Cohérence et superfluidité dans les gaz atomiques

Cours 3

Gaz en interaction et critère de Landau

Jean Dalibard

Chaire Atomes et rayonnement

Année 2015-16



Le but de ce chapitre

Ce que nous avons vu aux cours précédents

- Le gaz parfait saturé
- Les deux critères de superfluidité
 Rigidité de phase (vrai aussi pour le gaz parfait) Métastabilité des courants permanents (interactions indispensables)

Aujourd'hui : description plus détaillée du rôle des interactions

- Discussion qualitative de différents rôles possibles
- Traitement quantitatif dans un modèle de champ moyen

L'équation de Gross-Pitaevskii et l'approche de Bogoliubov

1.

Quels rôles pour les interactions ?

Elles empêchent la fragmentation

Elles peuvent favoriser l'hybridation

Elles conduisent à une intrication

+ modification du point critique et du comportement au voisinage de ce point

Anneau tournant et dégénérescences

L'hamiltonien d'une particule dans un anneau tournant :



Au point $\Omega_c/2$, dégénérescence des états propres à une particule

$$\psi_a(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (n=0) \qquad \qquad \psi_b(x) = \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (n=1)$$

Gaz parfait dans un anneau tournant

Puisque les états à une particule ψ_a et ψ_b sont dégénérés, tous les états à N particules du type

 $|N_a, N_b\rangle \equiv |N_a: \psi_a; N_b: \psi_b\rangle$ avec $N_a + N_b = N$

sont également dégénérés

Ce sont des états fragmentés :
$$\hat{
ho}_1 = egin{pmatrix} N_a & 0 \\ 0 & N_b \end{pmatrix}$$

Comment les interactions modifient-elles ce résultat ?

Interaction de contact : $V(x_1 - x_2) = g \, \delta(x_1 - x_2)$

Eléments de matrice :

$$V_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} = \langle 1 : \psi_{\alpha}; \ 2 : \psi_{\beta} | \hat{V} | 1 : \psi_{\gamma}; \ 2 : \psi_{\delta} \rangle$$
$$\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \{a, b\}$$



Le potentiel d'interaction



Parmi les 16 éléments de matrice possibles, la conservation du moment cinétique et l'uniformité de la densité entrainent que 6 seulement sont non nuls

termes « directs » :
$$V_{
m dir} \equiv V_{aaaa} = V_{bbbb} = V_{abab} = V_{baba} = rac{g}{2\pi r_0}$$

termes « d'échange » :
$$V_{
m ech}\equiv V_{abba}=V_{baab}=rac{g}{2\pi r_0}$$

La forme générale du potentiel d'interaction en seconde quantification se simplifie alors pour donner :

$$\hat{V} = \frac{V_{\text{dir}}}{2} \left[\hat{N}_a (\hat{N}_a - 1) + \hat{N}_b (\hat{N}_b - 1) + 2\hat{N}_a \hat{N}_b \right] + V_{\text{ech}} \hat{N}_a \hat{N}_b$$
$$= \frac{V_{\text{dir}}}{2} \hat{N} (\hat{N} - 1) + V_{\text{ech}} \hat{N}_a \hat{N}_b$$

Les interactions empêchent la fragmentation

En absence d'interaction, dégénérescence des états $|N_a, N_b\rangle$ avec $|N_a + N_b = N$



La contribution du terme d'échange dans

$$\hat{V} = \frac{V_{\rm dir}}{2} \ \hat{N}(\hat{N} - 1) + V_{\rm ech} \ \hat{N}_a \hat{N}_b$$

va lever cette dégénérescence

$$|N,0\rangle \quad |N-1,1\rangle \quad \bullet \quad |N/2,N/2\rangle \quad \bullet \quad \bullet \quad |1,N-1\rangle \quad |0,N\rangle$$

Barrière d'énergie macroscopique (~ $N g \rho^{1D}$) qui protège $|N,0\rangle$ et $|0,N\rangle$

Les interactions empêchent la fragmentation

Les interactions peuvent favoriser l'hybridation

Les interactions conduisent à une intrication

Gaz dans une boîte

Conditions aux limites de Dirichlet $\psi(0) = \psi(L) = 0$

Interactions de contact : $V(x_1 - x_2) = g \,\delta(x_1 - x_2)$



$$\psi_n(x) = \sin(n\pi x/L)$$

Dans cette géométrie, on a un élément de matrice non nul pour le processus



Elément de matrice :
$$V_{aaab} = \iint \psi_a^*(x_1) \psi_b^*(x_2) g \,\delta(x_1 - x_2) \,\psi_a(x_1) \,\psi_a(x_2) \,\mathrm{d}x_1 \,\mathrm{d}x_2$$

= $g \int |\psi_a(x)|^2 \,\psi_b^*(x) \,\psi_a(x) \,\mathrm{d}x$

Avec une fonction d'onde « hybridée » du type $\sqrt{1 - \epsilon^2 \psi_a(x)} + \epsilon \psi_b(x)$, on augmente la probabilité de présence au voisinage du bord : plus grande taille effective

Abaissement de l'énergie par hybridation

On considère un état de condensat pur :

$$|\Psi
angle = |1:\psi
angle \otimes |2:\psi
angle \otimes \ldots \otimes |N:\psi
angle$$
 avec $\psi(x) = \sqrt{1-\epsilon^2} \; \psi_a(x) \; + \; \epsilon \; \psi_b(x)$

et on calcule l'énergie moyenne. Est-elle abaissée pour $\epsilon \neq 0$?

Pour le gaz parfait, non.

Pour le gaz en interactions répulsives, c'est possible :

- On paye l'énergie à une particule supplémentaire $N(E_b E_a) \epsilon^2$
- On gagne l'énergie d'interaction $2N^2V_{aaab} \epsilon$

Pour ϵ assez petit, le gain l'emporte toujours sur le coût

L'optimisation de l'hybridation

On a intérêt à fabriquer un état condensé

$$|\Psi\rangle = |1:\psi\rangle \otimes |2:\psi\rangle \otimes \ldots \otimes |N:\psi\rangle$$

en mélangeant l'état fondamental à une particule ψ_a avec plusieurs états ψ_b

$$\psi(x) = \alpha \psi_a(x) + \sum_b \gamma_b \psi_b(x)$$

Les coefficients γ_b sont déterminés par une méthode variationnelle qui consiste à minimiser l'énergie moyenne : équation de Gross-Pitaevskii



La longueur de cicatrisation (healing length)

Quelle est la taille optimale de la « couche limite » au voisinage de la paroi ?



Energie moyenne à minimiser :



Energie cinétique liée au gradient de la fonction d'onde sur la distance ξ

Energie d'interaction (contact) pour N atomes occupant une longueur $L-2\xi$

A un facteur numérique près :
$$\xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2mg\rho}}$$
 $\rho = N/L$

Se généralise immédiatement à 2D et 3D

Les interactions empêchent la fragmentation

Les interactions peuvent favoriser l'hybridation

Les interactions conduisent à une intrication

Interactions et intrication

Les interactions peuvent également conduire à des diagrammes du type



Par exemple, une interaction de contact $g \ \delta(r_1 - r_2)$ entre deux atomes condensés dans l'état p = 0 peut produire une paire d'atomes $p = \hbar q$, $p = -\hbar q$

$$V_{bcaa} = \iint \left[\frac{e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_1}}{L^{3/2}}\right]^* \left[\frac{e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_2}}{L^{3/2}}\right]^* g\,\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) \left[\frac{1}{L^{3/2}}\right] \left[\frac{1}{L^{3/2}}\right] \,\mathrm{d}^3r_1 \,\mathrm{d}^3r_2 = \frac{g}{L^3}$$

On abaisse alors l'énergie du fondamental en considérant un état du type

$$\alpha_0 | N : \psi_a, 0, 0 \rangle + \alpha_2 | N - 2 : \psi_a, 1 : \psi_b, 1 : \psi_c \rangle + \dots$$

Interactions et intrication (2)

Un état du type $\alpha_0 | N : \psi_a, 0, 0 \rangle + \alpha_2 | N - 2 : \psi_a, 1 : \psi_b, 1 : \psi_c \rangle$

n'est pas un condensat pur.

Fraction condensée :
$$1 - \frac{2|\alpha_2|^2}{N}$$

Méthode de Bogoliubov quantique (avec beaucoup de paires bc possibles)

Intrication due aux interactions, qui diminue la fraction condensée et induit l'état superfluide

2.

L'équation de Gross-Pitaevskii ou équation de Schrödinger non linéaire

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi + G\,|\phi|^2\,\phi$$

Le statut de l'équation de Gross-Pitaevskii

Pour l'hélium liquide, équation phénoménologique donnant l'évolution du paramètre d'ordre, sans relation directe avec la fonction d'onde à N corps

En optique, propagation d'une onde dans un milieu non linéaire à l'approximation paraxiale : décrit l'évolution du champ dans le plan orthogonal à l'axe de propagation

Pour des gaz d'atomes froids, se justifie à partir d'un modèle microscopique dans le cadre d'une approche variationnelle

Approche de Hartree

On considère N atomes en interaction dans un piège

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{\hat{p}_j^2}{2m} + V_{\text{trap}}(\hat{r}_j) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\hat{r}_i - \hat{r}_j) \quad \text{longueur de diffusion : } a_s$$

On cherche des solutions approchées, inspirées de la notion de condensat de BE

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)=\phi(\boldsymbol{r}_1)\ldots\phi(\boldsymbol{r}_N)$$

Remplace le problème à N corps initial par un problème (non linéaire) à un corps

Fonctionnelle d'énergie pour une interaction de contact $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g \, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ $g = 4\pi \hbar^2 a_s/m$

$$\epsilon_{\rm GP}(\phi) = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\boldsymbol{\nabla}\phi|^2 + V_{\rm trap}(\boldsymbol{r})|\phi(\boldsymbol{r})|^2 + \frac{Ng}{2} |\phi(\boldsymbol{r})|^4\right) \,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \qquad N \gg 1$$

avec $\epsilon_{
m GP}(\phi) = rac{1}{N} \langle \Phi | \hat{H} | \Phi
angle$: énergie moyenne par particule

L'équation de Gross-Pitaevskii

Méthode variationnelle dépendant du temps :

Quelle est la variation temporelle à donner à la fonction de Hartree pour reproduire le plus fidèlement possible l'évolution de l'état à N corps ?

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N) \longrightarrow \phi(\boldsymbol{r}_1)\ldots\phi(\boldsymbol{r}_N)$$

Lagrangien :
$$L(\Phi) = \int \frac{\mathrm{i}\hbar}{2} \left(\Phi^* \dot{\Phi} - \dot{\Phi}^* \Phi \right) \right) - \Phi^* \left(\hat{H} \Phi \right) \, \mathrm{d}^3 r_1 \, \dots \, \mathrm{d}^3 r_N$$

 $\longrightarrow L(\phi) = \int \frac{\mathrm{i}\hbar}{2} \left(\phi^* \, \dot{\phi} - \dot{\phi}^* \, \phi \right) \, \mathrm{d}^3 r \, - \, \epsilon_{\mathrm{GP}}(\phi)$

Equation de Lagrange associée :

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi + V_{\text{trap}}(\boldsymbol{r}) \phi + Ng |\phi|^2 \phi$$

Solutions stationnaires pour un système homogène

Les ondes planes sont solutions stationnaires de $i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \phi + Ng |\phi|^2 \phi$

$$\phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i(\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}-\mu t/\hbar)} \text{ normalisée dans une boîte de taille } L^3$$
$$\mu = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} + \frac{Ng}{L^3} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} + g\rho \qquad \rho = N/L^3 \quad : \text{densité spatiale}$$

potentiel chimique

L'énergie totale se calcule simplement pour ces solutions

$$E = N\epsilon_{\rm GP} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}N + \frac{N^2 g}{2L^3}$$

et on retrouve donc bien la définition du potentiel chimique :

$$\mu = \left. \frac{\partial E}{\partial N} \right|_{L^3}$$

Comment analyser les solutions de l'équation de GP



• Quel est le spectre d'excitation au voisinage d'une solution stationnaire donnée, par exemple $\phi_{K=0}$?

Les deux questions conduisent à la même réponse : le critère de Landau

Métastabilité des solutions de l'équation de GP

Est-ce qu'une petite perturbation $\phi_{K} \longrightarrow \phi_{K} + \delta \phi$ augmente toujours l'énergie moyenne ?

Que prendre pour $\delta \phi$? On va choisir des perturbations en ondes planes

• une seule onde plane $\delta \phi \propto e^{i(K+q)\cdot r}$? Dangereux compte tenu du caractère non-linéaire de l'équation

$$\phi\phi\phi^* = \left[e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}} e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}}\right]e^{-i(\boldsymbol{K}+\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{r}} = e^{i(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{r}}$$

• une somme de deux ondes plane : OK

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}}}{L^{3/2}} \left(\phi_0 + u \,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} + v^* \,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\right)$$

avec $\phi_0 = \sqrt{1 - |u|^2 - |v|^2}$ et $|u|, |v| \ll 1$

Comment l'énergie moyenne varie-t-elle avec les coefficients (u, v)?

Surcoût en énergie de la perturbation

Calcul à l'ordre le plus bas non nul en (u, v) : forme quadratique

$$\Delta \epsilon = \epsilon_{\rm GP}(u, v) - \epsilon_{\rm GP}(0) = (u^*, v^*) \hat{\mathcal{H}} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

où $\hat{\mathcal{H}}$ est une matrice 2x2 fonction de $\boldsymbol{K}, \boldsymbol{q}, g\rho$

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} \left(q^2 + 2\mathbf{K} \cdot \mathbf{q} \right) + g\rho & g\rho \\ g\rho & \frac{\hbar^2}{2m} \left(q^2 - 2\mathbf{K} \cdot \mathbf{q} \right) + g\rho \end{pmatrix}$$

Il faut que cette forme quadratique soit positive quel que soit q

- Interactions répulsives : g > 0 $U(r r') = g \, \delta(r r')$
- Vitesse associée à l'onde principale pas trop grande : $V = \frac{\hbar K}{m} < c_s$ où la « vitesse du son » $c_s = \sqrt{g\rho/m}$ est reliée à la force des interactions $mc_s^2 = g\rho$

Critère de Landau

Conclusion de cette première approche

Pour la solution stationnaire

$$\phi_{\boldsymbol{K}}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}-\mu t/\hbar)}$$

la métastabilité (au moins vis-à-vis des perturbations de type onde plane) est assurée si la vitesse du condensat $\hbar K/m$ est inférieure à la vitesse du son



Ecoulement sans dissipation

Vitesse du son : $c_{\rm s} = \sqrt{g\rho/m}$

- Quelques millimètres/seconde pour les gaz d'atomes froids
- Pour He liquide superfluide, 240 m/s (mais la relation de dispersion est plus complexe que celle déduite de l'équation de Gross-Pitaevskii)

3.

L'approche de Bogoliubov (champ classique)

Quelle est la dynamique de $\phi(\mathbf{r},t)$ au voisinage d'une solution stationnaire ?

$$\phi_{\boldsymbol{K}}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{\mathrm{i}(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}-\mu t/\hbar)}$$

Equations du mouvement linéarisées

On reprend l'ansatz $\phi(\mathbf{r},t) = \frac{e^{i(\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}-\mu t/\hbar)}}{L^{3/2}} \left[\phi_0(t) + u(t) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + v^*(t) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\right]$

avec le choix de phase $\phi_0 \sim 1$. On l'injecte dans l'équation de GP

$$\begin{split} &\mathrm{i}\hbar \; \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \mathcal{H}_{11}u + \mathcal{H}_{12}v & \hat{\mathcal{H}} \; : \text{matrice réelle symétrique} \\ &\mathrm{i}\hbar \; \frac{\mathrm{d}v^*}{\mathrm{d}t} = \mathcal{H}_{21}u^* + \mathcal{H}_{22}v^* & \hat{\mathcal{H}} \; : \text{matrice réelle symétrique} \\ &\mathrm{obtenue \ plus \ haut} \end{split}$$

Faut-il diagonaliser $[\mathcal{H}]$ pour avoir les modes propres ? Pas vraiment... Il faut d'abord disposer d'équation fermées sur (u, v)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \hat{\mathcal{L}} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \qquad \qquad \hat{\mathcal{L}} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{11} & \mathcal{H}_{12} \\ -\mathcal{H}_{21} & -\mathcal{H}_{22} \end{pmatrix} \quad \text{opérateur de Bogoliubov}$$

... complique quelque peu la situation car $\hat{\mathcal{L}}$ n'est pas hermitien, mais il reste heureusement diagonalisable (presque toujours)

Les modes propres de l'opérateur de Bogoliubov

Prenons le cas d'un condensat immobile pour simplifier : K = 0

$$\phi(\mathbf{r},t) = \frac{e^{-i\mu t/\hbar}}{L^{3/2}} \left[\phi_0(t) + u(t) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + v^*(t) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\right] \qquad \phi_0 \sim 1$$

On peut écrire $\hat{\mathcal{L}}$ sous la forme :

$$\hat{\mathcal{L}} = \hbar \omega_q \begin{pmatrix} \cosh(2\alpha_q) & -\sinh(2\alpha_q) \\ \sinh(2\alpha_q) & -\cosh(2\alpha_q) \end{pmatrix} \qquad \qquad \tanh(2\alpha_q) = \frac{-g\rho}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + g\rho}$$

et les modes propres sont (

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} \cosh \alpha_q \\ \sinh \alpha_q \end{pmatrix}$$

Impulsion :
$$\langle \hat{\boldsymbol{p}} \rangle = \gamma^2 \ \hbar \boldsymbol{q}$$
Energie : $\epsilon_{\rm GP}(\boldsymbol{q}) = \epsilon_{\rm GP}(0) + \gamma^2 \ \hbar \omega_q$ $\epsilon_{\rm GP}(0) = g\rho/2$

avec la relation de dispersion $\omega_q = \left[c_s^2 q^2 + \left(\frac{\hbar q^2}{2m}\right)^2\right]^{1/2} \qquad c_s = \sqrt{g\rho/m}$

Le spectre de Bogoliubov



Pourquoi faut-il payer cette énergie alors que la particule interagissait déjà avec le condensat avant d'être excitée ?

L'excitation fait passer de $|N,0
angle\,$ à $|N-1,1:oldsymbol{q}
angle$: on paye l'énergie d'échange...

Transition entre les deux régimes : $q \sim m c_{
m s}/\hbar \sim 1/\xi$ ξ : longueur de cicatrisation

Spectre à basse énergie et théorème de Goldstone

 $q ext{ petit}: \ \ \omega_q pprox c_{ ext{s}} \ q$. En particulier, quand $\ \ q o 0$, $\ \ \omega_q o 0$

Pour ces modes « phononiques », les coefficients (u, v) sont tels que $u \approx -v \in \mathbb{R}$ Par exemple, pour le mode de plus bas vecteur d'onde $q = 2\pi/L$

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \left[1 + u \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} + v^* \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx} \right] \sim \frac{1}{L^{3/2}} \left[1 + 2\mathrm{i}\, u \, \sin(2\pi x/L) \right]$$



La condensation dans l'état $1/L^{3/2}$ aurait aussi bien pu se faire dans $e^{i\theta}/L^{3/2}$: même énergie

Brisure spontanée d'une symétrie continue : les fluctuations à grande échelle de la phase ne doivent pratiquement pas coûter d'énergie

Le spectre de Bogoliubov mesuré sur des atomes froids

Weizmann (2002)

Condensat de Rubidium quasi-pur : 10⁵ atomes, fraction condensée > 95 %

Piège harmonique en forme de cigare, spectroscopie de Bragg



Un cycle absorption-émission stimulée transfert au nuage l'impulsion $\hbar(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ (dépend de θ) et l'énergie $\hbar(\omega_1 - \omega_2)$

Le spectre de Bogoliubov mesuré sur des atomes froids (2)

Weizmann (2002)

Excitation de Bragg, puis temps de vol de 38 ms :







Le critère de Landau retrouvé

Objet de masse M en mouvement à vitesse V dans le fluide au repos (K = 0)

Cet objet peut-il déposer une excitation dans le superfluide, en passant à la vitesse V'?

Conservation de l'énergie : $\frac{1}{2}MV^2 = \frac{1}{2}MV'^2 + N\gamma^2\hbar\omega_q$ Conservation de l'impulsion : $MV = MV' + N\gamma^2\hbar q$

On élimine V' de ces deux équations : $\omega_q = \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{V} - N\gamma^2 \frac{\hbar q^2}{2M}$



- : relation de Bogoliubov

Comparaison des pentes à l'origine : pas de solution si $~V < c_{\rm s}$

Bilan de ce cours

L'équation de Gross-Pitaevskii fournit un moyen quantitatif pour évaluer la métastabilité des états d'un gaz en interaction

Spectre caractéristique en
$$\omega_q=\sqrt{q^2+q^4}$$



ightarrow Fournit un lien entre phonon $\,\omega_q\,\propto\,q\,$ et particule libre $\,\,\omega_q\,\propto\,q^2$

Conduit au critère de Landau : métastabilité si la vitesse relative entre le gaz et un obstacle éventuel (ponctuel) est inférieur à la vitesse du son c_s