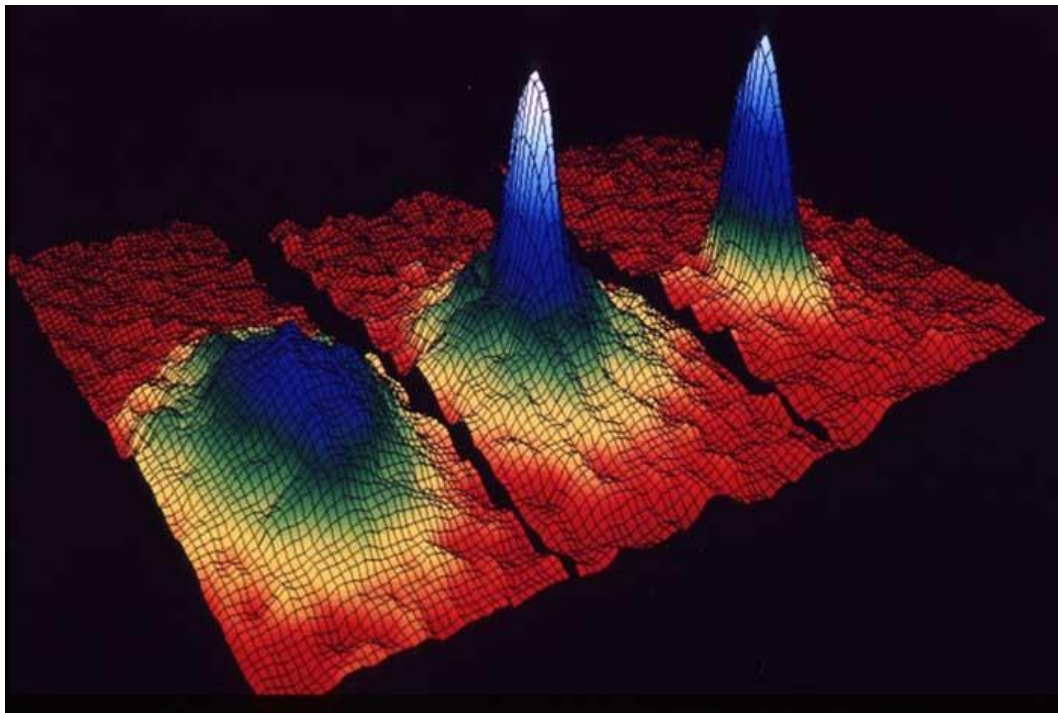


Atomes froids dans un réseau de lumière : Le condensat de Bose-Einstein à l'épreuve de la décohérence

Raphaël Photopoulos

Stage M1 réalisé du 27 avril au 19 juin 2015
au Laboratoire de Physique Corpusculaire de Caen
sous la direction du Professeur Olivier Juillet



Remerciements

Je voudrais remercier Olivier Juillet qui a su me faire confiance en me proposant ce sujet compte tenu du temps qui nous était imparti. Je voudrais le remercier pour son écoute, ses explications et sa grande patience qu'il a manifestée tout au long de ce stage à mon égard ainsi que pour sa disponibilité.

Table des matières

1. Introduction

1.1. Contexte général

1.2. Objectif du stage

2. Modèle de Bose-Hubbard

3. L'approximation de champ moyen de Gross-Pitaevskii

3.1. Le principe

3.2. Illustration : le modèle à deux sites

4. Dynamique dissipative d'un gaz de Bose sur réseau

4.1. L'équation pilote de Lindblad

4.2. Reformulation au travers d'une extension stochastique du champ moyen

4.2.1. Une première hypothèse : approche déterministe

4.2.2. Une seconde hypothèse : approche purement stochastique

4.2.3. Bilan

5. Conclusion

Références

Annexe A : Action du hamiltonien de Bose-Hubbard sur un condensat

Annexe B : Expression d'un condensat augmenté d'une variation de l'état individuel

1. Introduction

1.1 Contexte général

Depuis maintenant une vingtaine d'années, la physique des gaz quantiques d'atomes ultra-froids piégés a suscité un regain d'intérêt énorme dans la communauté scientifique [1]. En effet, ce domaine de recherche actuellement en plein essor a profité des progrès sur les techniques de piégeage et de refroidissement d'atomes par des faisceaux lumineux ou champs magnétiques statiques. A l'origine, c'est dès 1924 qu'Einstein s'inspirant des travaux de Bose [2] démontra un résultat remarquable à propos d'un gaz parfait de bosons. Dès lors, que la température T est suffisamment basse, les particules s'accumulent dans l'état quantique individuel de plus basse énergie et le gaz est ainsi essentiellement caractérisé par une fonction d'onde macroscopique. Ce phénomène se produit lorsque la distance inter-particulaire est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de De Broglie λ_T associée au mouvement d'agitation thermique :

$$n\lambda_T^3 \geq \zeta(3/2) \approx 2,612 \quad \text{où} \quad \lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$$

Où n est la densité du gaz, m la masse des particules (h et k_B sont respectivement les constantes de Planck et de Boltzmann). Il a fallu attendre 1995 pour réellement observer la condensation de Bose-Einstein au travers de la réalisation expérimentale, par l'équipe de E.Cornell et C. Wiemann, d'un gaz quasiment parfait de vapeur atomiques piégées et refroidies par laser [3]. Depuis lors, les atomes froids s'imposent progressivement dans l'espoir de simuler les mécanismes fondamentaux de problèmes à N-corps quantiques. On est en effet capable de modifier comme on le souhaite les propriétés microscopiques du gaz telles que sa statistique (bosonique ou fermionique), la nature des interactions (attractives ou répulsives), l'intensité des interactions, le potentiel de confinement, etc. Les travaux expérimentaux et/ou théoriques dans ce domaine relevant originellement de la physique atomique permettent globalement d'apporter des réponses décisives à des problématiques de physique moléculaire, de physique statistique, de physique de la matière condensée ou encore de l'information quantique.

1.2 Objectif du stage

Au cours de ce stage, nous nous intéresserons aux propriétés quantiques d'un système à N-corps d'atomes froids à température nulle $T=0$ piégés dans un potentiel périodique. Nous traiterons le problème exclusivement avec des bosons. Nous introduirons, en premier lieu, une approche de champ moyen pour "absorber" approximativement l'effet des interactions entre les atomes. Nous nous intéresserons par la suite au couplage du système avec un "environnement", comme un appareil de mesure. Il

s'agira alors d'examiner la dynamique exacte décrite par l'équation pilote de Lindblad et plus précisément de montrer qu'elle peut être reformulée en termes d'une extension stochastique du champ moyen. L'objectif, à terme, est ainsi de disposer d'un cadre théorique permettant d'étudier la stabilité d'un condensat de Bose-Einstein vis-à-vis des interactions et des processus de décohérence qui sont inévitablement induits par une mesure extérieure.

2. Modèle de Bose-Hubbard

En combinant plusieurs faisceaux lasers de piégeage [1], un gaz d'atomes froids peut être préparé dans un potentiel optique présentant des minima régulièrement disposés et dans lesquels les atomes viennent se piéger :

$$U_{\text{ext}}(\vec{r}) = U_0 \left(\sin^2(qx) + \sin^2(qy) + \sin^2(qz) \right) \quad (2.1)$$

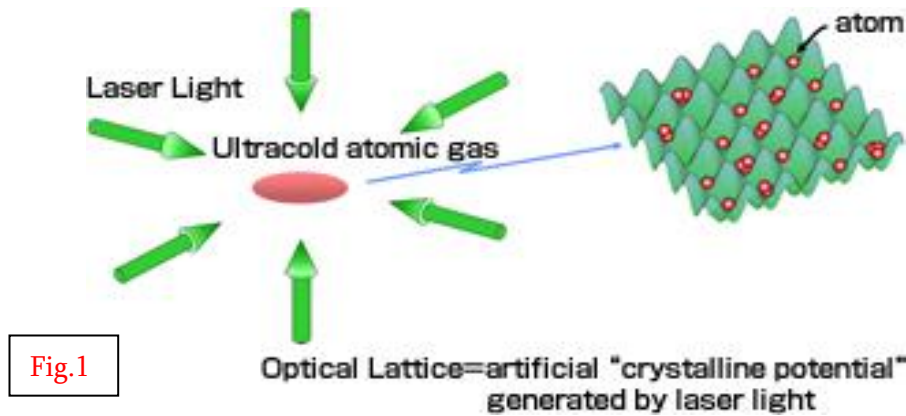


Fig.1

Schématiquement, les atomes se répartissent au fond des puits correspondant aux minima $\vec{r} = \frac{\pi}{q} (n_x \vec{u}_x + n_y \vec{u}_y + n_z \vec{u}_z)$ (avec n_x, n_y, n_z entiers) de ce potentiel (2.1). Ces sites "forment" donc un cristal cubique de pas $l = \frac{\pi}{q}$ et on parle de "réseau optique". Mais contrairement à ce qu'il se passe dans un solide, les sites ne sont pas nécessairement tous remplis et chacun peut éventuellement contenir plusieurs atomes (sous réserve que leur statistique soit bosonique). La fréquence d'oscillation $\omega/2\pi$ autour du fond de chaque puits est donnée par $\frac{1}{2} m \omega^2 = U_0 q^2$ soit $\hbar \omega = 2\sqrt{U_0 E_r}$ où $E_r = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$ (énergie de recul), m étant la masse d'un atome, on supposera ici que la dynamique des atomes peut être restreinte au niveau fondamental de chaque puits, c'est-à-dire que la température et l'énergie d'interaction entre atomes sont petites devant $\hbar \omega$. En d'autres termes, l'espace des états d'un atome est engendré par l'état fondamental $|\vec{r}\rangle$ de l'oscillateur harmonique de

pulsation ω centré sur chaque site \vec{r} du réseau. Nous négligerons le recouvrement des fonctions d'onde correspondantes et ainsi $\{|\vec{r}\rangle\}$ est une base orthonormée à une particule.

Dans un tel réseau optique, les atomes sont soumis à deux effets antagonistes : ils peuvent passer d'un site à un autre site voisin par effet tunnel (la probabilité tunnel décroît exponentiellement avec l'intensité des faisceaux laser) et ils interagissent entre eux par un potentiel dont la portée est très faible [2]. Par conséquent, on peut considérer que ces interactions existent lorsque deux atomes sont piégés dans le même puits.

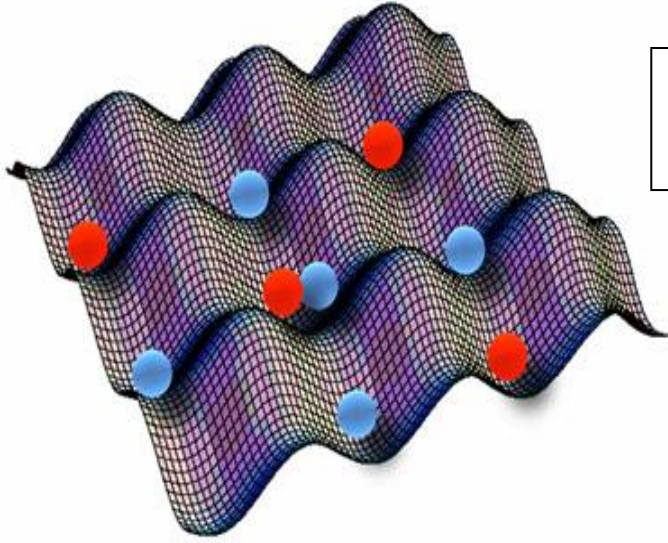


Fig.2 : Représentation schématique d'un réseau optique bidimensionnel.

Dans le langage de la seconde quantification, le hamiltonien correspondant est donné par :

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \hat{a}_{\vec{r}}^+ \hat{a}_{\vec{r}'} + \frac{U}{2} \sum_{\vec{r}} \hat{n}_{\vec{r}} (\hat{n}_{\vec{r}} - 1) \quad (2.2)$$

$\hat{a}_{\vec{r}}^+$ et $\hat{a}_{\vec{r}}$ sont respectivement les opérateurs de création et de destruction d'un atome sur le site \vec{r} . $\hat{n}_{\vec{r}} = \hat{a}_{\vec{r}}^+ \hat{a}_{\vec{r}}$ est l'opérateur comptant le nombre d'atomes sur le site \vec{r} et enfin, $\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle$ désigne une paire de sites plus proches voisins. Compte tenu du caractère symétrique des états à plusieurs bosons, ces opérateurs de création et d'annihilation doivent satisfaire à des relations de commutation [4] :

$$[\hat{a}_{\vec{r}}, \hat{a}_{\vec{r}'}^+] = \delta_{\vec{r}, \vec{r}'} \hat{1} \quad \text{et} \quad [\hat{a}_{\vec{r}}, \hat{a}_{\vec{r}'}] = [\hat{a}_{\vec{r}}^+, \hat{a}_{\vec{r}'}^+] = 0 \quad (2.3)$$

(2.2) définit le modèle de Bose-Hubbard. Le premier terme correspond à l'effet tunnel tandis que l'autre correspond aux interactions sur site.

Si l'effet tunnel ($t \gg U$) est dominant alors les atomes auront tendance à se délocaliser sur tout le réseau et à se condenser. En régime répulsif, si les interactions entre les atomes deviennent au contraire prépondérantes ($t \ll U$), les atomes vont avoir tendance à se localiser chacun dans des puits distincts : c'est l'isolant de Mott observé maintenant il y a une dizaine d'années par l'équipe de I. Bloch [5].

3. L'approximation de champ moyen de Gross-Pitaevskii

3.1 Le principe

Le concept de champ moyen est en général au cœur de la description théorique des systèmes quantiques de particules en interaction. Nous l'introduirons ici comme un schéma d'approximation de l'état fondamental et indiquerons sommairement comment il peut être étendu aux phénomènes dépendants du temps qui nous intéressent par la suite. En l'absence d'interaction ($U = 0$), tous les atomes sont condensés dans l'état fondamental de l'effet tunnel. L'état à N-corps correspondant s'écrit donc :

$$|N : \phi\rangle = |\phi\rangle \otimes \dots \otimes |\phi\rangle \quad (3.1)$$

Où $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_r}} \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle$ (N_r étant le nombre de sites du réseau)

L'approche de champ moyen (indépendante du temps) consiste alors à conserver cette forme de l'état à N-corps pour $U \neq 0$, la fonction d'onde macroscopique $|\phi\rangle$ étant cependant optimisée de manière à être le plus proche possible de la solution exacte. Pour ce faire, on utilise une méthode variationnelle [6]. Concrètement, il s'agit alors simplement de minimiser l'énergie moyenne $\langle \hat{H} \rangle_{N:\phi} = \langle N : \phi | \hat{H} | N : \phi \rangle$ où l'on a supposé $|\phi\rangle$ normé.

Dans le formalisme de la seconde quantification, le condensat s'obtient en appliquant successivement l'opérateur de création \hat{a}_ϕ^+ d'un atome dans l'état individuel $|\phi\rangle$:

$$|N : \phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{a}_\phi^+)^N |0\rangle \quad (3.2)$$

Dans la mesure où $|\phi\rangle = \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r} | \phi \rangle = \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \phi(\vec{r})$ et $\hat{a}_\phi^+ = \sum_{\vec{r}} \hat{a}_r^+ \phi(\vec{r})$ nous en déduisons que pour tout vecteur $|\phi'\rangle$:

$$[\hat{a}_{\phi'}, \hat{a}_{\phi}^+] = \langle \phi' | \phi \rangle \hat{1} \quad (3.3)$$

$$\text{En effet : } [\hat{a}_{\phi'}, \hat{a}_{\phi}^+] = \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} \langle \phi' | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r} | \phi \rangle [\hat{a}_{\vec{r}'}, \hat{a}_{\vec{r}}^+] = \sum_{\vec{r}} \langle \phi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \phi' \rangle \hat{1} = \sum_{\vec{r}} \phi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}) \hat{1} = \langle \phi | \phi' \rangle \hat{1}$$

En conséquence de (3.3), on en déduit immédiatement par récurrence que

$$[\hat{a}_{\phi'}, (\hat{a}_{\phi}^+)^N] = N \langle \phi' | \phi \rangle (\hat{a}_{\phi}^+)^{N-1} \quad (3.4)$$

On vérifie ainsi avec (3.4), que $\langle 0 | (\hat{a}_{\phi}^+)^N (\hat{a}_{\phi}^+)^N | 0 \rangle = N! \langle \phi | \phi \rangle^N$ et donc l'ansatz (3.2) est bien normé dès que $|\phi\rangle$ l'est. De plus, en prenant maintenant $|\phi'\rangle = |\vec{r}\rangle$, nous avons :

$$[\hat{a}_{\vec{r}}, (\hat{a}_{\phi}^+)^N] = N \langle \vec{r} | \phi \rangle (\hat{a}_{\phi}^+)^{N-1} \quad (3.5)$$

En utilisant (3.2) et (3.5), on obtient :

$$\hat{a}_{\vec{r}} |N : \phi\rangle = \hat{a}_{\vec{r}} \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{a}_{\phi}^+)^N |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} N \langle \vec{r} | \phi \rangle (\hat{a}_{\phi}^+)^{N-1} |0\rangle = \sqrt{N} \phi(\vec{r}) |N-1 : \phi\rangle \quad (3.6)$$

En prenant le conjugué hermitique de (3.6), nous obtenons la valeur moyenne d'un des termes associé à l'effet tunnel:

$$\langle \hat{a}_{\vec{r}}^+ \hat{a}_{\vec{r}'} \rangle_{N:\phi} = \langle N-1 : \phi | N-1 : \phi \rangle^{N-1} N \phi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}') = N \phi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}') \quad (3.7)$$

De plus, d'après (3.6), il vient :

$$\hat{a}_{\vec{r}}^2 |N : \phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} N(N-1) \langle \vec{r} | \phi \rangle (\hat{a}_{\phi}^+)^{N-1} |0\rangle = \sqrt{N(N-1)} \phi(\vec{r})^2 |N-2 : \phi\rangle \quad (3.8)$$

On obtient donc :

$$\langle \hat{n}_{\vec{r}}^2 - \hat{n}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi} = \langle \hat{a}_{\vec{r}}^+ \hat{a}_{\vec{r}}^+ \hat{a}_{\vec{r}} \hat{a}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi} = N(N-1) |\phi(\vec{r})|^4 \quad (3.9)$$

Finalement, d'après les expressions (3.9) et (3.7), l'expression de l'énergie moyenne dans le condensat s'écrit donc :

$$\langle \hat{H} \rangle_{N:\phi} = -Nt \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \phi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}') + \frac{U}{2} N(N-1) \sum_{\vec{r}} |\phi(\vec{r})|^4 \quad (3.10)$$

On trouve N contributions identiques provenant du terme d'énergie cinétique et $N(N-1)$ contributions du terme d'interaction entre particules. Il faut maintenant minimiser (3.10) en tenant compte de la contrainte de normalisation dans le cadre de la méthode des multiplicateurs de Lagrange, on introduit la fonctionnelle :

$$F(\Phi) = \langle \hat{H} \rangle_{N:\phi} - \lambda \langle \phi | \phi \rangle \quad (3.11)$$

qui est rendue stationnaire en considérant toutes les variables comme indépendantes. Il faut donc que :

$$\frac{\partial F}{\partial \phi^*(\vec{r})} = -Nt \sum_{\vec{r}'} \delta_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \phi(\vec{r}') + UN(N-1) |\phi(\vec{r})|^2 \phi(\vec{r}) + \lambda \phi(\vec{r}) = 0$$

$$\text{d'où} \quad -t \sum_{\vec{r}'} \delta_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \phi(\vec{r}') + U(N-1) |\phi(\vec{r})|^2 \phi(\vec{r}) = \frac{\lambda}{N} \phi(\vec{r}) \quad (3.12)$$

Finalement, on voit dans cette équation l'émergence d'un champ moyen que l'on notera tout au long de ce manuscrit $\bar{v}(\hat{r})$ telle que (3.12) puisse s'écrire :

$$\langle \vec{r} | \hat{t} + \bar{v}(\hat{r}) | \phi \rangle = \frac{\lambda}{N} \langle \vec{r} | \phi \rangle \Leftrightarrow \hat{h} | \phi \rangle = \tilde{\varepsilon} | \phi \rangle \quad (3.13)$$

$$\text{avec} \quad \hat{h} = -t \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r}' | + \frac{U(N-1)}{N} \sum_{\vec{r}} | \vec{r} \rangle \langle \hat{n}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi} \langle \vec{r} | \Leftrightarrow \hat{h} = \hat{t} + \hat{v} \quad (3.14)$$

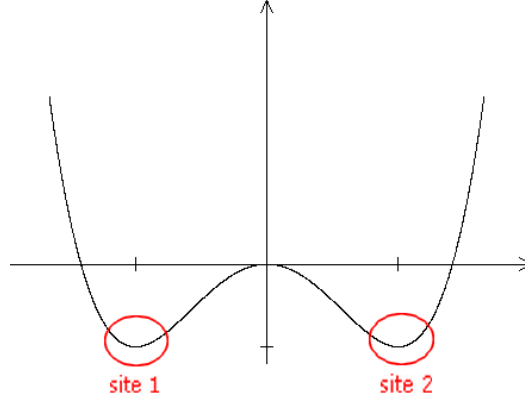
Cette équation a la structure d'une équation aux valeurs propres pour un hamiltonien \hat{h} effectif à un corps faisant intervenir l'effet tunnel entre les puits adjacents et l'énergie de champ moyen créée par le gaz formé par les $N-1$ autres particules, dont la densité dans un puits est $(N-1) |\phi(\vec{r})|^2$. Cette équation de Schrödinger non-linéaire porte le nom d'équation de Gross-Pitaevskii (3.13). Elle est auto-cohérente et peut être résolue numériquement par itération successive. On choisit un état de départ $|\phi\rangle$ dans lequel les atomes sont condensés, puis on détermine les valeurs propres de l'hamiltonien effectif par diagonalisation. Ceci permet d'obtenir un nouvel état propre de plus basse énergie et enfin on réitère le processus jusqu'à convergence.

Signalons enfin que l'approximation de champ moyen peut être aisément étendue à la dynamique du gaz d'atomes [7]. On suppose alors qu'à tout instant le système conserve la forme condensée $|N:\phi\rangle$ caractéristique d'un gaz parfait mais l'état individuel $|\phi\rangle$ est optimisé afin de s'approcher du mieux possible de la solution exacte issue de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. On montre que $|\phi\rangle$ doit simplement évoluer avec l'hamiltonien de champ moyen que nous avons mis en exergue par l'état fondamental :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\phi\rangle = \hat{h} |\phi\rangle \quad (3.15)$$

3.2 Illustration : le modèle à deux sites

Considérons ici un système simple formé d'atomes piégés dans un potentiel à une dimension en forme de double puits [8]. Soient $|\vec{r}_1\rangle$ et $|\vec{r}_2\rangle$ les vecteurs d'état d'un atome localisé sur les sites 1 et 2 (on suppose que ces deux états sont orthonormés).



Dans le cadre du champ moyen où l'état fondamental en présence d'interaction est approximé par un condensat $|N:\phi\rangle$, l'hamiltonien effectif de Gross-Pitaevskii s'écrit alors :

$$\hat{h} = -t(|\vec{r}_1\rangle\langle\vec{r}_2| + |\vec{r}_2\rangle\langle\vec{r}_1|) + U(N-1)(|x_1|^2|\vec{r}_1\rangle\langle\vec{r}_1| + |x_2|^2|\vec{r}_2\rangle\langle\vec{r}_2|) \quad (3.16)$$

x_1 et x_2 sont les amplitudes de probabilité de présence d'un atome sur chacun des deux sites. Elles définissent complètement l'état individuel $|\phi\rangle$ dans lequel les atomes sont condensés : $|\phi\rangle = x_1|\vec{r}_1\rangle + x_2|\vec{r}_2\rangle$. La solution optimale est obtenue en résolvant l'équation aux valeurs propres (3.13) :

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} U(N-1)|x_1|^2 & -t \\ -t & U(N-1)|x_2|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \tilde{\varepsilon} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Posons $\kappa = |x_1|^2 - |x_2|^2$ de sorte que, compte-tenu de la normalisation $|x_1|^2 + |x_2|^2 = 1$, $|x_1|^2 = \frac{1+\kappa}{2}$ et $|x_2|^2 = \frac{1-\kappa}{2}$. Introduisons aussi : $g = \frac{U(N-1)}{2}$ et $\mu = \tilde{\varepsilon} - g$. Le système (3.17) se réécrit sous la forme :

$$\begin{pmatrix} g\kappa & -t \\ -t & -g\kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

Nous devons donc avoir $\begin{vmatrix} g\kappa - \mu & -t \\ -t & -g\kappa - \mu \end{vmatrix} = 0$ et en divisant la première ligne du système d'équation (3.18) par le conjugué de la seconde ligne, il vient : $(\mu - g)\kappa = 0$ (3.19)

$$\text{Les solutions sont aussi : } \begin{cases} \mu = g \Leftrightarrow \tilde{\varepsilon} = 2g = U(N-1) \\ \kappa = 0 \Leftrightarrow \tilde{\varepsilon} = \pm t + \frac{U(N-1)}{2} \end{cases}$$

En régime répulsif, l'énergie propre effective d'une particule dans son état fondamental approché est donné par $\tilde{\varepsilon} = -t + \frac{U(N-1)}{2}$, la fonction d'onde macroscopique optimale est simplement vecteur propre de l'effet tunnel pour la valeur propre $-t$, soit :

$$\begin{pmatrix} 0 & -t \\ -t & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = -t \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

$$|\phi_{opt}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\vec{r}_1\rangle + |\vec{r}_2\rangle) \quad (3.21)$$

Pour ce modèle à deux sites, l'approximation de champ moyen conduit donc, pour $U > 0$, au même condensat qu'en l'absence d'interaction. Dès lors, on peut calculer l'énergie moyenne du système dans l'état optimal s'approchant de l'état fondamental exact en se référant à (3.10) :

$$\langle \hat{H} \rangle_{N:\phi_{opt}} = -Nt + \frac{UN(N-1)}{4} \quad (3.22)$$

Elle peut être comparée à la valeur exacte dans la mesure où le modèle de Bose-Hubbard à deux sites se résout "facilement" en utilisant une algèbre de pseudo-spin [9]. Nous nous limiterons ici à un calcul analytique plus simple pour deux atomes. L'état du système devant être symétrique dans l'échange des particules, l'espace des états accessibles est alors généré par trois vecteurs de base :

- $|u_1\rangle = |\vec{r}_1, \vec{r}_1\rangle$ et $|u_3\rangle = |\vec{r}_2, \vec{r}_2\rangle$ correspondants aux deux bosons sur un même site
- $|u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\vec{r}_1, \vec{r}_2\rangle + |\vec{r}_2, \vec{r}_1\rangle)$ avec un atome dans chaque puits

La matrice du hamiltonien de Bose-Hubbard exprimée dans la base orthonormée $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ s'obtient immédiatement :

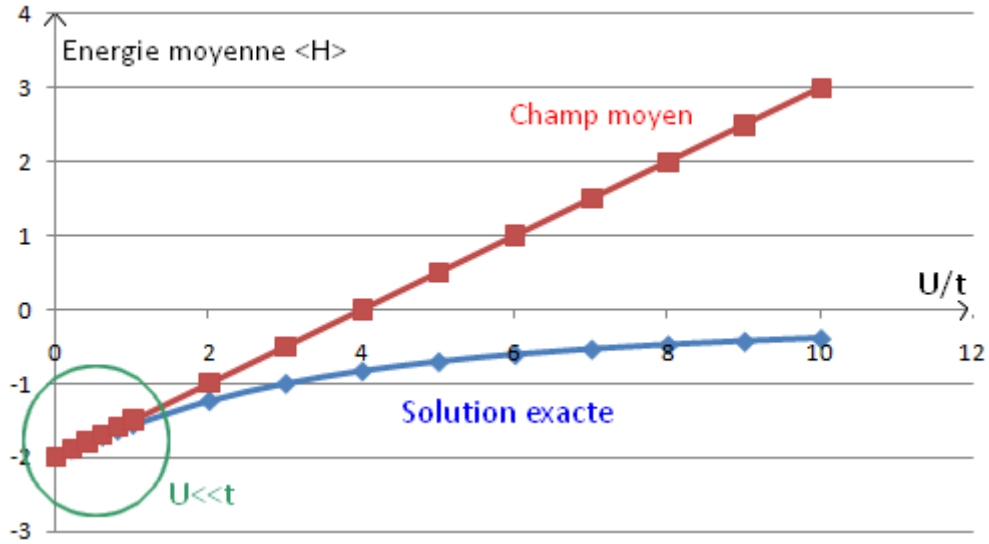
$$\hat{H} \Rightarrow \begin{bmatrix} U & -t\sqrt{2} & 0 \\ -t\sqrt{2} & 0 & -t\sqrt{2} \\ 0 & -t\sqrt{2} & U \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

Après diagonalisation de (3.23), les trois niveaux d'énergie possibles sont :

$$E_0 = \frac{U - \sqrt{U^2 + 16t^2}}{2}, \quad E_1 = U \quad \text{et} \quad E_2 = \frac{U + \sqrt{U^2 + 16t^2}}{2}.$$

Pour $U > 0$, E_0 est l'énergie de l'état fondamental.

Nous comparons ci-dessous l'énergie moyenne à l'approximation de Gross-Pitaevskii (3.22) à la solution exacte pour deux atomes dans deux puits (E_0) en fonction de U/t :



Comme attendu, le champ moyen n'est une bonne approximation de l'état fondamental exact du système, que pour $U \leq 2t$ environ.

4. Dynamique dissipative d'un gaz de Bose sur réseau

4.1 L'équation pilote de Lindblad

Nous supposons dorénavant que le système (S) d'atomes froids n'est plus isolé et interagit avec un environnement extérieur (E). Il peut tout simplement s'agir des champs électromagnétiques utilisés pour réaliser le réseau optique ou bien d'un appareil de mesure d'une observable. Il en résulte inévitablement un enchevêtrement des degrés de liberté du gaz d'atomes et de ceux de l'environnement si bien que le vecteur $|\psi^{(S,E)}\rangle$ de l'ensemble s'écrit sous la forme d'une superposition d'états factorisés :

$$|\psi^{(S,E)}\rangle = \sum_{n,p} c_{n,p} |\psi_n^{(S)}\rangle \otimes |\psi_p^{(E)}\rangle \quad (4.1)$$

Où $\{|\psi_n^{(S)}\rangle\}$ et $\{|\psi_p^{(E)}\rangle\}$ sont des bases orthonormées des espaces hilbertiens respectivement associés à (S) et (E). Dès lors, la valeur moyenne d'une grandeur $\hat{A}^{(S)}$ relative seulement au système d'atomes s'écrit : $\langle \hat{A}^{(S)} \rangle = \sum_{n,n',p} c_{np}^* c_{n'p} \langle \psi_n^{(S)} | \hat{A}^{(S)} | \psi_{n'}^{(S)} \rangle$ ou

encore $\langle \hat{A}^{(S)} \rangle = \text{Tr}(\hat{D} \hat{A}^{(S)})$, en faisant apparaître l'opérateur densité $\hat{D} = \sum_{n,n',p} c_{np}^* c_{n'p} |\psi_n^{(S)}\rangle \langle \psi_{n'}^{(S)}|$ du système. On montre aisément que \hat{D} est hermitique de trace égale à 1 et qu'il s'agit d'un opérateur positif : $\langle \psi_n^{(S)} | \hat{D} | \psi_{n'}^{(S)} \rangle \geq 0$ pour tout vecteur associé au système. En conséquence, \hat{D} peut être diagonalisé avec des valeurs propres p_k

comprises entre 0 et 1, soit $\hat{D} = \sum_k |\psi_k\rangle p_k \langle \psi_k|$ où les kets $|\psi_k^{(S)}\rangle$ sont les vecteurs propres associés. Ainsi $\langle \hat{A}^{(S)} \rangle = \sum_k p_k \langle \psi_k^{(S)} | \hat{A}^{(S)} | \psi_k^{(S)} \rangle$ et l'on comprend alors que \hat{D} traduit la possibilité pour le système d'être dans l'un des états $|\psi_k^{(S)}\rangle$ avec la probabilité p_k . En résumé, le couplage avec l'environnement implique que l'état du système est imparfaitement connu.

Au niveau dynamique, l'état total $|\psi^{(S,E)}\rangle$ évolue bien sûr selon l'équation de Schrödinger $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi^{(S,E)}\rangle = \hat{H}^{(S,E)} |\psi^{(S,E)}\rangle$ où $\hat{H}^{(S,E)}$ est l'hamiltonien du système total soit :

$$\hat{H}^{(S,E)} = \hat{H}^{(S)} + \hat{H}^{(E)} + \hat{V}^{(S,E)} \quad (4.2)$$

$\hat{H}^{(S)}$ est l'hamiltonien du système donc celui de Bose-Hubbard (2.2) dans notre cas, $\hat{H}^{(E)}$ est l'hamiltonien propre à l'environnement et $\hat{V}^{(S,E)}$ traduit le couplage entre (S) et (E). En éliminant les degrés de liberté de l'environnement et moyennant plusieurs hypothèses générales, il a été montré [10] que l'opérateur densité \hat{D} du système suit (approximativement) l'équation pilote de Lindblad suivante :

$$\frac{d}{dt} \hat{D} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{D}] + \sum_s \gamma_s \left(\hat{L}_s \hat{D} \hat{L}_s^\dagger - \frac{1}{2} (\hat{L}_s^\dagger \hat{D} + \hat{D} \hat{L}_s) \right) \quad (4.3)$$

Les opérateurs \hat{L}_s , dits de "sauts quantiques", traduisent le couplage avec l'environnement. Par ailleurs, on vérifie que l'énergie moyenne $\langle \hat{H} \rangle = \text{Tr}(\hat{D} \hat{H})$ du système n'est pas conservée au cours du temps avec l'équation de Lindblad sous l'influence de l'environnement et c'est pourquoi on parle de dynamique dissipative. Le nombre moyen $\langle \hat{N} \rangle = \text{Tr}(\hat{D} \hat{N})$ demeure, en revanche, constant dès lors que les opérateurs \hat{L}_s commutent tous avec \hat{N} .

Dans notre cas, nous nous restreignons à un couplage au travers du nombre d'atomes dans chaque puits. Ainsi : $\sum_s \gamma_s \hat{L}_s \Rightarrow \sum_{\vec{r}} \gamma \hat{n}_{\vec{r}}$, la constante de couplage γ étant supposée uniforme. En réalité, ce choix s'apparente plutôt à une mise au contact d'un appareillage visant à mesurer simultanément le nombre d'atomes dans chacun des puits (c'est-à-dire le profil de répartition des atomes au sein du réseau). Dans ces conditions, la dynamique de Lindblad (4.3) peut être réécrite en terme de l'hamiltonien de Bose-Hubbard (2.2) dans lequel l'interaction U se voit augmentée d'une composante imaginaire pure proportionnelle à γ :

$$\frac{d}{dt} \hat{D} = \frac{1}{i\hbar} (\hat{H}_{\text{eff}} \hat{D} - \hat{D} \hat{H}_{\text{eff}}^\dagger) + \sum_{\vec{r}} \gamma \hat{n}_{\vec{r}} \hat{D} \hat{n}_{\vec{r}} \quad (4.4)$$

$$\text{avec } \hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H} - \frac{i\hbar}{2} \sum_{\vec{r}} \gamma \hat{n}_{\vec{r}}^2 = \hat{H}_{U-i\hbar\gamma} - \frac{i\hbar\gamma}{2} \sum_{\vec{r}} \hat{n}_{\vec{r}} \quad (4.5)$$

où $\hat{N} = \sum_{\vec{r}} \hat{n}_{\vec{r}}$ est le nombre total d'atomes et $\hat{H}_{U-i\hbar\gamma}$ est le hamiltonien de Bose-Hubbard dans lequel on remplace U par $U - i\hbar\gamma$.

4.2 Reformulation au travers d'une extension stochastique du champ moyen

Avec des opérateurs de sauts \hat{L}_s donnés par la densité $\hat{n}_{\vec{r}} = \hat{a}_{\vec{r}}^+ \hat{a}_{\vec{r}}$ d'atomes dans chaque puits, le nombre moyen total d'atomes est une constante du mouvement selon l'équation de Lindblad (4.4). Il en est de même pour $\langle \hat{N}^2 \rangle$ et donc pour la variance associée. En conséquence, si le système est initialement préparé avec un nombre N parfaitement déterminé d'atomes, cette propriété restera valable à tout instant. Nous nous placerons par la suite dans un tel scénario.

On peut alors montrer que tout opérateur densité \hat{D} peut être reconstruit en moyennant des dyades d'états condensés, soit :

$$\hat{\sigma}^{(ab)}(t) = |N : \phi^{(a)}(t) \rangle \langle N : \phi^{(b)}(t) | \quad (4.6)$$

Où les deux fonctions d'onde macroscopiques $\phi^{(a)}$ et $\phi^{(b)}$ ne sont pas nécessairement identiques et normées.

$$\hat{D}(t) = \mathbb{E}[\hat{\sigma}^{(ab)}(t)] = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{p=1}^{\mathcal{N}} |N : \phi_p^{(a)} \rangle \langle N : \phi_p^{(b)} | \quad (4.7)$$

L'indice p se réfère aux différentes réalisations dont le nombre total est noté \mathcal{N} . Il en résulte que nous pouvons, à priori, retrouver la solution exacte de l'équation de Lindblad en donnant un mouvement spécifique à $|\phi^{(a)}\rangle$ et $|\phi^{(b)}\rangle$. Dans ces conditions, nous serons en mesure de pouvoir étudier le devenir d'un condensat de Bose sur réseau sous l'effet conjugué des interactions binaires entre les atomes et des couplages avec un environnement extérieur. Pour mener à bien ce "programme", il suffira d'initialiser $|\phi^{(a)}\rangle$ et $|\phi^{(b)}\rangle$ avec la fonction d'onde du condensat et de faire suivre à ces deux vecteurs l'évolution que nous allons déterminer afin de retrouver en moyenne l'opérateur densité exact.

En premier lieu, commençons par étudier la dynamique d'une dyade de condensats pendant une petite durée Δt . Selon l'équation de Lindblad (4.4) :

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}^{(ab)}(t + \Delta t) = & \left(\hat{1} + \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}_{eff} \right) \left| N : \phi^{(a)}(t) \right\rangle \left\langle N : \phi^{(b)}(t) \right| + \left| N : \phi^{(a)}(t) \right\rangle \left\langle N : \phi^{(b)}(t) \right| \left(\hat{1} - \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}_{eff}^+ \right) \\
& + \sum_{\vec{r}} \Delta t \gamma \hat{n}_{\vec{r}} \left| N : \phi^{(a)}(t) \right\rangle \left\langle N : \phi^{(b)}(t) \right| \hat{n}_{\vec{r}}
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Nous présentons dans l'annexe A, le calcul consistant à expliciter l'action du hamiltonien de Bose-Hubbard sur un condensat $|N : \phi\rangle$. Trois contributions sont ainsi mises en évidence :

- L'une se réduit à une simple multiplication par l'énergie moyenne.
- La seconde "expulse" un atome du condensat pour lui conférer un état individuel $|\bar{\phi}\rangle$ orthogonal à $|\phi\rangle$. Notons que l'amplitude de probabilité correspondante est associée directement à l'élément de matrice (entre $|\phi\rangle$ et $|\bar{\phi}\rangle$) de l'hamiltonien de Gross-Pitaevskii introduit dans la section 3 (3.14).
- Le dernier change l'état de deux atomes du condensat, ces derniers se retrouvant de nouveau avec des états quelconques orthogonaux à la fonction d'onde macroscopique.

En procédant de manière similaire avec les termes $\hat{n}_{\vec{r}} \hat{\sigma}^{(ab)} \hat{n}_{\vec{r}}$ de l'équation de Lindblad (4.4), nous obtenons des contributions proportionnelles à $\hat{\sigma}^{(ab)}$ auxquelles se superposent des excitations des deux condensats de la dyade associées à un changement d'état d'un atome. Au final, nous obtenons précisément sous l'effet des interactions et des couplages avec l'environnement l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}^{(ab)}(t + \Delta t) = & \left(1 + \frac{\Delta t}{i\hbar} \langle \hat{H}_{eff} \rangle_{N:\phi^{(a)}} - \frac{\Delta t}{i\hbar} \langle \hat{H}_{eff}^+ \rangle_{N:\phi^{(b)}} + \gamma \Delta t \sum_{\vec{r}} \langle \hat{n}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi^{(a)}} \langle \hat{n}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi^{(b)}} \right) \hat{\sigma}^{(ab)}(t) \\
& + \sqrt{N} \sum_{\bar{\phi}^{(a)}} \langle \bar{\phi}^{(a)} | \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{h}_{U-i\hbar\gamma}^{(a)} + \Delta t \hat{w}^{(a)} | \phi^{(a)} \rangle \hat{a}_{\bar{\phi}^{(a)}}^+ | N-1 : \phi^{(a)} \rangle \langle N : \phi^{(b)} | \\
& + \frac{\sqrt{N(N-1)}}{2} \sum_{\bar{\phi}_1^{(a)}, \bar{\phi}_2^{(a)}} \sum_{\vec{r}} \frac{(U - i\hbar\gamma)\Delta t}{i\hbar} \langle \bar{\phi}_1^{(a)} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \phi^{(a)} \rangle \langle \bar{\phi}_2^{(a)} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \phi^{(a)} \rangle \hat{a}_{\bar{\phi}_1^{(a)}}^+ \hat{a}_{\bar{\phi}_2^{(a)}}^+ | N-2 : \phi^{(a)} \rangle \langle N : \phi^{(b)} | \\
& + \sqrt{N} \sum_{\bar{\phi}^{(b)}} \langle \bar{\phi}^{(b)} | \Delta t \hat{w}^{(b)} - \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{h}_{U-i\hbar\gamma}^{(b)+} | \phi^{(b)} \rangle | N : \phi^{(a)} \rangle \langle N-1 : \phi^{(b)} | \hat{a}_{\bar{\phi}^{(b)}} \\
& + \frac{\sqrt{N(N-1)}}{2} \sum_{\bar{\phi}_1^{(b)}, \bar{\phi}_2^{(b)}} \sum_{\vec{r}} \frac{(U - i\hbar\gamma)\Delta t}{i\hbar} \langle \bar{\phi}_1^{(b)} | \vec{r} \rangle^* \langle \vec{r} | \phi^{(b)} \rangle^* \langle \bar{\phi}_2^{(b)} | \vec{r} \rangle^* \langle \vec{r} | \phi^{(b)} \rangle^* | N : \phi^{(a)} \rangle \langle N-2 : \phi^{(b)} | \hat{a}_{\bar{\phi}_1^{(b)}} \hat{a}_{\bar{\phi}_2^{(b)}} \\
& + N \sum_{\bar{\phi}^{(a)}, \bar{\phi}^{(b)}} \sum_{\vec{r}} \gamma \Delta t \phi^{(b)*}(\vec{r}) \phi^{(a)}(\vec{r}) \bar{\phi}^{(a)*}(\vec{r}) \bar{\phi}^{(b)}(\vec{r}) \hat{a}_{\bar{\phi}^{(a)}}^+ | N-1 : \phi^{(a)} \rangle \langle N-1 : \phi^{(b)} | \hat{a}_{\bar{\phi}^{(b)}}
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Ici $\hat{h}_{U-i\hbar\gamma}^{(k)}$ correspond à l'hamiltonien de champ moyen pour le condensat $|N:\phi^{(k)}\rangle$ ($k \in \{a, b\}$) de la dyade et avec l'interaction effective complexe $U - i\hbar\gamma$. Outre les couplages entre puits plus proches voisins (avec l'amplitude $-t$), sa matrice dans la base $|\vec{r}\rangle$ comporte des termes diagonaux de potentiel moyen proportionnels au nombre moyen d'atomes sur chaque site $\langle \hat{n}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi^{(k)}}$ (auquel il convient d'ajouter la contribution $-\frac{i\hbar\gamma}{2}$) :

$$\hat{h}_{U-i\hbar\gamma} = \hat{t} - \frac{i\hbar\gamma}{2} \hat{1} + \underbrace{\frac{(U - i\hbar\gamma)(N-1)}{N} \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \hat{n}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi^{(k)}} \langle \vec{r}|}_{\bar{v}_{U-i\hbar\gamma}^{(k)}} \quad (4.10)$$

$$\text{où } \langle \hat{n}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi^{(k)}} = \frac{N |\phi^{(k)}(\vec{r})|^2}{\|\phi^{(k)}\|^2} \text{ avec } k = \{a, b\}$$

Notons également l'émergence de contributions locales similaires sous l'effet des couplages avec l'environnement mais dans lesquelles chaque condensat de la dyade est influencé par le profil de densité des atomes dans l'autre condensat. Nous avons noté ci-dessus $\bar{w}^{(a)}$, $\bar{w}^{(b)}$ ces nouveaux potentiels moyen associés aux processus de décohérence :

$$\begin{cases} \bar{w}^{(a)} = \gamma \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \hat{n}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi^{(b)}} \langle \vec{r}| \\ \bar{w}^{(b)} = \gamma \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \hat{n}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi^{(a)}} \langle \vec{r}| \end{cases} \quad (4.11)$$

Nous souhaitons maintenant comparer cette dynamique à celle résultant d'une simple petite variation $|\Delta\phi^{(k)}\rangle$ des états individuels dans lesquels les atomes sont condensés au niveau du ket ($k=a$) ou du bra ($k=b$) dans la dyade. En utilisant les résultats de l'annexe B et jusqu'au second ordre en $\Delta\phi$, il vient alors :

$$\begin{aligned} & |N:\phi^{(a)} + \Delta\phi^{(a)}\rangle \langle N:\phi^{(b)} + \Delta\phi^{(b)}| = \\ & \left[1 + N \left(\frac{\langle \phi^{(b)} | \Delta\phi^{(b)} \rangle^*}{\|\phi^{(b)}\|^2} + \frac{\langle \phi^{(a)} | \Delta\phi^{(a)} \rangle}{\|\phi^{(a)}\|^2} \right) + N^2 \frac{\langle \phi^{(a)} | \Delta\phi^{(a)} \rangle \langle \phi^{(b)} | \Delta\phi^{(b)} \rangle^*}{\|\phi^{(a)}\|^2 \|\phi^{(b)}\|^2} \right. \\ & \quad \left. + \frac{N(N-1)}{2} \left(\frac{\langle \phi^{(a)} | \Delta\phi^{(a)} \rangle^2}{\|\phi^{(a)}\|^4} + \frac{\langle \phi^{(b)} | \Delta\phi^{(b)} \rangle^{*2}}{\|\phi^{(b)}\|^4} \right) \right] \hat{\sigma}^{(ab)} \\ & + \sqrt{N} \sum_{\bar{\phi}^{(b)}} \left(1 + \frac{N \langle \phi^{(a)} | \Delta\phi^{(a)} \rangle}{\|\phi^{(a)}\|^2} + (N-1) \frac{\langle \phi^{(b)} | \Delta\phi^{(b)} \rangle^*}{\|\phi^{(b)}\|^2} \right) \langle \bar{\phi}^{(b)} | \Delta\phi^{(b)} \rangle^* |N:\phi^{(a)}\rangle \langle N-1:\phi^{(b)} | \hat{a}_{\bar{\phi}^{(b)}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\sqrt{N} \sum_{\bar{\phi}^{(a)}} \left(1 + \frac{N \langle \phi^{(b)} | \Delta \phi^{(b)} \rangle^*}{\|\phi^{(b)}\|^2} + (N-1) \frac{\langle \phi^{(a)} | \Delta \phi^{(a)} \rangle}{\|\phi^{(a)}\|^2} \right) \langle \bar{\phi}^{(a)} | \Delta \phi^{(a)} \rangle \hat{a}_{\bar{\phi}^{(a)}}^+ | N-1 : \phi^{(a)} \rangle \langle N : \phi^{(b)} | \\
& + N \sum_{\bar{\phi}^{(a)}, \bar{\phi}^{(b)}} \langle \bar{\phi}^{(a)} | \Delta \phi^{(a)} \rangle \langle \bar{\phi}^{(b)} | \Delta \phi^{(b)} \rangle^* \hat{a}_{\bar{\phi}^{(a)}}^+ | N-1 : \phi^{(a)} \rangle \langle N-1 : \phi^{(b)} | \hat{a}_{\bar{\phi}^{(b)}} \\
& + \frac{\sqrt{N(N-1)}}{2} \sum_{\bar{\phi}_1^{(b)}, \bar{\phi}_2^{(b)}} \langle \bar{\phi}_1^{(b)} | \Delta \phi^{(b)} \rangle^* \langle \bar{\phi}_2^{(b)} | \Delta \phi^{(b)} \rangle^* | N : \phi^{(a)} \rangle \langle N-2 : \phi^{(b)} | \hat{a}_{\bar{\phi}_1^{(b)}} \hat{a}_{\bar{\phi}_2^{(b)}} \\
& + \frac{\sqrt{N(N-1)}}{2} \sum_{\bar{\phi}_1^{(a)}, \bar{\phi}_2^{(a)}} \langle \bar{\phi}_1^{(a)} | \Delta \phi^{(a)} \rangle \langle \bar{\phi}_2^{(a)} | \Delta \phi^{(a)} \rangle \hat{a}_{\bar{\phi}_1^{(a)}}^+ \hat{a}_{\bar{\phi}_2^{(a)}}^+ | N-2 : \phi^{(a)} \rangle \langle N : \phi^{(b)} | \left. \right] \quad (4.12)
\end{aligned}$$

4.2.1 Une première hypothèse : approche déterministe

Tout le problème consiste maintenant à chercher les $|\Delta \phi^{(k)}\rangle$ pour retrouver la dynamique issue de l'équation pilote (4.4). Supposons, dans un premier temps, que les petites variations des fonctions d'onde macroscopiques sont proportionnelles au pas de temps Δt :

$$|\Delta \phi^{(a)}\rangle \propto \Delta t \text{ et } |\Delta \phi^{(b)}\rangle \propto \Delta t.$$

Au premier ordre en Δt nous obtenons alors à partir de (4.12) :

$$\begin{aligned}
|N : \phi^{(a)} + \Delta \phi^{(a)}\rangle \langle N : \phi^{(b)} + \Delta \phi^{(b)}| &= \left[1 + N \left(\frac{\langle \phi^{(b)} | \Delta \phi^{(b)} \rangle^*}{\|\phi^{(b)}\|^2} + \frac{\langle \phi^{(a)} | \Delta \phi^{(a)} \rangle}{\|\phi^{(a)}\|^2} \right) \right] \hat{\sigma}^{(ab)} \\
& + \sqrt{N} \sum_{\bar{\phi}^{(b)}} \langle \bar{\phi}^{(a)} | \Delta \phi^{(a)} \rangle \hat{a}_{\bar{\phi}^{(a)}}^+ | N-1 : \phi^{(a)} \rangle \langle N : \phi^{(b)} | \\
& + \sqrt{N} \sum_{\bar{\phi}^{(b)}} \langle \bar{\phi}^{(b)} | \Delta \phi^{(b)} \rangle^* | N : \phi^{(a)} \rangle \langle N-1 : \phi^{(b)} | \hat{a}_{\bar{\phi}^{(b)}} \quad (4.13)
\end{aligned}$$

Dès lors, nous sommes en mesure de retrouver les termes en $\hat{\sigma}^{(ab)}$ de la dynamique exacte ainsi que ceux dans lesquels un des condensats de la dyade a perdu un atome. En identifiant terme à terme dynamique exacte et (4.13), on doit avoir :

$$\left\{ \begin{aligned} N \left(\frac{\langle \phi^{(b)} | \Delta \phi^{(b)} \rangle^*}{\|\phi^{(b)}\|^2} + \frac{\langle \phi^{(a)} | \Delta \phi^{(a)} \rangle}{\|\phi^{(a)}\|^2} \right) &= \frac{\Delta t}{i\hbar} \langle \hat{H}_{eff} \rangle_{N:\phi^{(a)}} - \frac{\Delta t}{i\hbar} \langle \hat{H}_{eff}^+ \rangle_{N:\phi^{(b)}} + \gamma \Delta t \sum_{\vec{r}} \langle \hat{n}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi^{(a)}} \langle \hat{n}_{\vec{r}} \rangle_{N:\phi^{(b)}} \\ \langle \bar{\phi}^{(a)} | \Delta \phi^{(a)} \rangle &= \langle \bar{\phi}^{(a)} | \left(\frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{h}_{U-i\hbar\gamma}^{(a)} + \Delta t \hat{w}^{(a)} \right) | \phi^{(a)} \rangle \\ \langle \bar{\phi}^{(b)} | \Delta \phi^{(b)} \rangle^* &= \langle \bar{\phi}^{(b)} | \left(\Delta t \hat{w}^{(b)} - \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{h}_{U-i\hbar\gamma}^{(b)+} \right) | \phi^{(b)} \rangle \end{aligned} \right. \quad (4.14)$$

Dans la mesure où $|\phi^{(k)}\rangle$ ainsi que les vecteurs orthonormés $|\bar{\phi}^{(k)}\rangle$ qui lui sont orthogonaux forment une base, nous avons :

$$|\Delta \phi^{(k)}\rangle = |\phi^{(k)}\rangle \frac{\langle \phi^{(k)} | \Delta \phi^{(k)} \rangle}{\|\phi^{(k)}\|^2} + \sum_{\bar{\phi}^{(k)}} |\bar{\phi}^{(k)}\rangle \langle \bar{\phi}^{(k)} | \Delta \phi^{(k)} \rangle \quad (4.15)$$

Il en résulte immédiatement l'expression des variations élémentaires recherchées :

$$\left\{ \begin{aligned} |\Delta \phi^{(a)}\rangle &= \frac{\Delta t}{i\hbar} \left[\hat{t} - \frac{i\hbar\gamma}{2} \hat{1} + \hat{v}_{U-i\hbar\gamma}^{(a)} - \frac{1}{2} \hat{P}_{\phi^{(a)}} \hat{v}_{U-i\hbar\gamma}^{(a)} \right] + \Delta t \left[\hat{w}^{(a)} - \frac{1}{2} \hat{P}_{\phi^{(a)}} \hat{w}^{(a)} \right] \\ |\Delta \phi^{(b)}\rangle &= \frac{\Delta t}{i\hbar} \left[\hat{t} - \frac{i\hbar\gamma}{2} \hat{1} + \hat{v}_{U-i\hbar\gamma}^{(b)} - \frac{1}{2} \hat{P}_{\phi^{(b)}} \hat{v}_{U-i\hbar\gamma}^{(b)} \right] + \Delta t \left[\hat{w}^{(b)} - \frac{1}{2} \hat{P}_{\phi^{(b)}} \hat{w}^{(b)} \right] \end{aligned} \right. \quad (4.16)$$

Où $\hat{P}_{\phi^{(k)}} = \frac{|\phi^{(k)}\rangle \langle \phi^{(k)}|}{\|\phi^{(k)}\|^2}$ est le projecteur sur l'état $|\phi^{(k)}\rangle$

4.2.2 Une seconde hypothèse : approche purement stochastique

Les termes pour lesquels un des deux condensats a perdu deux atomes (sous l'effet des interactions) ou bien ceux dans lesquels un atome a changé d'état dans chaque condensat de la dyade (sous l'effet de l'environnement) ne peuvent être reproduits au travers de simples variations $|\Delta \phi^{(k)}\rangle$ du premier ordre en Δt des deux fonctions d'onde macroscopiques. Toutes ces contributions correspondent globalement à des termes du second ordre vis-à-vis des variations $|\Delta \phi^{(a)}\rangle$ et/ou $|\Delta \phi^{(b)}\rangle$. Dans la mesure où elles sont en Δt dans la dynamique déduite de l'équation de Lindblad, nous ne pouvons espérer les reproduire qu'en supposant des variations telles que :

$$|\Delta \phi^{(a)}\rangle \propto \sqrt{\Delta t} \text{ et } |\Delta \phi^{(b)}\rangle \propto \sqrt{\Delta t}.$$

Une telle hypothèse va néanmoins nécessairement aussi conduire à des termes de cet ordre, ce qui n'est pas le cas dans l'évolution exacte (4.9). L'astuce est alors de rendre les variations $|\Delta\phi^{(k)}\rangle$ fluctuantes avec une moyenne statistique nulle. Nous ne chercherons pas à déterminer la solution la plus générale dans ce contexte. Nous nous limiterons à la mise en exergue d'un schéma possible avec le souci de ne pas se préoccuper des termes pouvant être absorbés par l'approche déterministe étudiée précédemment. Ainsi, en supposant que les contributions fluctuantes $|\Delta\phi^{(k)}\rangle$ sont orthogonales aux états $|\phi^{(k)}\rangle$ dans lesquels les atomes sont condensés, nous avons, après avoir moyenné sur un grand nombre de réalisations :

$$\begin{aligned}
& E\left[|N:\phi^{(a)} + \Delta\phi^{(a)}\rangle\langle N:\phi^{(b)} + \Delta\phi^{(b)}|\right] = \\
& N \sum_{\bar{\phi}^{(a)}, \bar{\phi}^{(b)}} E\left[\langle\bar{\phi}^{(a)}|\Delta\phi^{(a)}\rangle\langle\bar{\phi}^{(b)}|\Delta\phi^{(b)}\rangle^* \hat{a}_{\bar{\phi}^{(a)}}^+ |N-1:\phi^{(a)}\rangle\langle N-1:\phi^{(b)}|\hat{a}_{\bar{\phi}^{(b)}}\right. \\
& + \frac{\sqrt{N(N-1)}}{2} \sum_{\bar{\phi}_1^{(a)}, \bar{\phi}_2^{(a)}} E\left[\langle\bar{\phi}_1^{(a)}|\Delta\phi^{(a)}\rangle\langle\bar{\phi}_2^{(a)}|\Delta\phi^{(a)}\rangle\right] \hat{a}_{\bar{\phi}_1^{(a)}}^+ \hat{a}_{\bar{\phi}_2^{(a)}}^+ |N-2:\phi^{(a)}\rangle\langle N:\phi^{(b)}| \\
& + \frac{\sqrt{N(N-1)}}{2} \sum_{\bar{\phi}_1^{(b)}, \bar{\phi}_2^{(b)}} E\left[\langle\bar{\phi}_1^{(b)}|\Delta\phi^{(b)}\rangle^*\langle\bar{\phi}_2^{(b)}|\Delta\phi^{(b)}\rangle^*\right] |N:\phi^{(a)}\rangle\langle N-2:\phi^{(b)}|\hat{a}_{\bar{\phi}_1^{(b)}}\hat{a}_{\bar{\phi}_2^{(b)}} \quad (4.17)
\end{aligned}$$

En conséquence, les termes jusqu'alors problématiques, à deux atomes sortis d'un des deux condensats tout comme ceux où chaque condensat a perdu un atome, seront correctement décrits dès lors que les trois conditions suivantes sont satisfaites :

$$\begin{cases}
E\left[\langle\bar{\phi}_1^{(a)}|\Delta\phi^{(a)}\rangle\langle\bar{\phi}_2^{(a)}|\Delta\phi^{(a)}\rangle\right] = \sum_{\vec{r}} \frac{(U - i\hbar\gamma)\Delta t}{i\hbar} \langle\bar{\phi}_1^{(a)}|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\phi^{(a)}\rangle\langle\bar{\phi}_2^{(a)}|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\phi^{(a)}\rangle \\
E\left[\langle\bar{\phi}_1^{(b)}|\Delta\phi^{(b)}\rangle^*\langle\bar{\phi}_2^{(b)}|\Delta\phi^{(b)}\rangle^*\right] = \sum_{\vec{r}} \frac{(U - i\hbar\gamma)\Delta t}{i\hbar} \langle\bar{\phi}_1^{(b)}|\vec{r}\rangle^*\langle\vec{r}|\phi^{(b)}\rangle^*\langle\bar{\phi}_2^{(b)}|\vec{r}\rangle^*\langle\vec{r}|\phi^{(b)}\rangle^* \\
E\left[\langle\bar{\phi}^{(a)}|\Delta\phi^{(a)}\rangle\langle\bar{\phi}^{(b)}|\Delta\phi^{(b)}\rangle^*\right] = \sum_{\vec{r}} \gamma\Delta t \bar{\phi}^{(a)*}(\vec{r})\bar{\phi}^{(b)}(\vec{r})\phi^{(a)}(\vec{r})\phi^{(b)*}(\vec{r})
\end{cases} \quad (4.18)$$

Introduisons alors des variables aléatoires pour chaque site \vec{r} associées aux condensats (a) et (b) et une variable aléatoire complexe commune aux deux condensats formant la dyade $\hat{\sigma}^{(ab)}$ (4.6). Nous les noterons respectivement : $\varepsilon_{\vec{r}}^{(a)}$, $\varepsilon_{\vec{r}}^{(b)}$ et $z_{\vec{r}}^{(ab)}$. Ces "bruits" seront tous supposés avoir une valeur moyenne nulle. Posons :

$$\begin{cases} \langle \bar{\phi}^{(a)} | \Delta \phi^{(a)} \rangle = \langle \bar{\phi}^{(a)} | \sum_{\vec{r}} \left(\sqrt{\frac{\Delta t (U - i\hbar\gamma)}{i\hbar}} \varepsilon_{\vec{r}}^{(a)} + \sqrt{\gamma \Delta t} z_{\vec{r}}^{(ab)} \right) | \phi^{(a)} \rangle \\ \langle \bar{\phi}^{(b)} | \Delta \phi^{(b)} \rangle^* = \langle \phi^{(b)} | \sum_{\vec{r}} \left(\sqrt{\frac{\Delta t (U - i\hbar\gamma)}{i\hbar}}^* \varepsilon_{\vec{r}}^{(b)} + \sqrt{\gamma \Delta t} z_{\vec{r}}^{(ab)} \right) | \bar{\phi}^{(b)} \rangle \end{cases} \quad (4.19)$$

Nous respectons les équations (4.18) dès lors que :

$$\begin{aligned} E[\varepsilon_{\vec{r}}^{(a)} \varepsilon_{\vec{r}'}^{(a)}] &= \delta_{\vec{r}, \vec{r}'} & ; & \quad E[\varepsilon_{\vec{r}}^{(b)} \varepsilon_{\vec{r}'}^{(b)}] = \delta_{\vec{r}, \vec{r}'} \\ E[z_{\vec{r}}^{(ab)} z_{\vec{r}'}^{(ab)}] &= 0 & ; & \quad E[z_{\vec{r}}^{(ab)} z_{\vec{r}'}^{(ab)*}] = \delta_{\vec{r}, \vec{r}'} \end{aligned} \quad (4.20)$$

De telles variables aléatoires sont aisément construites : elles doivent tout d'abord être statistiquement indépendantes d'un site à l'autre. Pour $\varepsilon_{\vec{r}}^{(k)}$ avec $k \in \{a, b\}$, il suffit de prendre une variable à deux états ± 1 équiprobables. En ce qui concerne le processus stochastique complexe $z_{\vec{r}}^{(ab)}$, il peut être obtenu avec deux variables aléatoires $\varepsilon_{\vec{r}}^{(ab)}$ et $\varepsilon_{\vec{r}}'^{(ab)}$ indépendantes et égales chacune à ± 1 avec la même probabilité : avec $z_{\vec{r}}^{(ab)} = \frac{\varepsilon_{\vec{r}}^{(ab)} + i\varepsilon_{\vec{r}}'^{(ab)}}{\sqrt{2}}$ nous avons immédiatement les relations (4.20).

Finalement, des variations stochastiques des fonctions d'onde $|\phi^{(a)}\rangle$, $|\phi^{(b)}\rangle$ judicieusement choisies sont en mesure de conduire en moyenne aux termes traduisant l'effet des interactions au delà du champ moyen et aux couplages non-hamiltonien de l'équation de Lindblad. Nous avons ainsi obtenu comme solutions possibles :

$$\begin{cases} |\Delta \phi^{(a)}\rangle = Q_{\phi^{(a)}} \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \left[\sqrt{\frac{(U - i\hbar\gamma)\Delta t}{i\hbar}} \varepsilon_{\vec{r}}^{(a)} + \sqrt{\frac{\gamma \Delta t}{2}} (\varepsilon_{\vec{r}}^{(ab)} + i\varepsilon_{\vec{r}}'^{(ab)}) \right] \langle \vec{r} | \phi^{(a)} \rangle \\ |\Delta \phi^{(b)}\rangle = Q_{\phi^{(b)}} \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \left[\sqrt{\frac{(U - i\hbar\gamma)\Delta t}{i\hbar}} \varepsilon_{\vec{r}}^{(b)} + \sqrt{\frac{\gamma \Delta t}{2}} (\varepsilon_{\vec{r}}^{(ab)} + i\varepsilon_{\vec{r}}'^{(ab)}) \right] \langle \vec{r} | \phi^{(b)} \rangle \end{cases} \quad (4.21)$$

où $Q_{\phi^{(a)}} = \sum_{\bar{\phi}^{(a)}} |\bar{\phi}^{(a)}\rangle \langle \bar{\phi}^{(a)}|$ et $Q_{\phi^{(b)}} = \sum_{\bar{\phi}^{(b)}} |\bar{\phi}^{(b)}\rangle \langle \bar{\phi}^{(b)}|$ sont respectivement les projecteurs orthogonaux aux états $|\phi^{(a)}\rangle$ et $|\phi^{(b)}\rangle$.

4.2.3 Bilan

En réunissant les approches déterministes et purement fluctuantes, nous venons de montrer que la dynamique complète d'une dyade peut s'obtenir en moyennant de nouvelles dyades de condensats dont les états individuels ont légèrement varié :

$$\hat{\sigma}^{(ab)}(t + \Delta t) = E \left[\left[N : \phi^{(a)} + \Delta \phi^{(a)} \right] \left[N : \phi^{(b)} + \Delta \phi^{(b)} \right] \right] \quad (4.22)$$

$$\text{où} \quad |\Delta\phi^{(k)}\rangle = \overbrace{|\Delta\phi^{(k)}_{\text{det}}\rangle}^{\text{Hypothèse 1}} + \overbrace{|\Delta\phi^{(k)}_{\text{fluct}}\rangle}^{\text{Hypothèse 2}} \quad \text{avec } k = \{a, b\} \quad (4.23)$$

C'est-à-dire, d'après (4.23) :

$$\left\{ \begin{aligned} |\Delta\phi^{(a)}\rangle &= \left\{ \frac{\Delta t}{i\hbar} \left[\hat{t} - \frac{i\hbar\gamma}{2} \hat{1} + \hat{v}_{U-i\hbar\gamma}^{(a)} - \frac{1}{2} \hat{P}_{\phi^{(a)}} \hat{v}_{U-i\hbar\gamma}^{(a)} \right] + \Delta t \left[\hat{w}^{(a)} - \frac{1}{2} \hat{P}_{\phi^{(a)}} \hat{w}^{(a)} \right] \right. \\ &\quad \left. + Q_{\phi^{(a)}} \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \left[\sqrt{\frac{(U-i\hbar\gamma)\Delta t}{i\hbar}} \mathcal{E}_{\vec{r}}^{(a)} + \sqrt{\frac{\gamma\Delta t}{2}} (\mathcal{E}_{\vec{r}}^{(ab)} + i\mathcal{E}_{\vec{r}}^{\prime(ab)}) \right] \langle \vec{r} | \right\} |\phi^{(a)}\rangle \\ |\Delta\phi^{(b)}\rangle &= \left\{ \frac{\Delta t}{i\hbar} \left[\hat{t} - \frac{i\hbar\gamma}{2} \hat{1} + \hat{v}_{U-i\hbar\gamma}^{(b)} - \frac{1}{2} \hat{P}_{\phi^{(b)}} \hat{v}_{U-i\hbar\gamma}^{(b)} \right] + \Delta t \left[\hat{w}^{(b)} - \frac{1}{2} \hat{P}_{\phi^{(b)}} \hat{w}^{(b)} \right] \right. \\ &\quad \left. + Q_{\phi^{(b)}} \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \left[\sqrt{\frac{(U-i\hbar\gamma)\Delta t}{i\hbar}} \mathcal{E}_{\vec{r}}^{(b)} + \sqrt{\frac{\gamma\Delta t}{2}} (\mathcal{E}_{\vec{r}}^{(ab)} + i\mathcal{E}_{\vec{r}}^{\prime(ab)}) \right] \langle \vec{r} | \right\} |\phi^{(b)}\rangle \end{aligned} \right. \quad (4.24)$$

Dès lors, en remplaçant $\hat{\mathcal{O}}^{(ab)}$ par l'une des réalisations de la date $t + \Delta t$, nous pouvons itérer le raisonnement et donc reconstruire finalement l'opérateur densité \hat{D} à tout instant.

5. Conclusion

Ce stage visait à initier la mise en place d'un cadre théorique afin d'étudier, à terme, l'effet conjugué des interactions et de la décohérence dans un gaz d'atomes froids piégé dans un réseau optique. Notre démarche s'est fondée sur un schéma de reformulation du problème à N-corps bosonique proposé par Y. castin et al [11]. Jusqu'alors, seul un système isolé avait été considéré et l'essentiel du travail a consisté à généraliser l'approche pour un système couplé à un environnement et dont la dynamique (dissipative) est alors décrite par l'équation de Lindblad. Nous sommes ainsi parvenu à reconstruire l'opérateur densité exact au travers de la moyenne de dyades d'états condensés dont les fonctions d'onde macroscopiques suivent une évolution stochastique en complément d'une dynamique déterministe fondée sur le champ moyen de Gross-Pitaevskii. Même si nous n'avons pu l'aborder dans ce rapport, nous avons aussi examiné la stabilité de notre approche en montrant analytiquement que les erreurs statistiques demeureront bornées à tout instant. Cette propriété remarquable est indispensable pour pouvoir prédire les valeurs moyennes de toute observable. En ce sens, la méthode proposée se singularise d'autres reformulations stochastiques [12] utilisées pour les systèmes ouverts et dans lesquelles l'échantillonnage est contaminé par des réalisations divergentes (associées à des états de norme infinie).

Par ailleurs, ce stage a été pour moi une véritable initiation à la démarche de chercheur. Au travers du travail pur et dur d'apprentissage et maîtrise d'outils nouveaux

indispensables de mécanique quantiques généralement introduits en Master 2 (seconde quantification, champ moyen, opérateur densité...), j'ai pu suivre un cheminement intellectuel avec pour but d'appréhender la résolution théorique d'un problème parfaitement concret de physique sur des terres peu explorées. Je me suis confronté aux doutes, aux erreurs, aux essais infructueux, aux mauvaises directions mais aussi aux réussites et aux résultats qui font l'unité et la dynamique de la recherche. C'est en mettant en commun mes impressions avec celles des autres stagiaires de ma promotion que ce stage m'a aussi permis de bien cerner les différences existantes entre études expérimentales et études théoriques.

Références

- [1] Frédéric Chevy, « *Les gaz de fermions ultra-froids* », la revue du CNRS : image de la physique, Quanta et photons, 2005
- [2] S.N Bose, Z. Physik 26, p. 178, 1924
- [3] M.H Anderson, J.R Ensher, M.R Matthews, C.E Wieman and E.A Cornell, « *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor* », Science 269, p. 198, 1995
- [4] Yvan Castin, « *Mécanique quantique : seconde quantification et résolvante* », cours M2 physique quantique, LKB, ENS Paris, 2011
- [5] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T.W. Hansch, I. Bloch, « *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gaz of ultracold atoms* », Nature 415, p.39, 2013
- [6] Jean Dalibard, « *Notes de cours : atomes ultra-froids* », ENS Ulm, Les gaz quantiques Chap.8, p. 108
- [7] Jean-Paul Blaizot and G.Ripka, « *Quantum theory of finite systems* », The MIT Press, 1995
- [8] Eva-Maria Graefe, « *Thesis : Quantum-classical correspondence for a Bose-Hubbard dimer and its non-Hermitian generalisation* », p. 23, 2009
- [9] G. Kalosakas and A.R. Bishop « *Small-tunneling-amplitude boson-Hubbard dimer* », Phys. Rev A 68, 2003
- [10] Michel Le Bellac, « *Physique quantique : 2ème édition* », EDP Sciences, CNRS Editions, Chap. Systèmes quantiques ouverts, p. 680, 2007
- [11] Yvan Castin and Iacopo Carusotto, « *Exact reformulation of the bosonic many-body problem in terms of stochastic wave functions : an elementary derivation* », Annales Henri Poincaré, 2003
- [12] P. Deuar and P.D. Drummond, « *Stochastic gauges in quantum dynamics for many-body simulation* », Arxiv, 2002

Annexes

A. Action du hamiltonien de Bose-Hubbard sur un état condensé

On cherche à déterminer l'action du hamiltonien de Bose-Hubbard sur un condensat $|N:\phi\rangle$:

$$\hat{H}|N:\phi\rangle = \left(-t \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \hat{a}_{\vec{r}}^+ \hat{a}_{\vec{r}'} + \frac{U}{2} \sum_{\vec{r}} \hat{n}_{\vec{r}} (\hat{n}_{\vec{r}} - 1) \right) |N:\phi\rangle \quad \text{où } \hat{n}_{\vec{r}} = \hat{a}_{\vec{r}}^+ \hat{a}_{\vec{r}} \quad (\text{A.1})$$

Introduisons alors dans le sous espace orthogonal à l'état $|\phi\rangle$, une famille orthonormée de vecteurs $|\bar{\phi}\rangle$. L'ensemble $|\phi\rangle, |\bar{\phi}\rangle$ forme une base orthonormée de l'espace des états d'un atome et donc :

$$\frac{|\phi\rangle\langle\phi|}{\|\phi\|^2} + \sum_{\bar{\phi}} |\bar{\phi}\rangle\langle\bar{\phi}| = \hat{1} \Rightarrow \hat{a}_{\vec{r}} = \hat{a}_{\phi} \frac{\phi(\vec{r})}{\|\phi\|^2} + \sum_{\bar{\phi}} \bar{\phi}(\vec{r}) \hat{a}_{\bar{\phi}} \quad (\text{A.2})$$

Ainsi :

$$\hat{a}_{\vec{r}} |N:\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{\phi(\vec{r})}{\|\phi\|^2} N \|\phi\|^2 (\hat{a}_{\phi}^+)^{N-1} |0\rangle \quad \text{car} \quad \left[\hat{a}_{\phi}, (\hat{a}_{\phi}^+)^N \right] = N \|\phi\|^2 (\hat{a}_{\phi}^+)^{N-1}$$

$$\text{d'où } \hat{a}_{\vec{r}} |N:\phi\rangle = \sqrt{N} \phi(\vec{r}) |N-1:\phi\rangle \quad (\text{A.3})$$

En appliquant $\hat{a}_{\vec{r}}^+$ l'opérateur de création d'un atome dans le puits centré sur \vec{r} sur (A.3), il vient immédiatement :

$$\begin{cases} \hat{a}_{\vec{r}}^+ \hat{a}_{\vec{r}'} |N:\phi\rangle = \frac{N}{\|\phi\|^2} \phi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}') |N:\phi\rangle + \sqrt{N} \phi(\vec{r}') \sum_{\bar{\phi}} \bar{\phi}^*(\vec{r}) \hat{a}_{\bar{\phi}}^+ |N-1:\phi\rangle \\ \hat{n}_{\vec{r}} |N:\phi\rangle = \frac{N |\phi(\vec{r})|^2}{\|\phi\|^2} |N:\phi\rangle + \sqrt{N} \phi(\vec{r}) \sum_{\bar{\phi}} \bar{\phi}^*(\vec{r}) \hat{a}_{\bar{\phi}}^+ |N-1:\phi\rangle \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} \text{d'où : } \hat{n}_{\vec{r}}^2 |N:\phi\rangle &= \frac{N |\phi(\vec{r})|^2}{\|\phi\|^2} \left(\frac{N |\phi(\vec{r})|^2}{\|\phi\|^2} |N:\phi\rangle + \sqrt{N} \phi(\vec{r}) \sum_{\bar{\phi}} \bar{\phi}^*(\vec{r}) \hat{a}_{\bar{\phi}}^+ |N-1:\phi\rangle \right) \\ &\quad + \sqrt{N} \phi(\vec{r}) \sum_{\bar{\phi}} \langle \vec{r} | \bar{\phi} \rangle \langle \bar{\phi} | \vec{r} \rangle \left[\frac{\sqrt{N} \phi^*(\vec{r})}{\|\phi\|^2} |N:\phi\rangle + \sum_{\bar{\phi}'} \bar{\phi}'^*(\vec{r}) \hat{a}_{\bar{\phi}'}^+ |N-1:\phi\rangle \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\sqrt{N}\phi(\vec{r})}{\|\phi\|^2} (N-1) |\phi(\vec{r})|^2 \sum_{\vec{\phi}} \bar{\phi}^*(\vec{r}) \hat{a}_{\vec{\phi}}^+ |N-1:\phi\rangle \\
& + \sqrt{N(N-1)} \phi(\vec{r})^2 \sum_{\vec{\phi}_1, \vec{\phi}_2} \bar{\phi}_1^*(\vec{r}) \bar{\phi}_2^*(\vec{r}) \hat{a}_{\vec{\phi}_1}^+ \hat{a}_{\vec{\phi}_2}^+ |N-2:\phi\rangle
\end{aligned}$$

Après simplification en utilisant la relation de fermeture dans (A.2), il vient :

$$(\hat{n}_{\vec{r}}^2 - \hat{n}_{\vec{r}}) |N:\phi\rangle = \frac{N(N-1) |\phi(\vec{r})|^4}{\|\phi\|^4} |N:\phi\rangle + \frac{2(N-1)\sqrt{N} |\phi(\vec{r})|^2}{\|\phi\|^2} \phi(\vec{r}) \sum_{\vec{\phi}} \bar{\phi}^*(\vec{r}) \hat{a}_{\vec{\phi}}^+ |N-1:\phi\rangle \quad (\text{A.5})$$

On peut dès lors écrire l'action du hamiltonien sur un condensat grâce aux relations (A.1), (A.4) et (A.5) déterminées précédemment :

$$\begin{aligned}
\hat{H} |N:\phi\rangle = & \underbrace{\left(\sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \frac{-Nt \phi^*(\vec{r}) \phi(\vec{r}')}{\|\phi\|^2} + \frac{UN(N-1)}{2} \sum_{\vec{r}} \frac{|\phi(\vec{r})|^4}{\|\phi\|^4} \right)}_{\langle \hat{H} \rangle} |N:\phi\rangle \\
& + \sqrt{N} \sum_{\vec{\phi}} \underbrace{\left(-t \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \phi(\vec{r}') \bar{\phi}^*(\vec{r}) + U(N-1) \sum_{\vec{r}} \frac{|\phi(\vec{r})|^2 \phi(\vec{r}) \bar{\phi}^*(\vec{r})}{\|\phi\|^2} \right)}_{\langle \vec{\phi} | \hat{h} | \phi \rangle} \hat{a}_{\vec{\phi}}^+ |N-1:\phi\rangle \\
& + \frac{U\sqrt{N(N-1)}}{2} \sum_{\vec{\phi}_1, \vec{\phi}_2} \left(\sum_{\vec{r}} \langle \bar{\phi}_1 | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \phi \rangle \langle \bar{\phi}_2 | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \phi \rangle \right) \hat{a}_{\vec{\phi}_1}^+ \hat{a}_{\vec{\phi}_2}^+ |N-2:\phi\rangle
\end{aligned}$$

Où nous avons introduit l'hamiltonien de champ moyen de Gross-Pitaevskii sur réseau :

$$\hat{h} = -t \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}'| + \frac{U(N-1)}{N} \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \hat{n}_{\vec{r}} \rangle \langle \vec{r}| \Leftrightarrow \hat{t} + \hat{v} \quad (3.14)$$

B. Expression d'un état condensé dont l'état individuel varie légèrement

Il s'agit donc ici de déterminer le vecteur $|N:\phi + \Delta\phi\rangle$ en fonction de la variation $\Delta\phi$. Ce développement limité dans l'espace des états à un corps sera conduit jusqu'au premier ordre.

En utilisant la formule du binôme, nous avons immédiatement :

$$|N : \phi + \Delta\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{a}_\phi^+ + \hat{a}_{\Delta\phi}^+)^N |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} (\hat{a}_{\Delta\phi}^+)^k (\hat{a}_\phi^+)^{N-k} |0\rangle \quad (\text{B.1})$$

avec

$$\hat{a}_{\Delta\phi}^+ = \hat{a}_\phi^+ \frac{\langle \phi | \Delta\phi \rangle}{\|\phi\|^2} + \sum_{\bar{\phi}} \hat{a}_{\bar{\phi}}^+ \langle \bar{\phi} | \Delta\phi \rangle \quad (\text{B.2})$$

En ne retenant que les contributions $k \leq 2$ dans (B.1), il vient ainsi :

$$|N : \phi + \Delta\phi\rangle = |N : \phi\rangle + \hat{a}_{\Delta\phi}^+ \sqrt{N} |N-1 : \phi\rangle + \frac{\sqrt{N(N-1)}}{2} (\hat{a}_{\Delta\phi}^+)^2 |N-2 : \phi\rangle \quad (\text{B.3})$$

On utilise alors la relation (B.2) pour calculer (B.3) et il vient directement :

$$\begin{aligned} |N : \phi + \Delta\phi\rangle &= |N : \phi\rangle + \frac{N \langle \phi | \Delta\phi \rangle}{\|\phi\|^2} |N : \phi\rangle + \sqrt{N} \sum_{\bar{\phi}} \hat{a}_{\bar{\phi}}^+ \langle \bar{\phi} | \Delta\phi \rangle |N-1 : \phi\rangle \\ &+ \frac{\sqrt{N(N-1)}}{2} \left[\sqrt{N(N-1)} \frac{\langle \phi | \Delta\phi \rangle^2}{\|\phi\|^4} |N : \phi\rangle + 2\sqrt{N-1} \frac{\langle \phi | \Delta\phi \rangle}{\|\phi\|^2} \sum_{\bar{\phi}} \hat{a}_{\bar{\phi}}^+ \langle \bar{\phi} | \Delta\phi \rangle |N-1 : \phi\rangle \right. \\ &\left. + \sum_{\bar{\phi}_1, \bar{\phi}_2} \langle \bar{\phi}_1 | \Delta\phi \rangle \langle \bar{\phi}_2 | \Delta\phi \rangle \hat{a}_{\bar{\phi}_1}^+ \hat{a}_{\bar{\phi}_2}^+ |N-2 : \phi\rangle \right] \end{aligned}$$

Finalement, on obtient le résultat :

$$\boxed{\begin{aligned} |N : \phi + \Delta\phi\rangle &= \left[\hat{1} + \frac{N \langle \phi | \Delta\phi \rangle}{\|\phi\|^2} + \frac{N(N-1)}{2} \frac{\langle \phi | \Delta\phi \rangle^2}{\|\phi\|^4} \right] |N : \phi\rangle \\ &+ \sqrt{N} \sum_{\bar{\phi}} \left[\hat{1} + \frac{(N-1) \langle \phi | \Delta\phi \rangle}{\|\phi\|^2} \right] \hat{a}_{\bar{\phi}}^+ \langle \bar{\phi} | \Delta\phi \rangle |N-1 : \phi\rangle \\ &+ \frac{\sqrt{N(N-1)}}{2} \sum_{\bar{\phi}_1, \bar{\phi}_2} \langle \bar{\phi}_1 | \Delta\phi \rangle \langle \bar{\phi}_2 | \Delta\phi \rangle \hat{a}_{\bar{\phi}_1}^+ \hat{a}_{\bar{\phi}_2}^+ |N-2 : \phi\rangle \end{aligned}}$$