

Chapitre 4

Condensation et superfluidité dans un réseau

Sommaire

1	La limite des liaisons fortes	2
1-1	Le théorème de Bloch	2
1-2	Fonctions de Wannier	2
1-3	L'hamiltonien de Hubbard	4
1-4	Interactions dans le réseau	5
2	Superfluidité et vitesse critique dans un réseau	6
2-1	Études expérimentales	6
2-2	Vitesse critique dans un réseau (limite $U \rightarrow 0$)	7
2-3	Vitesse critique dans un réseau (liaisons fortes)	8
3	Transition superfluide-isolant (cas homogène)	10
3-1	Classe de fonction d'essai : <i>ansatz</i> de Gutzwiller	11
3-2	L'état fondamental pour l' <i>ansatz</i> de Gutzwiller	12
3-3	Le point de transition superfluide-isolant	12
3-4	Une approche analytique simple	14
4	Appendice : fonctions de Hartree et états cohérents	15

Nous avons étudié dans les chapitres précédents la superfluidité des gaz de Bose homogènes, en absence de potentiel extérieur. Nous abordons maintenant un autre volet de la superfluidité des gaz d'atomes froids, portant sur le comportement du fluide en présence d'un réseau périodique. Cette étude va notamment nous permettre d'étudier la célèbre transition de phase quantique entre l'état superfluide et un état isolant de Mott, transition mise en évidence sur des atomes froids par Greiner, Mandel, et al. (2002).

Notre point de départ sera l'état superfluide, décrit par une approche de Gross-Pitaevskii similaire à celle utilisée dans le cours 3. Nous décrirons quelques expériences qui ont montré que la présence d'un potentiel périodique de réseau peut déstabiliser un courant permanent et briser la superfluidité. Cela nous conduira à la transition de phase superfluide–isolant ; cette transition, initialement étudiée par Fisher, Weichman, et al. (1989) dans un contexte de matière condensée, a été transposée aux atomes froids par Jaksch, Bruder, et al. (1998). Elle est désormais devenue emblématique de la possibilité qu'offrent les systèmes d'atomes froids d'atteindre des états fortement corrélés.

Nous aborderons cette transition superfluide – isolant de Mott par plusieurs approches, d'abord pour un gaz uniforme dans ce chapitre, puis pour un gaz confiné dans un piège harmonique dans le cours prochain.

1 La limite des liaisons fortes

Nous commençons ce chapitre par quelques rappels sur la description quantique du mouvement d'une particule dans un potentiel périodique $V(\mathbf{r})$. Nous renvoyons le lecteur recherchant une description plus détaillée au cours 2012-13.

1-1 Le théorème de Bloch

Nous considérons des atomes en mouvement dans un potentiel périodique $V(\mathbf{r})$, de période spatiale a , créé par exemple par une onde lumineuse stationnaire. En exploitant la périodicité spatiale du potentiel, on montre que l'on peut chercher les états propres de l'hamiltonien à une particule

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1)$$

sous forme d'ondes de Bloch

$$\psi_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \quad \text{d'énergie } E_n(\mathbf{q}). \quad (2)$$

Indiquons sans démonstration quelques propriétés de ces ondes de Bloch, en prenant le cas d'un réseau cubique.

- La fonction $u_{n,\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ est périodique sur le réseau.
- L'indice entier $n = 0, 1, 2, \dots$, appelé *indice de bande*, sert à classer les énergies par ordre croissant à \mathbf{q} donné.
- le vecteur \mathbf{q} , appelé *vecteur de Bloch* ou *quasi-moment*, peut être choisi dans la zone de Brillouin

$$-\frac{\pi}{a} < q_j \leq \frac{\pi}{a} \quad \text{avec } j = x, y, z. \quad (3)$$

Cette restriction permet d'éviter tout comptage multiple, puisque les ondes de Bloch associées à (n, \mathbf{q}) et à $(n, \mathbf{q} + \mathbf{Q})$, où \mathbf{Q} est un vecteur de coordonnées multiples de $2\pi/a$ coïncident, à un facteur de phase près.

- Quand \mathbf{q} varie sur l'étendue de la zone de Brillouin, le segment décrit par l'énergie $E_n(\mathbf{q})$ est appelé *bande d'énergie*.

Un exemple de bandes d'énergies est donné en figure 1 pour le problème unidimensionnel $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$. Les énergies $E_n(q)$ y sont tracées en unité de l'énergie de recul

$$E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4)$$

qui est l'échelle d'énergie naturelle pour une particule de masse m en mouvement dans ce potentiel de période spatiale $a = \pi/k$.

Nous avons utilisé sur la figure 2 une autre représentation des bandes d'énergie, appelée *schéma de zone répétée*, pour laquelle chaque état figure plusieurs fois. Ce schéma nous sera utile un peu plus loin quand nous étudierons les instabilités d'un condensat en mouvement dans un réseau.

1-2 Fonctions de Wannier

Les ondes de Bloch forment une base de fonctions qui représentent pour un réseau l'équivalent des ondes planes pour l'espace libre. Il est très utile d'introduire une autre base de fonctions orthogonales, les *fonctions de Wannier*, qui pour un choix convenable de la phase des ondes de Bloch, sont localisées au voisinage des minima locaux du réseau $\mathbf{r}_j = a\mathbf{j}$, repérés par le triplet d'entier $\mathbf{j} \equiv (j_x, j_y, j_z)$.

Plaçons-nous à une dimension pour simplifier les notations, le retour à 3D se faisant sans difficulté. Les fonctions de Wannier associées à la bande n s'écrivent :

$$w_{n,j}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \psi_{n,q}(x) e^{-ijaq} dq. \quad (5)$$

Il est immédiat de montrer à partir de la définition (5) que les fonctions de Wannier $w_{n,j}$ se déduisent les unes de autres (à n donné) par translation :

$$w_{n,0}(x - ja) = w_{n,j}(x). \quad (6)$$

Il suffit donc de caractériser les fonctions de Wannier $w_{n,0}(x)$ pour les connaître toutes.

La définition des fonctions de Wannier dépend de la phase que l'on donne à chaque onde de Bloch, cette phase étant à ce stade arbitraire. Pour

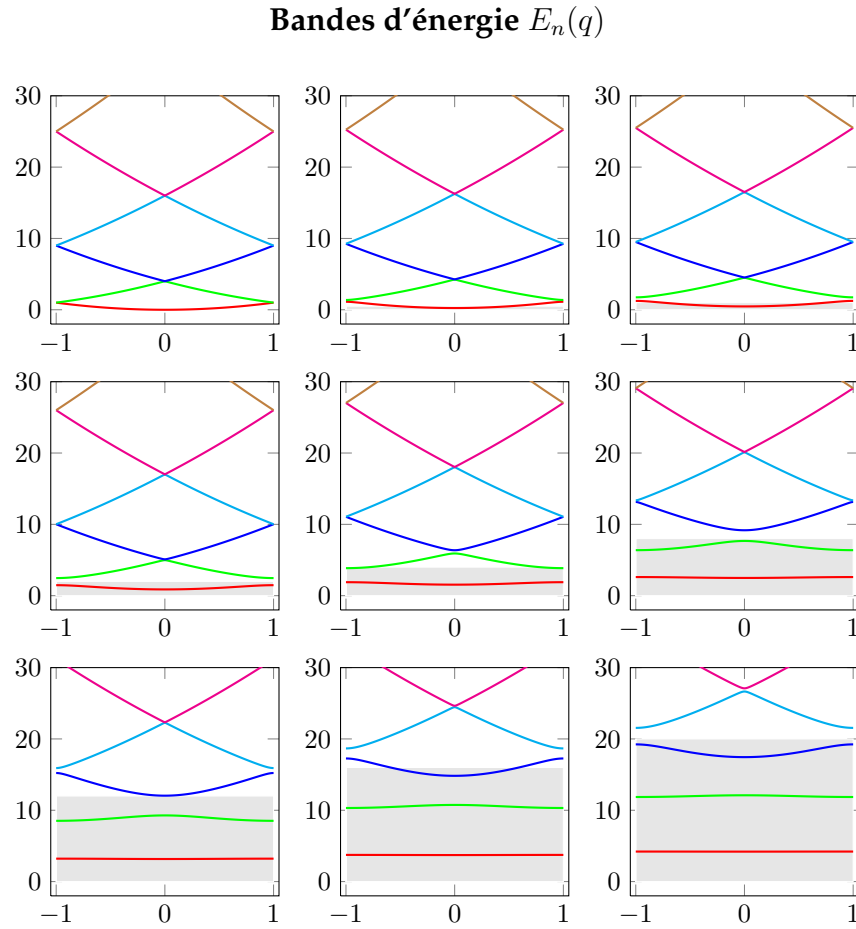


FIGURE 1. Premières bandes d'énergie $E_n(q)$ (unité $E_T = \hbar^2 k^2 / 2m$), en fonction de q/k pour un potentiel $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$. De gauche à droite, et de haut en bas : $V_0/E_T = (0, 0.5, 1); (2, 4, 8); (12, 16, 20)$. Le rectangle grisé représente la zone d'énergie inférieure à la hauteur du potentiel V_0 .

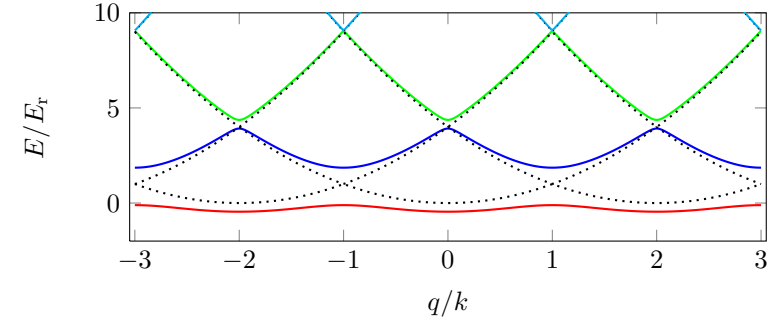


FIGURE 2. Représentation en bande étendue. Chaque état $\psi_{n,q}$ figure plusieurs fois dans ce schéma, qui présente l'intérêt de montrer de manière intuitive les transferts d'impulsion possibles (voir par exemple la figure 7). Le potentiel vaut $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$ avec $V_0 = 4 E_T$. Les courbes pointillées représentent le résultat obtenu pour $V_0 = 0$ (particule libre).

un potentiel symétrique par réflexion et pour des bandes d'énergie I_n disjointes, Kohn (1959) a montré qu'il y a un choix unique pour cette phase qui garantit que la fonction de Wannier (i) est réelle, (ii) est paire ou impaire vis-à-vis de $x = 0$ ou $x = a/2$, (iii) décroît exponentiellement vite à l'infini.

La fonction de Wannier associée au site $j = 0$ et à la bande $n = 0$, $w_{0,0}(x)$, est tracée sur la figure 3 pour plusieurs valeurs de l'amplitude V_0 du potentiel sinusoidal $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$. Dans la suite, nous utiliserons une expression approchée pour cette fonction de Wannier de la bande fondamentale $w_{0,0}(x)$. Cette expression est obtenue en remplaçant le potentiel $V(x)$ au voisinage de ses minima par une fonction quadratique, i.e. $V(x) \approx V_0 k^2 x^2$ autour de $x = 0$. Elle consiste à prendre pour $w_{0,0}(x)$ la fonction d'onde de l'état fondamental dans ce potentiel harmonique :

$$w_{0,0}(x) \approx \frac{1}{(\pi a_{\text{oh}}^2)^{1/4}} e^{-x^2 / 2a_{\text{oh}}^2} \quad \text{avec} \quad a_{\text{oh}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \hbar\omega = 2\sqrt{V_0 E_T}. \quad (7)$$

Fonctions de Wannier pour la bande fondamentale

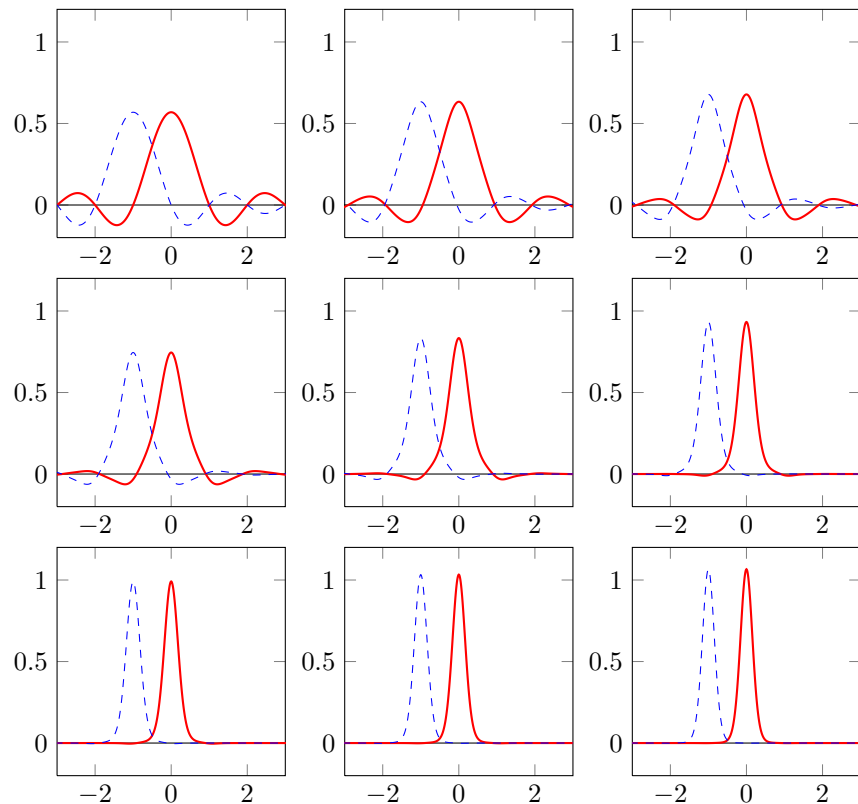


FIGURE 3. Fonctions de Wannier $w_{0,0}(x)$ pour la bande $n = 0$ et le site $j = 0$ en fonction de $x/a = kx/\pi$ pour le potentiel périodique $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$. De gauche à droite, et de haut en bas : $V_0/E_F = (0, 0.5, 1); (2, 4, 8); (12, 16, 20)$. Les pointillés indiquent la fonction de Wannier pour la même bande $n = 0$, mais décalée d'un site ($w_{0,-1}(x)$).

1-3 L'hamiltonien de Hubbard

En utilisant la base des fonctions de Wannier, on peut réécrire l'hamiltonien de départ comme une somme d'opérateurs de saut faisant passer la particule de la fonction de Wannier $w_{n,j}$ à une autre fonction de Wannier $w_{n,j'}$, correspondant à la même bande n mais à un autre site j' . Le problème est alors entièrement caractérisé par la donnée des éléments de matrice de saut $J_n(j - j')$.

Dans le cas d'un potentiel de forte modulation, on peut souvent se limiter à des états qui appartiennent à la bande fondamentale. Ceci correspond à une diminution considérable de l'espace de Hilbert et permet de simplifier fortement les notations et les calculs. Plaçons-nous donc dans cette approximation et supposons de plus que l'élément de matrice $J_{n=0}(j = 1)$ (entre proches voisins) est le seul à prendre des valeurs significatives.

En posant

$$J = -J_{n=0}(j = 1), \quad (8)$$

dont on peut montrer qu'il est toujours positif ou nul pour un réseau statique, l'hamiltonien est alors très simple

$$\hat{H} = -J (\hat{T} + \hat{T}^\dagger) \quad (9)$$

où \hat{T} est l'opérateur qui translate la particule d'un site vers la droite :

$$\hat{T} = \sum_{j \in \mathbb{Z}} |w_{j+1}\rangle \langle w_j|. \quad (10)$$

Nous avons noté les fonctions de Wannier $w_j \equiv w_{0,j}$ puisque nous limitons notre espace de travail à la bande $n = 0$. Nous utiliserons également une écriture du même hamiltonien en seconde quantification :

$$\hat{H} = -J \sum_j \hat{b}_{j+1}^\dagger \hat{b}_j + \text{h.c.}, \quad (11)$$

où \hat{b}_j^\dagger crée une particule sur le site j avec la fonction d'onde $w_j(x)$.

Dans ce modèle de Hubbard 1D, représenté graphiquement sur la figure 4, les états de Bloch et leur énergies sont

$$|\psi_q\rangle = \sum_j e^{ijaq} |w_j\rangle, \quad E(q) = -2J \cos(aq). \quad (12)$$

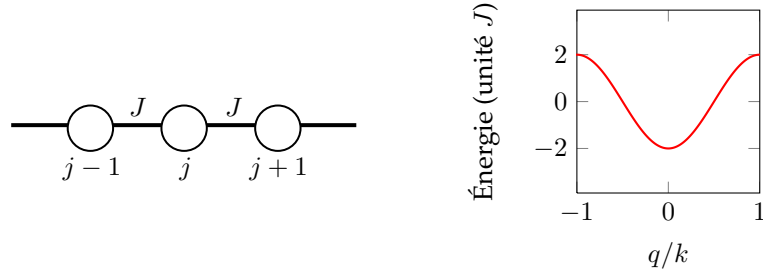


FIGURE 4. Représentation graphique du modèle de Hubbard 1D décrit par l'hamiltonien (11) à gauche, et spectre correspondant à droite (cf. eq. (12)).

La bande fondamentale a pour largeur $2zJ$, où z désigne le nombre de proches voisins d'un site donné ($z = 2$ à une dimension). Ce résultat se transpose sans difficulté à 2D et à 3D, avec $z = 4$ pour un réseau carré et $z = 6$ pour un réseau cubique.

Pour un réseau sinusoïdal, on montre qu'une valeur approchée du coefficient tunnel J dans la limite $V_0 \gg E_r$ est

$$\frac{J}{E_r} \approx \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^{3/4} \exp \left[-2 \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^{1/2} \right]. \quad (13)$$

1-4 Interactions dans le réseau

Comme dans le chapitre 3, nous nous limiterons ici à des interactions de contact entre atomes. Dans le cas 1D, l'hamiltonien d'interaction s'écrit

$$H_{\text{int}} = \frac{g}{2} \sum_{n, n' \neq n} \delta(x_n - x_{n'}), \quad (14)$$

où la somme porte sur les $N(N-1)/2$ paires formées à partir des N atomes présents, et où x_n désigne la position de l'atome n . La constante g décrit la force des interactions.

Dès que la profondeur du réseau devient suffisante (typiquement $10E_r$), cette interaction de contact ne joue un rôle significatif que si les deux atomes de la paire considérée occupent la même fonction de Wannier, le

recouvrement spatial entre deux fonctions de Wannier associées à deux sites différents devenant négligeable. L'écriture de \hat{H}_{int} est alors considérablement simplifiée, surtout si on adopte une écriture de seconde quantification. Il ne reste plus que les termes décrivant l'interaction sur site et le résultat s'écrit dans le cadre de l'approximation de Hubbard :

$$\hat{H}_{\text{int}} \approx \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1), \quad (15)$$

où on a introduit l'opérateur nombre de particules sur le site j , $\hat{n}_j = \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j$. L'énergie U est l'énergie à fournir pour mettre deux atomes sur le même site ; elle s'écrit explicitement à partir de la fonction de Wannier associée à la bande fondamentale $n = 0$ et à un site donné, $j = 0$ par exemple

$$U = g \int w_{0,0}^4(x) dx \approx \frac{g}{\sqrt{2\pi} a_{\text{oh}}}, \quad (16)$$

où nous avons utilisé l'approximation gaussienne (7) pour la fonction de Wannier de la bande fondamentale.

Les calculs ci-dessus ont été menés pour un réseau 1D. Ils se transposent directement au cas 3D pour un réseau cubique et on obtient

$$U^{(3D)} = \frac{g^{(3D)}}{(\sqrt{2\pi} a_{\text{oh}})^3}. \quad (17)$$

Si on exprime le couplage $g^{(3D)}$ en terme de la longueur de diffusion a_d

$$g^{(3D)} = \frac{4\pi\hbar^2 a_d}{m}, \quad (18)$$

l'énergie sur site $U^{(3D)}$ se met alors sous la forme

$$\frac{U^{(3D)}}{E_r} = \sqrt{\frac{8}{\pi}} k a_d \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^{3/4} \quad (19)$$

que nous allons maintenant commenter.

Ordres de grandeurs. Discutons les valeurs des deux coefficients importants pour décrire la dynamique du gaz dans le réseau dans le régime de

Hubbard, J et U . Nous ferons cette discussion dans le cas 3D puisque nous avons l'expression explicite (19) à notre disposition. En dehors d'une résonance de Feshbach, la longueur de diffusion a une échelle nanométrique (3 nm pour ^{23}Na , 5 nm pour ^{87}Rb). Puisque la lumière utilisée pour le réseau a une longueur d'onde λ micrométrique, le produit $ka_d = 2\pi a_d/\lambda$ est petit, entre 10^{-2} et 10^{-1} . La fréquence E_r/h associée à l'énergie de recul varie de quelques kHz à quelques dizaines de kHz, selon qu'on considère des atomes de masse élevée (Rb par exemple) ou des atomes plus légers (Li par exemple).

Le produit V_0/E_r ne dépasse en général pas quelques dizaines : au delà de cette valeur, l'effet tunnel entre sites devient complètement négligeable et le réseau n'est plus qu'une collection de pièges indépendants. Le coefficient $U^{(3D)}$ évalué à partir de (19) est donc généralement de l'ordre de l'énergie de recul, ou plus petit par un ou deux ordres de grandeur.¹

Le coefficient tunnel J quant à lui est de l'ordre de E_r pour des réseaux peu profonds ($V_0 \sim E_r$) et il décroît exponentiellement vite [cf. (13)] quand on augmente le rapport V_0/E_r . On peut donc passer continuellement du régime dominé par l'énergie cinétique $J \gg U$ au régime dominé par les interactions $J \ll U$: c'est ce qui fait tout l'intérêt des réseaux optiques pour l'étude des phénomènes à N corps (Jaksch, Bruder, et al. 1998).

2 Superfluidité et vitesse critique dans un réseau

Dès que les études expérimentales sur la superfluidité ont pu être menées avec des condensats atomiques, la question s'est posée de savoir si cette superfluidité était maintenue en présence d'un potentiel. Avant de décrire de manière précise la disparition complète de la superfluidité pour un rapport U/J assez grand, nous allons dans ce paragraphe nous intéresser à ce qui peut arriver à un condensat en mouvement dans un réseau. Nous allons montrer qu'une instabilité dynamique peut se produire dès que la vitesse du condensat dépasse une vitesse critique, directement liée à la vitesse de recul $v_r = \hbar k/m$.

1. Il est important que $Un_j(n_j - 1)/2$ reste petit devant $\hbar\omega = 2\sqrt{V_0 E_r}$ pour que la restriction à la bande fondamentale soit légitime.

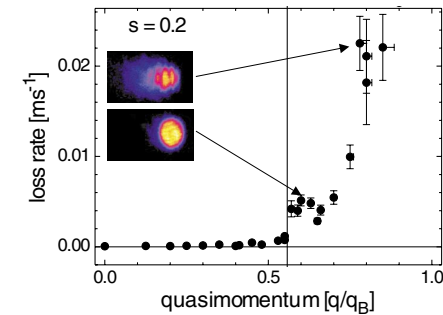


FIGURE 5. Taux de perte pour un condensat en mouvement dans un réseau optique 1D de faible profondeur $V_0 = 0.2 E_r$. Pour un quasi-moment supérieur à $0.5 q_B$ (avec $q_B = k$), une instabilité dynamique apparaît et le condensat disparaît rapidement. Cette expérience a été menée avec un condensat de rubidium au repos dans un piège magnétique. On superpose à ce condensat un réseau optique à $\lambda = 820$ nm, et ce réseau est mis en mouvement en décalant les fréquences d'une onde progressive par rapport à l'autre. Cette situation est équivalente à celle considérée dans le texte de ce chapitre si l'on se place dans le référentiel du réseau. Figure extraite de Fallani, De Sarlo, et al. (2004).

2-1 Études expérimentales

La première mise en évidence d'une instabilité pour un condensat en mouvement dans un réseau a été obtenue par Fallani, De Sarlo, et al. (2004) (voir figure 5). Cette instabilité a été obtenue avec un réseau de faible profondeur, $V_0 = 0.2 E_r$. Rien de particulier ne se passe pour une vitesse relative entre le réseau et le nuage inférieure à la vitesse critique $\approx 0.5 v_r$, où v_r désigne la vitesse de recul $\hbar k/m$. En revanche, au-dessus de cette vitesse critique, le gaz est fortement chauffé, signature d'une instabilité dynamique sur laquelle nous allons revenir.

Cette expérience a ensuite été reprise et généralisée par Mun, Medley, et al. (2007), qui ont étudié pour le cas d'un réseau plus profond, comment la vitesse critique diminue quand on varie la valeur relative de la force des interactions par rapport à l'effet tunnel entre puits adjacents. Le résultat essentiel est représenté sur la figure 6. Pour des interactions faibles, on

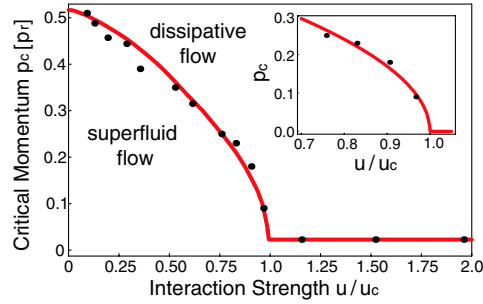


FIGURE 6. Variation de la vitesse critique pour un condensat d'atomes de rubidium placé dans un réseau en mouvement ($\lambda = 1064 \text{ nm}$), le réseau étant 1D ou 3D selon les points. Ce résultat montre la continuité entre le phénomène d'instabilité dynamique mesuré pour de faibles interactions et la transition superfluide-isolant (vitesse critique nulle) pour des interactions suffisamment fortes. Le paramètre u est défini comme $u = U/J$ et $u_c = 34.2 \pm 2.0$ (obtenu pour $V_0 = 13.5 E_r$). Le régime étudié correspond à un remplissage $\bar{n} = 1$ atome par site. Figure extraite de Mun, Medley, et al. (2007).

retrouve le résultat de Fallani, De Sarlo, et al. (2004): la vitesse critique est environ $0.5 v_r$. Quand la force des interactions augmente, la vitesse critique diminue. Elle s'annule quand le potentiel d'interaction U atteint une valeur critique U_c , ce qui signifie que le gaz n'est alors plus superfluide.

Dans la suite de ce paragraphe, nous nous proposons d'analyser la première instabilité, se produisant pour des interactions relativement faibles, à la vitesse $0.5 v_r$. Nous passerons ensuite à la perte complète de superfluidité observée pour des interactions plus fortes, c'est-à-dire la transition superfluide - isolant de Mott. Pour ne pas allonger trop la discussion, nous ne chercherons pas à décrire la totalité de la courbe d'instabilité de la courbe de la figure 6, mais simplement ses points extrêmes. Pour une analyse détaillée de l'ensemble de cette transition, nous renvoyons le lecteur intéressé vers l'article de Altman, Polkovnikov, et al. (2005).

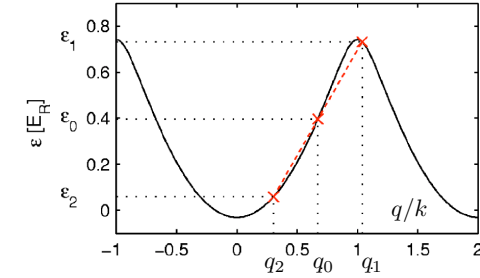


FIGURE 7. Bande fondamentale pour le potentiel $V(x) = V_0 \sin^2(k_L x)$ avec $V_0 = E_r$. On a adopté ici le schéma de « zone répétée ». Un condensat atomique de quasi-moment q_0 peut donner naissance de manière résonnante à deux nuages de quasi-moments q_1 et q_2 [figure adaptée de Hilligsøe & Mølmer (2005)].

2-2 Vitesse critique dans un réseau (limite $U \rightarrow 0$)

Dans ce paragraphe, nous nous proposons de rendre compte de manière qualitative de l'instabilité dynamique mesurée par Fallani, De Sarlo, et al. (2004) dans un réseau de faible profondeur, quand la vitesse des atomes est $\approx 0.5 v_r$. Cette instabilité a été expliquée initialement par Wu & Niu (2001) [voir aussi Wu & Niu (2003)]; cette interprétation a ensuite été reprise et approfondie par Hilligsøe & Mølmer (2005), article dont nous avons extrait la figure 7.

Cette interprétation est fondée sur la relation de dispersion d'une particule dans le réseau. Alors que cette relation de dispersion dans l'espace libre est convexe ($E = p^2/2m$), elle devient plus « riche » : dans un réseau. En particulier, la concavité de la relation s'inverse aux bords de bande (voir par exemple la figure 1). Il est alors possible de trouver des quasi-moments q_0 qui autorisent la transition :

$$q_0 + q_0 \longrightarrow q_1 + q_2, \quad (20)$$

les quasi-moments q_0 étant toujours tels que $|q_0| \geq k/2$ [cf. la figure 5 de Wu & Niu (2003)]. Ce processus correspond à une collision entre deux atomes du condensat se déplaçant initialement avec le quasi-moment q_0 et finissant avec les quasi-moments q_1 et q_2 , tels que l'impulsion et l'énergie sont

conservées :

$$2E(q_0) = E(q_1) + E(q_2). \quad (21)$$

Dans le plan (q, E) , cette double conservation impulsion-énergie se produit si les trois points $(q_0, E_0), (q_1, E_1), (q_2, E_2)$ sont alignés, avec (q_0, E_0) au milieu des deux autres. Notons que nous utilisons ici le schéma de « zone répétée » pour représenter la bande d'énergie fondamentale. En fait, le point q_1 est en dehors de la zone de Brillouin ; il correspond donc à des atomes dont le quasi-moment (au sens habituel) vaut $q_1 - 2k$, où k est le nombre d'onde du laser servant à créer le réseau.²

Les opticiens reconnaîtront dans ce processus l'équivalent du mélange à quatre ondes en présence d'accord de phase. Il a d'ailleurs été utilisé en tant que tel dans plusieurs expériences, comme par exemple Campbell, Mun, et al. (2006) et Bonneau, Ruaudel, et al. (2013). Plus généralement, il s'agit d'un processus paramétrique qui va vider rapidement le mode q_0 du condensat pour peupler les modes q_1 et q_2 . En principe, on pourrait s'attendre à observer une oscillation cohérente de type Rabi $(q_0, q_0) \leftrightarrow (q_1, q_2)$ comme prédit par Hilligsøe & Mølmer (2005). En pratique, cette oscillation n'a pas été vue dans les expériences de Fallani, De Sarlo, et al. (2004), probablement du fait de déphasages incontrôlés des modes q_1, q_2 .

2-3 Vitesse critique dans un réseau (liaisons fortes)

Dans ce paragraphe, nous allons approfondir l'étude de l'instabilité dynamique apparaissant pour un condensat en mouvement dans un réseau en prenant en compte de manière quantitative les interactions. Pour pouvoir mener les calculs de manière analytique, nous allons limiter notre analyse au cas de l'hamiltonien de Hubbard, valable pour un réseau suffisamment profond. Cette approche a été développée initialement par Wu & Niu (2003) et Smerzi, Trombettoni, et al. (2002). L'article de Wu & Niu (2003) présente par ailleurs des résultats numériques obtenus en dehors de ce régime des liaisons fortes.

2. Dans le cas d'un réseau faible, la relation de dispersion pour la bande fondamentale en schéma de *bande étendue* est très proche d'une série de paraboles $E_0(q) = \hbar^2(q - 2jk)^2/2m$ avec j entier (voir les courbes pointillées de la figure 2). On peut alors vérifier analytiquement que ce type de processus est possible pour pratiquement tout quasi-moment q_0 de la première zone de Brillouin tels que $|q_0| > k/2$.

Pour aller au delà de l'image de la figure 7, dans laquelle on utilise le spectre à une particule, nous allons procéder comme pour le gaz de Bose homogène. Nous allons partir de la solution stationnaire de l'équation de Gross-Pitaevski et étudier la stabilité de cette solution. Dans le cas du gaz de Bose homogène, nous avons trouvé que ces solutions présentaient une instabilité thermodynamique (critère de Landau) quand la vitesse de la solution stationnaire de départ était supérieure à la vitesse du son : des énergies négatives apparaissaient dans le spectre des excitations. Ici, nous allons rencontrer une instabilité plus forte, de nature dynamique, se traduisant par des énergies avec une partie imaginaire non nulle. Ceci entraîne la croissance exponentielle de toute déviation, même très faible, par rapport à l'état stationnaire exact.

Hamiltonien de Bose-Hubbard et fonctions d'essai. Pour simplifier notre analyse, nous allons faire un traitement 1D en utilisant l'hamiltonien de Hubbard à une particule (11), auquel nous ajoutons le terme décrivant l'interaction sur site (15) :

$$\hat{H} = -J \sum_{j=1}^{N_s} (\hat{b}_{j+1}^\dagger \hat{b}_j + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_{j=1}^{N_s} \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1). \quad (22)$$

La recherche du spectre et des états propres (approchés) de cet hamiltonien va nous occuper dans l'essentiel de la suite de ce chapitre. Pour cette recherche, nous allons d'abord faire des hypothèses fortes concernant l'état du gaz $|\Psi\rangle$ dans le réseau, qui sont justifiées par la relative simplicité des calculs auxquels elles conduisent. Dans la suite, nous affaiblirons progressivement ces hypothèses, mais posons pour l'instant que :

— L'état $|\Psi\rangle$ est un état factorisé entre les N_s sites :

$$|\Psi\rangle = \prod_{j=1}^{N_s} |\psi_j\rangle. \quad (23)$$

Ceci exclut en particulier les états présentant des corrélations entre sites, comme par exemple pour une situation à $N_s = 2$ sites et $N_a = 2$ atomes : $(|2, 0\rangle + |0, 2\rangle)/\sqrt{2}$.

— Chaque $|\psi_j\rangle$ est lui-même un état cohérent³, c'est-à-dire un état propre de l'opérateur \hat{a}_j avec la valeur propre complexe ψ_j . Comme on étudie un problème de stabilité temporelle, chaque coefficient ψ_j est lui-même dépendant du temps.

On montre dans l'appendice de ce chapitre que ces deux hypothèses reviennent à poser que l'état à N_a atomes est une fonction de Hartree :

$$\Phi_{N_a}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_a}) = \phi(\mathbf{r}_1) \dots \phi(\mathbf{r}_{N_a}) \quad (25)$$

avec la fonction d'onde à un corps normalisée qui se développe sur les fonctions de Wannier $w_j(x)$ associées aux N_s sites

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{N_s} \phi_j w_j(\mathbf{r}), \quad \sum_{j=1}^{N_s} |\phi_j|^2 = 1, \quad (26)$$

et le lien entre l'amplitude ψ_j de l'état cohérent et cette fonction d'onde :

$$\psi_j = \sqrt{N_a} \phi_j. \quad (27)$$

Dans ces conditions, l'équation de Gross-Pitaevskii sur le réseau s'écrit

$$i\hbar \dot{\psi}_j = -J(\psi_{j+1} + \psi_{j-1}) + U |\psi_j|^2 \psi_j. \quad (28)$$

Dans le cas sans interaction, nous avons déjà donné les états propres de cet hamiltonien : ce sont les états de Bloch (12) correspond à :

$$\psi_j = \psi_0 e^{ijaq} \quad \text{avec} \quad E(q) = -2J \cos(aq). \quad (29)$$

L'évolution temporelle de $\psi_j(t)$ est alors simplement

$$\psi_j(t) = \psi_0 e^{i[jaq - \omega(q)t]} \quad \text{avec} \quad \hbar\omega(q) \equiv E(q) = -2J \cos(aq). \quad (30)$$

En présence des interactions, il est immédiat de vérifier que ces ondes de Bloch restent des solutions stationnaires, le seul changement étant le déplacement de leur énergie par une quantité proportionnelle à l'amplitude ψ_0 de l'onde (choisie réelle par convention) :

$$\psi_j(t) = \psi_0 e^{i[jaq - \omega(q)t]} \quad \text{avec} \quad \hbar\omega(q) = -2J \cos(aq) + U\psi_0^2. \quad (31)$$

3. Pour rappel, un état cohérent $|\alpha\rangle$ est un état propre de \hat{b} avec la valeur propre α :

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (32)$$

où les $|n\rangle$ sont les états à nombre d'occupation donné, $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$, avec $\hat{n} = \hat{b}^\dagger \hat{b}$.

Perturbation des ondes de Bloch. Nous allons maintenant étudier la stabilité de ces ondes de Bloch, tout comme nous l'avons fait au chapitre 3 pour des ondes planes pour arriver au critère de Landau. On considère donc une onde perturbée correspondant à l'apparition de deux quasi-moments additionnels $q \pm q'$:

$$\tilde{\psi}_j(t) = \left[\psi_0 + u(t) e^{ijaq'} + v^*(t) e^{-ijaq'} \right] e^{i[jaq - \omega(q)t]} \quad \text{avec} \quad |u|, |v| \ll \psi_0. \quad (32)$$

Du fait de la non-linéarité cubique de l'équation d'évolution (28), rappelons qu'il faut ajouter simultanément les deux ondes planes $e^{\pm ijaq'}$ à ψ_0 pour que le calcul soit cohérent.

Injectons (32) dans (28) et limitons-nous à l'ordre 1 en u et v . Nous séparons les contributions des trois ondes planes $e^{ijaq}, e^{ija(q \pm q')}$. La première redonne simplement la relation (31). Les deux autres conduisent aux deux équations couplées :

$$i\hbar \dot{u} = \{-2J \cos[a(q + q')] + 2U\psi_0^2 - \hbar\omega(q)\} u + U\psi_0^2 v \quad (33)$$

$$i\hbar \dot{v}^* = \{-2J \cos[a(q - q')] + 2U\psi_0^2 - \hbar\omega(q)\} v^* + U\psi_0^2 u^*. \quad (34)$$

Nous prenons le complexe conjugué de la seconde équation et mettons le résultat sous la forme matricielle

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \hat{\mathcal{L}} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (35)$$

où $\hat{\mathcal{L}}$ est la matrice 2×2 :

$$\hat{\mathcal{L}} = \begin{pmatrix} 4J \sin[a(q + q'/2)] \sin[aa'/2] + U\psi_0^2 & U\psi_0^2 \\ -U\psi_0^2 & 4J \sin[a(q - q'/2)] \sin[aa'/2] - U\psi_0^2 \end{pmatrix} \quad (36)$$

Il reste à étudier les valeurs propres de cette matrice pour en déduire la stabilité de l'onde de Bloch de départ. Soulignons que (comme dans le cas uniforme vu au chapitre 3) cette matrice réelle n'est pas symétrique, et qu'on ne peut donc rien dire *a priori* sur le caractère réel ou complexe de ses valeurs propres.

Un calcul un peu fastidieux conduit à ces valeurs propres :

$$\lambda_{\pm}(q') = 2J \sin(aq) \sin(aa') \pm 2 \left[4J^2 \sin^4(aa'/2) \cos^2(aq) + 2JU\psi_0^2 \sin^2(aa'/2) \cos(aq) \right]^{1/2} \quad (37)$$

Pour interpréter ce résultat, commençons par deux cas limites simples :

- Pour $U = 0$, la matrice (36) est diagonale et on retrouve simplement que les valeurs propres associées aux perturbations en $e^{ija(q \pm q')}$ ont pour énergie $\hbar\omega(q \pm q')$.
- Pour $U \neq 0$ et $q = 0$, on retrouve pour des perturbations de faible vecteur d'onde $aq' \ll 1$ le spectre de Bogoliubov, avec la vitesse du son c_s définie par

$$m_{\text{eff}} c_s^2 = U \psi_0^2 \quad \text{avec} \quad m_{\text{eff}} = (2Ja^2)^{-1}. \quad (38)$$

Ce résultat est équivalent à celui obtenu pour des particules libres, en remplaçant la masse nue des particules par la masse effective obtenue à partir de la courbure de la bande fondamentale $E_0(q)$ au voisinage de $q = 0$.

Passons maintenant au cas général, $U \neq 0$ et $q \neq 0$; on voit apparaître un phénomène qui ne se produisait pas dans le cas du gaz uniforme : ces valeurs propres peuvent avoir une partie imaginaire non nulle. Il faut pour cela que l'argument de la racine carrée (deuxième ligne de 38) soit négatif, ce qui peut se produire si

$$\cos(aq) < 0 \quad \Leftrightarrow |q| > \frac{\pi}{2a} \quad \text{dans la première zone de Brillouin.} \quad (39)$$

Quand c'est le cas, quelle que soit la valeur de $U \psi_0^2$, il y a toujours une infinité de valeurs de q' proches de 0 qui conduisent à des valeurs $\lambda_{\pm}(q')$ avec une partie imaginaire non nulle. Comme λ_{\pm} sont alors complexes conjuguées l'une de l'autre⁴, une de ces valeurs propres va conduire à une croissance exponentielle de la perturbation $[u(t), v(t)]$: le condensat en mouvement avec le quasi-moment q est instable. Nous retrouvons ainsi le résultat pressenti par la construction graphique de la figure 7, mais dans le régime des liaisons fortes alors que la figure 7 portait sur un réseau de faible profondeur.

4. On pourra consulter le cours de Castin (2001) pour une étude détaillée des valeurs propres de l'opérateur de Bogoliubov et de leurs vecteurs propres associés.

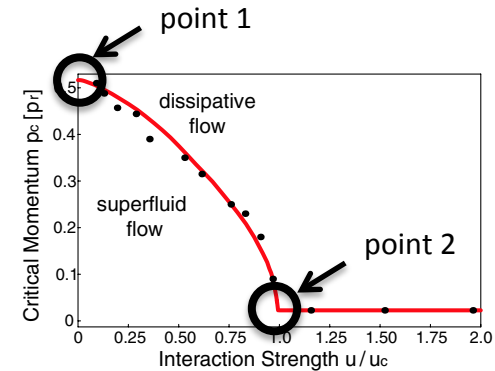


FIGURE 8. Figure identique à la figure 6, sur laquelle nous avons entouré les deux points développés dans ce chapitre. Figure extraite de Mun, Medley, et al. (2007).

3 Transition superfluide-isolant (cas homogène)

Revenons au résultat expérimental obtenu par Mun, Medley, et al. (2007) que nous avons reproduit une nouvelle fois en figure 8. Nous nous sommes concentrés jusqu'ici sur le point 1, qui correspond à un état superfluide pour lequel il existe (comme il se doit) une vitesse critique. Cette vitesse critique est liée à la présence du réseau : nous avons vu que ce réseau, en présence d'interactions arbitrairement faibles, suffit à créer une instabilité dynamique du gaz en mouvement. Nous avons pu rendre compte de manière quantitative et analytique de cette instabilité dans l'approximation des liaisons fortes, en prenant des fonctions d'essai très simples, correspondant à un état cohérent en chaque site du réseau.

Nous allons maintenant passer au point 2. En ce point, la vitesse critique devient nulle, ce qui signifie que la superfluidité est complètement perdue. Aucun flot non dissipatif de particules ne peut avoir lieu, quelle que soit sa vitesse. Pour analyser ce point 2, obtenu pour des interactions suffisamment fortes, nous allons continuer à travailler dans l'approximation des liaisons fortes. Cette approximation est d'autant mieux justifiée que pour obtenir les grandes valeurs de U nécessaires à la disparition de la superfluidité, il faut aller vers des réseaux profonds [cf. (19)]. Toutefois,

nous allons devoir enrichir notre classe de fonctions d'essai par rapport aux produits d'états cohérents envisagés en (23). En effet, en présence d'interactions répulsives, le résultat obtenu en (38) ne donne pas de signe d'instabilité (dynamique ou thermodynamique) pour un condensat avec un quasi-moment q proche de zéro.

Nous allons dans ce paragraphe nous limiter au cas homogène, qui est le plus simple à traiter théoriquement. Dans le chapitre suivant, nous passerons au cas non homogène que l'on rencontre par exemple pour un gaz confiné dans un piège harmonique superposé au réseau.

3-1 Classe de fonction d'essai : *ansatz* de Gutzwiller

Pour décrire la transition entre l'état superfluide et l'état isolant observé sur la figure 8, nous allons conserver des fonctions d'essai du type Gutzwiller (Rokhsar & Kotliar 1991; Krauth, Caffarel, et al. 1992)

$$|\Psi_G\rangle = \prod_j |\Psi_j\rangle, \quad (40)$$

c'est-à-dire un état factorisé par rapport aux différents sites j du réseau. Toutefois, contrairement à ce que nous avons fait au paragraphe précédent, nous ne nous limiterons pas au cas où les $|\Psi_j\rangle$ sont des états cohérents. Notre classe de fonctions d'essai est donc beaucoup plus grande que précédemment, ce qui va nous permettre de décrire (de manière approchée bien sûr) une plus grande variété de phénomènes. Notons également que pour notre recherche de l'état fondamental, nous prendrons le même état Ψ_j en chaque site j du réseau puisque le problème est invariant par translation. Il faut bien sûr relâcher cette hypothèse quand on s'intéresse à la propagation de perturbations dans ce réseau [cf. chapitre 5].

Avant de nous lancer dans l'exploitation de cette classe de fonction d'essai pour la recherche de l'état fondamental, il est utile de la justifier sur les deux cas limites qui vont nous intéresser, $U \ll J$ et $U \gg J$, c'est-à-dire le cas des interactions négligeables et le cas des interactions dominantes. Nous allons considérer pour cela un réseau à N sites avec un taux de remplissage de 1, c'est-à-dire que nous y disposons N atomes.

Cas sans interaction $U = 0$. Si les particules n'interagissent pas entre elles, l'état fondamental du système est un condensat de Bose-Einstein accumulé dans l'état à une particule de plus basse énergie, c'est-à-dire l'état de quasi-moment $q = 0$, d'amplitude égale sur tous les sites j :

$$\begin{aligned} U = 0 \quad \rightarrow \quad |\Psi_{\text{fond}}\rangle &\propto \left(\sum_j \hat{b}_j^\dagger \right)^N |0\rangle \\ &\propto \sum_{\{n_j\}} \frac{(\hat{b}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{b}_N^\dagger)^{n_N}}{n_1! \dots n_N!} |0\rangle, \end{aligned} \quad (41)$$

où la somme porte sur tous les N -uplets $\{n_j\}$ tels que

$$\sum_j n_j = N. \quad (42)$$

Pour $N \gg 1$, cet état fondamental – exact dans le cas $U = 0$ – est très proche de l'état produit (40) correspondant à un état cohérent de moyenne 1, soit une particule par site (cf. appendice) :

$$\begin{aligned} |\Psi_G\rangle &\propto \prod_j \left(\sum_{n_j} \frac{(\hat{b}_j^\dagger)^{n_j}}{n_j!} \right) |0\rangle \\ &\propto \sum_{\{n_j\}} \frac{(\hat{b}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{b}_N^\dagger)^{n_N}}{n_1! \dots n_N!} |0\rangle. \end{aligned} \quad (43)$$

Cas en interaction forte $U \rightarrow +\infty$. Dans ce cas, le prix énergétique à payer pour mettre deux particules sur le même site devient prohibitif et l'état fondamental est obtenu en mettant exactement une particule par site, ce qui est possible puisque nous nous intéressons ici au cas où le nombre de sites et le nombre de particules coïncident. On a donc

$$U \rightarrow +\infty \quad \rightarrow \quad |\Psi_{\text{fond}}\rangle = \prod_j \hat{b}_j^\dagger |0\rangle \quad (44)$$

ce qui est bien de la forme produit annoncée.

Notre *ansatz* sous forme d'état produit (40) capture donc bien la physique dans les deux cas limite et on peut espérer qu'il décrive, au moins

de manière semi-quantitative, la transition entre les deux états. Mais il faut dès le départ être également conscient de ses limites : notre classe de fonction d'essai ne pourra décrire aucune corrélation entre sites. Si, pour une raison ou une autre, un état (1D) du type

$$|\dots, 2, 0, 2, 0, \dots\rangle, \quad (45)$$

c'est-à-dire un état avec des corrélations entre sites adjacents, était amené à jouer un rôle significatif dans le problème, ce rôle ne sera pas capturé par notre *ansatz*.

3-2 L'état fondamental pour l'*ansatz* de Gutzwiller

Nous partons donc de l'hamiltonien de Hubbard

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1) \quad (46)$$

où la somme porte sur tous les couples de proches voisins. Pour un réseau linéaire, carré, cubique, un site j donné est couplé à $z = 2, 4, 6$ proches voisins. Prenons une fonction d'essai du type (40), où chaque Ψ_j possède la même structure :

$$|\Psi_j\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} c(n) |n\rangle_j \quad \sum_n |c(n)|^2 = 1. \quad (47)$$

Le principe de la méthode variationnelle consiste à rechercher les coefficients $c(n)$, représentés symboliquement par le vecteur normé \mathbf{c} , qui minimisent l'énergie moyenne par site

$$\epsilon(\mathbf{c}) = \frac{1}{N_{\text{sites}}} \langle \Psi_G | \hat{H} | \Psi_G \rangle. \quad (48)$$

Le calcul explicite de $\epsilon(\mathbf{c})$ ne pose pas de difficulté. On a

$$\langle \hat{b}_j \rangle = \sum_n \sqrt{n+1} c^*(n) c(n+1) \quad (49)$$

et on calcule les valeurs moyennes des deux termes de l'hamiltonien :

$$\frac{1}{N_{\text{sites}}} \langle -J \sum_{\langle ij \rangle} b_i^\dagger b_j \rangle = -Jz \left| \sum_n \sqrt{n+1} c^*(n) c(n+1) \right|^2 \quad (50)$$

$$\frac{1}{N_{\text{sites}}} \langle \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \rangle = \frac{U}{2} \sum_n n(n-1) |c(n)|^2. \quad (51)$$

Pour obtenir l'état fondamental (approché), il faut déterminer les amplitudes $c(n)$ qui minimisent la somme de ces deux termes avec la contrainte que \mathbf{c} est normé. Cette minimisation doit passer par une étape numérique, mais nous pouvons remarquer tout de suite que l'on peut se limiter à des coefficients $c(n)$ réels positifs. En effet pour des valeurs données de $|c(n)|$, le terme d'interaction (51) est fixé et le terme d'énergie cinétique (50) est minimisé en prenant la même phase pour tous les $c(n)$.

Les deux paramètres importants pour caractériser le problème sont

- le rapport zJ/U , caractérisant la valeur relative de l'énergie cinétique et des interactions,
- le taux de remplissage du réseau

$$\bar{n} = \frac{N}{N_{\text{sites}}} = \sum_n n |c(n)|^2. \quad (52)$$

Il serait fastidieux de donner systématiquement les coefficients $c(n)$ minimiseurs de l'énergie $\epsilon(\mathbf{c})$ en fonction de ces deux paramètres. Dans ce qui suit, nous allons nous limiter à la variation de l'écart-type Δn

$$\Delta n^2 = \langle n^2 \rangle - \bar{n}^2, \quad \langle n^2 \rangle = \sum_n n^2 |c(n)|^2. \quad (53)$$

ainsi que l'énergie approchée ϵ_f de l'état fondamental. Ces deux paramètres nous permettront de dégager les aspects essentiels de la transition superfluide – isolant de Mott.

3-3 Le point de transition superfluide-isolant

Nous avons tracé sur la figure 9 la variation de la fluctuation relative $\Delta n / \bar{n}$ quand on varie \bar{n} à zJ/U fixé, et sur la figure 10 cette variation quand on varie zJ/U , à \bar{n} fixé.

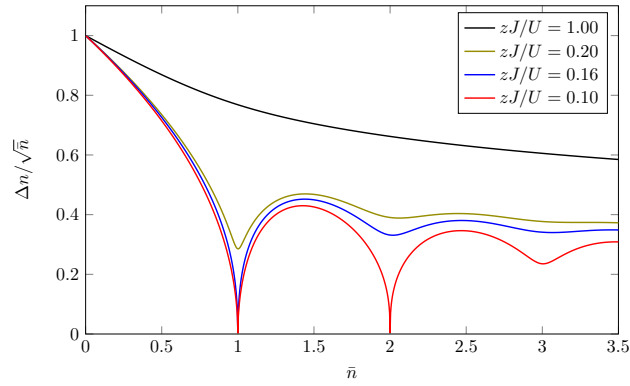


FIGURE 9. Variation de la fluctuation relative $\Delta n/\sqrt{\bar{n}}$ du taux d'occupation en fonction du nombre moyen d'atomes par site \bar{n} , pour différentes valeurs de zJ/U .

Considérons pour commencer la figure 9 :

- Pour zJ/U assez grand, typiquement 1, la fluctuation relative décroît doucement quand on augmente \bar{n} : les interactions tendent à diminuer les fluctuations, ce qui est naturel puisque le coût énergétique d'une fluctuation qui mettrait beaucoup d'atomes sur un site devient prohibitif.
- Quand on diminue zJ/U (typiquement autour de 0.2), des structures apparaissent pour \bar{n} voisin d'un nombre entier.
- Pour des valeurs encore plus basses (0.16), Δn est nul au point $\bar{n} = 1$.
- Cette propriété se généralise aux entiers plus grands quand on diminue encore zJ/U .

La figure 10 permet de préciser les valeurs critiques pour lesquelles on bascule vers un état de $\Delta n = 0$. Ces états ne peuvent être obtenus que quand \bar{n} est un nombre entier, toute la population se concentrant alors sur ce nombre entier :

$$\text{Pour } \bar{n} \text{ entier : } \Delta n = 0 \longleftrightarrow C(n) = \delta_{n,\bar{n}} \quad (54)$$

La transition se produit pour $U/(zJ) \approx 6$ pour $\bar{n} = 1$, $U/(zJ) \approx 10$ pour $\bar{n} = 2$, etc.

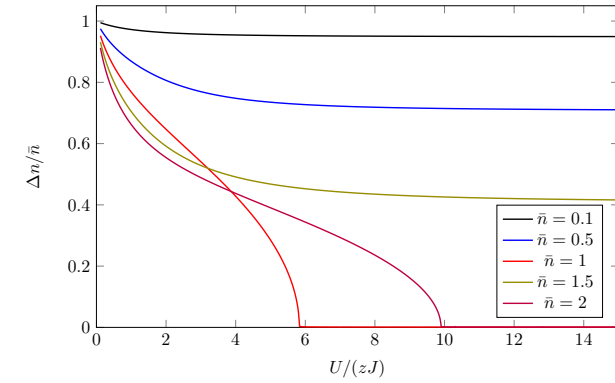


FIGURE 10. Même étude qu'en figure 9 en faisant cette fois-ci varier $U/(zJ)$, pour différentes valeurs de \bar{n} .

Cette bascule vers des états à nombre de particules par site fixé correspond à la transition d'un état superfluide vers un état isolant. Plus précisément, dans le régime des liaisons fortes, on peut caractériser la cohérence spatiale d'un état par la fonction de corrélation $G_1(i, j) = \langle b_i^\dagger b_j \rangle$, qui vaut pour nos fonctions d'essai :

$$G_1(i, j) = \left| \sum_n \sqrt{n+1} c^*(n) c(n+1) \right|^2. \quad (55)$$

Cette fonction est indépendante de la distance entre les sites i et j , et elle s'annule pour un état nombre. L'ordre de phase à longue portée, caractéristique d'un condensat de Bose-Einstein, est alors complètement perdu.

Au contraire, pour un remplissage non entier, le système reste superfluide quel que soit le rapport $U/(zJ)$. La conduction est plutôt de type particule si le remplissage est $\bar{n} = n + \epsilon$, avec n entier et $0 < \epsilon \ll 1$ et plutôt de type trou, si $\bar{n} = n - \epsilon$. Cette phase superfluide est notablement différente de celle obtenue pour un gaz de Bose homogène (sans réseau), pour laquelle toutes les particules participaient à la conduction. Par exemple, pour $\bar{n} = n + \epsilon$, on a $n N_{\text{sites}}$ particules qui sont bloquées dans une phase « isolant de Mott », et ce sont seulement les $\epsilon N_{\text{sites}}$ particules restantes qui peuvent abaisser leur énergie en se délocalisant sur l'ensemble du réseau, maintenant ainsi un (faible) ordre à longue portée.

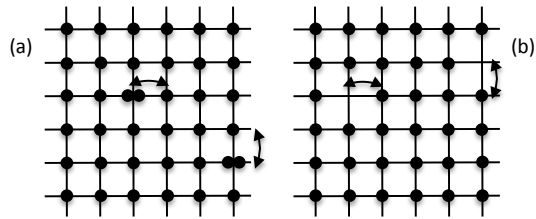


FIGURE 11. Autour du remplissage $\bar{n} = 1$. (a) : réseau avec un facteur de remplissage légèrement plus grand que 1 et une conduction de type « particule » ; (b) : idem pour un facteur de remplissage légèrement inférieur à 1 et une conduction de type « trou ».

3-4 Une approche analytique simple

Nous avons maintenant identifié les points de l'espace des paramètres permettant d'obtenir la transition superfluide-isolant : il faut choisir un facteur de remplissage entier $\bar{n} \in \mathbb{N}$ et des fluctuations Δn faibles autour de \bar{n} . Nous pouvons alors simplifier la forme de nos fonctions d'essai et nous limiter au cas où seuls trois coefficients $c(n)$ jouent un rôle significatif, $c(\bar{n})$ bien sûr, ainsi que $c(\bar{n} \pm 1)$, ce qui correspond au paramétrage suivant :

$$\begin{pmatrix} c(\bar{n} + 1) \\ c(\bar{n}) \\ c(\bar{n} - 1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(\eta+\varphi)} \sin \theta \cos \chi \\ \cos \theta \\ e^{i(\eta-\varphi)} \sin \theta \sin \chi \end{pmatrix}. \quad (56)$$

Pour assurer que la valeur moyenne du nombre de particules par site est bien égale au nombre entier \bar{n} , nous prenons $\chi = \pi/4$, de sorte que $\sin \chi = \cos \chi = 1/\sqrt{2}$. Par ailleurs, on vérifie aisément que la minimisation de l'énergie, plus précisément du terme tunnel (50), est obtenue en prenant $\eta = 0$. La phase φ en revanche peut être choisie quelconque, la valeur qu'elle prend quand on passe de l'état isolant ($\sin \theta = 0$) à l'état superfluide ($\sin \theta \neq 0$) correspondant à une brisure spontanée de symétrie. Dans ce qui suit, nous prendrons $\eta = \varphi = 0$ puisque nous nous intéressons uniquement à l'énergie de l'état fondamental (la phase φ reprendra un rôle

important dans le cours 5), ce qui donne :

$$\begin{pmatrix} c(\bar{n} + 1) \\ c(\bar{n}) \\ c(\bar{n} - 1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta / \sqrt{2} \\ \cos \theta \\ \sin \theta / \sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (57)$$

Le calcul de l'énergie par site $\epsilon(\theta)$ se fait alors simplement et on trouve :

$$\epsilon(\theta) = \epsilon_0 - \frac{\bar{n}zJ}{4} \sin^2(2\theta) \left[1 + \frac{1}{2\bar{n}} + \sqrt{1 + \frac{1}{\bar{n}}} \right] + \frac{U}{2} \sin^2 \theta, \quad (58)$$

où ϵ_0 est une constante additive indépendante de θ . La transition vers l'état isolant se produit quand le minimum de l'énergie ϵ est atteint pour $\theta = 0$, soit $c(\bar{n}) = 1$ et $c(\bar{n} \pm 1) = 0$. On peut donc étudier le voisinage de cette transition en faisant un développement limité de $\epsilon(\theta)$ au voisinage de $\theta = 0$. Posons pour cela

$$\rho = \frac{1}{2} \sin(2\theta) \quad (59)$$

et utilisons

$$\sin^2 \theta \approx \rho^2 + \rho^4. \quad (60)$$

On peut alors mettre l'énergie par site sous la forme suggestive

$$\epsilon(\rho) \approx \frac{U}{2} \rho^4 - A \rho^2 + \epsilon_0 \quad (61)$$

avec

$$A = \bar{n}zJ \left[1 + \frac{1}{2\bar{n}} + \sqrt{1 + \frac{1}{\bar{n}}} \right] - \frac{U}{2}. \quad (62)$$

On retrouve la forme habituelle de Landau pour décrire le voisinage d'une transition de phase (cf. figure 12) :

- Si le coefficient A est strictement négatif (interactions répulsives dominantes), le minimum est atteint pour $\rho = 0$, c'est-à-dire $\theta = 0$. Revenant à (57), nous voyons que cela correspond à l'état isolant, avec toute la population concentrée sur l'état $|n\rangle$.
- En revanche si $A > 0$, le minimum est atteint pour

$$A > 0 : \quad \rho_{\min}^2 = \frac{A}{U} \quad (63)$$

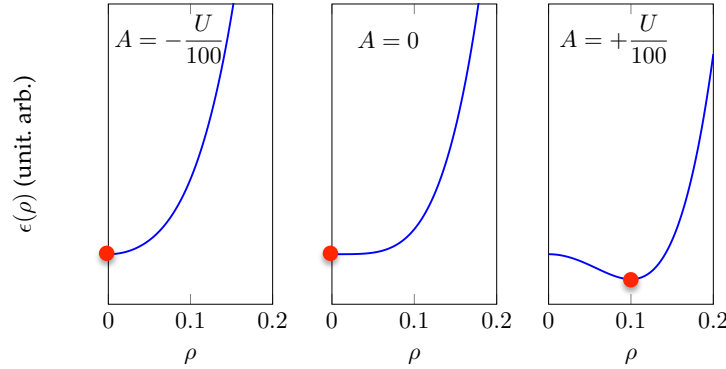


FIGURE 12. Variation avec ρ de l'énergie par site $\epsilon(\rho)$ pour trois valeurs du coefficient A : à gauche, $A < 0$, interactions dominantes et état isolant. Au milieu, $A = 0$, point critique. À droite : $A > 0$, effet tunnel dominant et état superfluide.

ce qui correspond à la phase superfluide, avec une cohérence à longue portée.

La position de la transition peut être précisée dans les deux cas $\bar{n} = 1$ et $\bar{n} \gg 1$. Pour $n = 1$, on trouve au point critique (Fisher, Weichman, et al. 1989)

$$\left. \frac{U}{zJ} \right|_c = 3 + 2\sqrt{2} \approx 5.8, \quad (64)$$

ce qui correspond au résultat de la figure 10. Pour $\bar{n} \gg 1$, on a

$$\left. \frac{U}{zJ} \right|_c \approx 4\bar{n}. \quad (65)$$

4 Appendice : fonct. de Hartree et états cohérents

Le but de cet appendice est de faire le lien entre les fonctions de Hartree introduites au chapitre précédent pour décrire l'état condensé d'un système à N particules, et les états cohérents multisites utilisés dans ce chapitre comme première approximation de l'état superfluide dans un réseau.

L'ansatz de Hartree consiste à écrire, par exemple dans le cadre d'une méthode variationnelle, la fonction d'onde à N_a atomes sous forme un produit d'états à une particule

$$\Phi_{N_a}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_a}) = \phi(\mathbf{r}_1) \dots \phi(\mathbf{r}_{N_a}). \quad (66)$$

Pour un gaz sur réseau décrit par l'approximation des liaisons fortes, la fonction d'onde à une particule $\phi(\mathbf{r})$ est décrite par N_s coefficients ϕ_j , où N_s est le nombre de sites du réseau :

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{N_s} \phi_j w_j(\mathbf{r}) \quad \text{avec} \quad \sum_{j=1}^{N_s} |\phi_j|^2 = 1, \quad (67)$$

où $w_j(\mathbf{r})$ est la fonction de Wannier associée au site j . On peut écrire cet état en seconde quantification

$$|\phi\rangle = \left(\sum_{j=1}^{N_s} \phi_j \hat{b}_j^\dagger \right) |\text{vac}\rangle, \quad (68)$$

où \hat{b}_j^\dagger crée une particule sur le site j . L'état de Hartree à N_a atomes donné en (66) s'écrit dans ces conditions

$$|\Phi_{N_a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_a!}} \left(\sum_{j=1}^{N_s} \phi_j \hat{b}_j^\dagger \right)^{N_a} |\text{vac}\rangle. \quad (69)$$

On peut développer le produit de ces N_a termes pour obtenir :

$$\begin{aligned} |\Phi_{N_a}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N_a!}} \sum_{m_1, \dots, m_{N_s}}' \frac{N_a!}{m_1! \dots m_{N_s}!} \phi_1^{m_1} \dots \phi_{N_s}^{m_{N_s}} (b_1^\dagger)^{m_1} \dots (b_{N_s}^\dagger)^{m_{N_s}} |\text{vac}\rangle \\ &\approx \sqrt{N_a!} \sum_{m_1, \dots, m_{N_s}}' \frac{\phi_1^{m_1} \dots \phi_{N_s}^{m_{N_s}}}{\sqrt{m_1! \dots m_{N_s}!}} |\text{site } 1 : m_1; \dots; \text{site } N_s : m_{N_s}\rangle. \end{aligned}$$

où le ' au dessus du signe somme signifie que la somme est restreinte aux N_s -uplets m_1, \dots, m_{N_s} tels que $\sum_{j=1}^{N_s} m_j = N_a$.

Passons maintenant aux états cohérents. Un état de Glauber d'amplitude ψ_j sur le site j s'écrit :

$$|\psi_j\rangle = e^{-|\psi_j|^2/2} \sum_{m_j=1}^{+\infty} \frac{\psi_j^{m_j}}{\sqrt{m_j!}} |\text{site } j : m_j\rangle \quad (70)$$

Considérons maintenant l'état cohérent multisites

$$|\Psi\rangle = \prod_{j=1}^{N_s} |\psi_j\rangle \quad (71)$$

en prenant pour amplitude ψ_j sur chaque site $\psi_j = \sqrt{N_a} \phi_j$ et donc $\sum_{j=1}^{N_s} |\psi_j|^2 = N_a$. En reportant l'expression de chaque $|\psi_j\rangle$ dans $|\Psi\rangle$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= e^{-N_a/2} \sum_{m_1, \dots, m_{N_s}} \frac{\psi_1^{m_1} \dots \psi_{N_s}^{m_{N_s}}}{\sqrt{m_1! \dots m_{N_s}!}} |\text{site 1 : } m_1; \dots; \text{site } N_s : m_{N_s}\rangle \\ &= e^{-N_a/2} \sum_{N=0}^{+\infty} \frac{N_a^{N/2}}{\sqrt{N!}} |\Phi_N\rangle \end{aligned} \quad (72)$$

où on a posé $N = \sum_{j=1}^{N_s} m_j$. Cette expression a une structure très proche de celle obtenue pour $|\Phi\rangle$, la seule différence étant que l'absence de la restriction sur les N_s -uplets m_1, \dots, m_{N_s} . Toutefois, pour des grandes valeurs de N_a , on peut vérifier que l'amplitude de probabilité d'un état $|\Phi_N\rangle$ dans (72) est fortement piquée autour de la valeur $N = N_a$, ce qui assure la quasi-égalité de $|\Phi_{N_a}\rangle$ et de $|\Psi\rangle$.

Références

- Altman, E., A. Polkovnikov, E. Demler, B. I. Halperin & M. D. Lukin (2005), « Superfluid-Insulator Transition in a Moving System of Interacting Bosons », in *Phys. Rev. Lett.* 95 (2), p. 020402.
- Bonneau, M., J. Ruaudel, R. Lopes, J.-C. Jaskula, A. Aspect, D. Boiron & C. I. Westbrook (2013), « Tunable source of correlated atom beams », in *Phys. Rev. A* 87 (6), p. 061603.
- Campbell, Gretchen K., Jongchul Mun, Micah Boyd, Erik W. Streed, Wolfgang Ketterle & David E. Pritchard (2006), « Parametric Amplification of Scattered Atom Pairs », in *Phys. Rev. Lett.* 96 (2), p. 020406.
- Castin, Y (2001), « Bose-Einstein condensates in atomic gases : simple theoretical results », in *Coherent atomic matter waves (Les Houches Summer School 1999)*, ed. by Kaiser R., Westbrook C. & David F., EDP Sciences and Springer-Verlag.

- Fallani, L., L. De Sarlo, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort & M. Inguscio (2004), « Observation of Dynamical Instability for a Bose-Einstein Condensate in a Moving 1D Optical Lattice », in *Phys. Rev. Lett.* 93 (14), p. 140406.
- Fisher, M. P. A., P. B. Weichman, G. Grinstein & D. S. Fisher (1989), « Boson localization and the superfluid-insulator transition », in *Phys. Rev. B* 40, p. 546.
- Greiner, M., O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch & I. Bloch (2002), « Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms », in *Nature* 415, p. 29.
- Hilligsøe, Karen Marie & Klaus Mølmer (2005), « Phase-matched four wave mixing and quantum beam splitting of matter waves in a periodic potential », in *Phys. Rev. A* 71 (4), p. 041602.
- Jaksch, D., C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner & P. Zoller (1998), « Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices », in *Phys. Rev. Lett.* 81 (15), pp. 3108–3111.
- Kohn, W. (1959), « Analytic Properties of Bloch Waves and Wannier Functions », in *Phys. Rev.* 115 (4), pp. 809–821.
- Krauth, Werner, Michel Caffarel & Jean-Philippe Bouchaud (1992), « Gutzwiller wave function for a model of strongly interacting bosons », in *Phys. Rev. B* 45 (6), pp. 3137–3140.
- Mun, J., P. Medley, G. K. Campbell, L. G. Marcassa, D. E. Pritchard & W. Ketterle (2007), « Phase diagram for a Bose-Einstein condensate moving in an optical lattice », in *arXiv :0706.3946*.
- Rokhsar, D. S. & B. G. Kotliar (1991), « Gutzwiller projection for bosons », in *Phys. Rev. B* 44, p. 10328.
- Smerzi, A., A. Trombettoni, P. G. Kevrekidis & A. R. Bishop (2002), « Dynamical Superfluid-Insulator Transition in a Chain of Weakly Coupled Bose-Einstein Condensates », in *Phys. Rev. Lett.* 89 (17), p. 170402.
- Wu, B. & Q. Niu (2001), « Landau and dynamical instabilities of the superflow of Bose-Einstein condensates in optical lattices », in *Phys. Rev. A* 64, 061603(R).
- (2003), « Superfluidity of Bose-Einstein condensate in an optical lattice : Landau-Zener tunnelling and dynamical instability », in *New J. Phys.* 5, p. 104.