue par le modèle de Castin-Dum [48]. Ce modèle est largement utilisé et généralement bien admis en tant que modèle fiable de l'effet de l'expansion. Il stipule essentiellement que les interactions entre le nuage thermique et le condensat sont négligeables pendant l'expansion. Il faut dire que, de ce modèle découlent énormément de conclusions, surtout expérimentales. En effet, l'étude expérimentale des condensats procède généralement par l'extinction du piège et l'analyse de l'expansion libre du gaz (TOF ou time of flight), et ce n'est que très récemment (à cause de difficultés techniques) que des études *in-situ* sont effectuées. De ce fait, afin de déduire l'état du gaz dans le piège, les expérimentateurs utilisaient le modèle d'expansion de Castin-Dum en croyant fermement que les profils de densité après un certain temps de vol seraient à peu de choses près les images du gaz tel qu'il était dans le piège modifiées par l'expansion Thomas-Fermi. Ceci s'avéra récemment incompatible avec certains résultats *in situ* et TOF.

Le problème consiste donc à trouver une théorie raisonnablement correcte afin de pouvoir comparer avec ces résultats. L'équation de Gross-Pitaevskii ou ses généralisations hydrodynamiques ne sont visiblement pas adaptées. Par contre, l'approximation HFB (et ses généralisations) semble être appropriée puisqu'elle tient compte aussi bien de l'effet du nuage que des corrélations entre le nuage thermique et le condensat.

Bien que la littérature sur l'approximation HFB (ou ses généralisations) soit abondante, nous avons été surpris de ne trouver aucun résultat numériquement fiable et permettant de comparer avec l'expérience. Et pour cause, les équations HFB, même dans leur version la plus simple (HFB-Popov), sont très difficilement solubles à température finie et pour un grand nombre d'atomes, de l'ordre de celui utilisé dans les expériences. Les résultats qui existaient dans la littérature sont soit dans la limite Thomas-Fermi soit pour très peu de particules. Ces deux limites sont visiblement inappropriées pour une confrontation directe avec l'expérience.

Nous nous sommes donc attelés à mettre au point un code numérique permettant de résoudre GHFB (1 et 2 voir texte) pour des nombres d'atomes dépassant les 10000. En effet, dans les travaux de Hutchinson et *al.*[5], cette barre a été atteinte mais reste insuffisante puisque les expériences sont effectuées à un ordre de grandeur de plus. Il faut néanmoins noter que le véritable défi numérique n'est pas le nombre d'atomes en lui-même, mais c'est plutôt le nombre de modes occupés à température finie.

La seconde difficulté est liée à la présence de cette moyenne anormale (densité anormale) qui, traitée dans le formalisme HFB est une quantité fondamentalement divergente à causes même de l'approximation de collisions binaires utilisée. Alors que la divergence IR est heureusement absorbée par la présence du piège (qui introduit naturellement un *cut-off* à grande distance), la divergence UV ne peut l'être que par une renormalisation à petite distance.

Nous avons constaté numériquement que les techniques de régularisation heuristique ne sont adéquates que pour des nombres d'atomes ne dépassant pas les 20000. Au-delà, nous avons dû utiliser la méthode du pseudo-potentiel qui s'avère être efficace jusqu'au 200000.

Cette technique de régularisation a été introduite dans un algorithme self-consistant tel qu'expliqué dans le texte. Il ne diffère de l'algorithme de Hutchinson et *al.* [5] que dans la façon de manipuler les divergences UV. Afin de tester notre algorithme, nous avons reproduit les résultats de [5].

Nous avons présenté les profils de densité en fonction de la température jusqu'à ce que la transition soit atteinte pour des nombres d'atomes allant jusqu'à 140000. Il faut noter en passant que le potentiel chimique est un facteur important pour la stabilité de toute la procédure de calcul. Nous avons calculé diverses quantités d'équilibre telles que le rayon du condensat et le rapport d'aspect. Nous trouvons un excellent accord avec Zawada et *al.* [7] alors que le modèle de Castin-Dum (qui prédit entre autres un rapport d'aspect constant) est clairement inadapté. Par ailleurs, l'effet de compression du condensat par le nuage, mesuré par Gerbier et *al.*[6] est aussi reproduit par nos calculs.

Au vu de ces résultats, nous sommes confiants que les approximations GHFB sont nettement plus adaptées au traitement des interactions entre le nuage et le condensat. Nous espérons avoir contribué à éclaircir un certain nombre de points qui sont restés obscurs pendant presque une décennie.

Une extension intéressante de notre travail est de résoudre les équations HFB dans le cas d'un piège anisotrope. L'intérêt est double. D'une part, la quasi-totalité des expériences sont actuellement réalisées grâce à des pièges fortement anisotropes (cigare shaped) pour produire des condensats à une et deux dimensions et, d'autre part, cela permettra de vérifier si GHFB est capable de décrire correctement les fortes anisotropies observées dans les rapports d'aspect.

La seconde extension et non des moindres, consiste à étudier la façon de tenir compte des effets à N corps. Cela sort évidemment du contexte de GHFB et du champ moyen en général. Mais certaines études récentes montrent que l'on peut contourner ce problème [77].

Appendice A

Calculs statistiques pour les gaz quantiques

Plan de l'appendice A

- 1- Introduction
- 2- Opérateur densité d'équilibre et fonction de partition Z
 - 2-1 Détermination de la densité ρ
 - 2-2 Expression de Z
 - 2-3 L'ensemble microcanonique, canonique et grand canonique
- 3- L'étude de l'hamiltonien du système
 - 3-1 Cas des Bosons
 - 3-2 La saturation des niveaux excités
 - 3-3 L'étude d'un gaz homogène
 - 3-3-1 Niveaux d'énergie
 - 3-3-2 Densité d'états
 - 3-3-3 Phénomène de condensation
 - a- Température critique T_c
 - b- Variation avec $\frac{T}{T_c}$ de la fonction condensée $\frac{N_c}{N}$
- 4- Etude d'un gaz idéal
 - 4-1 Piège harmonique à 3 dimensions
 - 4-2 Température critique T_c
 - a- Nombre de particules condensées N_c

1- Introduction

Dans cet appendice, nous rappelons quelques notions essentielles de la mécanique statistique, permettant de voir comment apparaissent les paramètres importants comme la température, le potentiel chimique, la fugacité et comment trouver les relations entre les grandeurs statistiques et les grandeurs thermodynamiques usuelles. Nous établissons les inégalités qui nous servent par la suite pour le calcul variationnel de la fonction de partition Z .

2- Opérateur densité d'équilibre et fonction de partition Z

2-1 Détermination de la densité ρ

Pour un système en équilibre thermodynamique, soumis à des contraintes l'opérateur densité d'équilibre, ρ , est déterminé par le postulat qui stipule que ρ décrit un état qui ne contient pas plus d'informations que celles fournies par les contraintes. On associe donc à ρ une quantité caractérisant l'information, puis l'on détermine ρ en maximisant cette information manquante. L'entropie statistique $S(\rho)$ caractérise précisément cette information manquante dans l'état décrit par ρ .

On définit alors ρ par deux relations :

$$S(\rho) = -k_B \text{tr}(\rho \ln \rho) \quad (\text{A-1})$$

$$\text{tr}(\rho A_i) = \langle A_i \rangle \quad (\text{A-2})$$

Où A_i est une grandeur physique.

Pour n'importe quelle variation $d\rho$ autour de la valeur d'équilibre, on doit avoir :

$$dS = 0 \quad (\text{A-3})$$

$$d(\text{tr}(\rho A_i)) = 0 \quad (\text{A-4})$$

La solution à ce problème s'écrit :

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\sum_i \lambda_i A_i} \quad (\text{A-5})$$

Où λ_i : sont les multiplicateurs de Lagrange associés à $\langle A_i \rangle$ et Z est un facteur de normalisation, appelé fonction de partition.

2-2 Expression de Z

En écrivant $\text{tr}(\rho) = 1$, on obtient :

$$Z = \text{tr}(e^{-\sum_i \lambda_i A_i}) \quad (\text{A-6})$$

La relation entre Z et les contraintes s'obtient à partir de l'équation (A-6) ou en utilisant le fait que la fonction de partition Z dépend des $\{\lambda_i\}$ et en la dérivant par rapport à λ_i :

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_i} \ln Z(\lambda_i) = \frac{1}{\text{tr}(e^{-\sum_j \lambda_j A_j})} \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \text{tr}(e^{-\sum_j \lambda_j A_j}) = -\frac{1}{Z} \text{tr}(A_i e^{-\sum_j \lambda_j A_j}) = -\langle A_i \rangle \quad (\text{A-7})$$

2-3 L'ensemble microcanonique, canonique et grand canonique

La physique statistique repose sur trois ensembles pour formuler toutes les grandeurs usuelles : l'ensemble microcanonique, canonique et grand canonique [50,78-79]. Pour l'ensemble microcanonique, on doit se restreindre aux systèmes dont les volumes sont fixés, pour des valeurs de leurs énergies totales entre E et $E+dE$. Ainsi à l'équilibre, tous les états quantiques d'un système donné d'énergie comprise entre E et $E+dE$ sont occupés avec la même probabilité [80]. L'opérateur densité ρ est un multiple de l'unité dans cette base.

Pour l'ensemble canonique, la résolution d'un problème physique est basée sur l'association d'un seul multiplicateur de Lagrange à l'énergie interne U qu'on note β . Les équations, (A-5) et (A-6), prennent la forme suivante :

$$\rho = \frac{1}{Z_c} e^{-\beta H}, \quad Z_c = \text{tr}(e^{-\beta H}) \quad (\text{A-8})$$

Pour un système d'énergie totale H contenant un nombre de particules fixé N, deux multiplicateurs β, α sont nécessaires. Dont l'un est relié à H et l'autre est relié à N. L'opérateur densité et la fonction de partition s'écrivent :

$$\rho = \frac{1}{Z_G} e^{-\beta H - \alpha N}, \quad Z_{Gc} = \text{tr}(e^{-\beta H - \alpha N}) \quad (\text{A-9})$$

3- L'étude de l'hamiltonien du système

La description d'un ensemble de particules quantiques indiscernables repose sur l'ensemble grand canonique [50,78]. En supposant que le système considéré peut échanger de l'énergie et des particules avec un réservoir, supposé beaucoup plus grand [80] pour fixer le nombre moyen de particules N et l'énergie moyenne E. On a vu précédemment que l'état d'équilibre est déterminé par la maximisation de l'information manquante, S, par rapport à la densité du système ρ . Alors en, utilisant l'équation (A-1) et en tenant compte des deux contraintes suivantes :

$$\langle N \rangle = N, \quad \langle H \rangle = E \quad (\text{A-11})$$

Où N et H sont les opérateurs nombres de particules et l'hamiltonien du système à N particules.

Nous obtenons les mêmes expressions résumées dans l'équation (A-9) citées ci-dessus.

Le paramètre β est relié à la température T par $\beta = \frac{1}{k_B T}$, le paramètre α est relié au potentiel chimique qui

constitue l'énergie à fournir pour ajouter une particule par $\alpha = -\beta\mu$, ainsi qu'à la fugacité $z = e^{-\alpha}$.

La détermination des valeurs de z et β , qui vérifient les contraintes (A-11), se fait par l'intermédiaire de :

$$N = z \frac{\partial}{\partial z} \ln Z_G(z, \beta, \Omega) \quad (\text{A-12})$$

$$E = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_G(z, \beta, \Omega) \quad (\text{A-13})$$

Qu'il suffit, d'inverser pour obtenir z et β comme fonctions de N et E.

Une fois Z_G déterminée, toutes les grandeurs thermodynamiques s'en déduisent par simple dérivation. Ainsi la pression se détermine à partir de :

$$P = k_B T \frac{\partial}{\partial \Omega} \ln Z_G(z, \beta, \Omega) \quad (\text{A-14})$$

Or la détermination de ces opérateurs pour un gaz en interaction est une tâche ardue mais qui se simplifie considérablement dans le cas d'un gaz parfait.

L'hamiltonien total est une somme d'hamiltonien à une particule :

$$H = \sum_{i=1} h_i \quad (\text{A-15})$$

Notons $\{|\varphi\rangle\}$ une base de vecteurs propres de l'hamiltonien à une particule h, et $|\varepsilon_\varphi\rangle$ l'énergie associée à $|\varphi\rangle$:

$$h|\varphi\rangle = \varepsilon_\varphi |\varphi\rangle \quad (\text{A-16})$$

En seconde quantification, l'hamiltonien total H et l'opérateur nombre de particules, N, s'écrivent :

$$H = \sum_{\varphi} \varepsilon_{\varphi} a_{\varphi}^{\dagger} a_{\varphi}, \quad N = \sum_{\varphi} a_{\varphi}^{\dagger} a_{\varphi} \quad (\text{A-17})$$

Une base d'états de l'espace de Fock est $\{|N_\varphi, N_{\varphi'}, \dots\rangle\}$ où les nombres d'occupation N_φ des états quantiques individuels valent 0 et 1 dans le cas des fermions, sont des entiers positifs ou nuls quelconques dans le cas des bosons. On note par commodité un ensemble donné $\{|\varphi\rangle\}$:

$|l\rangle = |N_\varphi, N_{\varphi'}, \dots\rangle$. On a donc :

$$N|l\rangle = N_l|l\rangle \quad (\text{A-18})$$

Avec $N_l = \sum_\varphi N_\varphi$

$$H|l\rangle = E_l|l\rangle \quad (\text{A-19})$$

Avec $E_l = \sum_\varphi N_\varphi \varepsilon_\varphi$

La fonction de partition grand canonique, Z_G , donnée en (A-9) se calcule aisément dans la base $\{|l\rangle\}$:

$$Z_G = \sum_l \exp(-\alpha N_l - \beta E_l) \quad (\text{A-20a})$$

$$Z_G = \prod_\varphi \xi_\varphi \quad (\text{A-20b})$$

Où on a posé $\xi_\varphi = \sum_{N_\varphi} \exp(-(\alpha + \beta \varepsilon_\varphi) N_\varphi)$

Cette factorisation de Z_G en produit de fonctions de partition, relatives chacune à un état quantique individuel φ est l'avantage majeur de l'utilisation du formalisme grand canonique.

3-1 Cas des Bosons

Le calcul se ramène alors à une série géométrique, soit :

$$\xi_\varphi^{Boson} = \frac{1}{1 - \exp(-\alpha - \beta \varepsilon_\varphi)} \quad (\text{A-21})$$

Le nombre de particules est alors donné par :

$$N = \sum_\varphi N_\varphi \quad (\text{A-22})$$

Avec $N_\varphi = \frac{1}{\exp \beta(\varepsilon_\varphi - \mu) - 1}$

Dans ce cas le potentiel chimique peut prendre toutes les valeurs de $-\infty$ à ε_{\min} , qui représente l'énergie du niveau fondamental de H. Pour un potentiel chimique au-delà de cette valeur, ε_{\min} , la population de ce niveau fondamental deviendrait négative, ce qui n'a bien sûr aucun sens. Les valeurs grandes et négatives de μ correspondent à un gaz bien décrit par la physique classique :

$$\mu \rightarrow -\infty \quad N_\varphi \approx \exp -\beta \varepsilon_\varphi \quad (\text{A-23})$$

3-2 La saturation des niveaux excités

Considérons maintenant la statistique de Bose Einstein en (A-22). Quand $\mu \rightarrow \varepsilon_{\min}$, à température fixée, le nombre de particules N_c dans le niveau fondamental de h tend vers l'infini :

$$\mu \rightarrow \varepsilon_{\min} \text{ Alors } N_c \square \frac{k_B T}{\varepsilon_{\min} - \mu} \quad (\text{A-24})$$

Si le gaz est confiné dans une enceinte de taille finie ou piégé par un potentiel harmonique, le spectre de H est discret. Le nombre de particules N' dans les niveaux excités de H est borné supérieurement :

$$N' = \sum_{\varphi} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\varphi} - \mu)} - 1} < N'_{\max} = \sum_{\varphi} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\varphi} - \varepsilon_{\min})} - 1} \quad (\text{A-25})$$

Où la somme est sur tous les états propres φ de H sauf l'état fondamental.

Dans ce qui suit, nous appellerons nombre de saturation la valeur de N'_{\max} .

L'existence de ce nombre, qui représente une borne supérieure au nombre de particules que l'on peut disposer dans les états autre que le niveau fondamental, peut être considérée comme une signature de la condensation de Bose Einstein ; si, à température fixée, on place dans le piège un nombre de particules N supérieur à N'_{\max} , on est certain qu'au moins $N - N'_{\max}$ particules iront se loger sur le niveau fondamental. Cet effet suffit à rendre compte des phénomènes observés dans un piège harmonique. La saturation des niveaux excités de H ne doit pas être identifiée à une transition de phase. Pour introduire cette notion, il faudra prendre la limite thermodynamique du système considéré, et voir si la densité correspondant aux N' particules disposés sur les niveaux excités reste elle aussi bornée. La réponse à cette question dépendra fortement de la dimensionnalité du système. Auparavant, nous allons étudier l'application de (A-25) au cas d'un piège harmonique, pour lequel cette notion de limite thermodynamique n'est pas nécessaire [82-85].

3-3 L'étude d'un gaz homogène

Le cas d'un gaz homogène (à la limite thermodynamique) a reçu récemment une attention particulière par les théoriciens, du fait qu'il représente un point extrême d'un gaz piégé. Nous nous intéressons maintenant à l'étudier d'une manière plus précise, c'est-à-dire on le suppose contenu dans une boîte de volume Ω qui fût le cas qu'avait considéré Einstein dans son article original. Dans cette situation, l'hamiltonien à une particule est tout simplement :

$$\hat{h} = \frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} \quad (\text{A-26})$$

Nous pouvons dire que ce gaz est caractérisé par un potentiel de piège nul ($V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) = 0$) et son hamiltonien contient seulement le terme de l'énergie cinétique $\frac{-\hbar^2 \Delta}{2m}$. Nous appliquons les conditions de limites, la solution de l'équation de Schrödinger ordinaire est triviale pour l'instant et elle correspond à un condensat plat $\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}$. Les fonctions d'ondes $\varphi_i(\mathbf{r})$ qui décrivent les particules non condensées peuvent être choisies comme des ondes planes puisqu'elles forment un ensemble complet orthogonal. Elles s'écrivent sous la forme suivante :

$$\varphi_i(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{\Omega}} \quad (\text{A-27})$$

Où $\mathbf{k}_i = \frac{2\pi}{\Omega^{1/3}}(i_x, i_y, i_z)$

3-3-1 Niveaux d'énergie

On utilise des conditions aux limites périodiques, les composantes de l'impulsion de la particule seront quantifiées et sont données par :

$$p_i = \frac{2\pi\hbar}{L} n_i, \quad (\text{A-28})$$

Où $i=x,y,z$ ni est un entier.

Et par conséquent les niveaux d'énergie s'écrivent :

$$\varepsilon_p = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (\text{A-29})$$

L'état fondamental ($n_x = n_y = n_z = 0$) a une énergie nulle $\varepsilon_0 = 0$, et l'écart d'énergie entre l'état fondamental et le premier niveau excité vaut :

$$\delta\varepsilon = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2} \quad (\text{A-30})$$

Nous verrons plus loin que la condensation de Bose Einstein apparaît pour une température T_c telle que $k_B T_c \sim \delta\varepsilon$. Cette condensation n'est donc pas due au fait que l'énergie thermique $k_B T_c$ est de l'ordre de ou plus faible que l'écart séparant l'état fondamental des autres états excités.

3-3-2 Densité d'états

On remplace la somme discrète sur les valeurs possibles des composantes (A-28) de p par une intégrale :

$$\sum_p \rightarrow \frac{1}{(2\pi\hbar/L)^3} \int_0^\infty 4\pi p^2 dp \quad (\text{A-31})$$

Et utilisant :

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}, \quad pdp = m d\varepsilon, \quad p^2 dp = \sqrt{2m\varepsilon} m d\varepsilon \quad (\text{A-32})$$

La densité $\rho(\varepsilon)$ s'écrit comme :

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\Omega m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} \sqrt{\varepsilon} \quad (\text{A-33})$$

Où le volume de la boîte est : $\Omega = L^3$. L'intégrale de la densité $\rho(\varepsilon)$ sur $d\varepsilon$, nous donne maintenant le nombre d'état possible :

$$\int_0^\infty \rho(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\infty \frac{\Omega m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon \quad (\text{A-34})$$

Il est commode, dans les calculs qui suivent, d'utiliser, au lieu de E , la variable sans dimensions $x = \frac{\varepsilon}{k_B T}$:

$$\rho(x) = \frac{\Omega}{\lambda_{dB}^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{x} \quad (\text{A-35})$$

Où λ_{dB} est la longueur de de Broglie thermique.

En appliquant cette approximation, nous pouvons calculer le nombre moyen d'occupation des états individuels :

$$I(z) = \int_0^\infty dx \rho(x) \frac{1}{z^{-1} e^x - 1} = \frac{\Omega}{\lambda_{dB}^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \frac{z \cdot e^{-x}}{1 - z e^{-x}} \quad (\text{A-36})$$

Comme x est positif et que $z < 1$ alors $z e^{-x} < 1$. Nous développons la fraction apparaissant dans (A-36) :

$$\frac{z \cdot e^{-x}}{1 - z e^{-x}} = \sum_{l=1}^{\infty} (z e^{-x})^l \quad (\text{A-37})$$

On obtient alors pour I(z) :

$$I(z) = \frac{\Omega}{\lambda_{dB}^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^{3/2}} \int_0^{\infty} du \sqrt{u} e^{-u} \quad (\text{A-38})$$

En utilisant $\int_0^{\infty} du \sqrt{u} e^{-u} = \Gamma(3/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ et en introduisant la fonction de Bose définie par :

$$g_{3/2}(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^{3/2}} \quad (\text{A-39})$$

On obtient finalement :

$$I(z) = \frac{\Omega}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(z) \quad (\text{A-40})$$

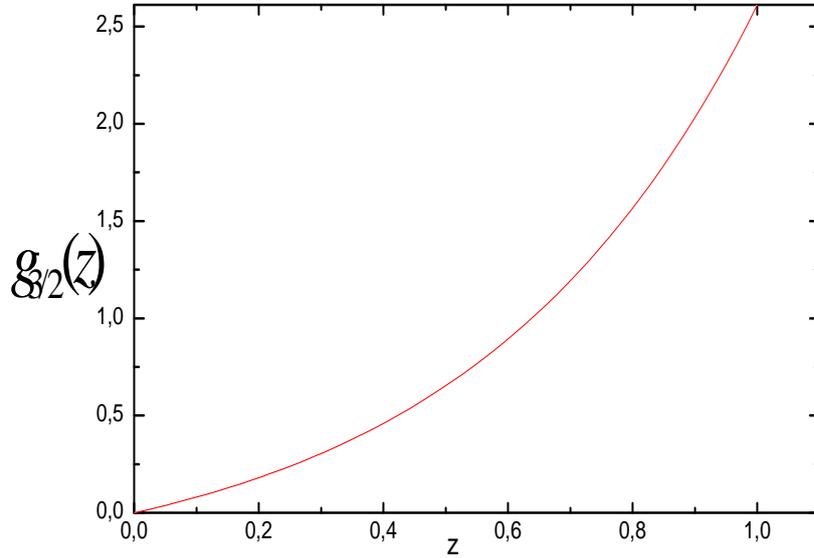


Figure A-2 : La fonction de Bose $g_{3/2}(z)$.

Notons, d'après la figure A-2 que la fonction de Bose est croissante. Pour des $z \ll 1$, la fonction de Bose est pratiquement égale à la variable z. Sa valeur maximale est en $z=1$.

Si l'on ignore les fluctuations des nombres de particules autour de leurs moyennes, on écrit N comme :

$$N = \sum_p \bar{N}_p = \sum_p \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_p} - 1} \quad (\text{A-41})$$

$$N = \frac{z}{z-1} + \frac{\Omega}{\lambda_{dB}^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{x_1}^{\infty} dx \sqrt{x} \frac{z e^{-x}}{1 - z e^{-x}} \quad (\text{A-42})$$

Où, $x_1 = \beta \varepsilon_1$, ε_1 étant l'énergie du premier niveau excité.

Nous verrons plus loin qu'aux températures où l'inégalité commence à être satisfaite, $x_1 \ll 1$, de sorte que l'on commet une erreur négligeable en étendant à 0 la borne inférieure on obtient alors pour :

$$N = \frac{z}{z-1} + \frac{\Omega}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(z) \quad (\text{A-43})$$

3-3-3 Phénomène de condensation

a- Température critique T_c

Partons d'une température très élevée, la longueur d'onde de de Broglie étant très petite devant la distance moyenne entre particule $n^{-1/3}$, on a $n\lambda^3 \ll 1$ et l'équation (A-41) a une solution z . Quand T décroît, λ_{dB} croît, et pour une certaine valeur $T = T_c$ de T , on a :

$$T = T_c, \quad n\lambda_{dB}^3 = g_{3/2}(1) \quad (\text{A-44})$$

En utilisant l'expression (A-10) de λ_{dB} , on obtient aisément :

$$k_B T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left(\frac{n}{2.612} \right)^{2/3} \quad (\text{A-45})$$

Pour cette valeur de T , le dernier terme de (A-47), $\frac{\Omega}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(z)$, est égal à N pour la valeur maximale possible $z=1$ de z .

Quand T est inférieur à T_c , λ_{dB} croît encore, et même pour $z=1$, le dernier terme (A-43) est inférieur à N .

C'est le premier terme $\frac{z}{1-z}$ qui fournit alors la population macroscopique manquante : z prend une valeur suffisamment proche de 1 pour que N_c atteigne une valeur macroscopique. Notons que le fait que z ne soit pas tout à fait égal à 1 ne change pas la valeur du dernier terme de (A-43) puisque $g_{3/2}(z)$ est continue en $z=1$.

Quand N est fixé et qu'on diminue progressivement T , une population macroscopique N_c se condense dans l'état fondamental quand T devient inférieur à T_c .

b-Variation avec $\frac{T}{T_c}$ de la fonction condensée $\frac{N_c}{N}$

Pour des températures inférieures à T_c , (A-43) s'écrit :

$$N = N_c + \frac{\Omega}{\lambda_{dB}^3(T)} g_{3/2}(z), \quad T < T_c \quad (\text{A-46})$$

En éliminant $\Omega g_{3/2}(1)$ entre (A-44) et (A-46) et en utilisant le fait que $\lambda_{dB}(T)$ est proportionnel à $T^{-1/2}$, on obtient :

$$N = N_c + \frac{\lambda_{dB}^3(T_c)}{\lambda_{dB}^3(T)} N = N_c + \left(\frac{T}{T_c} \right)^{2/3} N, \quad T < T_c \quad (\text{A-47a})$$

C'est-à-dire encore :

$$\frac{N_c}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{2/3} \quad (\text{A-47b})$$

4- Etude d'un gaz idéal

Soit un système de N bosons sans interaction de masse m et dans un piège harmonique, en équilibre thermodynamique à température T . Son état fondamental est donné par :

$$|\varphi_N\rangle = \frac{(a_0^+)^N}{\sqrt{N!}}|0\rangle \quad (\text{A-48})$$

Où $a_{k=0}^+$ crée une particule dans l'état $k=0$, et $|0\rangle$ est le vide nu.

En passant à l'ensemble grand canonique, on peut calculer la fonction de partition et extraire le nombre de particules moyennes dans l'état k :

$$\langle a_k^+ a_k \rangle = \frac{1}{\exp(\beta(E - \mu)) - 1} = f_B(E) \quad (\text{A-49})$$

Où $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ est l'énergie, μ son potentiel chimique.

En faisant sortir $\exp(-\beta\mu)$ de (A-49), le nombre de totale, N , de particules du système s'écrit :

$$N = \sum_k \frac{1}{z^{-1} \exp \beta E - 1} \quad (\text{A-50})$$

Maintenant, analysant le cas ou la distribution de Bose Einstein, $f_B(E)$, varie lentement sur l'axe des énergies, la sommation dans l'équation (A-50) peut être remplacé par une intégrale sur la densité d'état et le chemin le plus simple pour étudier ces différents cas est d'écrire N comme :

$$N = N_c + \int dE g(E) f_B(E, T, N) \quad (\text{A-51})$$

Où $N_c = \frac{1}{\exp(-\beta\mu) - 1}$ est le nombre de particules condensées et $g(E)$ est la densité d'état.

4-1 Piège harmonique à 3 dimensions

En général pour un piège harmonique anisotrope, on a :

$$V_{\text{piège}}(r) = \frac{1}{2} m [\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2] \quad (\text{A-52})$$

En effectuant le changement de variables suivant :

$$\frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 = \xi^2, \quad \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 = \eta^2, \quad \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 = \zeta^2 \quad (\text{A-53})$$

On obtient, après un calcul simple l'expression :

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{2\hbar^3 \omega_x \omega_y \omega_z} \varepsilon^2 \quad (\text{A-54})$$

Dans le cas d'un piège harmonique isotrope :

$$\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega \quad (\text{A-55})$$

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{2\hbar^3 \omega^3} \varepsilon^2 \quad (\text{A-56})$$

Prenons l'énergie de l'état fondamental comme origine des énergies (énergie nulle). Comme $\rho(\varepsilon) \propto \varepsilon^2$ s'annule en $\varepsilon = 0$, l'expression semi classique (A-51) ne contient pas le nombre N_c de particules dans l'état fondamental et représente plutôt le nombre N_e de particules dans les états excités. En reportant (A-56) dans (A-51), en utilisant (A-51) et en effectuant le changement de variables $\beta\varepsilon = x$, on obtient :

$$N_{\text{excites}} = \frac{1}{2} \frac{(kT)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^3} \int_0^{\infty} du u^2 e^{-u} = \frac{(kT)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} g_3(z) \quad (\text{A-57})$$

En toute rigueur, la borne inférieure de l'intégrale de (A-57) devrait être $\beta\hbar\omega_i$ (où ω_i est la plus petite des 3 fréquences $\omega_1, \omega_2, \omega_3$).

4-2 Température critique T_c

a- Nombre de particules condensées N_c

La fugacité z varie dans l'intervalle 0-1. Dans cet intervalle, la fonction de Bose $g_3(z)$ est une fonction croissante de z et reste donc inférieure à sa valeur maximale :

$$g_3(z) = \zeta(3) = 1.2 \quad (\text{A-58})$$

Quand t'on diminue T à partir d'une valeur élevée, le nombre total N de particules restant constant, on atteint une valeur critique de T , $T=T_c$, pour laquelle le nombre total N de particules est égal à la valeur maximale possible $(N_e)_{\max}$ de N_e atteinte pour $z=1$:

$$N = \frac{(kT_c)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} g_3(1) \quad (\text{A-59})$$

Si l'on diminue T en dessous de T_c , les états excités ne peuvent accueillir toutes les particules et l'excès de particules se condense dans l'état fondamental, dont la population :

$$N_c = \frac{z}{1-z} \quad (\text{A-60})$$

devient macroscopique. La fugacité z est alors très proche de 1; on peut la remplacer par 1 dans l'expression de la somme sur les états excités puisque $g_3(z)$ est continue en $z=1$. On obtient ainsi :

$$T \leq T_c \quad N = \frac{z}{1-z} + \frac{(kT)^3}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} g_3(1) \quad (\text{A-61})$$

En remplaçant $\frac{z}{1-z}$ par N_c dans (A-60) et en ré exprimant $\frac{1}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} g_3(1)$ à partir de N et T_c grâce à (A-59), on obtient:

$$N = N_c + \frac{T^3}{T_c^3} N \quad (\text{A-62})$$

C'est-à-dire encore :

$$\frac{N_c}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \quad (\text{A-63})$$

Appendice B

Les harmoniques sphériques relations d'orthogonalisation

B-1 Les harmoniques sphériques

Les harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ à trois dimensions sont solutions de :

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial^2 \theta} + l(l+1) \right] Y_{lm}(\theta, \varphi) = 0 \quad (\text{B-1})$$

et avec la condition de normalisation nous aurons :

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (\text{B-2})$$

$$0 \leq l, l' \leq \infty, \quad -l \leq m, m' \leq l$$

Nous explicitons l'harmonique sphérique :

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right] (-1)^m P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (\text{B-3})$$

La fonction associée au polynôme de Legendre est définie par :

$$P_l^m(x) = \begin{cases} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d^{|m|}x} P_l(x), & \text{si } m = |m| \\ (-1)^{|m|} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d^{|m|}x} P_l(x), & \text{si } m = -|m| \end{cases} \quad (\text{B-4})$$

Toutes les fonctions de Legendre sont exprimées en termes de fonctions avec un nombre quantique azimutal positif. La fonction de Legendre $P_l(x)$ est donnée par la formule de Rodrigues pour la fonction de Legendre [87] :

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d^l x} (x^2 - 1)^l, \quad 0 \leq l \quad (\text{B-5})$$

L'opérateur Laplacien en coordonnées sphériques s'écrit :

$$\Delta = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial^2 r_i} = \frac{1}{r^2} [\Delta_r + \Delta_{\theta, \varphi}] \quad (\text{B-6})$$

$$\Delta = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial^2 r_i} = \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial^2 \varphi} \right) \right] \quad (\text{B-7})$$

et nous trouvons aussi :

$$\sum_{i=1}^3 r_i \frac{\partial}{\partial r_i} = r \frac{\partial}{\partial r} \quad (\text{B-8})$$

Ou nous utilisons les coordonnées sphériques conventionnelle :

$$\begin{aligned}
r_1 &= x = r \sin \theta \cos \varphi \\
r_2 &= y = r \sin \theta \sin \varphi \\
r_3 &= z = r \cos \theta
\end{aligned} \tag{B-9}$$

Nous avons besoin de (B-8) quand on dérive les modes quasi particules dans la limite Thomas Fermi pour un potentiel harmonique. Pour la partie angulaire de l'opérateur énergie cinétique nous avons :

$$\Delta_{\theta,\varphi} Y_{lm}(\theta, \varphi) = -l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{B-10}$$

Et en utilisant l'expression, nous trouvons :

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\theta, \varphi) = im Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{B-11}$$

La signification physique est la suivante :

$$L^2 = -\hbar^2 \Delta_{(\theta,\varphi)} \tag{B-12a}$$

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{B-12b}$$

$$L_3 \equiv L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{B-12c}$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{B-12d}$$

Où L_z est l'opérateur moment cinétique suivant l'axe des z. En utilisant les expressions (B-6), (B-12a) et (B-12c) on aura :

$$[\Delta, L^2] = [\Delta, L_z] = [L^2, L_z] = 0 \tag{B-13}$$

Si l'hamiltonien H consiste seulement en l'opérateur énergie cinétique et le potentiel à symétrie sphérique :

$$\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \tag{B-14}$$

Il est possible de trouver simultanément les fonctions propres communes à \tilde{H}, L^2 et L_z .

Une propriété importante des harmoniques sphériques est la relation de symétrie :

$$Y_{lm}^*(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, -\varphi) \tag{B-15a}$$

$$Y_{l-|m|}(\theta, \varphi) = (-1)^{|m|} Y_{l|m|}^*(\theta, \varphi) \tag{B-15b}$$

$$Y_{lm}(-\theta, -\varphi) = (-1)^m Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{B-15c}$$

Nous notons aussi d'autres propriétés des harmoniques sphériques :

$$\begin{aligned}
\Delta Y_{lm}(\theta, \varphi) \frac{f(r)}{r} &= \frac{1}{r^2} [\Delta_r + \Delta_{(\theta,\varphi)}] Y_{lm}(\theta, \varphi) \frac{f(r)}{r} \\
&= Y_{lm}(\theta, \varphi) \frac{d^2}{dr^2} f(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} Y_{lm}(\theta, \varphi) \frac{f(r)}{r}
\end{aligned} \tag{B-16}$$

Un cas spécial du théorème d'addition pour les harmoniques sphériques est :

$$\sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{(2l+1)}{4\pi} \tag{B-17}$$

En développant l'onde plane en harmoniques sphériques nous trouvons l'équation de Rayleigh :

$$\begin{aligned}
e^{iqr} &= \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) j_n(qr) P_n(q_0 r_0) \\
&= 4\pi \sum_{n=0}^{\infty} i^n j_n(qr) \sum_{m=-n}^n Y_{nm}^*(q_0) Y_{nm}(r_0)
\end{aligned}
\tag{B-18}$$

Dans l'équation (B-18) nous utilisons que :

$$P_n(q_0 r_0) = \frac{4\pi}{2n+1} \sum_{m=-n}^n Y_{nm}(q_0) Y_{nm}^*(r_0)
\tag{B-19}$$

Ici $q_0 r_0$ représente l'angle entre q_0 et r_0 .

Appendice C

La théorie de la diffusion : longueur de diffusion de l'onde s

C-1 Introduction

Le problème de la diffusion élastique entre deux particules de même masse interagissant *via* un potentiel $V(r_1 - r_2)$ est régi par l'hamiltonien :

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(r_1 - r_2) \quad (\text{C-1})$$

Il est commode de séparer le mouvement du centre de masse et celui du mouvement relatif en utilisant les opérateurs position et impulsion du centre de masse R_G et P_G de coordonnée relative (r et p) :

$$\left\{ \begin{array}{l} R_G = (r_1 + r_2)/2, \quad r = (r_1 - r_2) \\ P_G = p_1 + p_2, \quad p = (p_1 - p_2)/2 \end{array} \right\} \quad (\text{C-2})$$

L'hamiltonien (C-1) devient alors :

$$H = \frac{P_G^2}{4m} + \frac{p^2}{m} + V(r) \quad (\text{C-3})$$

Le problème se décompose en deux ; celui d'une particule libre de masse $2m$, et celui d'une particule de masse $m_r = \frac{m}{2}$ (dite masse réduite) soumise à un potentiel $V(r)$. Toutes les propriétés collisionnelles relèvent de cette particule fictive :

C-2 Amplitude de diffusion

Le traitement quantique du processus de diffusion d'une particule sur un potentiel peut être fait en terme de vecteurs propres de l'hamiltonien du mouvement relatif, d'énergie positive $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}$:

$$\left(\frac{p^2}{m} + V(r) \right) \psi_k(r) = E_k \psi_k(r) \quad (\text{C-4})$$

Où on suppose que le potentiel $V(r)$ tend vers 0 lorsque r tend vers l'infini. On définit b la portée du potentiel, l'extension de la région sur laquelle le potentiel d'interaction est non nul, si le potentiel a une extension finie, une définition plus générale est donnée dans la réf. [86].

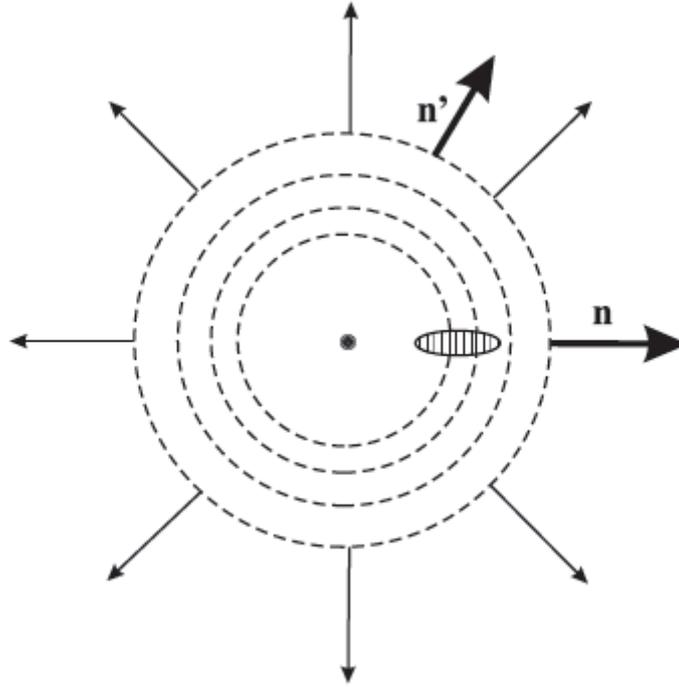


Figure C-1: Représentation schématique de la diffusion d'un paquet d'onde se propageant le long de la direction n , par un potentiel $V(r)$

Loin de la région d'interaction r très supérieur b on cherche des solutions asymptotiques du type :

$$\psi_k(r) \approx e^{ik \cdot r} + f_k(k, n, n') \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{C-5})$$

L'interprétation physique de la solution est claire, il s'agit de la superposition de l'onde plane de l'atome incident, et d'une onde sphérique sortante relative à la composante diffusée. Pour chaque position l'amplitude de diffusion $f(k)$ dépend de l'énergie de la particule E_k de la direction d'observation n' , et de la direction initiale n (voir figure 1). A partir de (C-4), on trouve que les solutions stationnaires de diffusion vérifient la condition suivante [87] :

$$f_k(k, n, n') = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik' \cdot r'} V(r') \psi_k(r') d^3 r' \quad (\text{C-6})$$

A partir de cette dernière on obtient directement la section différentielle et totale de diffusion du potentiel :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(k, n, n')|^2, \quad \sigma(k, n) = \int |f_k(k, n, n')|^2 d^2 n' \quad (\text{C-7})$$

Il est intéressant de noter que la solution (C-6) est implicite puisqu'elle relie la valeur asymptotique de $\psi_k(r')$ à sa valeur dans la région de diffusion. Cependant dans la limite de faible énergie, lorsque k très inférieur $1/b$, le problème se simplifie considérablement. Les contributions de l'intégrale (C-6) proviennent uniquement du volume à l'intérieur de la portée effective du potentiel dans la limite de faible énergie $kr' \ll 1$ on peut alors remplacer l'exponentielle par 1 ; ce qui enlève toute dépendance de la direction et donc rend la diffusion isotrope. L'état stationnaire de diffusion s'écrit alors :

$$\psi_k(r) \approx e^{ik \cdot r} + f_k(k) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{C-8})$$

C-3 Potentiel radial et développement en ondes partielles

Le calcul exact de l'amplitude de diffusion nécessite la solution de l'équation de Schrödinger (C-4). Ce problème, qui normalement est extrêmement compliqué, peut être simplifié largement en considérant des potentiels à symétrie sphérique. Dans ce cas l'amplitude de diffusion dépend uniquement de l'angle entre n et n'_b est donc $f_k = f_k'$. Il est utile alors de définir z la direction de l'onde incidente et de décomposer l'onde diffusée sur la base des vecteurs propres de L_z et L^2 où L est l'opérateur moment angulaire relatif :

$$\psi_k(r) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_m^l(\theta, \varphi) \frac{u_{k,l,m}(r)}{r} \quad (C-9)$$

Où φ est l'angle azimutal autour de l'axe des z , et Y_m^l sont les harmoniques sphériques. L'onde plane incidente a un moment angulaire nul par rapport à l'axe des z , sa décomposition en harmoniques sphériques ne contiendra que des composantes $m_z=0$ et on trouve que [88] :

$$e^{ikz} \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) ((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr}), \quad kr \gg 1 \quad (C-10)$$

Où $P_l(\cos \theta)$ sont des polynômes de Legendre. On trouve alors que l'onde plane incidente est la superposition d'ondes sphériques $P_l(\cos \theta)$ entrantes et sortantes, dont la phase relative dépend du moment angulaire relatif. Grâce au développement (C-10) on peut écrire la valeur asymptotique de l'expression (C-9) en terme d'harmoniques sphériques :

$$\psi_k(r) \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) ((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{ikr}) \quad (C-11)$$

Les déphasages $\delta_l(k)$ sont réels car la symétrie sphérique du potentiel interdit toute redistribution de courant entre les différentes ondes partielles. Le calcul des états stationnaires de diffusion se réduit à la détermination des coefficients $\delta_l(k)$ en insérant la solution (C-9) dans l'équation de Schrödinger (C-4). On ne considère

que les contributions $m=0$. Si les $\frac{u_k}{r}$ sont réguliers à l'origine, ils satisfont l'équation de Schrödinger 1D :

$$u''_{k,l}(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m_r}{\hbar^2} V(r)\right) u_{k,l}(r) = 0 \quad (C-12)$$

En égalisant les valeurs asymptotiques de (C-9) et (C-11) on obtient :

$$u_{k,l}(r) \approx ((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{ikr}) \quad (B-13)$$

L'amplitude de diffusion f_k et la section efficace de diffusion se déduisent directement de la soustraction de (C-10) de (C-11) :

$$f_k(\theta, \varphi) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta) \quad (C-14)$$

Les $\delta(k)$ se calculent directement en intégrant l'équation (C-12) :

$$\sigma(k) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(k), \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (C-15)$$

C-4 Collisions entre particules identiques

La diffusion entre particules identiques nécessite un traitement particulier car, à cause du principe de symétrisation, la fonction d'onde du système doit être symétrique ou antisymétrique selon qu'on considère des bosons ou des fermions. Ceci implique que les états stationnaires de diffusion qu'on vient de traiter doivent satisfaire les bonnes propriétés de symétrie par échange de particule. L'échange des particules dans

un problème de diffusion équivaut au changement de l'angle θ avec $\pi - \theta$, la solution (C-5) pour un potentiel central s'écrit :

$$\psi_k(r) \approx e^{ik \cdot r} + \varepsilon e^{-ikr} + \frac{e^{ikr}}{r} (f_k(\theta, \varphi) + \varepsilon f_k(\pi - \theta, \varphi)) \quad (C-16)$$

Où ε vaut +1 pour des bosons et -1 pour des fermions. La section efficace différentielle devient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta, \varphi) + \varepsilon f_k(\pi - \theta, \varphi)|^2 \quad (C-17)$$

La section efficace de diffusion s'obtient par intégration de (C-17), la nouveauté est que dans le cas des particules identiques, à cause de la parité des polynômes de Legendre.

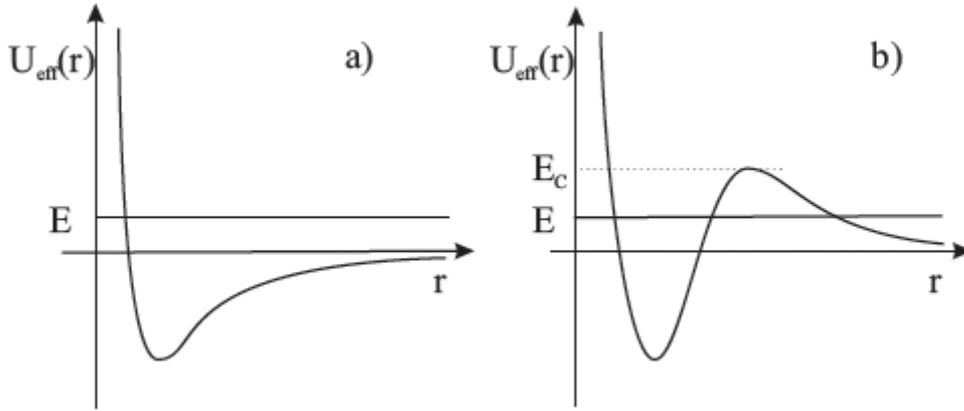


Figure C-2 : Potentiel effectif de l'interaction atome-atome pour a) $l=0$, collision en onde $-s$, b) l collision en onde supérieure. E est l'énergie du mouvement relatif, et E_c est la hauteur de la barrière centrifuge.

$(-1)^l$, seulement certaines ondes partielles donnent une contribution à la section efficace de diffusion : celles en l pair pour les bosons, et celles en l impair pour les fermions. Pour des particules identiques la section efficace de diffusion s'écrit :

$$\sigma(k) = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l \text{ pair}} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad \text{Pour les bosons} \quad (C-18)$$

$$\sigma(k) = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l \text{ impair}} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad \text{Pour les fermions} \quad (C-19)$$

C-5 Limite de faible énergie

Les propriétés de diffusion dans la limite où l'énergie du centre de masse est très faible par rapport à la portée du potentiel se déduisent par la résolution de l'équation (C-12) en négligeant le terme k^2 . Il est important de remarquer que le potentiel effectif du problème radial comprend deux termes : le premier est celui de l'interaction atome-atome, qui a pour origine le déphasage entre les ondes sphériques entrantes et sortantes, le deuxième, a pour origine la barrière centrifuge due au moment angulaire relatif des atomes. Ce dernier terme, qui est présent pour toutes les ondes partielles sauf $l=0$, joue un rôle important sur les déphasages $\delta_l(k)$ car, en étant répulsif, peut masquer le potentiel d'interaction atome-atome, et donc annuler les $\delta_l(k)$.

Pour des faibles énergies les $\delta_l(k)$ ont une dépendance du type [87] :

$$\delta_l(k) \propto k^{2l+1} \quad (\text{C-20})$$

Ce qui donne les amplitudes de diffusion :

$$f_k(\theta, \varphi) \propto k^{2l} \quad (\text{C-21})$$

Les sections efficaces de diffusion pour les ondes partielles

$$\sigma_l(k) = \frac{8\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \propto k^{4l} \quad (\text{C-22})$$

On déduit de cette expression, à faible température, pour les collisions en onde s , la section de diffusion prend une valeur constante :

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_{l=0}(k) = 8\pi a^2 \text{ Pour particules indiscernables bosoniques} \quad (\text{C-23a})$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_{l=0}(k) = 4\pi a^2 \text{ Pour particules discernables} \quad (\text{C-23b})$$

où a est la longueur de diffusion définit par :

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k} \quad (\text{C-24})$$

Appendice D

L'hamiltonien à N particules

1. Le formalisme de la seconde quantification

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

$$[a_\alpha, a_\beta^+] = \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{D-1})$$

Tous les autres commutateurs étant nuls.

En outre, nous trouvons les propriétés suivantes :

$$\langle \text{vide} | \text{vide} \rangle = 1, \quad a_\alpha | \text{vide} \rangle = 0 \quad (\text{D-2a})$$

$$a_\alpha | \dots, n_\alpha, \dots \rangle = n_\alpha^{1/2} | \dots, n_\alpha - 1, \dots \rangle$$

$$a_\alpha | \dots, n_\alpha, \dots \rangle = (n_\alpha + 1)^{1/2} | \dots, n_\alpha + 1, \dots \rangle \quad (\text{D-2b})$$

$$a_\alpha^+ a_\alpha | \dots, n_\alpha, \dots \rangle = n_\alpha | \dots, n_\alpha, \dots \rangle$$

Où n_α est le nombre de particules dans l'état α .

Maintenant nous pouvons écrire les fonctions d'ondes en termes d'onde planes :

$$\psi(r) = \sum_k \langle r | k \rangle a_k, \quad \psi^+(r) = \sum_k \langle k | r \rangle a_k^+ \quad (\text{D-3})$$

La relation de commutation en termes d'opérateurs s'écrit alors :

$$[\psi(r), \psi^+(r')] = \sum_k \langle r | k \rangle \langle k | r' \rangle = \delta(r - r') \quad (\text{D-4a})$$

Ce formalisme consiste à traiter les fonctions d'ondes comme des opérateurs

Ainsi, tout opérateur à une particule (somme symétrique d'opérateurs à une particule) s'écrit :

$$F = \sum_i f(i) = \sum_\alpha \sum_\beta a_\beta^+ a_\alpha \langle \varphi_\beta | f | \varphi_\alpha \rangle \quad (\text{D-5})$$

Tout opérateur à deux particules s'écrit sous la forme suivante :

$$G = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} g(i, j) = \frac{1}{2} \sum_\delta \sum_\gamma \sum_\beta \sum_\alpha a_\delta^+ a_\gamma^+ a_\beta a_\alpha \langle \delta\gamma | g | \beta\alpha \rangle \quad (\text{D-6})$$

Avec $g(i, j) = g(j, i)$.

2-Dérivation de l'hamiltonien de HFB

Dans le calcul suivant, nous commencerons de l'hamiltonien (II-1) et nous utilisons l'approximation de Bogoliubov, on aboutit à :

$$H = \int d^3 r \left\{ \varphi_0^* (h_0 - \mu) \varphi_0 + \tilde{\psi}^+ (h_0 - \mu) \tilde{\psi} + \varphi_0^* (h_0 - \mu) \tilde{\psi} + \tilde{\psi}^+ (h_0 - \mu) \varphi_0 \right\} \quad (\text{D-7})$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{g}{2} \int d^3 r \left\{ |\varphi_0|^4 + (\varphi_0^* |\varphi_0|^2 + \varphi_0^{*2} \varphi_0) \tilde{\psi} + (|\varphi_0|^2 \varphi_0 + \varphi_0^* \varphi_0^2) \tilde{\psi}^+ \right\} \\
& + \frac{g}{2} \int d^3 r \left\{ \varphi_0^{*2} \tilde{\psi} \tilde{\psi} + \varphi_0^2 \tilde{\psi} \tilde{\psi}^+ + 4 |\varphi_0|^2 \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} + 2 \varphi_0^* \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \tilde{\psi} + 2 \varphi_0 \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} + \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \tilde{\psi} \right\}
\end{aligned}$$

Maintenant nous pouvons écrire l'hamiltonien sous la forme suivante :

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + H_3 + H_4 \quad (\text{D-8})$$

$$H_0 = \int dr \varphi_0^* \left\{ h_0 - \mu + \frac{g}{2} |\varphi_0|^2 \right\} \varphi_0 \quad (\text{D-9a})$$

$$H_1 = \int dr \left\{ \varphi_0^* (h_0 - \mu + g |\varphi_0|^2) \tilde{\psi} + \tilde{\psi}^+ (h_0 - \mu + g |\varphi_0|^2) \varphi_0 \right\} \quad (\text{D-9b})$$

$$H_2 = \int dr \left\{ \tilde{\psi}^+ (h_0 - \mu + 2g |\varphi_0|^2) \tilde{\psi} + \frac{g}{2} (\varphi_0^{*2} \tilde{\psi} \tilde{\psi} + \varphi_0^2 \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+) \right\} \quad (\text{D-9c})$$

$$H_3 = \int dr g \left\{ \varphi_0^* \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \tilde{\psi} + \varphi_0 \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \right\} \quad (\text{D-9d})$$

$$H_4 = \int dr \frac{g}{2} \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \tilde{\psi} \quad (\text{D-9e})$$

Il est commode de simplifier les termes cubiques et quadratiques en introduisant par l'approximation HFB :

$$a_i^+ a_j a_k \approx \langle a_i^+ a_j \rangle a_k + \langle a_i^+ a_k \rangle a_j + \langle a_j a_k \rangle a_i^+ \quad (\text{D-10})$$

$$a_i^+ a_j^+ a_k a_l \approx \langle a_i^+ a_j^+ \rangle a_k a_l + \langle a_i^+ a_k \rangle a_j^+ a_l + \langle a_i^+ a_l \rangle a_j^+ a_k + \langle a_j^+ a_l \rangle a_i^+ a_k + \langle a_j^+ a_k \rangle a_i^+ a_l + \langle a_k a_l \rangle a_i^+ a_j^+$$

(D-4)

Ecrivant ceci en termes d'opérateurs de fluctuation, nous aurons pour H_3

$$H_3 \approx g \int dr \left\{ \varphi_0^* (2 \langle \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \rangle \tilde{\psi} + \langle \tilde{\psi} \tilde{\psi} \rangle \tilde{\psi}^+) + \varphi_0 (\langle \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \rangle \tilde{\psi} + 2 \langle \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \rangle \tilde{\psi}^+) \right\} \quad (\text{D-11})$$

$$= g \int dr \left\{ (2 \tilde{n} \varphi_0^* + \tilde{m}^* \varphi_0) \tilde{\psi} + (2 \tilde{n} \varphi_0 + \tilde{m} \varphi_0^*) \tilde{\psi}^+ \right\} \quad (\text{D-12})$$

et pour H_4

$$H_4 \approx \frac{g}{2} \int dr \left\{ 4 \tilde{n} \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} + \tilde{m}^* \tilde{\psi} \tilde{\psi} + \tilde{m} \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi}^+ \right\} \quad (\text{D-13})$$

3- L'expression de la densité non condensée et de la densité anormale

Nous définissons les quantités importantes qui nous servent au chapitre III en termes de matrice par :

$$\tilde{n}_{ij} = \langle \tilde{\psi}^+ \tilde{\psi} \rangle \equiv \langle a_j^+ a_i \rangle, \quad \tilde{m}_{ij} = \langle \tilde{\psi} \tilde{\psi} \rangle \equiv \langle a_j a_i \rangle \quad (\text{D-14})$$

Elles sont symétriques :

$$\tilde{n}_{ij} = \tilde{n}_{ji}^*, \quad \tilde{m}_{ij} = \tilde{m}_{ji} \quad (\text{D-15})$$

Où \tilde{n}_{ij} et \tilde{m}_{ij} représentent les matrice densités non condensées et densités anormales respectivement.

Appendice E

Dérivation de l'équation de Gross Pitaevskii et limite Thomas Fermi

E-1 Principe du calcul

Dans la représentation de Heisenberg, l'équation de Schrödinger dépendant du temps de N particules identiques en interaction, piégées dans un potentiel dépendant du temps est obtenu en écrivant :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r_1, r_2, \dots, t) = [H, \psi] \quad (\text{E-1})$$

où en représentation position :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r_1, r_2, \dots, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i \psi(r_1, r_2, \dots, t) + \sum_{i=1}^N V_{trap}(r_i, t) \psi(r_1, r_2, \dots, t) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(r_i - r_j) \psi(r_1, r_2, \dots, t) \quad (\text{E-2})$$

E-2 Equations de Lagrange pour un champ satisfaisant à un principe de moindre action

On prend un champ scalaire complexe $\psi(r, t)$, la densité Lagrangienne L fonction réelle de ψ ,

$$\psi^*, \nabla \psi, \nabla \psi^*, \dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial t}, \dot{\psi}^* = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}, \text{ l'action S est :}$$

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3 r L \quad (\text{E-4})$$

D'après le principe de moindre action, l'action S doit être extrémale, c-à-d s'annuler pour toute variation infinitésimale $\delta\psi$, $\delta\psi^*$ satisfaisant :

$$\delta\psi(r, t_1) = \delta\psi(r, t_2) = 0, \quad \forall r \quad (\text{E-5})$$

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

$$\nabla \delta\psi = \delta \nabla \psi \quad (\text{E-6a})$$

$$\delta \dot{\psi} = \frac{\partial}{\partial t} \delta\psi \quad (\text{E-6b})$$

Et en effectuant un certain nombre d'intégration par parties, on obtient, compte tenu de (E-5)

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3 r \left\{ \delta\psi^* \left[-\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}^*} + \frac{\partial L}{\partial \psi^*} - \nabla \cdot \frac{\partial L}{\partial \nabla \psi^*} \right] + \text{terme analogue en } \delta\psi \right\} \quad (\text{E-7})$$

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

$$-\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}^*} + \frac{\partial L}{\partial \psi^*} - \nabla \cdot \frac{\partial L}{\partial \nabla \psi^*} = 0 \quad (\text{E-8})$$

E-3 L'équation de Schrödinger dépendant du temps déduite d'un principe de moindre action

E-3-1 Cas d'une particule unique soumise à un potentiel extérieur $V_{trap}(r)$

La densité de Lagrangien pour le champ $\psi(r, t)$:

$$L = i \frac{\hbar}{2} [\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi] - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - V_{trap}(r) \psi^* \psi \quad (\text{E-9})$$

L'équation de Lagrange associée à (E-9)

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}^*} = -i\frac{\hbar}{2}\psi, \quad \frac{\partial L}{\partial \psi^*} = i\frac{\hbar}{2}\dot{\psi} - V_{trap}\psi, \quad \frac{\partial L}{\partial \nabla \psi^*} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla \psi \quad (\text{E-10})$$

En reportant (E-10) dans (E-8), on obtient l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V_{trap} \psi \quad (\text{E-11})$$

E-3-2 Généralisation à N particules identiques en interaction

On va prendre maintenant

$$L = i\frac{\hbar}{2} [\dot{\psi}^* \psi - \dot{\psi} \psi^*] - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - (V_{trap}(r) + 1/2 \sum_{i,j \neq i} V(r_i - r_j)) \psi^* \psi \quad (\text{E-12})$$

On vérifie alors que l'équation de Lagrange associée à (E-12) coïncide avec l'équation de Schrödinger (E-2).

E-3-3 Approximation de la fonction d'onde de N bosons identiques par un produit de N fonctions d'ondes identiques

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

$$\psi(r_1, \dots, r_N, t) = \varphi(r_1, t) \varphi(r_2, t) \dots \varphi(r_N, t) \quad (\text{E-13})$$

Pour obtenir la meilleure fonction d'onde individuelle $\varphi(r, t)$, il faut maintenant reporter (E-13) dans (E-12), puis le L ainsi obtenu dans S donné par (E-4), puis chercher le $\varphi(r, t)$ qui minimise S. De (E-13), on déduit :

$$\dot{\psi}(r, t) = \sum_{i=1}^N \dot{\varphi}(r_i, t) \prod_{i \neq j} \varphi(r_j, t) \quad (\text{E-14})$$

En reportant (E-13) et (E-14) dans (E-12), puis dans (E-4), on obtient en supposant $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ N \int d^3 r \left[\varphi^* \dot{\varphi} - \dot{\varphi}^* \varphi - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \varphi^* \cdot \nabla \varphi - V_{trap} \varphi^* \varphi \right] + \frac{N(N-1)}{2} \iint d^3 r d^3 r' |\varphi(r)|^2 |\varphi(r')|^2 V(r-r') \right\} \quad (\text{E-15})$$

La variation δS de S correspondant à des variations $\delta \varphi$ et $\delta \varphi^*$ se calcule alors aisément en utilisant

$\delta \dot{\varphi} = \frac{\partial}{\partial t} \delta \varphi$ et $\nabla \delta \varphi = \delta \nabla \varphi$ et en effectuant des intégrations par parties. En annulant le coefficient de $\delta \varphi^*$ dans l'intégrale sur r, on obtient l'équation :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(r, t) + V_{trap} \varphi(r, t) + (N-1) \left[\int d^3 r' V(r-r') |\varphi(r', t)|^2 \right] \varphi(r, t) \quad (\text{E-16})$$

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

Si on remplace dans (E-16), N-1 par N (car N est supérieur devant 1 et $V(r-r')$ par $g \delta(r-r')$), on obtient l'équation de Gross Pitaevskii dépendante du temps :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(r, t) + V_{trap} \varphi(r, t) + Ng |\varphi(r, t)|^2 \varphi(r, t) \quad (\text{E-17})$$

E-3-1 Régime Thomas Fermi

Dans le régime de forte densité atomique, on néglige le terme énergie cinétique de l'équation de Gross Pitaevskii, et l'équation prend la forme suivante :

$$V_{\text{trap}}(r)\varphi(r) + A|\varphi(r)|^2 \varphi(r) = \mu\varphi(r) \quad (\text{E-18})$$

Où la solution s'écrit par :

$$\varphi_{\text{TF}}(r) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\mu - V_{\text{trap}}(r)}{A}} & \text{si } V_{\text{trap}}(r) < \mu \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{E-19})$$

On donne les résultats pour différents cas :

$$\mu = \frac{1}{2} \left(\frac{3A}{2} \right)^{2/3}, \quad \varphi_{\text{TF}}(r) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\mu - 1/2x^2}{A}} & \text{si } 1/2x^2 < \mu \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{E-20a})$$

$$\mu = \left(\frac{\alpha A}{\pi} \right)^{1/2}, \quad \varphi_{\text{TF}}(x, y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\mu - 1/2(x^2 + \alpha^2 y^2)}{A}} & \text{si } 1/2(x^2 + \alpha^2 y^2) < \mu \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{E-20b})$$

$$\mu = \frac{1}{2} \left(\frac{15\alpha A}{4\pi} \right)^{2/5}, \quad \varphi_{\text{TF}}(\rho, z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\mu - 1/2(\rho^2 + \alpha^2 z^2)}{A}} & \text{si } 1/2(\rho^2 + \alpha^2 z^2) < \mu \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{E-20c})$$

$$\mu = \frac{1}{2} \left(\frac{15A}{4\pi} \right)^{2/5}, \quad \varphi_{\text{TF}}(r) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\mu - 1/2r^2}{A}} & \text{si } 1/2r^2 < \mu \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{E-20d})$$

Appendice F

Programmes de calcul de Ntilde, Mtilde et les fonctions Rnl

```
Programme ntilde(in,lms,nms)
implicit double precision (a-h,o-z)
c calculation of the ntilde density at the point in
double precision ntild,ntildtot
common/xco/g,xt,qp,xmiu,atom,dentmp
common/ha/dentil(250)
common/energie/e(150,0:150),e1(150,0:150)
common/vu/ua(250,150,0:150),va(250,150,0:150)
common/ttt/ntild,ntildtot
common/sss/fu,fv
dentil(in)=0.
    sum=0.
    ntildtot=0.
    if(xt.ne.0) then
do l=0,lms
do n=1,nms
    ee=e1(n,l)
    dentil(in)=dentil(in)+1./qp*(2.d0*float(l)+1.d0)*
& (ua(in,n,l)**2+va(in,n,l)**2)*f(ee)
    sum=sum+4.d0*(fu**2+fv**2)*f(ee)
enddo
enddo
    ntild=sum*qp
    ntildtot=ntildtot+ntild
c    dentmp=real(atom)-ntild
c    write(*,*)'ntild=',ntild,atom
c    read(*,*)
endif
if(xt.eq.0) then
do l=0,lms
do n=1,nms
    ee=e1(n,l)
    dentil(in)=dentil(in)+1./qp*(2.d0*float(l)+1.d0)*
& (va(in,n,l)**2)
    sum=sum+4.d0*fv**2
cc    print*,f(ee)=,f(ee),atom,ntild
c    print*,va(in,n,l)=,va(in,n,l)
c    read(*,*)
end do
    sum=0.25*(2.d0*dfloat(l)+1.d0)*sum
end do
    ntild=sum*qp
    ntildtot=ntildtot+ntild
c    write(*,*)'ntildtot=',ntildtot
c    read(*,*)
endif
return
end
```

```

Programme mtild(in,lms,nms)
c calculation of the mtild density at the point in
  implicit double precision (a-h,o-z)
  double precision mtild,mtildtot
  common/xco/g,xt,qp,xmiu,atom,dentmp
  common/pa/dmtil(250),dmtild(250)
  common/ddd/mtild,mtildtot
  common /mathco/ zero,one,two,thalf,third,pi
  common/energie/e(150,0:150),e1(150,0:150)
  common/vu/ua(250,150,0:150),va(250,150,0:150)
  common/aaaa/alpha
  common/sss/fu,fv
  dimension rnl(150)

  call gfv()
  dmtil(in)=0.
    sum=0.
    mtildtot=0.
  do l=0,lms
    do n=1,nms
      ee=e1(n,l)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
      dmtil(in)=dmtil(in)-1./qp*(2.d0*float(l)+1.d0)*
      & (ua(in,n,l)*va(in,n,l))*(2.*f(ee))
      sum=sum+4.d0*fu*fV
cc      write(*,*)'fu=',fu,'fv=',fv
c      read(*,*)
    end do
      mtild=-0.25*(2.d0*dfloat(l)+1.d0)*sum*qp
cc      write(*,*)'mtild=',mtild
c      read(*,*)
      mtildtot=mtildtot+mtild
cc      write(*,*)'mtildtot=',mtildtot
cc      read(*,*)
    end do
  return
end
c-----

```

```

cccccccccccccccccccc
function f(ee)
c Bose Einstein distribution function
  implicit double precision (a-h,o-z)
  common/xco/g,xt,qp,xmiu,atom,dentmp
  if(xt.eq.0.)then
    f=0.
    goto 1111
  end if
  f=1./(exp((ee/xt)-1.))
1111 continue
  return
end

```

```

c-----
c harmonic oscill
  Programme osc(n,l,in,iop,rnl)
c
c n = 1,2,3... radial quantum number
c l = 0,1,2... orbital angular momentum
c calculates the radial functions for the spherical oscillator
c for fixed l for the radial quantum numbers 1,...n and
c stores it in the array rnl(1:n)
c
c the wave function R_nl(r) of the spherical oscillator are:
c
c  $\phi(r,\Omega) = b^{-(3/2)} * R_{nl}(r) * Y_{lm}(\Omega)$ 
c
c  $R_{nl}(r) = N_{nl} * r^{*l} * L^{(l+1/2)}_{(n-1)}(x*x) * \exp(-x*x/2)$ 
c  $N_{nl} = \sqrt{2 * (n-1)! / (n+1-1/2)!}$  and  $x=r/b$ 
c R_nl is normalized in such way that the norm integral reads
c
c  $\int dr r^{*2} R_{nl}(r)^2 = 1$ 
c
c-----c

```

parameter (igfv=130)

implicit double precision (a-h,o-z)

dimension rnl(150)

```

common /gfvsq / sq(0:igfv)
common /gfvsqi / sqi(0:igfv)
common /gfvsqh / sqh(0:igfv)
common /gfvshi / shi(0:igfv)
common /gfvwgi / wgi(0:igfv)
common/aaaa/alpha
common /mathco/ zero,one,two,thalf,third,pi
c if(in.eq.1.and.n.eq.1.and.l.eq.0)write(6,*)n,l,x
  x=dfloat(in)*0.1
  if(iop.eq.0)xx=x*x/alpha
  if(iop.eq.1)xx=alpha*x*x
  if (l.eq.0) then
    xl = one
  else
    xl = x**l
  endif
  rnl(1) = sq(2)*wgi(l+1)*exp(-thalf*xx)*xl
  rnl(2) = rnl(1)*(1+1.5d0-xx)*shi(l+1)
  do i = 3,n
    rnl(i) = ((2*i+1-2.5d0-xx)*rnl(i-1)-
& sq(i-2)*sqh(i-2+1)*rnl(i-2))*sqi(i-1)*shi(i-1+1)
  enddo
  return
end

```

References

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, et E. A. Cornell, “Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor”, *Science* **269**, 198 (1995).
- [2] 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)
- [3] C C Bradley, C A Sackett, J J Tollett and R G Hulet *Phys. Rev. Lett.* **79** 1170 (1997)
- [4] E A Cornell and C E Wieman *Rev. Mod. Phys.* **74** 875 (2002)
C C Bradley, C A Sackett, J J Tollett and R G Hulet *Phys. Rev. Lett.* **75** 1687 (1995)
- [5] D. A. W. Hutchinson, K. Burnett, R. J. Dodd *et al.* *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 3825-3846 (2000)
- [6] F. Gerbier, J. H. Thywissen, S. Richard, M. Hugbart, P. Bouyer and A. Aspect *Phys. Rev. A* **70** 013607 (2004).
- [7] M. Zawada, R. Abdoul, *et al.* *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 241001 (2008)
- [8] M. A. Caracanhas, J. A. Seman, E. R. Ramos, E. A. L. Henn, K. M. F. Magalhaes, K. Helmerson and V. S. Bagnato *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42** 145304 (2009).
- [9] K. Gawryluk, M. Brewczyk, M. Gajda and K. Rzazewski, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 105303 (2010)
- [10] N. P. Proukakis, S. A. Morgan, S. Choi, and K. Burnett, Comparison of gapless mean-field theories for trapped Bose-Einstein condensates, *Phys. Rev. A* **58**, 2435 (1998).
- [11] A. L. Fetter *Ann. Phys.* **70** 67(1972)
- [12] N. N. Bogoliubov, On the Theory of Superfluidity, *J. Phys. (U.S.S.R.)* **11**, 23 (1947).
- [13] L. D. Landau *J. Phys. (U.S.S.R.)* **5** 71(1941)
- [14] E. A. Uehling and G E Uhlenbeck *Phys. Rev.* **43** 552(1933)
- [15] O. Penrose and L. Onsager *Phys. Rev.* **104** 576(1956)
- [16] K. Huang and C. N. Yang *Phys. Rev.* **105** 767(1957)
- [17] S. T. Beliaev *Sov. Phys. JETP* **7** 289(1958)
- [18] S. T. Beliaev *Sov. Phys. JETP* **7** 299(1958)
- [19] N. M. Hugenholtz and D Pines *Phys. Rev.* **116** 489(1959)
- [20] P. C. Martin and J Schwinger *Phys. Rev.* **115** 1342(1959)
- [21] G. Baym and L. P. Kadano *Phys. Rev.* **124** 287(1961)
- [22] F. Takano *Phys. Rev.* **123** 699(1961)
- [23] J. Goldstone *Nuovo Cimento* **19** 154(1961)
- [24] L. P. Kadano and G Baym *Quantum Statistical Mechanics* (New York: Benjamin, 1962).
- [25] P. C. Martin *J. Math. Phys.* **4** 208(1963)
- [26] J. Gavoret and P Nozieres *Ann. Phys. (N.Y.)* **28** 349(1964)
- [27] L. V. Keldysh *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **47**, 1515 (1964) [*Sov. Phys. JETP* **20**, 1018 (1965)]
- [28] J. W. Kane and L P Kadano *J. Math. Phys.* **6** 1902(1965)
- [29] P. C. Hohenberg and P C Martin *Ann Phys.* **34** 291(1965)
- [30] V. N. Popov *Sov. Phys. JETP* **20** 1185(1965); V N Popov *Functional Integrals and Collective Excitations* (Cambridge University Press, 1987)
- [31] N. D. Mermin and H Wagner *Phys. Rev. Lett.* **22** 1133(1966)
- [32] P. C; Hohenberg *Phys. Rev.* **158** 383 (1967)
- [33] S. A. Morgan *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 3847 (2000)
- [34] P. O. Fedichev and G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. A* **58**, 3146 (1998).
- [35] V. N. Popov and L. D. Fadeev, *Soviet Physics JETP* **20**, 890 (1965).
- [36] H. Shi and A. Griffin, *Phys. Repts.* **304**, 1 (1998).
- [37] R. J. Dodd, M. Edwards, C. W. Clark and K. Burnett, *Phys. Rev. A* **57**, R32 (1998).
- [38] M. Bijlsma and H. T. C. Stoof, Variational Approach to the Dilute Bose Gas, *Phys. Rev. A* **55**, 498 (1997).
- [39] N. P. Proukakis and K. Burnett, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, **355** (1997).
- [40] A. Bulgac and Y. Yu, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 042504 (2002)

- [41] C. Gies Master Thesis ‘Hartree-Fock-Bogoliubov treatment’ University of Otago, Dunedin New Zealand May (2004)
- [42] D. R. Hartree, Proc. Com. Phi. Soc., Vol. **24**, p. 89 (1928)
- [43] V. A. Fock, Z. Phys. Vol. **61**, p. 126 (1930)
- [44] L. D. Landau and E. M. Lifshitz Quantum Mechanics Nonrelativistic Theory, Pergamon Press, Oxford (1965)
- [45] F. Dalfovo, S. Giorgini, L P Pitaevskii and S Stringari *Rev. Mod. Phys.* **71** 463 (1999)
- [46] P. Ruprecht, M Holland, K. Burnette, M. Edwards *Phys. Rev. A* **51**, 4704 (1995)
- [47] A. Griffin *Phys. Rev. B* **53** 9341 (1996)
- [48] Y. Castin and R. Dum, Bose-Einstein condensation in time dependent traps, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5315{5319 (1996).
- [49] Y. Kagan, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven, Bose-Einstein condensation in trapped atomic gases, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2670{2673 (1996).
- [50] K. Huang. Statistical Mechanics. 2nd edition. John Wiley & Sons, New York, (1987).
- [51] N. P. Proukakis and B. Jackson, Finite-temperature models of Bose-Einstein condensation, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41**, 203002 (2008).
- [52] E. P. Gross, Structure of a quantized Vortex in Boson Systems, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961); E. P. Gross, Hydrodynamics of a Superfluid Condensate, *J. Math. Phys.*, **4**, 195 (1963); L. P. Pitaevskii, Vortex Lines in an imperfect Bose Gas, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **40**, 646 (1961) [*Sov. Phys. JETP.*, **13**, 451 (1961)].
- [53] L. Pitaevskii and S. Stringari, Bose-Einstein Condensation, (Oxford Scientific Publications, 2003).
- [54] C. J. Pethick and H. Smith, Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases, (Cambridge University Press, 2002).
- [55] A. Penckwitt, Bose-Einstein Condensates (PhD. Thesis, University of Otago, Dunedin New Zealand 2004).
- [56] J. Riedl, A. Csordas, R. Graham *Phys. Rev. A* **59**(5), 3816 (1999)
- [57] C. Gies, M. D. Lee and D. A. W. Hutchinson, *J. Phys. B* **38** 1797 (2005)
- [58] D. S. Fisher and P. C. Hohenberg, Dilute Bose Gas in Two Dimensions, *Phys. Rev. B* **37**, 4936 (1988).
- [59] M. Shick *Phys. Rev. A* **3**, 1067 (1971)
- [60] L. Pitaevskii, *Phys. Lett. A* **221**, 14 (1996)
- [61] V I Yukalov *Laser Phys. Lett.* **3** 406–14 (2006)
- [62] J. F. See Dobson, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2244 (1994)
- [63] M. O. Mewes et al. *Phys. Rev. Lett.* **77** 992 (1996)
- [64] M. Benarous and H. Chachou-Sameut, *Eur. Phys. J. D* **50** 125. (2008), A Boudjemaa and M Benarous *Eur. Phys. J. D* **59** 427 (2010)
- [65] Syamal Biswas cond-mat/**0701450**
- [66] W Ketterle, D S Durfee and D M Stamper-Kurn *Proc. Int. School of Physics ‘Enrico Fermi’, Course CXL* ed M. Inguscio, S. Stringari and C E Wieman (Amsterdam: IOS) pp **67–176**(1999)
- [67] V. V. Goldman, I. F. Silvera and A. J. Leggett *Phys. Rev. B* **24** 2870 (1981).
- [68] D. A. Huse and E. D. Siggia, *Journal Low Temp. Phys.* **46** 137 (1982)
- [69] I. F. Silvera and J. T. M. Walraven, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 164 (1980)
- [70] E. V. Shuryak *Phys. Rev. A* **54**, 3151 (1996)
- [71] S. L. Giorgini, L. P. Pitaevskii and S. Stringari *Phys. Rev. A* **54**, 4633 (1996)
- [72] L. P. Pitaevskii and S. Stringari *Phys. Rev. A* **235**, 398 (1997)
- [73] S. Stringari *Phys. Rev. A* **58**, 2385 (1998)
- [74] D. S. Jin, M. R. Matthews and al. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 764 (1997)
- [75] K. Burnett, M. Edwards, and C. W. Clark, American Institute of Physics, *Phys. Today* **S-0031-9228-9912-030-1** (1999)
- [76] Rakesh Prabhat Tiwari and Alok Shukla, preprint cond-mat/**0603732v1** (2006)
- [77] L. Pricoupenko *Phys. Rev. A* **84**, 053602 (2011).
- [78] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet, *Physique statistique* (Hermann, Paris, 1989)
- [79] M. Le Bellac et F. Morstessage, *Thermodynamique statistique* (Dunod , Paris, 2001)
- [80] J. Von Neumann, mathematical foundations of quantum mechanics (Princeton 1955-m reproduit dans J. A. Wheeler and W. H. Zurek, quantum theory and measurement (Princeton, 1983)
- [81] V. Bagnato, D. E. Pritchard and D. Kleppner, *Phys. Rev. A* **35**, 4354 (1987)

- [82]V. Bagnato and D. Kleppner, Phys. Rev. A **44**, 7439 (1991)
- [83] C. Cohen-Tannoudji, cours au collège de France 1997-1998
- [84]L. Brillouin, La science et la théorie de l'information (Masson Paris 1959)
- [85] M. Inguscio, S. Stringari et C. Wieman Proceeding of the international school of physics "Enrico Fermi", Course CXL: Bose Einstein Condensation in atomics Gases, IOS Press, Amsterdam, (1999).
- [86] L. D. Landau et E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Non Relativistic Theory Pergamon Press, Oxford, (1977).
- [87] C. Cohen Tannoudji, B. Diu et F. Laloë Mécanique Quantique, Hermann (1973).
- [89]M. Humi. J. Phys. A: Math. Gen. **20**, 4577 (1987).