

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par : *l'Université Toulouse 3 Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)*

Présentée et soutenue le *29/09/2015* **par :**

François DAMON

Sonder des structures complexes avec des ondes de matière

JURY

Denis BOIRON	Professeur d'Université	Rapporteur
Lionel CALMELS	Professeur d'Université	Président du Jury
Caroline CHAMPENOIS	Chargé de Recherche	Examinateur
Peter SCHLAGHECK	Professeur d'Université	Rapporteur
Bertrand GEORGEOT	Directeur de Recherche	Directeur de Thèse
David GUÉRY-ODELIN	Professeur d'Université	Co-Directeur de Thèse

---

École doctorale et spécialité :
SDM : Physique de la matière - CO090
Unité de Recherche :
Laboratoire de Physique Théorique (UMR 5152 - CNRS - UPS)
Directeur(s) de Thèse :
Bertrand GEORGEOT et *David GUÉRY-ODELIN*
Rapporteurs :
Denis BOIRON et *Peter SCHLAGHECK*

Remerciements

« *Let's go, Robin. We've set another youth on the road to a brighter tomorrow.* »

Batman

La rédaction des remerciements d'une thèse est un moment très privilégié car elle constitue une occasion unique pour repenser à toutes les personnes qui vous ont apporté sur les plans scientifique et personnel durant trois années. Il a été pour moi difficile de dresser une liste exhaustive de ces personnes et je m'excuse par avance pour mes éventuels oublis.

Je tiens tout d'abord à remercier les membres de mon jury Denis Boiron, Lionel Calmels, Caroline Champenois et Peter Schlagheck d'avoir pris le temps de juger les travaux que j'ai menés durant ma thèse. Les remarques et les corrections apportées à la suite des rapports ont fortement contribué à la qualité de lecture de ce manuscrit.

Durant mon Master Physique de la Matière, j'ai eu l'occasion de suivre les cours donnés par David Guéry-Odelin et Bertrand Georgeot. Leurs qualités d'orateur et de pédagogue m'ont tout de suite convaincu que le domaine des atomes froids et du chaos quantique allait être au centre de mon sujet de thèse. Ce choix s'est par la suite confirmé durant mon stage de fin de master co-encadré par David et Bertrand. J'ai eu la chance, durant cette thèse, de travailler sur une grande variété de problématiques en bénéficiant de leurs connaissances de la physique dépassant largement les frontières du domaine des atomes froids. Il est parfois difficile au cours d'une thèse de savoir dans quelle direction aller et, dans ce cadre, leur disponibilité (se traduisant par des réunions mensuelles et des discussions quasi-quotidiennes) et leur qualité d'écoute furent d'un réel réconfort.

Ma thèse est issue d'une collaboration interne à l'IRSAMC et, plus particulièrement, entre deux laboratoires : le Laboratoire Collision Agrégat Réactivité et mon laboratoire d'accueil, le Laboratoire de Physique Théorique. Il est très appréciable pour un doctorant de travailler dans une telle structure en bénéficiant de la bienveillance des personnes qui la composent. À ce titre, je tiens à remercier particulièrement Malika Bentour pour sa disponibilité et son dévouement sans égal, Sandrine Lemagoarou qui n'a jamais compté ses heures pour m'aider, Mai Dinh qui m'a conforté dans mon projet d'étude de la Physique Théorique dès la Licence et pour nos nombreuses conversations. Un grand merci aux anciens doctorants Renaud Ruamps, Jessica Loras, et plus particulièrement à ceux qui m'ont précédé dans l'équipe : François Vermersch, Charlotte Fabre (bonne chance dans vos carrières d'enseignant !) et Pierrick Cheiney (à quand le prochain marathon ?), ainsi qu'à Gabriel Hétet et Juliette Billy auxquels je souhaite de belles réussites dans leur carrière de maître de conférence.

Je suis aujourd'hui convaincu que l'aspect humain doit être central dans tout travail de thèse. J'ai eu la chance rare de faire mes études de Licence, de Master puis toute ma thèse avec un ami : Gabriel Condon. Il est impossible de quantifier le temps que l'on a passé ensemble et je ne sais pas ce qu'auraient donné ces années sans sa présence.

Il n'est pas évident, *a priori*, de se lier d'amitié avec des personnes que l'on côtoie tous les jours sur son lieu de travail, qui plus est lorsque les échéances fixées sont courtes. Ce qui est formidable c'est que, malgré ces difficultés, il existe un vrai groupe, qui ne se limite pas à l'institut, dans lequel il a été facile pour moi de m'intégrer.

Je tiens à ce titre à remercier Aéla Fortun pour son optimisme communicatif, Morane Fortun d'avoir mis un peu de couleur dans cette thèse, Simon Derouault (à quand le duo guitare-piano ?), Florian

Chaumeton, Camille Pierre-Antoine, Annaël Brunet, Muammar El Khatib et Mina Bionta pour tous les nombreux bons moments que l'on a passés ensemble, ainsi que mes compagnons de bureau qui ont eu la patience de me supporter : Vivek Kandiah, Guillaume Gueguen, Mehda Soni, Lionel Lacombe et Bertrand Jayles. Un grand merci également à Isabelle Braud, Julien Alibert, Boris Decamps, Citlali Cabrera Gutierrez et Etienne Mangaud pour continuer à faire vivre ce groupe ! Je tiens enfin à souhaiter bonne chance dans leurs projets de thèse, aux anciens stagiaires de l'équipe : Eric Michon et Lucile Sanchez (à bientôt sur Lyon !).

J'ai aussi eu la chance de créer et d'organiser des séries de séminaires entre doctorants de l'institut de Mathématique et de l'IRSAMC, avec des amis d'enfance : Ibrahim Akrour et Sylvain Gibaud. Je leur souhaite un très bon courage pour poursuivre cette magnifique aventure !

Enfin, *the last but not the least*, je remercie ma famille qui m'a accompagné au quotidien dans ce projet de thèse. Le soutien sans limite dont j'ai bénéficié durant toutes mes études a été aux fondements mêmes de mes réussites.

Table des matières

Introduction générale **11**

Gaz ultra-froids dans un réseau optique **17**

2.1 Introduction . . . 17
2.2 Particules quantiques dans un potentiel périodique . . . 19
2.2.1 Théorie des Bandes . . . 19
2.2.2 Formalisme de Mathieu . . . 23
2.2.3 Propagation d'une particule . . . 26
2.2.4 Effet d'une profondeur locale sur la dynamique . . . 29
2.3 Cavités optiques pour ondes de matière . . . 34
2.3.1 Dispositif expérimental . . . 34
2.3.2 Potentiel à enveloppe gaussienne . . . 37
2.3.3 Construction de la cavité . . . 38
2.4 Réalisation expérimentale . . . 42
2.4.1 Chargement adiabatique . . . 43
2.4.2 Propagation d'un nuage d'atomes . . . 45
2.4.3 Design de l'enveloppe . . . 49
2.4.4 Cavités à deux dimensions . . . 52
2.5 Manipulation cohérente d'ondes de matière . . . 54
2.5.1 Transitions induites par modulation temporelle . . . 55
2.5.2 Cavités en présence de modulation temporelle . . . 56
2.6 Conclusion et perspectives . . . 58

Simuler le papillon d'Hofstadter avec un potentiel quasi-périodique **67**

3.1 Introduction . . . 67
3.2 Électrons dans un réseau 2D soumis à un champ magnétique . . . 68
3.2.1 Niveaux de Landau . . . 69
3.2.2 Électrons de Bloch dans un champ magnétique uniforme . . . 69
3.2.3 La matrice de Harper . . . 74
3.2.4 Analyse spectrale du modèle de Harper . . . 78
3.2.5 Rationalité de α et construction du spectre . . . 80
3.2.6 Dimension fractale du spectre dans la limite irrationnelle . . . 83
3.2.7 Effet Hall quantique et invariants topologiques . . . 89
3.2.8 Diagramme de Claro-Wannier . . . 92
3.3 Application au réseau bichromatique incommensurable . . . 95
3.3.1 Lien avec les réseaux optiques . . . 96
3.3.2 Calcul du diagramme de bande du super-réseau . . . 97
3.3.3 Transport : spectre de diffusion d'ondes planes . . . 99
3.3.4 Autres approches possibles . . . 102
3.4 Conclusion et perspectives . . . 104

Les solitons comme sonde pour des potentiels locaux **109**

4.1 Introduction . . . 109
4.2 Équation de Schrödinger à N corps . . . 110
4.2.1 Équation de la dynamique du gaz . . . 110
4.2.2 Bilan énergétique . . . 112
4.3 Équations de Schrödinger non linéaires à basses dimensions . . . 115
4.3.1 Gross-Pitaevskii 1D . . . 115
4.3.2 Équation de Schrödinger non polynomiale . . . 116
4.3.3 Solution propagative : le soliton . . . 118
4.4 Diffusion d'un soliton sur un potentiel de taille finie . . . 120
4.4.1 Puits de potentiel et ordres de grandeur . . . 120
4.4.2 Paquets transmis après diffusion . . . 127
4.5 Sonder des états de surface . . . 129
4.5.1 Approche analytique . . . 130
4.5.2 Diffusion de solitons . . . 134
4.6 Conclusion et perspectives . . . 137

Réduction de vitesse locale par un potentiel linéaire **141**

5.1 Introduction . . . 141
5.2 Obtention des lois d'échelle . . . 142
5.2.1 Cas général . . . 143
5.2.2 Cas d'un gaz d'atomes non interagissant . . . 143
5.2.3 Cas d'un gaz interagissant . . . 144
5.3 Distribution de Wigner et grandeurs locales . . . 145
5.3.1 Définitions et propriétés . . . 145
5.3.2 Grandeurs globales et locales . . . 146
5.3.3 Moments en vitesse . . . 149
5.3.4 Dynamique d'un gaz initialement confiné . . . 150
5.4 Domaines de validité . . . 152
5.4.1 Application à un gaz sans interaction . . . 153
5.4.2 Application à un condensat de Bose-Einstein dans le régime de Thomas-Fermi . . . 153
5.5 Application : sonder des résonances inférieures au pico-Kelvin . . . 156
5.5.1 Paramètre de monochromaticité locale . . . 156
5.5.2 Gain d'un découplage progressif lors de la diffusion d'un nuage d'atomes sur un potentiel local . . . 157
5.6 Conclusion . . . 160

Conclusion Générale **163**

Méthodes numériques **165**

A.1 Introduction . . . 165
A.2 Propagation d'une fonction d'onde dans le temps . . . 165
A.2.1 Algorithme du *Split-Step Fourier* . . . 165
A.2.2 Domaine de validité du programme . . . 167
A.2.3 Conditions aux limites . . . 171
A.2.4 Résolution de la dynamique de l'équation de Schrödinger non-linéaire . . . 173
A.3 Diffusion d'une onde plane . . . 174
A.3.1 Principe de la méthode . . . 175
A.3.2 Comparaison avec quelques solutions analytiques . . . 176

Système à deux fréquences commensurables **183**

B.1 Spectre du réseau bichromatique . . . 183
B.1.1 Calcul perturbatif des solutions de l'équation de Whittaker-Hill . . . 184
B.2 Stabilité de l'équation de Whittaker-Hill . . . 186
B.2.1 Calcul itératif de $\Delta(0)$ . . . 187
B.2.2 Comparaisons numériques . . . 188
B.3 Diagramme de bande . . . 188
B.3.1 Résolution dans l'espace des x . . . 189
B.3.2 Résolution dans l'espace des k . . . 190

Étude d'un potentiel fractal **193**

C.1 Motivations . . . 193
C.2 Le modèle . . . 194
C.3 Méthode de Hill . . . 195
C.3.1 Calcul perturbatif . . . 197
C.3.2 Obtention du diagramme de stabilité . . . 198
C.4 Conclusion . . . 199

1 Introduction générale

« However, my personal reason for working on one-dimensional problems is merely that they are fun. A man grows stale if he works all the time on the insoluble and a trip to the beautiful work of one dimension will refresh his imagination better than a dose of LSD. »

F. Dyson

Ces trois dernières décennies ont vu l'émergence puis les avancées spectaculaires de la physique des atomes ultra-froids [1]. Les techniques de piégeage et de refroidissement d'atomes à l'aide de lasers (prix Nobel 1997) [2–4], combinées au refroidissement par évaporation [1], ont permis d'atteindre expérimentalement la condensation de Bose-Einstein (prix Nobel 2001) [5, 6]. Dans ce régime, des centaines de milliers d'atomes occupent un même état quantique permettant de traiter le nuage à l'aide d'une unique fonction d'onde [7, 8]. Le gaz d'atomes présente alors des propriétés de cohérence pouvant être observées au travers de figures d'interférence [9]. Cette fonction d'onde macroscopique a été mise à profit en optique atomique, et notamment pour la réalisation de *lasers à atomes guidés* quasi-continus [10] et monomodes [11], analogues à leur pendant optique.

La maîtrise expérimentale que l'on peut avoir aujourd'hui de ces gaz d'atomes ultra-froids, en fait un objet de choix pour la réalisation de systèmes présentant un comportement quantique à une échelle macroscopique. Le façonnage des lasers, y compris dynamiquement, permet de créer une grande variété de potentiels conservatifs, dont les paramètres peuvent être contrôlés précisément [12]. Ces systèmes peuvent être décrits par des hamiltoniens similaires à ceux rencontrés dans d'autres domaines de la physique. Ceci fait actuellement des atomes ultra-froids un système de choix pour la réalisation de *simulateurs quantiques* [13].

Les systèmes à basses dimensions bénéficient d'un attrait particulier depuis ces dernières années, non seulement parce qu'ils permettent une première approche d'un problème en réduisant sa complexité, mais surtout parce que, souvent, une nouvelle physique émerge de ces systèmes [14]. Les récentes démonstrations expérimentales de la localisation d'Anderson [15, 16] (1D), la transition superfluide-isolant de Mott [17] (2D), la réalisation de gaz de Tonks-Girardeau [18] (1D), ou encore la transition Berezinskii-Koterlitzs-Thouless [19] (2D), en sont des exemples.

La condensation de Bose-Einstein ne pouvant être obtenue qu'à trois dimensions (cf. Fig. 1.1), ces réalisations expérimentales ont en commun une réduction effective de la dimension du système. Un condensat est initialement relâché de son potentiel harmonique de manière adiabatique, puis évolue dans un espace de plus basse dimension. Ainsi relâché dans un guide, tous les atomes composant le gaz se comportent comme une *onde de matière monodirectionnelle* de longueur d'onde de de Broglie : $\lambda_{\mathrm{dB}} = h/(mv)$, où v est la vitesse moyenne de l'onde de matière. On peut construire l'équivalent d'éléments d'optique comme, par exemple, une lame séparatrice. Dans ce contexte, le groupe de recherche d'atomes froids de Toulouse a mis en exergue le comportement chaotique de ce système [20]. De par leur nature ondulatoire, la diffraction d'ondes de matière sur un potentiel périodique local conduit à une

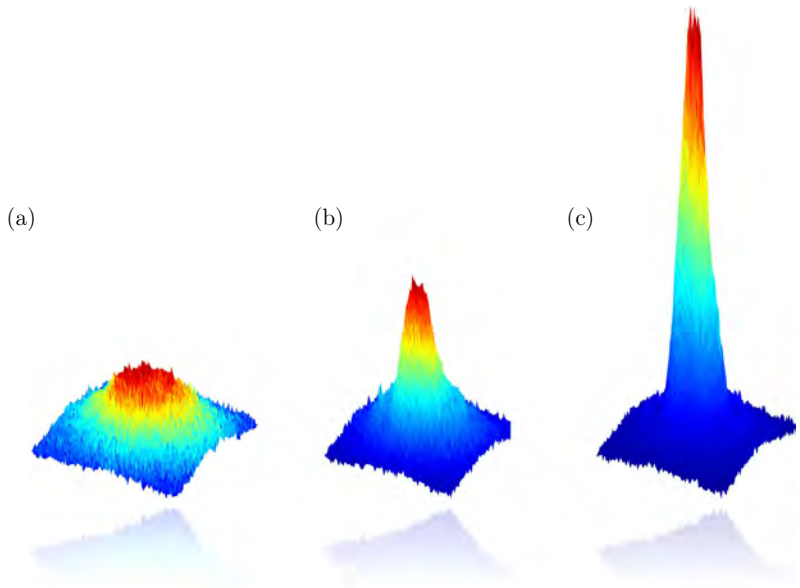


Figure 1.1

Condensat de Bose-Einstein de $N = 150 \times 10^3$ atomes de Rubidium 87 obtenu pas le groupe de David Guéry-Odelin (mai 2015). On représente la densité d'atomes obtenue à l'aide d'une imagerie par absorption pour (a) un nuage thermique, (b) un nuage partiellement condensé (présentant une partie thermique significative) et (c) un condensat pur.

diffraction de Bragg [21]. Dans cette configuration, le réseau optique agit comme un miroir de Bragg dont le coefficient de réflexion dépend de la longueur d'onde de de Broglie et des caractéristiques de la structure périodique.

J'ai bénéficié durant ma thèse d'un double encadrement issu de la collaboration entre Bertrand Georgeot du Laboratoire de Physique Théorique et de David Guéry-Odelin du Laboratoire Collision Agrégat et Réactivité, dont les thématiques ont été dans la continuité naturelle des expériences réalisées par l'équipe atomes froids. Dans ce cadre, j'ai approfondi l'étude d'une cavité de Bragg pour onde de matière. Ces travaux ont été stimulés par une réalisation expérimentale. L'un des objectifs que s'est assigné l'équipe est de réaliser l'*atom blockade*, et de contrôler le déplacement d'une onde macroscopique par un objet microscopique (un atome). En pratique, un laser à atomes entre en interaction avec une cavité (murs répulsifs) atomique nourrie de zéro ou un atome. De telles cavité présentent des résonances dont les largeurs énergétiques sont bien plus petites que celles d'un condensat de Bose-Einstein. Pour contourner cette difficulté, on propose d'exploiter la monochromaticité locale de l'onde de matière. Nous avons développé un formalisme basé sur des grandeurs dynamiques locales qui, contrairement à leurs homologues globales, ne sont pas limitées par le principe d'incertitude d'Heisenberg. Dans ce cas de figure, les interactions répulsives jouent un rôle essentiel, en renforçant les corrélations opérant dans l'espace des phases. Sonder les états liés d'un potentiel attractif peut aussi se faire au moyen d'un gaz d'atomes en interaction attractive. Le nuage peut alors déposer, lors d'une diffusion, une partie de ses atomes dans ces états, de sorte à réaliser une cartographie énergétique du potentiel. L'avantage de ce type d'expérience est de pouvoir peupler des états du spectre pourtant difficilement atteignables car se situant dans des gaps en énergie comme, par exemple, les états de surface lorsque le potentiel est de taille finie.

Ce manuscrit sera composé de quatre chapitres groupés en deux thématiques, la première concernant l'étude de gaz d'atomes dans des réseaux optiques et la seconde concernant l'utilisation des interactions

inter-atomiques comme outil pour sonder les états d'un potentiel local :

- Chapitre 2 : Après avoir introduit le formalisme général permettant de caractériser la propagation d'une particule quantique dans un potentiel périodique infini à une dimension, je montrerai l'émergence de barrières tunnel lorsque la profondeur dépend de la position. Je présenterai une application expérimentale : la cavité de Bragg, qui a été mise en œuvre expérimentalement à l'aide d'un réseau optique de taille finie. Enfin, l'extension de ces concepts à des réseaux de plus grandes dimensions et à des réseaux modulés temporellement sera discutée. Ces travaux ont fait l'objet d'une lettre dans EuroPhysics Letters [22] en 2013, et d'un article publié dans Physical Review A en 2015 [23].
- Chapitre 3 : Je détaillerai, dans un premier temps, le comportement d'une particule chargée dans un réseau cristallin à deux dimensions, soumis à un champ magnétique normal au réseau. Ce contexte théorique est celui dans lequel se manifeste le spectre fractal de Hofstadter, mais qui est très difficilement accessible avec une expérience de type effet Hall quantique entier, justifiant l'utilisation d'un simulateur quantique pour l'observer. De nombreuses propositions ont été faites dans le cadre d'une expérience d'atomes froids. Ici, nous nous concentrerons sur l'une d'entre elles nécessitant l'emploi d'un réseau optique quasi-périodique à une dimension.
- Chapitre 4 : Je présente, ici, le formalisme permettant la prise en compte des interactions inter-atomiques dans un gaz à température nulle. La réduction du système à une dimension spatiale conduisant à différentes formes de l'équation d'évolution en fonction des hypothèses liées au système, je me concentrerai sur l'une d'entre elles, l'équation de Gross-Pitaevskii. Cette équation a une solution propagative particulière, lorsque les interactions sont attractives : le soliton. J'utiliserai cet objet comme réservoir d'énergie d'interaction pour sonder les états liés et résonants d'un puits de potentiel, dans une situation de diffusion d'intérêt expérimental. Enfin, dans le cas d'un réseau optique à enveloppe carrée et à enveloppe lisse, je montrerai qu'il est possible de peupler des états de surface avec un grand taux d'occupation.
- Chapitre 5 : Le cas d'un gaz d'atomes interagissant répulsivement peut aussi être utile expérimentalement pour sonder les états d'un potentiel local. Un condensat de Bose-Einstein dans le régime de Thomas-Fermi, relâché initialement de son piège, développe une corrélation position-vitesse lors de sa propagation libre, pouvant être évaluée au moyen d'une loi d'échelle sur la distribution de Wigner. Je montrerai que l'utilisation de grandeurs dynamiques locales permet de sonder des résonances d'un potentiel dont la largeur énergétique est de l'ordre de grandeur du pico-Kelvin. Ces travaux ont fait l'objet d'un article dans Physical Review A en 2014 [24].

Les annexes sont découpées en 3 parties distinctes. La première concerne les programmes qui ont été développés principalement pour résoudre les équations aux valeurs propres et celles de la dynamique des différents systèmes étudiés au cours de cette thèse. La deuxième partie traite en détail le cas d'une particule dans un potentiel bi-périodique, dont le rapport entre les deux fréquences est de 2. Ce cas de figure est particulièrement intéressant [25, 26] et pourra être étudié plus en détail par l'équipe atomes froids dans un futur proche. Enfin, la dernière partie de cette annexe décrit la résolution de l'équation de Schrödinger en présence d'un potentiel fractal. Plusieurs travaux ont été menés sur cette thématique, mais jamais de manière analytique. On se place ici dans un cas de figure particulier où le potentiel est défini par la fonction de Weierstrass, pour laquelle la méthode de Hill s'applique.

Bibliographie

[1] C. Cohen-Tannoudji et D. Guéry-Odelin, *Advances in Atomic Physics*, (World Scientific, 2011).

[2] S. Chu *Rev. Mod. Phys.* **70** 685 (1998).

[3] C. N. Cohen-Tannoudji *Rev. Mod. Phys.* **70** 707 (1998).

[4] W. D. Phillips *Rev. Mod. Phys.* **70** 721 (1998).

[5] K. B. Davis, M. -O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn et W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75** 3969 (1995).

[6] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman et E. A. Cornell, *Science* **269** 198 (1995).

[7] L. Pitaevskii et S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, (Claderon Press, Oxford, 2003).

[8] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii et S. Stringari *Rev. Mod. Phys.* **71** 463 (1999).

[9] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn et W. Ketterle, *Science* **275** 637 (1997).

[10] I. Bloch, T. W. Hänsch et T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **82** 3008 (1999).

[11] G. L. Gattobigio, A. Couvert, M. Jeppesen, R. Mathevet et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. A* **80** 041605(R) (2009).

[12] O. Morsch et M. Oberthaler, *Rev. Mod. Phys.* **78** 179 (2006).

[13] M. Lewenstein, A. Sanpera et V. Ahufinger, *Ultracold Atoms in Optical Lattices - Simulating quantum many-body systems*, (Claderon Press, Oxford, 2012).

[14] Thierry Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension* (Claderon Press, Oxford, 2003).

[15] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer et A. Aspect, *Nature* **453** 891 (2008).

[16] G. Roati, C. D'Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti1, G. Modugno, M. Modugno et M. Inguscio, *Nature* **453** 895 (2008).

[17] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch et Immanuel Bloch, *Nature* **415** 39 (2002).

[18] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch et I. Bloch, *Nature* **429** 277 (2004).

[19] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier et J. Dalibard, *Nature* **441** 1118 (2006).

[20] G. L. Gattobigio, A. Couvert, B. Georgeot et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. Lett.* **107** 254104 (2011).

[21] C. M. Fabre, P. Cheiney, G. L. Gattobigio, F. Vermersch, S. Faure, R. Mathevet, T. Lahaye et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. Lett.* **107** 230401 (2011).

[22] P. Cheiney, F. Damon, G. Condon, B. Georgeot et D. Guéry-Odelin, *Eur. Phys. Lett.* **103** 50006 (2013).

[23] F. Damon, G. Condon, P. Cheiney, A. Fortun, B. Georgeot, J. Billy et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. A* **92** 033614 (2015).

[24] F. Damon, F. Vermersch, J. G. Muga et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. A* **89** 053626 (2014).

[25] M. Atala, M. Aidelsburger, J. T. Barreiro, D. Abanin, T. Kitagawa, E. Demler et I. Bloch, *Nature Physics* **9** 795 (2013).

[26] T. Salger, C. Grossert, S. Kling et M. Weitz, *Phys. Rev. Lett.* **107** 240401 (2011).

2 Gaz ultra-froids dans un réseau optique

« Il y avait à Montmartre, au troisième étage du 75 bis de la rue d'Orchampt, un excellent homme nommé Dutilleul qui possédait le don singulier de passer à travers les murs sans en être incommodé. »

M. Aymé

Sommaire

2.1 Introduction **17**
2.2 Particules quantiques dans un potentiel périodique **19**
2.2.1 Théorie des Bandes 19
2.2.2 Formalisme de Mathieu 23
2.2.3 Propagation d'une particule 26
2.2.4 Effet d'une profondeur locale sur la dynamique 29
2.3 Cavités optiques pour ondes de matière **34**
2.3.1 Dispositif expérimental 34
2.3.2 Potentiel à enveloppe gaussienne 37
2.3.3 Construction de la cavité 38
2.4 Réalisation expérimentale **42**
2.4.1 Chargement adiabatique 43
2.4.2 Propagation d'un nuage d'atomes 45
2.4.3 Design de l'enveloppe 49
2.4.4 Cavités à deux dimensions 52
2.5 Manipulation cohérente d'ondes de matière **54**
2.5.1 Transitions induites par modulation temporelle 55
2.5.2 Cavités en présence de modulation temporelle 56
2.6 Conclusion et perspectives **58**

2.1 Introduction

La dualité onde-corpuscule est, probablement, un des paradigmes les plus emblématiques de la mécanique quantique et est parfaitement illustré par l'effet tunnel. Une particule diffusant, de par son caractère ondulatoire, a une probabilité non nulle de traverser une barrière de potentiel classiquement impénétrable. Ce phénomène est en général observable à l'échelle de l'atome, par exemple lors de la désintégration du noyau d'un atome [1], ou de son ionisation par effet tunnel [2], car la probabilité de transmission au travers d'une barrière dépend essentiellement de sa largeur et de sa hauteur. En parallèle, lors de la diffusion d'une particule sur un puits de potentiel on s'attend classiquement à ce que la particule soit toujours transmise et ce, quelle que soit son énergie. Quantiquement il n'en n'est rien. Les états résonants du puits entrent en jeu dans la dynamique et la particule est transmise lorsque son

énergie est égale à l'énergie de ces états, et est réfléchie dans le cas contraire. Cette réflexion quantique, qui prend place à basse énergie, est au centre de l'étude que l'on mènera par la suite.

Pour des atomes froids placés dans un réseau optique, l'effet tunnel est représenté par un paramètre de couplage entre deux puits adjacents du réseau, déterminant la dynamique du système [2–4] et pouvant être contrôlé expérimentalement en amplitude et en phase [5–7]. L'étude de l'effet tunnel au travers d'une unique barrière est, cependant, difficile à observer. Plusieurs travaux ont été réalisés dans ce sens dans le cadre de l'effet Josephson alternatif et continu [8], ou encore par l'utilisation de lithographies de Silicium [9]. Néanmoins, le concept d'effet tunnel ne se limite pas à l'espace des positions. Une particule dans un réseau peut faire, sous l'effet d'une force, une transition non adiabatique d'une bande d'énergie à une autre, qui peut être interprétée comme un effet tunnel dans l'espace des quasi-moments [3]. Un autre type d'effet tunnel peut aussi se produire entre deux îlots de stabilité [10] dans l'espace des phases. La présence d'un espace des phases mixte (*i.e.* présentant une mer chaotique et des îlots de stabilité) conduit à un effet tunnel assisté par le chaos et a été observé, pour la première fois, dans des réseaux optiques modulés temporellement [11, 12].

Inspiré par les avancées réalisées dans le domaine des métamatériaux [13] et de la nanophotonique [14, 15], concernant la réalisation de composants optiques capables de guider, de courber ou encore de filtrer la lumière, plusieurs études ont vu le jour dans le domaine de l'optique atomique. Un élément a été la réalisation d'un miroir de Bragg, composé d'une succession périodique de couches brillantes et sombres, de tailles sub-micrométriques issues de l'interférence d'un laser [16–20]. En revanche, contrairement à l'optique, les interférences d'ondes de matière multiples ne sont pas utilisées dans le but d'améliorer la réflectivité mais pour gagner en sélection en vitesse et réaliser des filtres en vitesse très fins et modulables [18, 19].

De tels miroirs ont pu être mis en œuvre expérimentalement par l'étude de la diffusion de condensats de Bose-Einstein sur un réseau optique, de taille finie, à une dimension [21] : la structure de bande qui a été sondée a révélé une grande richesse en termes de filtres sélectifs en vitesse (passe bande, coupe bande, passe haut et passe bas). L'enveloppe projette le diagramme de bande et, *a fortiori*, les gaps en énergie dans l'espace des positions. Il en résulte une distribution de gaps spatiaux générant un nouveau type de barrière tunnel pour ondes de matière. Traverser de telles barrières revient à faire une transition Landau-Zener entre deux bandes adjacentes [22]. Du fait de la symétrie spatiale que peut avoir un réseau optique, celui-ci peut créer un cavité pour les atomes [23].

Le formalisme sous-jacent à l'étude d'un nuage d'atomes dans un réseau optique périodique est la théorie des bandes. Nous verrons que les solutions données par la théorie de Bloch peuvent se généraliser, dans le cadre de l'équation de Mathieu résolue par la méthode de Hill. La diffusion d'une particule sur un réseau de taille finie à enveloppe carrée, présente des particularités spectrales qui seront mises en regard avec le cas d'un réseau infini. On abordera, dans une deuxième partie, un autre type de potentiel fini pour les atomes qui est celui d'un réseau optique à enveloppe gaussienne. Dans ce cadre, l'enveloppe donne lieu à des gaps spatiaux pouvant générer des barrières tunnel pour les atomes. Le réseau permet dans ce cas de réaliser une cavité de Fabry-Perot pour ondes de matière, que l'on peut caractériser numériquement à l'aide d'un modèle semi-classique. Cette cavité a été réalisée expérimentalement et a montré que les gaps spatiaux peuvent être considérés comme des lentilles convergentes pour ces ondes de matière. Une généralisation de ces cavités à des super-réseaux et à des dimensions supérieures à 1 est discutée.

Dans une dernière partie, on propose l'utilisation d'une modulation temporelle de l'amplitude du réseau, dans le but de réaliser des transitions cohérentes et locales, d'un état à un autre et ce, de manière à peupler des cavités latérales [24]. Contrairement aux systèmes utilisés en optique, un réseau optique peut être modulé en amplitude au cours du temps. Ce degré de liberté offre la possibilité de réaliser des filtres sélectifs en vitesse et des miroirs modulables, comme cela a été démontré expérimentalement dans l'article [25]. De tels outils pourraient se révéler très utiles dans le champ de recherche émergeant qu'est l'atomtronique [26–33]. Nous discuterons, dans ce chapitre, de nouvelles applications de cette

modulation temporelle aux transferts d'atomes dans différentes cavités.

2.2 Particules quantiques dans un potentiel périodique

Cette section est un rappel sur le traitement d'une particule quantique dans un réseau périodique et infini. Après avoir exposé la théorie de Bloch, on montrera l'intérêt d'exploiter les solutions complexes de l'équation de Schrödinger stationnaire (équation de Mathieu).

2.2.1 Théorie des Bandes

Énoncée en 1928 par Felix Bloch, la théorie des bandes caractérise les solutions d'un système périodique infini [34, 35]. On fait ici le choix de se placer dans un système à une dimension. L'approche que l'on fait ici peut se généraliser à des dimensions supérieures.

- **États de Bloch**

On considère un potentiel périodique, de période d, statique : $U(x) = U(x+d)$. L'équation de Schrödinger stationnaire s'écrit :

$$\hat{H}\psi(x) \hat{=} \left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + U(x)\right)\psi(x) = E\psi(x). \tag{2.1}$$

Les solutions de cette équation sont une superposition d'états propres de l'hamiltonien, qui sont données par le théorème de Bloch :

$$\psi_{n,k}(x) = \mathrm{e}^{ikx} u_{n,k}(x), \tag{2.2}$$

avec $n \in \mathbb{N}$ l'indice de la bande et k une constante, homogène à un vecteur d'onde, la fonction $u_{n,k}(x) \in \mathbb{R}$ est périodique de période d. Remarquons que $\exp(ikx)$ est une phase dynamique qui dépend de la position, de sorte que pour $k \neq 0$ les solutions de l'équation (2.1) sont *propagatives*, avec k le vecteur d'onde de la fonction d'onde. La fonction $u_{n,k}(x)$ se développe dans la base de Fourier, $v_{k,\ell}$:

$$u_{n,k}(x) = \sum_{\ell\in\mathbb{Z}} v_{k,\ell}\mathrm{e}^{2i\pi\ell x/d}.$$

Dans cette base, la fonction d'onde $\psi_{n,k}(x)$ s'écrit :

$$\psi_{n,k}(x) = \sum_{\ell\in\mathbb{Z}} v_{k,\ell}\mathrm{e}^{i(k+2\pi\ell/d)x}. \tag{2.3}$$

Les solutions de Bloch se décomposent donc en somme infinie d'ondes planes propagatives (sauf lorsque $k = 0$) de moment $k' = k+2\pi\ell x/d$. Tout vecteur d'onde k' peut se ramener à un vecteur d'onde k prenant des valeurs dans la première zone de Brillouin définie par l'intervalle $[-k_\mathrm{R}/2, k_\mathrm{R}/2]$, avec $k' = k+\ell k_\mathrm{R}$, où $k_\mathrm{R} = 2\pi/d$ est le vecteur d'onde associé au réseau qui satisfait la relation de réciprocité : $\exp(ik_\mathrm{R}d) = 1$. La quantité k est appelée *pseudo-moment*. En insérant la solution (Eq. 2.2) dans l'équation (2.1), on obtient après simplification l'équation aux valeurs propres suivante :

$$H_k u_{n,k}(x) = \left(\frac{(p+\hbar k)^2}{2m} + U(x)\right) u_{n,k}(x) = E_{n,k}u_k(x). \tag{2.4}$$

On peut définir alors n valeurs propres réelles $E_{n,k}$ associées au moment k.

- **Équation aux valeurs propres**

L'hamiltonien effectif H_k peut être réécrit sous forme matriciel en réalisant une décomposition du potentiel dans l'espace de Fourier :

$$U(x) = \sum_{p\in\mathbb{Z}} \tilde{U}_p \mathrm{e}^{ipk_\mathrm{R}x},$$

avec U_p les coefficients de Fourier associés. En combinant ce développement et celui de l'équation (2.3) dans (2.1), on trouve l'équation dite *centrale* :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(k+\ell k_\mathrm{R}\right)^2 v_\ell + \sum_{p\in\mathbb{Z}} \tilde{U}_p v_{\ell-p} = E v_\ell. \tag{2.5}$$

C'est un système linéaire de la forme $M\vec{v} = E\vec{v}$, avec M une matrice hermitienne de dimension infinie. Considérons pour le moment le cas particulier d'un réseau périodique sinusoïdal de la forme :

$$U(x) = -U_0[\cos(k_\mathrm{R}x)+1]/2, \tag{2.6}$$

avec $U_0 > 0$ la profondeur du potentiel. Pour résoudre numériquement l'équation aux valeurs propres (2.5), il est nécessaire de réduire la dimension de la matrice à $2N+1$ en tronquant la matrice à $|p| \leq N$, ce qui revient à considérer les N premier états du systèmes. Dans ce cadre, la matrice M est tridiagonale et prend la forme :

$$M = \begin{pmatrix} b_{-N} & u & & & & \\ u & b_{-N+1} & u & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & u & b_{N-1} & u & \\ & & & u & b_N \end{pmatrix}, \tag{2.7}$$

avec $u = U_0/4$, $b_\ell = E_\mathrm{R}\left(k/k_\mathrm{R}+\ell\right)^2 - U_0/2$. On définit ici l'énergie relative au réseau $E_\mathrm{R} = \hbar^2 k_\mathrm{R}^2/2m$, nommée *énergie de recul*. On verra par la suite qu'il est possible de généraliser cette approche à des potentiels ayant de multiples composantes dans l'espace de Fourier.

On peut procéder numériquement à la diagonalisation de cette matrice (cf. Annexe A). On représente sur la figure 2.1.a le diagramme de bande calculé pour un potentiel de profondeur nulle (ligne pointillée) pour les trois premières énergies propres. On retrouve la dispersion de la particule libre $E_0 = \hbar^2 k^2/(2m)$, dont le spectre est replié dans la première zone de Brillouin. Lorsque la profondeur du réseau est non nulle, une levée de dégénérescence (séparation en bandes d'énergies) se produit en bord de zone de Brillouin (Fig. 2.1.a ligne continue). Les zones en énergies pour lesquelles il n'y a aucune valeur propre sont appelées *gaps*. Lorsque $k \simeq k_\mathrm{R}$, la dérivée de $E_n(k)$ devient nulle. Les états de Bloch associés à ces énergies peuvent être calculés à partir des états propres $v_{k,\ell}$ et de la relation (Eq. 2.3). On les représente sur les figures 2.1.b. et c.

Ici, les états de Bloch sont une superposition des $2N+1$ états propres de M. Dans le cas d'un potentiel symétrique, la symétrie de ces états alterne entre paire lorsque $n \in 2\mathbb{N}$ et impaire pour $n \in 2\mathbb{N}+1$. Cet effet est à mettre en regard avec les états propres dans le cas d'un système dans une boîte symétrique (on verra par la suite que lorsque le potentiel n'est plus infini, le nombre d'états dans chaque bande correspond au nombre de sites du réseau).

- **Profondeur faible : approche perturbative**

Dans la limite où la profondeur du réseau est petite devant l'énergie de recul ($U_0 \ll E_\mathrm{R}$), une particule est quasi-libre et sa dynamique est très faiblement perturbée par le potentiel périodique. À l'ordre le plus bas, il est possible de réduire le système d'équation (2.5) pour $\ell = 0, 1$, à [7] :

$$\begin{cases} \mathcal{E}_k v_k - (U_0/4) v_{k-k_\mathrm{R}} & = E v_k \\ -(U_0/4) v_k + \mathcal{E}_{k-k_\mathrm{R}} v_{k-k_\mathrm{R}} & = E v_{k-k_\mathrm{R}} \end{cases}, \tag{2.8}$$

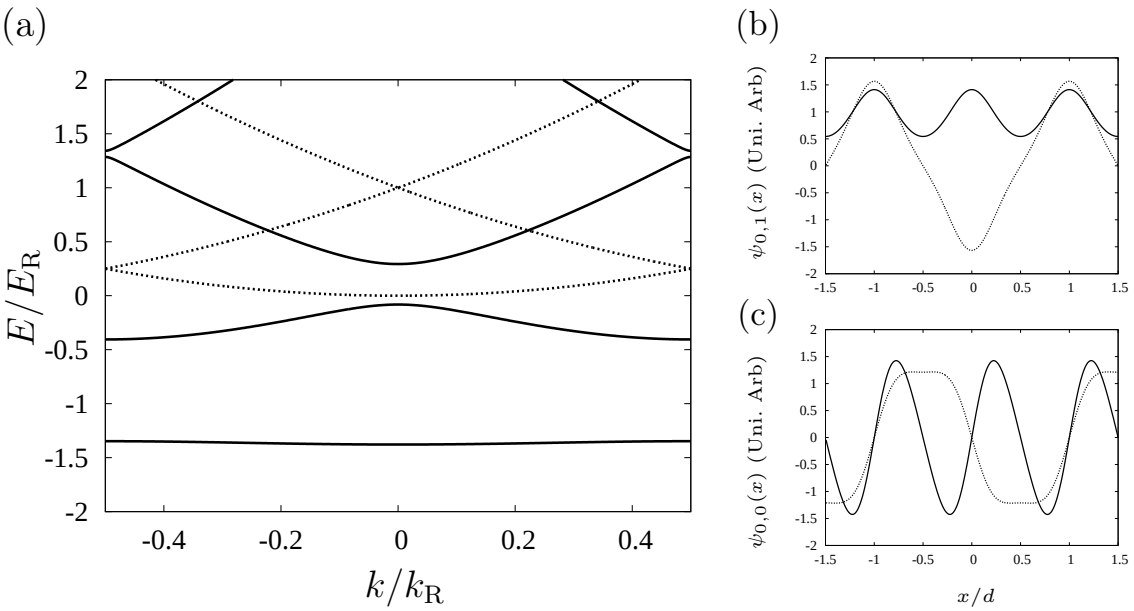


Figure 2.1

(a) Représentation graphique des premiers niveaux d'énergie $E_n(k)$ pour $U_0 = 0$ (ligne pointillée) et $U_0 = 2E_{\mathrm{R}}$ (ligne continue). Fonction de Bloch de l'état fondamental (b) et du premier état excité (c) pour $k = 0$ (lignes continues) et pour $k = k_{\mathrm{R}}$ (lignes pointillés).

qui a pour valeurs propres :

$$E_k^{(\pm)} = \frac{1}{2}(\mathcal{E}_k + \mathcal{E}_{k-k_{\mathrm{R}}}) \pm \sqrt{\left(\frac{\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k-k_{\mathrm{R}}}}{2}\right)^2 + \frac{U_0^2}{16}}, \tag{2.9}$$

avec $\mathcal{E}_k = \hbar^2 k^2/(2m)$. En introduisant la notation $K = k/k_{\mathrm{R}} - 1/2$ et $q = U_0/E_{\mathrm{R}}$, on peut réécrire l'équation (2.9) comme :

$$\frac{E_K^{(\pm)}}{E_{\mathrm{R}}} = \frac{1}{4} + K^2 \pm \sqrt{K^2 + \frac{q^2}{16}}. \tag{2.10}$$

Avec comme vecteurs propres associées : $v_k = (4E_K^{(-)}/U_0, 1)$ et $v_{k-k_{\mathrm{R}}} = (4E_K^{(+)}/U_0, 1)$. La fonction de Bloch perturbative $\tilde{\psi}_{n,k}$ est une superposition de ces états propres et prend la forme :

$$\tilde{\psi}_{n,k}(x) = \mathrm{e}^{ikx}\left(v_k + v_{k-k_{\mathrm{R}}}\mathrm{e}^{-ik_{\mathrm{R}}x}\right). \tag{2.11}$$

Le développement à l'ordre 1 du potentiel réduit le système à deux bandes et un gap en énergie. La largeur du gap est dans ce régime de l'ordre de grandeur de $q/2$ (cf. FIG. 2.2). Ce développement peut être effectué à des ordres plus élevés et adaptés aux bandes supérieures [35].

- **Régime liaisons fortes**

Il existe un autre régime dans lequel il est possible d'obtenir analytiquement les solutions de l'équation (2.1). Ce régime est celui des liaisons fortes pour lequel $U_0 \gg E_{\mathrm{R}}$. Contrairement au cas précédent, la particule a une très faible probabilité de se déplacer par effet tunnel d'un site du réseau à un autre [36,37]. On peut considérer que le potentiel périodique est un assemblage périodique d'une infinité d'oscillateurs harmoniques indépendants. La pulsation propre ω_0 de ces oscillateurs est donnée par le développement au deuxième ordre du potentiel autour des minima des puits ($x_j = jd$ avec $j \in \mathbb{Z}$) :

$$\omega_0 = \frac{1}{2m}\left.\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x_j=jd} = \frac{U_0\pi^2}{2md^2}.$$

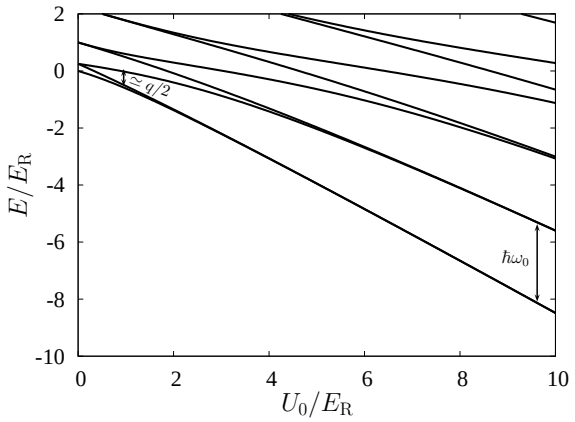


Figure 2.2

Bords des 5 premières bandes (lignes continues) en fonction de la profondeur du potentiel U_0.

Ce comportement se traduit dans le diagramme de bande par des niveaux d'énergies qui se rapprochent et se séparent d'un gap $\hbar\omega_0$ (cf. FIG. 2.2). Les premiers états du spectre d'énergie se comportent comme un ensemble discret d'état propres E_n correspondant aux bande* $E_{n,k}$. Ces valeurs propres sont celles de l'oscillateur harmonique équivalent (dans chaque puits du réseau) :

$$E_n = \frac{U_0}{2} + \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right),$$

qui est indépendant de k (ce qui traduit le fait que la largeur de bande est très petite, sans toutefois être nulle). Le fondamental ($n = 0$), $\psi_{0,k}$ est alors proche d'un état gaussien dont la largeur dépend de ω_0. Ainsi, comme précédemment, l'état de Bloch peut être construit comme une combinaison linéaire de ces états propres. Ces états sont définis à partir de la *fonction de Wannier* $w(x)$ [35, 38] :

$$\psi_{n,k}(x) = k_R^{1/2} \sum_{j\in\mathbb{Z}} w(x - jd) e^{ikjd}. \tag{2.12}$$

On peut montrer qu'à l'instar des états de Bloch, cette base des fonctions de Wannier forme une base orthonormale et est invariante par translation d'un site j à un autre $x \to x + jd$. Par la suite, on ne considérera que les états de Wannier de la bande fondamentale, localisés en x_j, que l'on notera w_j.

Dans ce régime, les états propres étant localisés en chaque site du réseau de position $x_j = jd$, il est possible de réécrire l'hamiltonien en utilisant un modèle de saut au premier voisin :

$$\hat{H} = -t\left(\hat{T} + \hat{T}^\dagger\right), \tag{2.13}$$

où l'on définit l'opérateur translation discret par $\hat{T} = \sum_j w^*_{j+1} w_j$ et la constante de couplage tunnel, t, d'un site à l'autre, est définie uniquement par la profondeur du réseau q [37] :

$$t = \frac{4E_R}{\sqrt{\pi}} q^{3/4} \exp\left(-2\sqrt{q}\right).$$

Le calcul de la valeur moyenne de $\hat{H}$ sur les états (2.12) donne, pour le fondamental :

$$E_k = -2t\cos(kd). \tag{2.14}$$

Seule la bande fondamentale rentre en jeu dans la dynamique, et elle oscille avec une amplitude de $4t$ dans la première zone de Brillouin. Ce modèle est un cas particulier du *modèle de Hubbard* pour lequel le terme d'interaction est très petit devant le terme cinétique (régime métallique).

∗. Lorsque la profondeur est grande, les bandes perdent leur dépendance en k en s'affinant.

- **Relations semi-classiques**

On peut définir, dans le cas général, des relations semi-classiques permettant de relier les dérivées successives des bandes d'énergies à des grandeurs classiques comme la vitesse de groupe ou la masse effective d'une particule dans le réseau. Pour ce faire, on utilise le *théorème de Hellmann-Feynman* [39]. Celui-ci stipule que si les états propres $|\psi(\sigma)\rangle$ et les énergies propres $E(\sigma)$ d'un hamiltonien $\hat{H}_\sigma$ dépendent d'un même paramètre σ, alors on peut écrire que :

$$\langle\psi(\sigma)|\frac{\partial\hat{H}_\sigma}{\partial\sigma}|\psi(\sigma)\rangle = \frac{\partial E(\sigma)}{\partial\sigma}. \tag{2.15}$$

L'approximation semi-classique (usuellement associée au petites longueurs d'ondes) permet d'associer à la particule quantique considérée une onde plane, lorsque sa dispersion en moment Δk reste très petite devant k_R. On définit l'opérateur vitesse par $\hat{v} = \partial\hat{T}/\partial\hat{p}$. Pour $\sigma \equiv k$ et en prenant les états propres de l'équation (2.1), l'équation (2.15) devient :

$$\bar{v}_k = \frac{1}{\hbar}\langle u_{n,k}|\frac{\hat{H}_{n,k}}{\partial k}|u_{n,k}\rangle = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{n,k}}{\partial k}. \tag{2.16}$$

D'un autre côté, un calcul perturbatif au deuxième ordre conduit à la masse effective dans le réseau [35] :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E_{n,k}}{\partial k^2}. \tag{2.17}$$

L'avantage de l'utilisation du théorème de Hellmann-Feynman est qu'il permet de généraliser la vitesse semi-classique à un formalisme de Floquet-Bloch, pour lequel l'hamiltonien est aussi périodique en temps.

2.2.2 Formalisme de Mathieu

Nous avons jusqu'à présent considérer des solutions de l'équation de Schrödinger pour lesquelles le vecteur d'onde k est un nombre réel. Les solutions associées sont des ondes propagatives. Il est légitime de se demander si ces solutions, sont les seules solutions physiques associées à ce système. Dans cette sous-section, nous verrons qu'il est possible d'étendre le vecteur d'onde au plan complexe au travers d'une réécriture de l'équation de Schrödinger stationnaire comme une équation de Mathieu. On verra que l'utilisation de ce formalisme présente la possibilité d'explorer la physique de ce système lorsque l'énergie E de la particule se situe dans un gap.

- **Passage de l'équation de Schrödinger à celle de Mathieu**

Repartons de l'équation (2.1) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} - U_0\sin^2\left(\frac{\pi x}{d}\right)\psi(x) = E\psi(x). \tag{2.18}$$

Grâce à un changement d'échelle $\tilde{x} = \pi x/d$, l'équation précédente prend la forme d'une équation de Mathieu :

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\tilde{x}^2} + [a + 2q\cos(2\tilde{x})]\,\psi(\tilde{x}) = 0. \tag{2.19}$$

avec :

$$a = 4E/E_\mathrm{R} + 2U_0/E_\mathrm{R} \text{ et } q = U_0/E_\mathrm{R}. \tag{2.20}$$

Dans ce formalisme, le couple (a, q) constitue les paramètres sans dimension du système.

- **Solutions de Floquet**

Le *théorème de Floquet* [40,41] nous apprend qu'il existe toujours une solution à l'équation linéaire :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + f(x)\psi = 0,$$

avec $f(x+d) = f(x)$. Il indique, dans ce cas, que les solutions non triviales $\psi(x)$ de l'équation précédente ont la propriété de pseudo-périodicité :

$$\psi(x+d) = e^{i\kappa x}\phi(x), \tag{2.21}$$

où $\phi(x)$ est une fonction périodique de même période d. Dans le cas particulier où $\kappa = 0$, la solution est périodique. L'exposant $\kappa \in \mathbb{C}$ est l'exposant de Floquet [40–42] (ou encore exposant caractéristique).

- **Méthode de Hill pour l'équation de Mathieu**

Le théorème de Floquet est, à l'instar du théorème de Bloch, général à toutes les fonctions $f(x)$ périodiques. On choisit ici de se placer dans le cadre de l'équation de Mathieu où $f(x) = a - 2q\cos(2x)$ (l'annexe B traite du cas plus général de l'équation de Whittaker-Hill pour laquelle $f(x) = a - 2q(\cos(2x) + \epsilon\cos(4x))$). Un développement en série de Fourier des fonctions $\phi(x)$ conduit à l'expression générale des solutions de Floquet :

$$\psi(x) = \sum_{r\in\mathbb{Z}} c_{2r} \mathrm{e}^{i(\kappa+2r)x}. \tag{2.22}$$

Les c_{2r} ayant les propriétés de convergence suivantes [40] :

$$\sum_{r\in\mathbb{Z}} |c_{2r}|^2 < \infty \text{ et } \lim_{n\to\pm\infty} |c_{2r}|^{1/|r|} = 0.$$

En introduisant ces solutions dans l'équation de Mathieu (2.19), on obtient le système d'équations linéaires suivant :

$$\sum_r c_{2r}\left[(\kappa+2ir)^2 - a - q\left(\mathrm{e}^{2rx} + \mathrm{e}^{-2irx}\right)\right]\mathrm{e}^{i(\kappa+2ir)x} = 0. \tag{2.23}$$

Après simplification on obtient pour tout r et $a \neq (\kappa+2r)^2$:

$$\frac{q}{a-(\kappa+2r)^2}c_{2r-2} - c_{2r} + \frac{q}{a-(\kappa+2r)^2}c_{2r+2} = 0.$$

La condition nécessaire et suffisante pour que l'équation (2.19) ait une solution, est alors [40–42] :

$$\Delta(\kappa,a) = \begin{vmatrix} \ddots & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ \ddots & 1 & \gamma_{-2} & \ddots & \vdots \\ 0 & \gamma_{-2} & 1 & \gamma_2 & 0 \\ \vdots & \ddots & \gamma_2 & 1 & \ddots \\ 0 & \dots & 0 & \ddots & \ddots \end{vmatrix} = 0, \tag{2.24}$$

où l'on a défini

$$\gamma_{2r} = -\frac{q}{a-(\kappa+2r)^2}.$$

À noter que le changement simultané $r \to -r$ et $\kappa \to -\kappa$ laisse le déterminant $\Delta(\kappa,a)$ invariant. Ainsi, l'équation (2.24) est paire vis-à-vis de μ : $\Delta(-\kappa,a) = \Delta(\kappa,a)$. Cette matrice étant de dimension infinie, on trouve une périodicité $\Delta(\kappa+1,a) = \Delta(\kappa,a)$ [43].

Cherchons maintenant à déterminer la convergence de ce déterminant infini. Nous savons qu'un déterminant est absolument convergent si :

1. le produit des éléments diagonaux est absolument convergent,
2. la somme des éléments non-diagonaux est absolument convergente.

La première condition est trivialement vérifiée : $\prod_{r=-\infty}^{\infty} |1| = 1$. Et la deuxième consiste à démontrer que la somme :

$$S = \sum_{r=-\infty}^{\infty} |\gamma_{2r}| = \frac{1}{4} \sum_{r=-\infty}^{\infty} \left| \frac{1}{r^2(a/4r^2 - (1+\kappa/2r)^2)} \right|, \tag{2.25}$$

est convergente. On suppose que : $2r+\kappa \neq \pm\sqrt{a}$. Puisque $|1/[a/4r^2-(1+\kappa/2r)^2]| < |r|^{-p}$ pour $1 < p < 2$ et que $\sum_{r=1}^{\infty} 1/r^p$ converge (Riemann) alors S et par conséquent $\Delta(\kappa)$ convergent absolument pour a et μ finis. Excepté aux pôles, c'est-à-dire pour $\mu \neq \sqrt{a}-2r$, les γ_{2r} sont analytiques (fonction méromorphe).

La méthode de Hill utilise la fonction auxiliaire :

$$\delta(\kappa, a) = \frac{1}{\cos(2\pi\kappa) - \cos(2\pi\sqrt{a})}, \tag{2.26}$$

qui a les mêmes pôles que le déterminant $\Delta(\kappa, a)$. Il est donc possible de définir une fonction $C(k)$ telle que la fonction :

$$\Theta(\kappa, a) = \Delta(\kappa, a) - C(\kappa)\delta(\kappa, a), \tag{2.27}$$

ne soit pas singulière. La fonction $C(\kappa, a)$ est choisie de sorte à ce qu'elle soit bornée pour $\kappa \to i\infty$, lorsque $\Delta(\kappa, a) = 1$ (car $\gamma \to 0$). Ainsi, on a la convergence $\Theta(\kappa \to i\infty, a) \to 1$ car $\delta(\kappa \to i\infty, a) \to 0$. De plus, Θ n'a pas de pôle dans le plan complexe lorsque $\kappa = \sqrt{a}$, et comme c'est une fonction périodique paire, alors on en déduit qu'elle n'a pas de pôle lorsque $\kappa = \sqrt{a} - 2r$. Ainsi, comme $\Theta(\kappa, a)$ est une fonction périodique (donc bornée) de κ, d'après le théorème de Liouville C est constante, telle que :

$$C = \frac{\Delta(\kappa, a) - 1}{\delta(\kappa, a)}. \tag{2.28}$$

Dès lors, dans le cas particulier où $\kappa = 0$, on a $\delta(0, a) = 1/(1 - \cos(2\pi\sqrt{a})$ et par suite : $C = (\Delta(0, a) - 1)(1-\cos(2\pi\sqrt{a}))$. En injectant cette constante dans l'équation (2.28) on obtient dans le cas où $\Delta(\kappa, a) = 0$ la solution analytique de l'*exposant de Floquet-Mathieu* :

$$\kappa(a) = \frac{1}{\pi} \arccos\left[1 - \Delta(0)(1 - \cos(2\pi\sqrt{a}))\right]. \tag{2.29}$$

Il est possible de calculer Δ en utilisant ses propriétés de symétrie [43]. En pratique on peut extraire numériquement l'exposant de Mathieu et, en particulier, sa partie réelle (Fig. 2.3.a) et sa partie imaginaire (Fig. 2.3.b) qui déterminent les régimes de paramètres pour lesquels les solutions de Floquet sont respectivement stables et instables. La partie imaginaire nous informe que les zones pour lesquelles l'équation est stable forment des bandes. Celles-ci peuvent être identifiées à partir des calculs réalisés dans le cadre du formalisme de Bloch (lignes vertes). Les zones d'instabilité se situent au niveau des gaps dans le spectre (partie imaginaire non nulle). La valeur de la partie réelle dans ces gaps alterne entre 0 et 0.5 en unité recul. Ceci provient du fait que l'algorithme utilisé induit un repliement du spectre (cf. Annexe A).

La méthode présentée jusqu'à présent est générale. Nous avons vu précédemment qu'il est possible de résoudre ce système dans la limite perturbative, ici lorsque $q \approx 0$. Voyons ce qu'il en est en pratique.

- **Développement perturbatif**

Reprenons le calcul réalisé lors de la section précédente (Eq. 2.10). Nous avons pu extraire d'un calcul perturbatif les deux premières bandes $E(k)$. Il est possible d'inverser ce développement pour calculer l'exposant de Mathieu $\kappa(E)$ associé. On peut montrer que l'on a :

$$\kappa^{(\pm)}(E') = \pm\frac{1}{2}\left(1 - \sqrt{1 + 4\frac{E'}{E_\mathrm{R}} - \sqrt{16\frac{E'}{E_\mathrm{R}} + q^2}}\right), \tag{2.30}$$

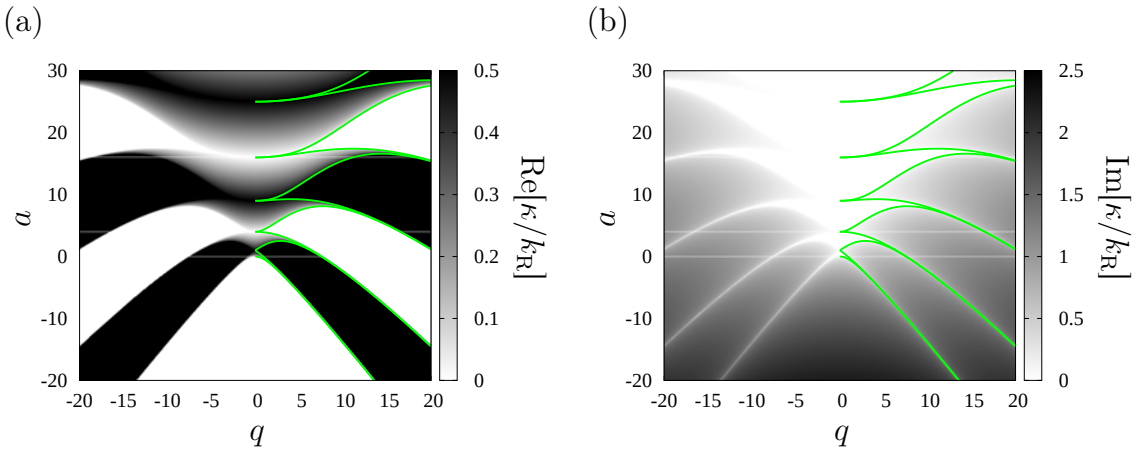


Figure 2.3

Valeurs des parties réelles (a) et imaginaires (b) de l'exposant de Mathieu κ en fonction de a et de q. Les lignes continues vertes représentent les bords de bandes obtenues à partir des énergies propres de l'équation de Schrödinger correspondantes (pour $U_0 > 0$). Elles sont issues du calcul de la figure 2.1 après application des transformations (2.20).

avec $E' = E - q/2$. On obtient à partir de cette formule sa partie réelle et imaginaire (lorsque les arguments des racines prennent des valeurs négatives). Ce calcul perturbatif peut être comparé au résultat exact (Fig. 2.4). On constate que pour une profondeur de seulement $U_0 = E_R$, il y a une différence visible entre les deux résultats. Il est donc nécessaire à ces profondeurs de réaliser un développement à un ordre supérieur [42]. De façon à quantifier cette différence on définit l'erreur relative suivante :

$$\epsilon = \max_{0 \leq E' \leq E_R} \left(\frac{\kappa_{\text{exact}}(E') - \kappa^{(\pm)}(E')}{\kappa_{\text{exact}}(E')} \right). \tag{2.31}$$

On reporte dans le tableau 1 cette erreur en fonction de la profondeur de potentiel. La contribution principale est donnée par les énergies proches des gaps.

$q = U_0/E_R$	0.1	0.3	0.5	1
ϵ	0.008	0.042	0.089	0.276

Table 1 *: Valeurs numériques de ϵ pour différentes profondeurs de potentiel U_0.*

Un tel développement perturbatif de l'exposant de Mathieu sera donc utile lorsque l'on aura besoin d'estimer des grandeurs dynamiques analytiquement, mais il faudra toujours tenir compte du fait que celui-ci s'éloigne rapidement de sa valeur exacte lorsque $q > 1$.

2.2.3 Propagation d'une particule

On vient de voir qu'il est possible de caractériser des solutions instables de l'équation de Mathieu et qu'elles correspondent à des énergies se situant dans les gaps. Ces solutions représentent une extension du vecteur d'onde pour des valeurs complexes. Ces solutions n'entrent pas dans le formalisme de Bloch qui ne considère que des ondes propagatives. Néanmoins, ces solutions ont une réalité physique et correspondent à des ondes évanescentes, exponentiellement décroissantes avec la position. On verra, par la suite, qu'elles entrent en jeu lors de la dynamique d'une particule dans un potentiel dont la profondeur dépend de la position.

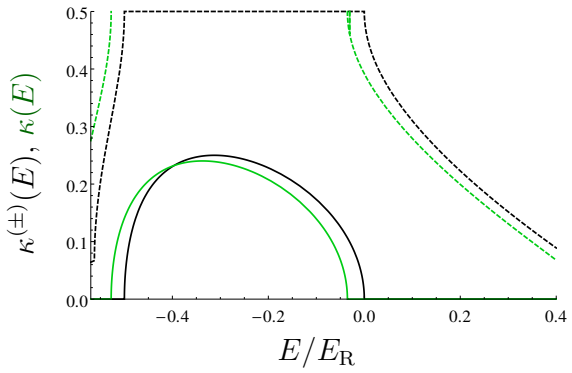


Figure 2.4

*Partie réelle (lignes en pointillés) et partie imaginaire (lignes continues) de l'exposant de Mathieu exact $\kappa(E)$ (vert) et perturbatif $\kappa^{(\pm)}$ (noir) issus du calcul numérique de l'exposant (*Eq. *2.29).*

Nous avons vu précédemment que l'équation de Schrödinger, pour un potentiel périodique infini (Eq. 2.18), avait pour unique paramètres la profondeur U_0 et l'énergie E de la particule considérée. On se place donc naturellement dans cet espace des paramètres. La figure 2.5 représente les parties réelles et imaginaires de l'exposant de Mathieu en fonction de ces paramètres. Une fois encore les zones de stabilité se distribuent en bandes.

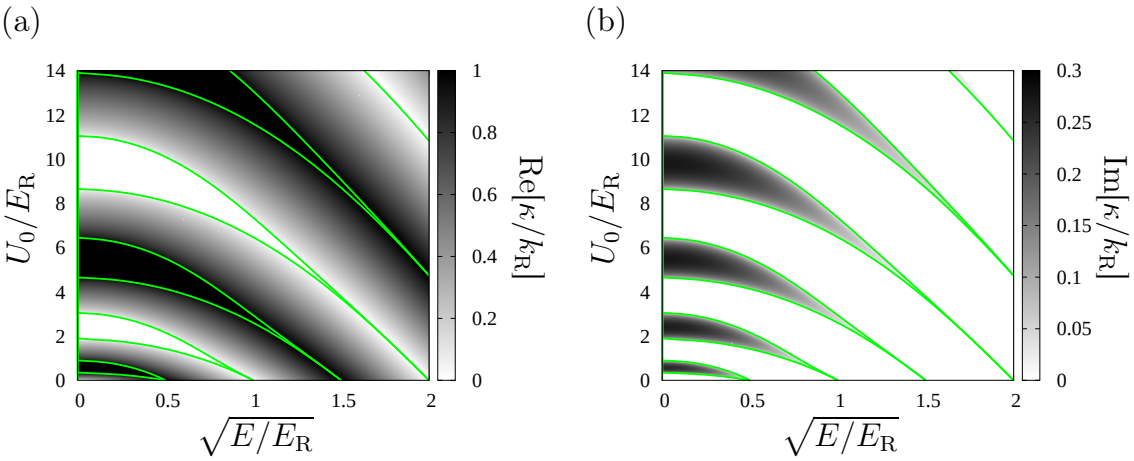


Figure 2.5

Valeurs (a) des parties réelles et (b) imaginaires de l'exposant de Mathieu κ en fonction de la profondeur U_0 et du vecteur d'onde $k = \sqrt{E/E_\mathrm{R}}$, dans le cas où $\phi = \pi/2$. Les lignes continues vertes représentent les bords de bandes obtenus à partir des énergies propres de l'équation de Schrödinger stationnaire correspondantes (pour $U_0 > 0$). Elles sont issues du calcul de la figure 2.1.

Dans cette sous-section, on étudie la diffusion d'ondes planes sur un potentiel périodique pour sonder la structure de bandes. L'approche proposée ici consiste à étudier un potentiel avec un nombre de sites fini, que l'on fera tendre vers l'infini. Il sera nécessaire de caractériser, en parallèle, le spectre du potentiel qui sera discret du fait de la taille finie. Enfin, le diagramme en transmission lié à la diffusion d'ondes planes permettra la caractérisation des résonances.

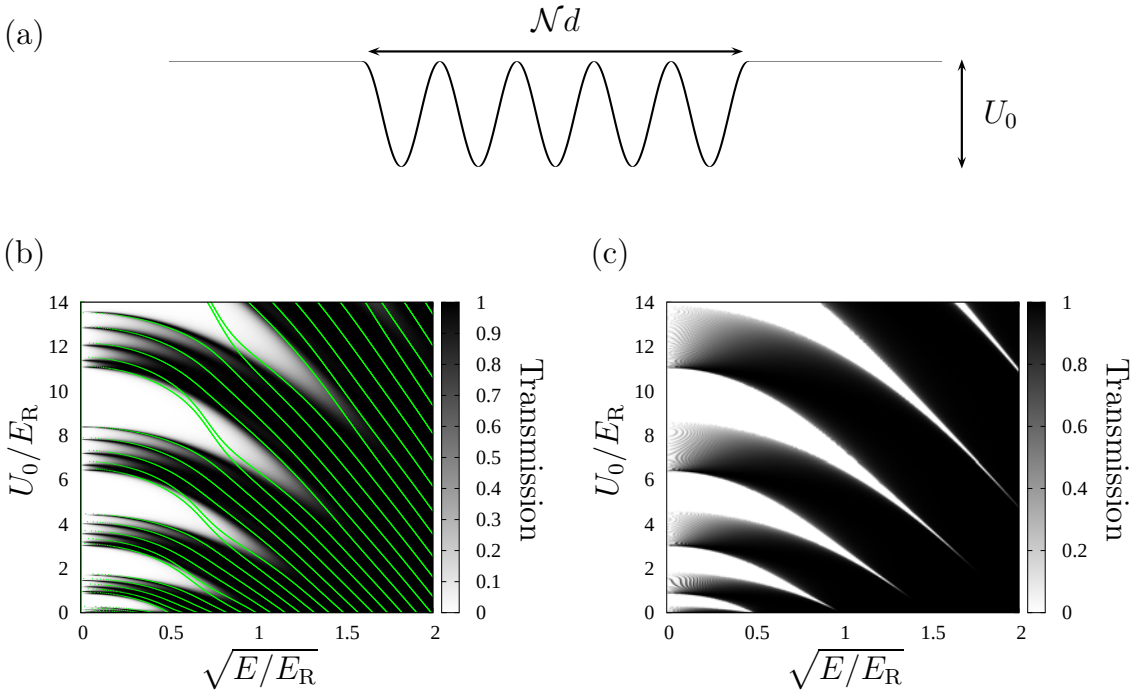


Figure 2.6

*Représentation schématique du potentiel (*Eq. *2.32) pour $\mathcal{N} = 5$ et $\varphi = \pi/2$. Transmission d'une onde plane d'énergie E au travers d'un potentiel périodique, de profondeur U_0, dont la largeur est (b) $\mathcal{N} = 5$ et (c) $\mathcal{N} = 100$. Les lignes vertes à la figure (b) représentent les valeurs propres discrètes obtenues par résolution de l'équation de Schrödinger pour ce potentiel. L'effet de moiré présent à la figure (c) provient de la résolution finie de la figure, et n'a pas de réalité physique.*

- **Effet de taille**

Partons d'un potentiel périodique de taille finie, composé de $\mathcal{N}$ puits espacés d'une distance d (cf. Fig. 2.6.a). On définit pour cette sous-section le potentiel suivant :

$$U(x) = -U_0 \sin^2\left(\frac{\pi x}{d} + \varphi\right)[H(x + \mathcal{N}d/2) - H(x - \mathcal{N}d/2)]/2, \tag{2.32}$$

où φ est une phase et $H(x)$ est la fonction de Heaviside. Pour $\mathcal{N} = 1$ on est dans le cas du simple puits de potentiel. Son spectre est composé d'un nombre fini d'états liés (dont le nombre dépend de la profondeur du puits) et d'un nombre infini d'états à énergie positive. Lorsque l'on ajoute un autre puits au premier ($\mathcal{N} = 2$), chacun des puits va participer au spectre et, du fait du couplage tunnel, il se produit une levée de dégénérescence entre les niveaux liés. Ce raisonnement peut se généraliser pour un grand nombre de sites et, dans cette limite, le spectre est, comme dans le cas d'un réseau infini, composé d'une infinité de bandes mais, cette fois-ci, ces bandes sont elles-mêmes composées de $\mathcal{N}$ niveaux discrets. Chaque puits contribue au spectre de chaque bande en apportant un niveau supplémentaire à celles-ci.

Illustrons ce phénomène en prenant un potentiel de largeur $\mathcal{N} = 5$ sites. On s'attend à ce que, dans ce cas, les bandes se composent de 5 valeurs propres. C'est ce que l'on observe à la figure 2.6.b (lignes vertes). On observe, de plus, un phénomène intéressant qui est le regroupement des deux niveaux de plus basses énergies de chaque bande. Qui plus est, ces deux niveaux passent d'une bande à une autre lorsque l'on augmente la profondeur du réseau. On peut montrer que, plus la largeur $\mathcal{N}$ est grande, plus l'on voit apparaître ce comportement. On verra, par la suite, que l'on peut associer à ces niveaux d'énergie des *états de surface* (cf. chapitre 4).

- **Transmission d'une onde plane**

Réalisons une comparaison quantitative de ce spectre avec la probabilité de transmission d'une onde plane au travers de ce potentiel (2.32). Une méthode consiste à réaliser la diffusion d'ondes planes d'énergie E et de mesurer la transmission en sortie. Ce calcul numérique peut être fait à l'aide d'un algorithme présenté à l'annexe A. On obtient dans le cas d'un potentiel de largeur $\mathcal{N} = 5$ la transmission représentée à la figure 2.6.b. Ce diagramme montre qu'à basse vitesse $v/v_{\mathrm{R}} = \sqrt{E/E_{\mathrm{R}}} \ll 1$, la transmission peut être quasi-nulle. C'est le phénomène de réflexion quantique. À vitesse élevée et à profondeur faible, on retrouve une transmission unité : la dynamique peut être traitée classiquement (cf. Fig. 2.6.b et c). Cette transmission est en très bon accord avec les niveaux d'énergie calculés précédemment, *i.e.* les zones de transmission maximales sont pour des énergies proches des valeurs propres de l'équation de Schrödinger. On observe que la diffusion ne rend pas compte des états de surface, lorsque ceux-ci ont des énergies se situant dans un gap.

Ces niveaux d'énergies peuvent être qualifiés de résonance (car $E > 0$). Du point de vue de la diffusion, ces résonances sont issues de réflexions multiples à l'intérieur du potentiel et dont les contributions s'additionnent de manière constructive. La forme de ces résonances sera discutée à la section 2.3, à l'aide d'un modèle semi-classique. À titre d'exemple, la figure 2.6.c représente la transmission pour un nombre de $\mathcal{N} = 100$ sites. On observe graphiquement que, lorsque $\mathcal{N} \to \infty$, on retrouve les bandes (stables) obtenues plus haut lors du calcul à l'aide de l'exposant de Mathieu (Fig. 2.5.b). Les zones de réflexion sont beaucoup plus contrastées que dans le cas où $\mathcal{N}$ est petit. Ceci est une des conséquences des réflexions multiples se sommant, de manière cohérente, à l'intérieur de ce potentiel et qui ont pour effet d'augmenter le contraste des résonances en transmission.

- **Effets de bord**

Pour conclure cette sous-section, on propose de réaliser cette même étude, mais dans le cas où les bords du réseau sont abrupts. Pour ce faire, on choisit de prendre une phase pour le potentiel qui est $\varphi = 0$. Dans cette configuration, la discontinuité est maximale. On la représente sur la figure 2.7.a. Le potentiel reste symétrique et est toujours composé de $\mathcal{N}$ sites mais, cette fois, l'un d'entre eux est « coupé » en deux parties. Cette géométrie a pour effet de changer la distribution des résonances dans le diagramme de transmission-énergie (Fig. 2.7.b). Chaque bande paire est maintenant composée de $\mathcal{N}+1$ niveaux et de $\mathcal{N}-1$ pour les bandes impaires. De plus, les résonances se situant dans une bande paire ont une largeur plus petite que celle se situant sur une bande impaire. La géométrie du potentiel à pour effet de changer la topologie des états propres et donc change la distribution des niveaux. Dans la limite où $\mathcal{N}$ est grand, on observe une résurgence de la réflexion quantique à des vitesses élevées (cf. Fig. 2.7.c). La largeur des résonances dépend fortement de leur appartenance à une bande paire ou impaire.

2.2.4 Effet d'une profondeur locale sur la dynamique

Considérons désormais un potentiel dont l'enveloppe varie en fonction de la position mais, de façon continue. Nous verrons que, dans ce cas, l'enveloppe du potentiel crée des barrières tunnel effectives.

- **Critère d'adiabaticité**

De manière à illustrer la dynamique d'un gaz de particules dans un tel potentiel, on fait le choix d'associer au gaz une représentation particulaire, semi-classique, de sa dynamique. Une particule dans un réseau a une énergie constante durant sa propagation par conservation de l'énergie, soit :

$$\frac{\mathrm{d}E(x;t)}{\mathrm{d}t} = 0. \tag{2.33}$$

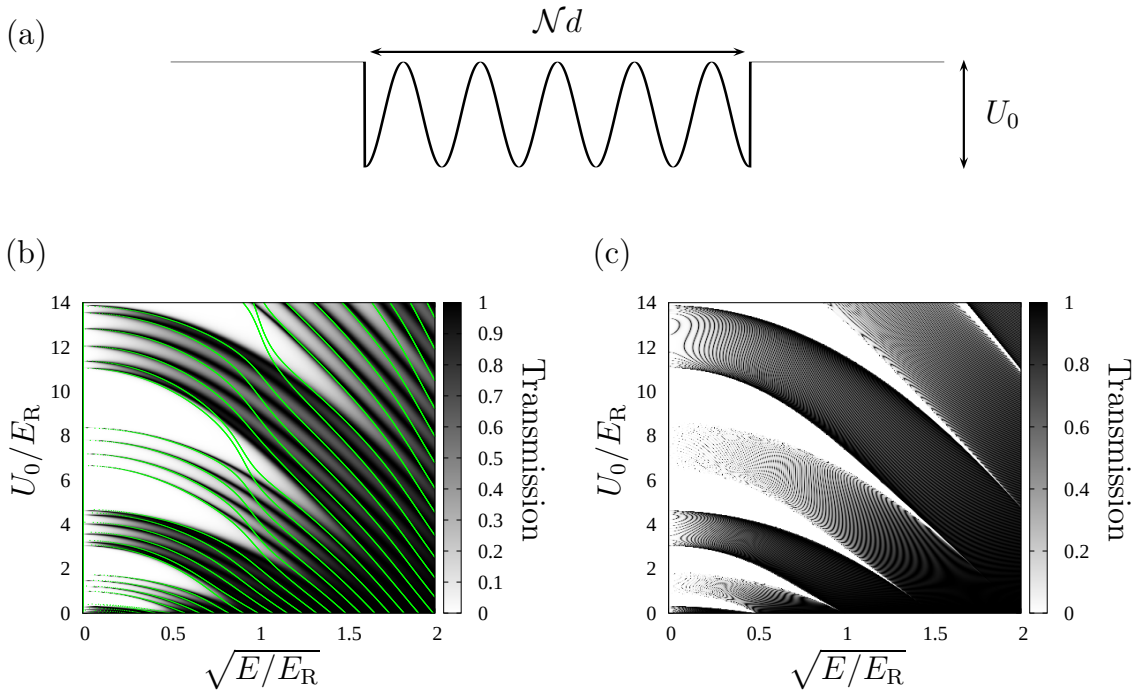


Figure 2.7

*Valeurs (a) des parties réelles et (b) imaginaires de l'exposant de Mathieu κ en fonction de la profondeur U_0 du potentiel (*Eq. *2.32) et du vecteur d'onde $k = \sqrt{E/E_\mathrm{R}}$, dans le cas où $\phi = 0$. Les lignes continues vertes représentent les bords de bandes obtenus à partir des énergies propres de l'équation de Schrödinger correspondantes (pour $U_0 > 0$). Les effets de Moiré présentés sur cette figure sont des artefacts graphiques provenant de la résolution numérique que l'on a choisis lors des simulations.*

On nomme cette constante, *pseudo-énergie*[*] que l'on note E_0. En revanche, la particule voit un potentiel dont la profondeur dépend de la position (Fig. 2.8.a). Il est possible d'associer à chaque position de l'espace x un diagramme de bande pour un réseau de taille infinie et de profondeur $q(x)$. Cette hypothèse d'enveloppe lentement variable semble valable, si la variation du potentiel est faible en regard de la période du réseau et sera testée quantitativement plus après.

Considérons une particule initialement à une position x_1 du réseau (cf. Fig. 2.8.a). Pour une profondeur $q(x_1)$, la pseudo-énergie se situe sur la bande II du diagramme de bande Fig. 2.8.b. Durant sa propagation le diagramme de bande descend relativement à la pseudo-énergie. Ainsi, le moment k est modifié. On peut montrer, en vertu de la conservation de l'énergie (Eq. 2.33), [35] que la force appliquée sur la particule s'écrit :

$$\frac{F}{\hbar} = \dot{k} = -\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{n,k}(x)}{\partial x}. \tag{2.34}$$

Les états propres $|u_{n,k}(q)\rangle$ et les énergies propres $E_{n,k}(q)$ dépendent maintenant d'un autre paramètre : la profondeur locale $q(x)$. Un système est dit *adiabatique* si, partant de son état propre initial $|u_{n,k}(q, t = 0)\rangle$, il demeure dans cet état $|u_{n,k}(q, t)\rangle$ pour tout temps t. On peut montrer de manière exacte que [44, 45] :

$$\langle\psi_{n',k}|\frac{\partial H}{\partial t}|\psi_{n,k}\rangle = (E_{n',k} - E_{n,k})\langle\psi_{n',k}(q,t)|\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{n,k}(q,t)\rangle \tag{2.35}$$

et donc que la condition à satisfaire est donnée par [46] :

$$\hbar\left|\langle u_{n',k}(q)|\frac{\partial}{\partial t}|u_{n,k}(q)\rangle\right| \ll |E_{n',k} - E_{n,k}|, \tag{2.36}$$

Pour deux états différents n et n', et pour tout t. L'état $|u_{n,k}(q)\rangle$ dépendant du temps de manière implicite (au travers de la profondeur de potentiel q et de la position), on peut réécrire ce critère en prenant :

$$\frac{\partial}{\partial t} \equiv \frac{\partial k}{\partial t}\frac{\partial}{\partial k} = -\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{n,k}(x)}{\partial x}\frac{\partial}{\partial k}.$$

La projection de l'état $\langle u_{n',k}(q)|$ sur l'équation aux valeurs propres portant sur $|u_{n,k}(q)\rangle$, combinée à l'équation (2.36) permet d'écrire [46] :

$$\frac{\hbar}{m}\frac{\partial E_{n,k}(x)}{\partial x}|\langle u_{n',k}|\hat{P}|u_{n,k}\rangle| \ll [E_{n,k}(x) - E_{n',k}(x)|^2, \tag{2.37}$$

avec $\hat{P}$, l'opérateur impulsion. Si ce critère est satisfait, durant la propagation, les particules resteront sur la bande n. En supposant maintenant que la particule à une position x_0 ait une pseudo-énergie pour laquelle $k = k_R/2$ (bord de zone de Brillouin) et que $q(x_0) \ll 1$, l'ordre de grandeur des conditions à réunir pour satisfaire le critère d'adiabaticité est donné par le développement perturbatif (Eq. 2.10). La levée de dégénérescence entre les niveaux $n = 0$ et $n' = 1$, c'est-à-dire la différence des énergies en bord de bande, est alors $E_R q(x_0)/2$.

- **Transition de Landau-Zener**

Supposons qu'après propagation cette même particule se retrouve à une position x_2 du réseau pour laquelle la profondeur est $q(x_2) > q(x_1)$, par exemple. Le diagramme de bande à cette position est différent : les bandes se sont séparées et se sont déplacées en énergie relativement à la pseudo-énergie, de sorte à ce que celle-ci se situe maintenant sur la bande III. Il y a donc eu, durant la propagation, un transfert non-adiabatique de population de la bande II à la bande III. Ce transfert correspond à une *transition de Landau-Zener* [22].

∗. On différencie la pseudo-énergie qui est l'énergie d'une particule dans un potentiel de son énergie $E = \hbar^2k^2/(2m)$ qui est son énergie en l'absence de potentiel.

Dans l'approximation où l'on considère un système à deux niveaux, la probabilité de transition Landau-Zener* s'écrit :

$$P = \exp(-2\pi\Gamma) \text{ avec : } \Gamma = \frac{\Delta E^2}{4\hbar} \left| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(E_n - E_{n\pm1}) \right|^{-1}, \tag{2.38}$$

avec ΔE la largeur du gap entre les deux niveaux. Ce raisonnement, mené dans la première zone de Brillouin, doit être affiné lorsque l'on considère une variation en fonction de la position de la largeur du gap. La non homogénéité de l'enveloppe du réseau projette les bandes et les gaps dans l'espace réel formant des *gaps spatiaux*. Ainsi, pour un intervalle de positions donné, la pseudo-énergie est dans un gap (représenté par une densité verte sur la figure 2.8.a). Dans cette zone, l'exposant de Mathieu associé à la pseudo-énergie prend des valeurs imaginaires : la particule peut être associée à une onde évanescente. Les gaps spatiaux peuvent être considérés comme des barrières tunnel étant donné la décroissance exponentielle de l'onde évanescente.

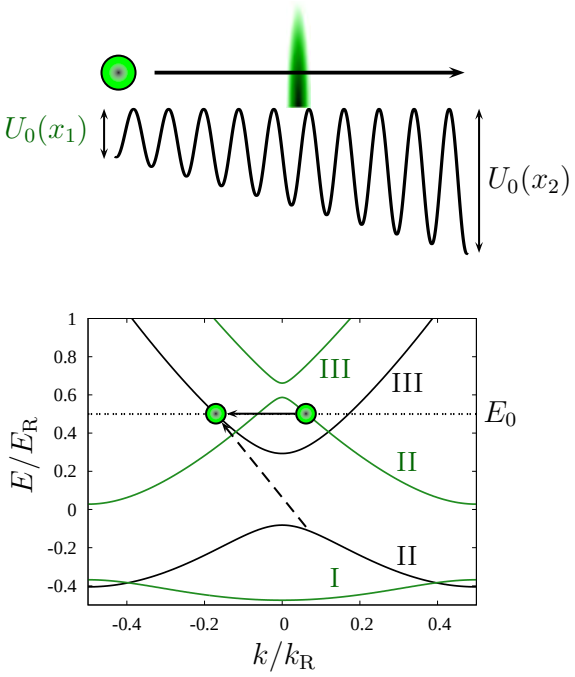


Figure 2.8

(a) Représentation schématique de la propagation d'une particule le long d'un potentiel périodique à enveloppe variable. La densité verte représente les positions pour lesquelles la pseudo-énergie E_0 de la particule se situe dans un gap. (b) Diagrammes de bandes pour $U_0(x_1)$ (ligne verte) et $U_0(x_2)$ (ligne noire). La particule durant sa propagation passe du niveau II au niveau III par transition Landau-Zener (flèche en pointillées).

- **Analyse semi-classique**

Afin de caractériser une particule quantique dans un potentiel variant avec la position, on peut utiliser l'approximation WKB. On peut montrer que la probabilité de transmission au travers du potentiel est

∗. Qui est la probabilité de transfert non-adiabatique d'une bande à une autre en suivant le chemin en pointillés sur la figure 2.8.

donnée par [47] :

$$T(E_0) = \exp\left(-2\int_{x_1}^{x_2} \mathrm{Im}[\kappa(x;E_0)]\mathrm{d}x\right), \tag{2.39}$$

où $\kappa(x;E_0)$ est le coefficient de Mathieu *local*. Ce résultat est valable dans la limite semi-classique c'est-à-dire lorsque l'énergie de la particule est grande relativement à E_R. On testera la validité de cette approximation lors de l'étude d'une cavité pour ondes de matière.

À l'échelle de la largeur du potentiel, il est justifié de considérer que l'enveloppe varie linéairement autour d'une position x_1 telle que : $q(x) = U_0(x)/E_\mathrm{R} \approx q(x_1) + (x - x_1)(\partial_x q(x))_{x_1}$. On en déduit que :

$$T(E_0) = \exp\left(-2\frac{f(E_0)}{(\partial_x q(x))_{x_1}}\right), \tag{2.40}$$

où $f(E)$ est une fonction dépendant uniquement de l'énergie telle que :

$$f(E_0) = \int_{q(x_1)}^{q(x_2)} \mathrm{Im}[\kappa(q;E_0)]\mathrm{d}q.$$

Cette fonction peut être calculée en prenant l'intégrale de la figure 2.5.b le long d'un segment vertical. Cette forme de la transmission, issue de l'approximation WKB, nous permet de conclure que la transmission décroît exponentiellement avec le gradient le l'enveloppe. Autrement dit, plus ce gradient sera petit plus le gap spatial sera étendu dans l'espace. Nous verrons que ce gradient de potentiel peut être considéré comme un paramètre expérimental ajustable.

Enfin, ce formalisme général peut être appliqué au cas perturbatif ($q(x) \ll 1\ \forall x$) obtenu précédemment (cf. Eq. 2.9), de sorte à avoir une expression explicite de la probabilité de transmission. Dans cette limite perturbative, on montre que la partie imaginaire de l'exposant de Mathieu devient [24] :

$$\mathrm{Im}[\kappa(x;E_0)] = \sqrt{q^2 - (4E_0/E_\mathrm{R} - 1 + 2q)^2}/2.$$

On cherche à calculer l'expression analytique de l'intégrale (2.40). On choisit la profondeur de potentiel $q(x_1)$ de manière à ce que la pseudo-énergie E_0 corresponde au bord inférieur du gap, et $q(x_2)$ de manière à ce que E_0 soit au bord supérieur. Ces critères conduisent à : $q(x_1) = (1-4E_0/E_\mathrm{R})/3$ et $q(x_2) = 3q(x_1)$. De plus, comme nous considérons les deux premières bandes du diagramme, on doit se restreindre aux valeurs $0 < E_0 < E_\mathrm{R}/4$. Dans ce cas, on trouve :

$$f(E) = \frac{\pi}{12\sqrt{3}}\left(1 - \frac{4E}{E_\mathrm{R}}\right)^2. \tag{2.41}$$

La dépendance en énergie de la transmission est une gaussienne de largeur $3^{3/4}\sqrt{2/\pi}$, centrée en $E = E_\mathrm{R}/4$. Elle est assez différente de celle obtenue dans le cas d'une barrière de potentiel répulsive. Un des avantages de ces barrières tunnel est de pouvoir atteindre des régimes de transmission relativement élevées (ici supérieure à 30%), pour des largeurs relativement petites qui sont de l'ordre de quelques sites.

On vient de démontrer que les gaps spatiaux peuvent être identifiés à des barrières tunnel pour des particules se propageant dans un réseau. Leurs caractéristiques spatiales et énergétiques sont modulables sur une large gamme de paramètres. Évaluons maintenant la faisabilité de leur mise en œuvre expérimentale.

- **Barrière tunnel équivalente : ordres de grandeurs**

Il peut être intéressant d'estimer la largeur de la barrière tunnel carrée équivalente à celle formée par un gap spatial. La théorie WKB stipule [47] que, dans la limite semi-classique, la probabilité de

transmission, par effet tunnel, d'une onde plane d'énergie $E_0 = mv^2/2$ au travers d'une barrière de potentiel carrée, est donnée par :

$$T(E) = \frac{1}{1 + U_0^2 \sinh^2(KL)/4E(U_0 - E)}, \tag{2.42}$$

avec $K = \sqrt{2mU_0(1 - E/U_0)/\hbar^2}$. Un changement de variable, $x \equiv E/U_0$ et $y \equiv 2mU_0L^2/\hbar^2$ permet d'exprimer une largeur caractéristique y, en fonction d'une énergie E :

$$y(x) = \frac{1}{1-x} \operatorname{argsinh}^2 \left[4x(1-x) \left(\frac{1}{T(E)} - 1 \right) \right], \tag{2.43}$$

pour une probabilité donnée $T(E)$ (Eq. 2.39). Donc, pour une énergie cinétique forcément telle que : $E_0 < U_0$, on obtient une valeur de $y^* = y(x^*)$, qui permet de remonter à une largeur de :

$$L = \frac{\hbar}{mv} \sqrt{\frac{y^*}{x^*}} \tag{2.44}$$

Ainsi, la largeur de la barrière tunnel sera la valeur maximale que prendra L. On présente, ci-dessous, la tabulation de ces largeurs tunnel en fonction de la probabilité de transmission :

$T(E)$ (%)	3	10	20	30	40	50	75
$\ell(\Pi_0)(\mu\text{m})$	1.29	0.69	0.46	0.35	0.28	0.23	0.13

Supposons que la probabilité de franchir, par effet tunnel, le gap spatial est d'environ 30%. On peut alors assimiler ce dernier à une barrière de potentiel d'une largeur de 0.35 μm. Autrement dit, la largeur de la barrière est de l'ordre d'une demi-oscillation du réseau. Une expérience [9] menée par le groupe de Ketterle et Pritchard a démontré la réflexion de condensats en présence d'un potentiel périodique de paramètre $d = 1$ μm, mais elle est réalisée à partir d'une lithographie de Silicium. Ainsi, on dispose ici d'un potentiel optique pouvant être assimilé à une barrière de potentiel répulsive équivalente de taille sub-micrométrique, pour certaines classes de vitesse bien définies.

2.3 Cavités optiques pour ondes de matière

Nous avons développé précédemment le formalisme nécessaire pour aborder l'étude de la dynamique de gaz d'atomes dans un réseau périodique. Après une présentation schématique du dispositif expérimental, on verra comment on peut définir un modèle de cavité pour ondes de matière ainsi que sa réalisation pratique. Plusieurs extensions possibles de ce système seront discutées. Ce nouveau type de cavité pourra être ensuite utilisé pour manipuler de manière cohérente les atomes composant le gaz, à l'aide d'une modulation temporelle de l'amplitude du réseau optique.

2.3.1 Dispositif expérimental

Les gaps spatiaux étudiés précédemment peuvent être assimilés à des barrières tunnel dont la largeur et la hauteur sont ajustables. Nous allons voir comment il est possible de réaliser de tels objets expérimentalement, de sorte à créer à l'aide de réseaux optiques symétriques des cavité pour ondes de matière guidées.

Le dispositif expérimental mis en place par l'équipe atomes froids du Laboratoire Collision Agrégat Réactivité de Toulouse, permet la réalisation de la diffusion de condensats de Bose-Einstein sur des potentiels périodiques, de taille finie, à une dimension (cf. Fig. 2.9.a). Cette expérience a permis de réaliser une diffraction de Bragg par diffusion d'ondes de matière [21], ainsi que la réalisation d'un filtre sélectif en vitesse [25]. Les travaux présentés ici s'inscrivent dans la continuité de ces expériences, dans l'objectif d'améliorer le contrôle dynamique de condensats par utilisation des propriétés du réseau optique, en temps et en espace.

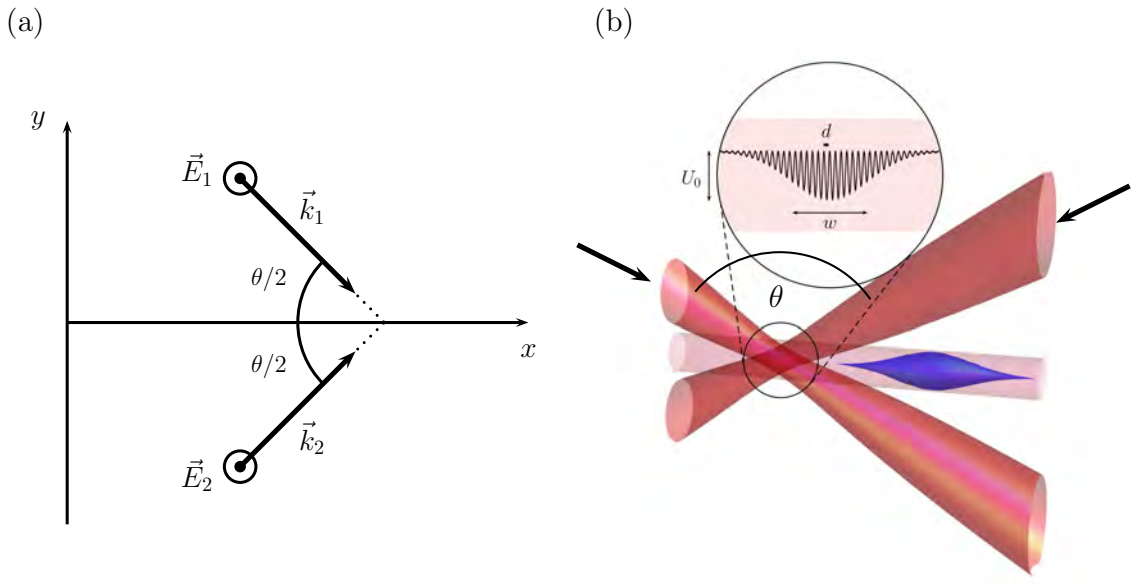


Figure 2.9

(a) Schéma du croisement de deux ondes planes progressives dans le plan. (b) Représentation schématique d'une onde de matière (bleu) se propageant le long d'un guide unidimensionnel sur un potentiel périodique 1D à enveloppe gaussienne créée par deux faisceux laser.

Le réseau optique est créé par l'intersection de deux faisceaux laser gaussiens cohérents entre eux, de longueur d'onde $\lambda = 852$ nm. Cette longueur d'onde est choisie de sorte à ce que la fréquence optique correspondante soit décalée vers le rouge, par rapport aux résonances des atomes composant le gaz. Il résulte de ce croisement une onde stationnaire créant un potentiel attractif pour les atomes. Afin de déterminer l'expression de ce potentiel, partons des expressions des champs électriques $\vec{E}_{1,2}$ créés par ces deux laser de moments $\vec{k}_{1,2}$, polarisés verticalement (cf. FIG. 2.9.b) :

$$\vec{E}_{1,2}(x,y) = E(0,0)\exp\left(i\vec{k}_{1,2}\cdot\vec{r} - \frac{R_{1,2}^2}{2\tilde{w}^2} - i\omega_{1,2}t\right)\vec{e}_z, \tag{2.45}$$

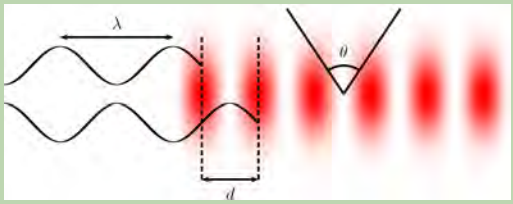
où $R_{1,2}$ est la distance radiale au centre du faisceau et $\tilde{w}$ est la largeur du faisceau gaussien. Afin d'extraire cette expression on a fait l'hypothèse que la longueur de Rayleigh est bien plus grande que la largeur des faisceaux, de sorte à ce que l'on puisse négliger les effets liés au profil gaussien sur la phase et sur l'amplitude. Il est possible de réécrire le terme de phase en prenant $\vec{k}_1 = k\cos(\theta/2)\vec{e}_x + k\sin(\theta/2)\vec{e}_y$ et $\vec{k}_2 = k\cos(\theta/2)\vec{e}_x - k\sin(\theta/2)\vec{e}_y$, avec $k = 2\pi/\lambda$ et en supposant que $\omega_1 = \omega_2$. Le champ électrique (Eq. 2.45) peut se réécrire :

$$\vec{E}_{1,2}(x,y) = E(0,0)\exp\left[ik(\pm\sin(\theta/2)x + \cos(\theta/2)y)\right]\exp\left(-\frac{2[\sin(\theta/2)y \pm \cos(\theta/2)x]^2}{\tilde{w}^2}\right)\vec{e}_z.$$

On peut montrer que le potentiel résultant de l'interaction dipôle/champ électrique est le long de l'axe x :

$$U(x) = \zeta\left\langle||E_1 + E_2||^2\right\rangle = \zeta E(0,0)^2\exp\left(-\frac{2x^2\cos^2(\theta/2)}{w^2}\right)[1 + \cos(2k\sin(\theta/2)x)], \tag{2.46}$$

où ζ est le *light shift* pour la longueur d'onde $\lambda = 852$ nm.



Loi de Bragg. Les conditions pour lesquelles deux ondes de matière monochromatiques interfèrent destructivement lors d'une diffusion sur un réseau optique, sont : $2k\sin(\theta/2) = \pi \pmod{\pi}$, soit : $x_n = 2\pi(1+2n)/(k\sin(\theta/2))$. La différence entre deux zéros s'écrit :

$$d = x_{n+1} - x_n = 2\pi/[k_{\mathrm{R}}\sin(\theta/2)],$$

qui définit le pas du réseau et $k_{\mathrm{R}} = 2\pi/d$, le vecteur d'onde de recul. Ici les rôles des atomes et de la lumière sont inversés par rapport à une expérience de diffusion de Bragg.

Le potentiel ressenti par les atomes est alors un réseau périodique de période d et de largeur $w = \tilde{w}/\cos^2(\theta/2)$ (cf. Fig. 2.10). Autrement dit, il est possible de définir expérimentalement, pour un angle de croisement θ, un couple de paramètres (d,w). Pour la suite de ce manuscrit (sauf cas indiqué), on prendra le paramètre expérimental qui est $\theta \approx 81°$.

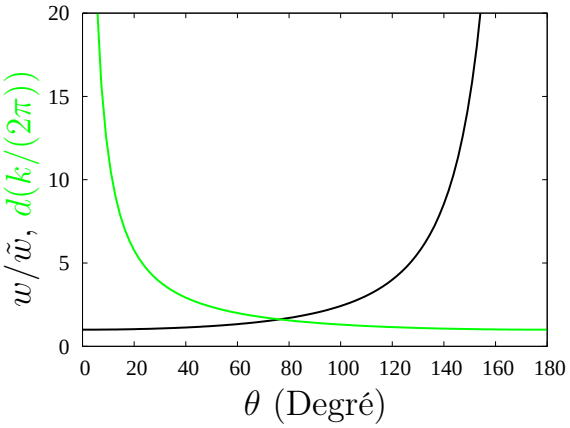


Figure 2.10

*Représentation graphique des deux paramètres expérimentaux liés à la géométrie du potentiel (*Eq. *2.46) en fonction de l'angle de croisement θ des deux faisceaux laser gaussiens.*

On résume, dans le tableau ci-dessous, les différents paramètres liés au réseau que l'on gardera constant par la suite :

Paramètres	Symbôles	Valeurs
Longueur d'onde du laser	$\lambda = 2\pi/k$	854 nm
Demi-angle entre les 2 faisceaux	θ	81°
Light-shift	ζ	-7.7×10^{-36} J.W^{-1}.m^{-2}
Période du réseau	d	650 nm
Waist	w	145 μm
Vecteur d'onde de recul	$k_{\mathrm{R}} = 2\pi/d$	9.7×10^{6} m^{-1}
Vitesse de recul	$v_{\mathrm{R}} = \hbar k_{\mathrm{R}}/m$	7.05 mm.s^{-1}
Énergie de recul	E_{R}	3.6×10^{-30} J ($\simeq 262\ k_B$.nK)

2.3.2 Potentiel à enveloppe gaussienne

Nous venons de montrer qu'il est possible de réaliser, expérimentalement, un potentiel optique périodique attractif de taille finie. L'objectif est maintenant de voir s'il est possible, dans les régimes de paramètre imposés par l'expérience, de réaliser une expérience de cavité pour onde de matière et si cette cavité peut être utilisée pour piéger des atomes de manière cohérente.

En reprenant les notations définies plus haut et l'expression (2.46), on écrit le potentiel à enveloppe gaussienne telle que :

$$U(x) = -U_0 \sin^2\left(\frac{\pi x}{d}\right) \exp\left(-\frac{2x^2}{w^2}\right). \tag{2.47}$$

On représente ce potentiel sur la figure 2.11.a. La profondeur du réseau peut s'écrire alors, à partir des paramètres liés au champ : $U_0 = \zeta E(0,0)^2/2 = \zeta I_0$, avec I_0 étant l'intensité des deux laser pris indépendamment. On choisira, par la suite, cette intensité de sorte à ce que la profondeur associée reste de l'ordre de grandeur de l'énergie de recul. De plus, comme on peut considérer (cf. plus haut) que $w \gg d$, on supposera que la profondeur varie lentement et est peu différente d'un site à un autre. Dans ces conditions, réalisons un premier test du modèle semi-classique et, en particulier, de la probabilité de transmission (Eq. 2.39).

Nous avons vu qu'il est possible d'extraire la probabilité de transmission à partir de la partie imaginaire de l'exposant de Mathieu. On peut donc calculer cette intégrale numériquement, le long du potentiel gaussien pour différentes vitesses $\sqrt{E/E_{\mathrm{R}}}$ et différentes profondeurs de potentiel U_0. Le résultat est présenté à la figure 2.11.b. L'effet principal de l'enveloppe gaussienne, comparativement à la transmission pour une enveloppe carrée (Fig. 2.6), est « de tronquer » les bandes. L'interprétation que l'on peut faire est que, lors de sa diffusion, une particule commence par explorer des régions à profondeur faible et ce, jusqu'à rencontrer une profondeur pour laquelle son énergie E soit dans un gap*. La probabilité de traverser ce gap n'étant pas nulle, on retrouve à énergie plus élevée une résurgence de la transmission. Ainsi, plus le potentiel est profond, plus l'on est susceptible, à une vitesse donnée, de rencontrer un grand nombre de gaps spatiaux.

Afin de vérifier (dans un premier temps qualitativement) si ce modèle semi-classique est pertinent, on propose de résoudre numériquement la propagation d'une onde plane au travers de ce potentiel. La figure 2.11.c présente la transmission ainsi obtenue. On observe que celle-ci est très similaire à celle obtenue dans le cas du calcul semi-classique. La différence principale réside dans les résonances apparaissant au sein de chaque bande en transmission. Nous avons vu précédemment que celles-ci provenaient d'un effet de taille, et leur nombre est ici d'approximativement $\mathcal{N}_{\mathrm{Gauss}} \approx 2w/d \approx 400$ qui est le nombre de sites de réseau à l'intérieur de l'enveloppe gaussienne. Ces résonances sont issues (à l'instar du potentiel à enveloppe carrée) d'un cumul de phases à l'intérieur du potentiel (cf. plus bas). Afin de pouvoir les quantifier, on propose d'étendre le modèle semi-classique.

∗. C'est-à-dire dans une zone pour laquelle l'exposant de Mathieu prend une valeur imaginaire.

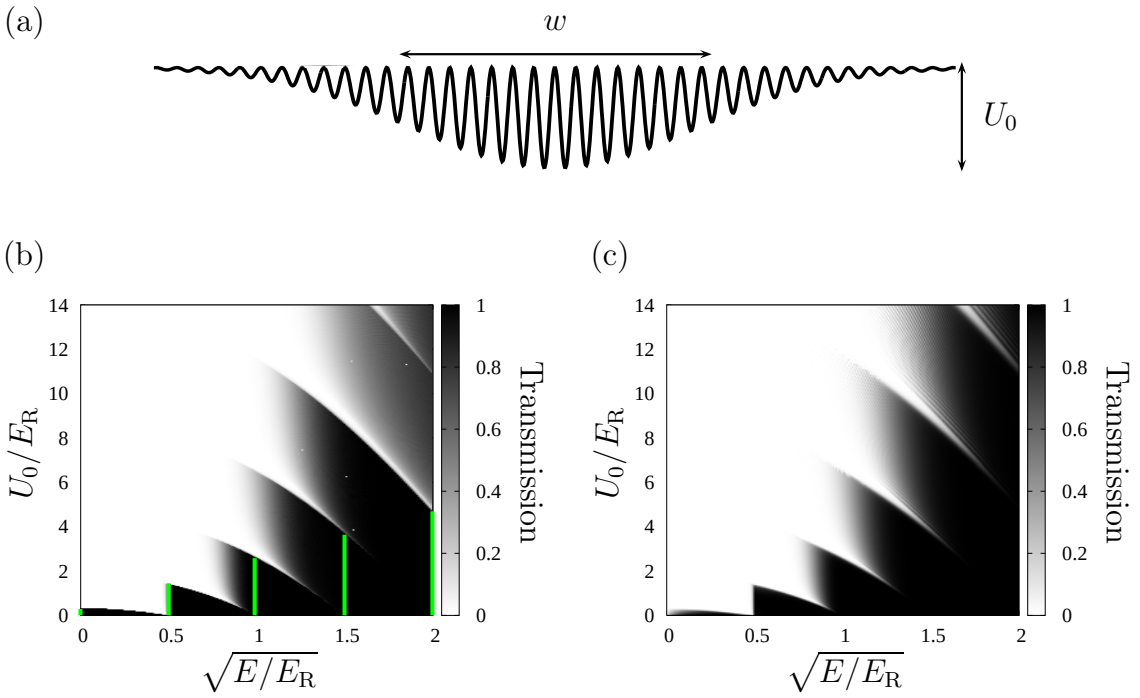


Figure 2.11

(a) Représentation graphique du potentiel à enveloppe gaussienne (2.47). Les droites vertes représentent les frontières pour lequelles la transmission revêt un caractère quantique à gauche de celles-ci (cf. texte). (b) Calcul de la transmission basée sur la formule semi-classique (2.39) et (c) obtenue à l'aide de la diffusion d'ondes planes progressives.

2.3.3 Construction de la cavité

La géométrie de l'enveloppe gaussienne produit un exposant de Mathieu dont la distribution est symétrique par rapport au centre du réseau. Par conséquent, on s'attend à ce que les gaps spatiaux soient, eux aussi, parfaitement symétriques. Il résultera d'une telle distribution l'équivalent d'une double barrière tunnel, pour certaines valeurs en énergie. Ce système présentant une disposition proche de celle d'une cavité Fabry-Perot en optique, on étudiera les effets de cohérence induisant l'apparition des résonances observées plus haut. Enfin, on discutera comment elles peuvent être modélisées, toujours à l'aide de l'approche semi-classique.

- **Exposant de Mathieu local**

Nous avons vu lors de l'étude de l'exposant de Mathieu (section 2.2.4) que les gaps pouvaient se projeter dans l'espace des positions créant localement une barrière tunnel. On utilise, ici, ce concept pour réaliser une distribution symétrique à l'aide d'un potentiel périodique à enveloppe gaussienne. Le calcul de la partie imaginaire de l'exposant de Mathieu peut se représenter en fonction de la position x et de l'énergie E d'une particule de vitesse $\sqrt{E/E_\mathrm{R}}$. Cette distribution (Fig. 2.12) reflète le caractère gaussien de l'enveloppe, ce qui se traduit par une disparition rapide de cette partie imaginaire aux bords du réseau. Pour cette gamme d'énergies et de paramètres, la distribution présente différentes topologies selon l'énergie :

- Lorsque $E \gg E_\mathrm{R}$ l'effet des gaps est négligeable.
- Pour $E/E_\mathrm{R} \in [0.25, 0.8]$ la distribution des gaps spatiaux produit deux barrières symétriques.

- Pour $E/E_\mathrm{R} \in [0, 0.25]$ c'est une distribution de trois barrières dont une centrale plus grande.
- Pour $E < 0$, les états sont stationnaires et les barrières sont, par définition, infranchissables. On peut, néanmoins, définir l'équivalent de trois puits infinis dont un central est plus large.

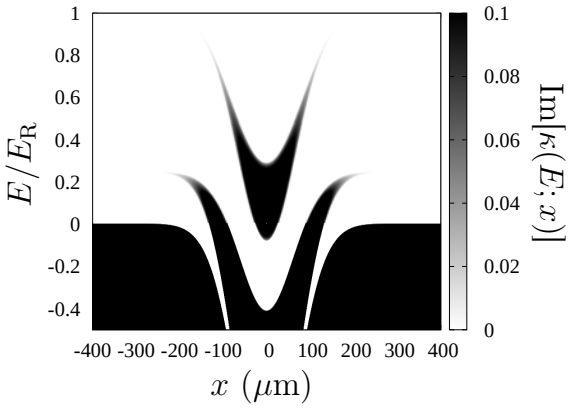


Figure 2.12

*Partie imaginaire de l'exposant de Mathieu en fonction de l'énergie de la particule E et de la position x pour un potentiel (*Eq. *2.47) de largeur $w = 140$ μm et de profondeur $U_0 = 2E_\mathrm{R}$.*

Il est possible d' « ajouter », pour une énergie fixée, d'autres barrières en augmentant la profondeur de potentiel. Ainsi, il est toujours possible de trouver une gamme d'énergies et de profondeurs pour laquelle on a un nombre de barrières donné (supérieur à 2).

- **Analogue d'une cavité Fabry-Perot**

Considérons maintenant une gamme d'énergies pour laquelle la distribution de l'exposant de Mathieu définit une double barrière formant une cavité. Le calcul de transmission proposé ici est réalisé en analogie avec celui de l'optique. Il se calcule par un cumul de phases à l'intérieur de la cavité. Considérons $\mathcal{A}$ l'amplitude complexe de l'onde plane à la sortie du potentiel. On peut l'écrire en sommant tous les chemins possibles formés par les réflexions multiples à l'intérieur de la cavité (Fig. 2.13.a) :

$$\mathcal{A} = t^2 e^{i\delta\varphi_1} + t^2 r^2 e^{i\delta\varphi_2} + t^2 r^4 e^{i\delta\varphi_3} + \ldots \tag{2.48}$$

avec $\delta\varphi_1 = 2\varphi_t + \varphi$, $\delta\varphi_2 = 2\varphi_t + 3\varphi + 2\varphi_r \ldots$ On désigne ici t et r respectivement les amplitudes (réelles) en transmission et en réflexion dont les phases associées sont φ_t et φ_r. La transmission totale de cette cavité Fabry-Perot peut donc être directement obtenue en prenant le module carré de l'amplitude $\mathcal{A}$ et on trouve :

$$\begin{aligned} T_\mathrm{FP}(E) = |\mathcal{A}|^2 &= \left| t^2 e^{2i\varphi_t} e^{i\varphi(E)} \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} r^{2n} \mathrm{e}^{2in(\varphi(E)+\varphi_r)} \right) \right|^2 \\ &= \left[1 + 4 \left(\frac{1}{T^2(E)} - \frac{1}{T(E)} \right) \sin^2(\varphi(E) + \varphi_r) \right]^{-1} . \end{aligned} \tag{2.49}$$

On remarque que cette probabilité de transmission dépend uniquement * du coefficient en transmission au travers d'un gap spatial $T(E) = t^2$ défini plus haut (Eq. 2.39) et d'une phase cumulée à l'intérieur de la cavité. La phase semi-classique définie le long d'un demi chemin fermé dont on prend un aller simple, entre les deux barrières s'écrit :

$$\varphi(E) = \frac{1}{2} \oint k \, \mathrm{d}x = \int_{-x_1}^{x_1} \mathrm{Re}[\kappa(x;E)] \, \mathrm{d}x. \tag{2.50}$$

∗. Comme attendu, la phase φ_t en transmission n'apparaît pas une fois le module carré effectué.

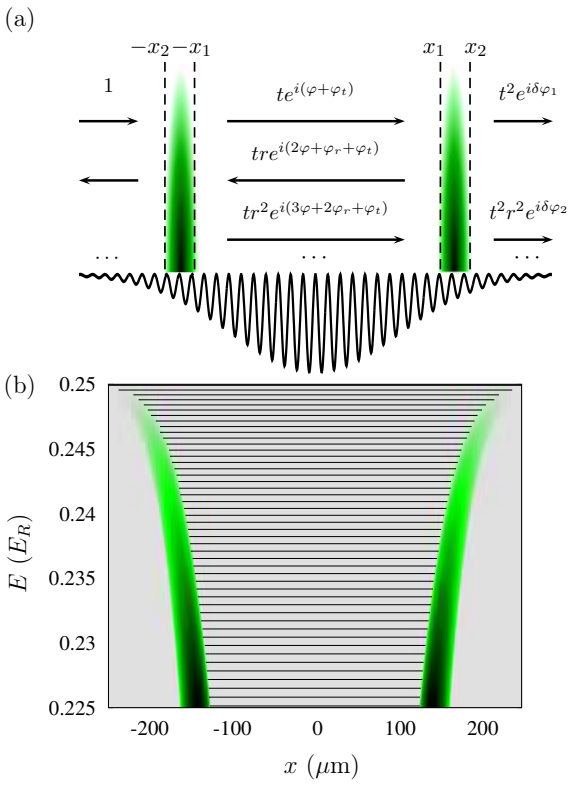


Figure 2.13

(a) Représentation d'une cavité composée de deux gaps spatiaux (se situant dans les intervalles $x \in [-x_2, x_1]$ et $x \in [x_1, x_2]$ pour une onde plane incidente d'énergie E, issue d'un réseau optique ayant une enveloppe gaussienne. (b) Partie imaginaire de l'exposant local de Mathieu (densité verte) pour un potentiel de profondeur $U_0 = 0.5E_{\mathrm{R}}$, en fonction de la position et de l'énergie. Les lignes noires représentent la position en énergie des résonances obtenues à partir du modèle semi-classique.

Néanmoins, cette phase doit être corrigée par une phase acquise lors de la réflexion φ_r qui ne se simplifie pas avec le module carré.

On utilise la méthode de Hill afin de calculer l'exposant de Mathieu en fonction de l'espace et de l'énergie dont on représente la partie imaginaire à la figure 2.13.b. Le calcul semi-classique nous permet d'extraire une distribution de résonances que l'on représente directement sur le diagramme. La forme de l'enveloppe combinée à la variation de l'exposant induit une répartition non périodique en énergie de ces résonances. La distribution se densifie à haute énergie, lorsque les gaps spatiaux s'éloignent, tout en diminuant en amplitude.

La figure 2.14 fait une comparaison entre la transmission calculée à l'aide de la formule (2.49) et celle obtenue à l'aide de la résolution directe de l'équation de Schrödinger, $T_{\mathrm{OP}}(E)$ (Onde Plane). On observe une bonne correspondance entre ces résultats, ce qui valide l'approche semi-classique. Pour obtenir un tel accord nous avons posé une phase de $\pi/4$ (analogue à l'indice de Maslov). On représente dans le sous-graphique de la figure 2.14 la correction en énergie que l'on doit effectuer pour avoir un accord parfait et on note que celle-ci est de l'ordre de 1% (0.03 rad par pic).

Afin de réaliser une comparaison directe entre la phase acquise en transmission durant le passage

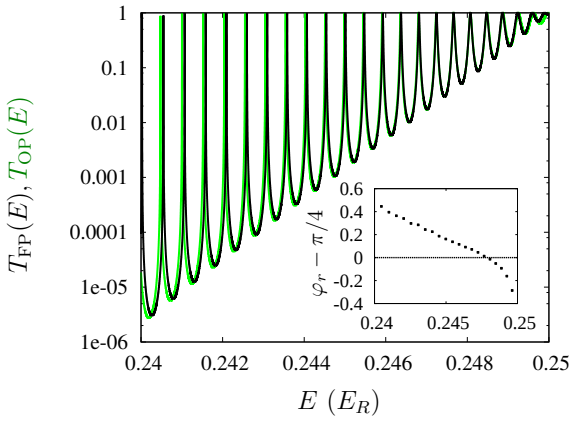


Figure 2.14

*Transmission exacte $T_{\mathrm{OP}}(E)$ obtenue par intégration directe de l'équation Schrödinger pour une onde plane d'énergie E (ligne verte) comparée à la transmission $T_{\mathrm{FP}}(E)$ provenant de l'approche semi-classique (*Eq. *2.49) (ligne noire) en ayant pris une phase globale $\varphi_r = \pi/4$. (Inset) Différence de phase entre le calcul exact et le modèle semi-classique.*

dans la cavité, on procède en plusieurs étapes :

- On identifie chaque pic issu de la transmission obtenue à l'aide de la simulation de l'équation de Schrödinger.
- On assigne une valeur de π supplémentaire à chaque pic.

Les figures 2.15.a et b comparent la phase cumulée correspondant à celle obtenue par les relations semi-classiques, utilisant l'exposant de Mathieu κ calculé par la méthode de Hill. La distribution des résonances dépend fortement de la géométrie de la cavité, mais peu de la profondeur du potentiel. Plus la largeur est petite plus les résonances sont espacées. On trouve un excellent accord entre ces phases pour différents régimes de paramètres, et même lorsque la largeur du potentiel est très petite ($w \to w/32$). Ceci vient valider l'approximation d'enveloppe lentement variable dans un régime pour lequel le potentiel ne contient que 6 périodes de réseau ! Dans ce cas de figure, on observe que la cavité ainsi définie ne contient plus que 3 résonances.

Contrairement à une cavité Fabry-Perot optique, la cavité basée sur deux gaps spatiaux a une finesse qui dépend fortement de l'énergie :

$$\mathcal{F}(E) = \frac{\Delta_E}{\sigma_E} = \frac{\pi}{2}\left[\arcsin\left(\frac{1}{2\sqrt{1/T^2(E) - 1/T(E)}}\right)\right]^{-1}, \tag{2.51}$$

où Δ_E est la différence d'énergie entre deux pics consécutifs et σ_E est la largeur du pic apparaissant à l'énergie E. On représente à la figure 2.16 cette finesse calculée à partir du modèle semi-classique comparée au calcul *ab initio*. L'inverse de celle-ci, que l'on nomme le facteur de qualité, augmente (quasi)exponentiellement avec l'énergie. On peut évaluer quantitativement l'écart entre le modèle et le calcul exacte à l'aide de l'erreur relative $\Delta\mathcal{F}$ entre ces deux quantités. L'inset de la figure 2.16 montre que celle-ci reste inférieure à 2% dans cette gamme d'énergie, et tend à augmenter légèrement lorsque E diminue [*].

L'expression semi-classique pour la transmission (2.49) permet d'évaluer simplement le temps de décroissance, τ, d'un paquet d'onde piégé dans la cavité à une énergie moyenne correspondant à une

∗. Dans cette gamme d'énergies les résonances deviennent extrêmement fines, et l'évaluation numérique de la largeur devient beaucoup plus difficile. Ainsi $\Delta\mathcal{F}$ est l'erreur numérique dans ces régimes d'énergie.

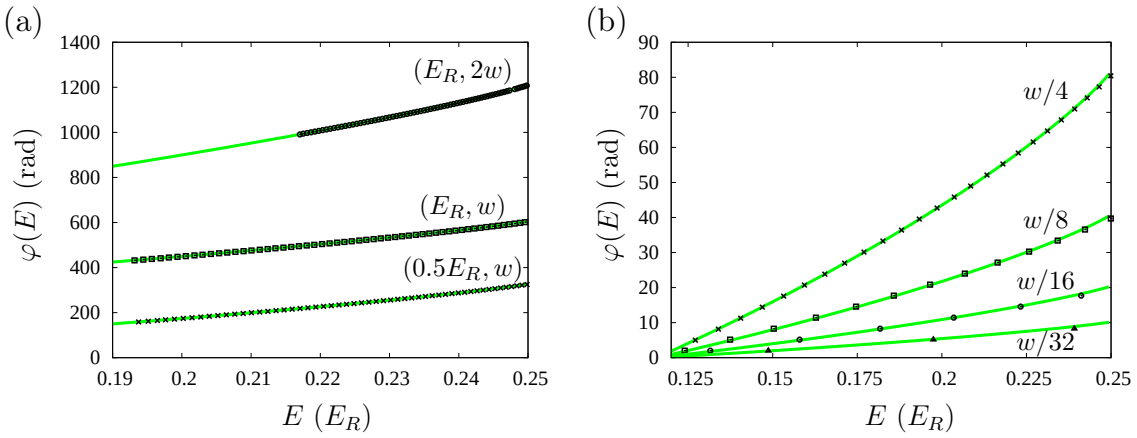


Figure 2.15

*Comparaison entre la phase calculée à l'aide du modèle semi-classique et de la méthode de Hill et celle obtenue par l'indentification des pics de la transmission exacte $T_{\mathrm{OP}}(E)$, pour (a) différentes profondeurs de potentiel (*Eq. *2.47), et (b) différentes largeurs w.*

résonance*. En effet, le développement du terme de phase autour de la résonance ($\varphi(E) \simeq \pi$) peut s'écrire :

$$\sin(\varphi(E) + \delta\varphi(E)) \approx -\frac{\partial\varphi}{\partial E}\delta E = \frac{\tau\delta E}{\hbar},$$

avec τ le temps semi-classique correspondant au temps nécessaire au paquet d'onde pour faire un aller-retour dans la cavité qui, pour une énergie E, est :

$$\tau = 2\hbar \int_{-x_1}^{x_1} \frac{\partial \mathrm{Re}[\kappa(z;E)]}{\partial E}\,\mathrm{d}x = -2\int_{-x_1}^{x_1} \frac{\mathrm{d}z}{v(z;E)},$$

où l'on utilise ici la vitesse semi-classique $v(z;E)$ discutée plus haut (sous-section 2.2.4). Le développement de la transmission devient alors :

$$T_{\mathrm{FP}}(E) \simeq \left[1 + \frac{4}{1-T(E)}\frac{\tau^2}{\hbar^2}(\delta E)^2\right]^{-1}, \tag{2.52}$$

d'où l'on en déduit le temps de décroissance τ_{dc} de l'état résonant (en prenant autour de celle-ci $T_{\mathrm{FP}}(E) \simeq 1$) :

$$\tau_{dc} \simeq \frac{\hbar}{2\delta E}\sqrt{1-T(E)}. \tag{2.53}$$

Ce temps est d'autant plus petit que la transmission est grande, comme attendu. De manière plus générale, la taille de la cavité donne une échelle d'énergie reliée à la différence d'énergie entre deux pics successifs Δ_E. La finesse d'une résonance donnée a une largeur en énergie de $\hbar/\tau_{dc}$. La possibilité de modifier la géométrie de ces cavités optiques offre la possibilité de créer une cavité dont les résonances ont une largeur et un espacement (donc une finesse) contrôlables.

2.4 Réalisation expérimentale

Nous venons de démontrer numériquement qu'il est possible de créer une cavité de Bragg pour ondes de matière, en utilisant un réseau optique attractif à enveloppe gaussienne. Nous avons vu précédemment qu'il est nécessaire, pour réaliser une expérience de cavité, de disposer d'un gaz quantique dont

∗. En supposant que la largeur en énergie du paquet d'onde soit suffisamment petite pour que celui-ci soit sur une unique résonance.

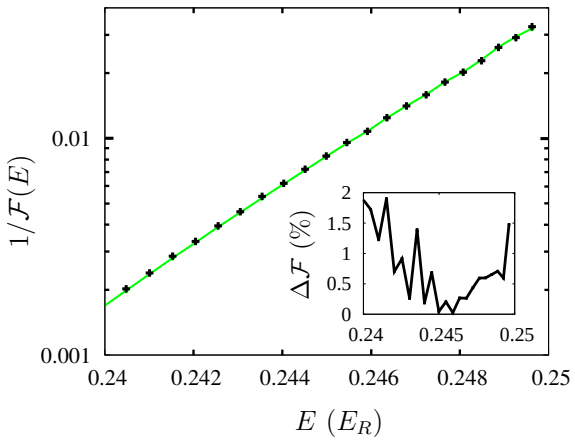


Figure 2.16

*Comparaison entre l'inverse de la finesse obtenue à partir du calcul en transmission d'ondes planes au travers du potentiel (*Eq. *2.47) et la formule (*Eq. *2.51) obtenue par la transmission semi-classique (*Eq. *2.39). Inset : erreur relative entre ces deux finesses.*

la dispersion en vitesse est faible (relativement à l'écart entre mode) et dont la dispersion en position est bien inférieure à la taille de la cavité. Ainsi, pour réaliser une telle expérience, un condensat de Bose-Einstein de rubidium 87 relâché adiabatiquement de son piège harmonique au centre du réseau gaussien semble idéal. Dans ce cadre, l'utilisation d'une technique de refroidissement appelé δ-kicked cooling pourrait permettre d'atteindre des régimes pour lesquels la dispersion en vitesse est de l'ordre du pico-Kelvin [2].

On considérera par la suite que, du fait de la dilution importante du gaz, les effets liés aux interactions seront négligeables. Une simulation de l'équation de Schrödinger pour un paquet d'onde gaussienne permettra de faire une comparaison directe avec les résultats expérimentaux. On précisera une méthode permettant de contrôler la dispersion en position, en optimisant la forme de l'enveloppe. Enfin, on discutera l'utilisation de gaps spatiaux pour la simulation de modèles de matière condensée.

2.4.1 Chargement adiabatique

La première étape d'une expérience de cavité consiste à éteindre le potentiel harmonique dont est issu le condensat de Bose-Einstein, tout en allumant le réseau. L'objectif étant d'éviter, durant cette étape, que des états d'énergie plus élevés ne soient peuplés. En effet, comme le hamiltonien dépend du temps, le système n'est plus conservatif et il est possible que le réseau transmette de l'énergie aux atomes. Il est donc nécessaire de réaliser une étude préalable, de sorte à certifier que les conditions expérimentales d'adiabaticité sont bien satisfaites.

Considérons un profil d'allumage décrit par une fonction $f(t)$ qui a la propriété d'être nulle à $t = 0$ et de valeur 1 à $t = \tau$. Le choix le plus simple est de prendre une fonction linéaire telle que :

$$f(t) = \begin{cases} t/\tau \text{ si } 0 \leq t \leq \tau \\ 1 \text{ si } t \geq \tau \end{cases} . \tag{2.54}$$

Ce type d'allumage a été testé la première fois expérimentalement par le groupe de Phillips [50]. Leur protocole consiste à charger un condensat de Bose-Einstein de sodium, dans l'état $|n = 0, k = 0\rangle$ d'un réseau infini de profondeur 14 E_{R}. L'allumage est suivi d'une fermeture linéaire symétrique, et

ils comparent la population initiale à la population finale. Cette mesure permet d'extraire un temps à partir duquel la population reste inchangée durant le processus. Inspiré par ces travaux on propose, ici, d'étendre cette étude à des populations initialement dans des états pour lesquels $k \neq 0$. En effet, le cas $k = 0$ est celui pour lequel le critère d'adiabaticité est le moins drastique dans le sens où l'écart énergétique entre deux niveaux est le plus élevé. À l'inverse, lorsque $k = k_{\mathrm{R}}/2$, on s'attend à ce qu'il y ait une diffraction de Bragg en bord de zone de Brillouin, amenant à une superposition d'états. On étudie, ici, un cas proche des conditions expérimentales pour lesquelles le paquet d'onde a une largeur en vitesse (pseudo-moment) non négligeable relativement à celle de la zone de Brillouin. Dans ce cas, il est nécessaire de garantir l'adiabaticité pour une large gamme de vitesses.

À partir de la formule (2.35), on peut écrire que :

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} \ll \frac{\Delta E^2}{E_{\mathrm{R}}\hbar}. \tag{2.55}$$

En d'autres termes, seule la différence d'énergie entre les états n et n' compte. Le calcul perturbatif (2.10) permet d'exprimer cette inégalité en fonction du pseudo-moment k :

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} \ll \frac{4E_{\mathrm{R}}}{\hbar}\left[\left(\frac{k}{k_{\mathrm{R}}} - \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{(U_0 f)^2}{16E_{\mathrm{R}}^2}\right], \tag{2.56}$$

dans la limite où $U_0 \ll E_{\mathrm{R}}$. Cette inégalité peut être résolue de manière générale en prenant comme condition initiale $f(0) = 0$. On obtient un comportement pour la fonction $f(t)$ telle que :

$$f(t) \ll \frac{4}{q}\left(\frac{k}{k_{\mathrm{R}}} - \frac{1}{2}\right)\tan\left[\frac{E_{\mathrm{R}}q}{\hbar}\left(\frac{k}{k_{\mathrm{R}}} - \frac{1}{2}\right)t\right].$$

L'impossibilité de remplir les conditions d'adiabaticité en bord de bande se traduit ici par le fait que la fonction doit être inférieure à zéro, quelles que soient les valeurs de t et de q. Pour k de l'ordre de grandeur de k_{R}, et $E_{\mathrm{R}}/\hbar \simeq 2\pi \cdot 5.4$ kHz, l'ordre de grandeur de τ pour que le processus soit adiabatique est inférieur à la milliseconde.

- **Étude numérique**

Nous allons maintenant réaliser une étude numérique dont le protocole est celui suivi par [50] de manière à vérifier si l'ordre de grandeur obtenu plus haut est valide. Considérons un paquet d'onde gaussien de largeur $\Delta v \ll v_{\mathrm{R}}$ chargé dans un potentiel périodique infini. On procède à un allumage linéaire du réseau en un temps τ immédiatement suivi d'une fermeture elle aussi en un temps τ. La vitesse moyenne $\bar{v}$ du paquet d'onde est ici un paramètre et la profondeur maximale $q = 1$ est fixée. On mesure la population dans l'état initial après la fermeture, c'est-à-dire au temps $t = 2\tau$ (cf. Fig. 2.17.a). Expérimentalement, la méthode employée consiste à faire une expansion libre du paquet d'onde (temps de vol) qui, à temps long, permet de mesurer la distribution en vitesse. Numériquement, on calcule simplement la transformée de Fourier de la fonction d'onde dont le module carré permet de mesurer la densité de population. La comparaison de cette population finale à celle du paquet d'onde initial en fonction du temps de montée est représentée à la figure 2.17.b, pour différentes vitesses moyennes du paquet d'onde.

La première observation que l'on peut faire est que la population tend vers 1 lorsque τ tend vers 0 et ce, quelle que soit la vitesse de groupe. Il existe un temps de latence pour que la population puisse être transférée d'un état à un autre. Lorsque τ augmente, la population diminue rapidement, avec une pente indépendante de la vitesse avant d'atteindre un minimum local. Ce minimum apparaît pour un τ qui est d'autant plus grand que la vitesse est petite. Dans le cas où la vitesse est très proche du bord de zone (courbe rouge pour $E = 0.26E_{\mathrm{R}}$), la différence d'énergie ΔE est très petite. La population oscille périodiquement en fonction de τ avec une large amplitude. Pour des vitesses plus grandes (de centre de bande), ces oscillations augmentent en fréquence et présentent un amortissement plus prononcé qui

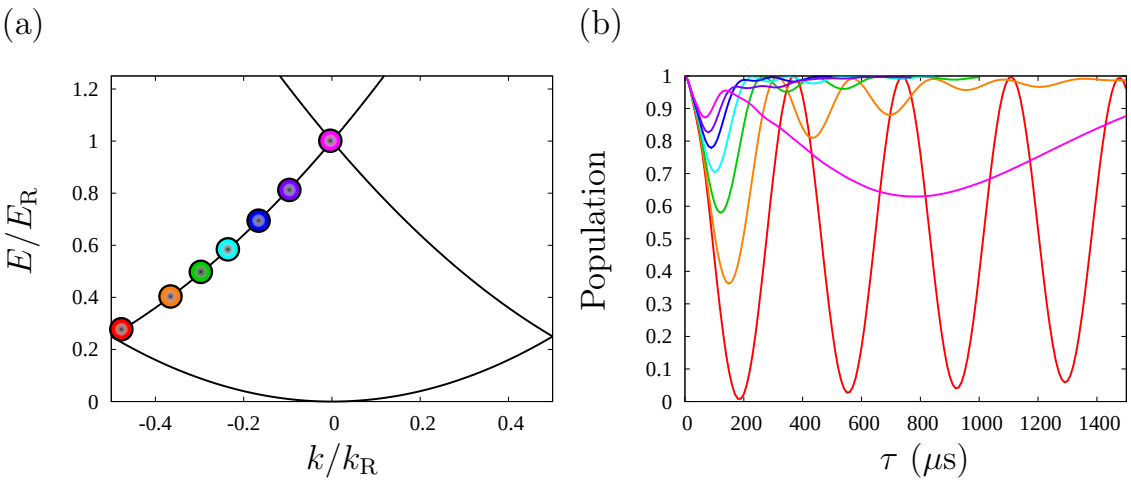


Figure 2.17

(a) Diagramme de bande à profondeur nulle. (b) Population dans l'état initial en fonction du temps d'allumage τ pour différentes valeurs de la vitesse de groupe $\bar{v}$ (représentées à la figure (a)). Le code couleur est choisi de manière à faciliter l'identification des différentes classes de vitesse étudiées ici (cf. texte).

permet d'extraire un temps pour lequel on peut considérer le processus comme adiabatique. Par exemple pour des particules ayant une énergie dans le réseau de $E = 0.8E_R$, ce temps est d'environ 200 μs (courbe bleu foncée). Enfin, lorsque l'énergie est très proche de l'énergie de recul on retrouve de larges oscillations (courbe rose foncée). Dans les cas limites de bord et de centre de la zone de Brillouin, il n'existe pas de τ à partir duquel on peut considérer que l'adiabaticité est garantie. De fait, le paquet d'onde est en superposition d'états et le processus de séparation et de recombinaison crée l'équivalent d'un interféromètre en temps pour les atomes. En effet, du fait des transitions Landau-Zener la population se répartit sur (au moins) deux niveaux dont l'évolution temporelle est différente. La phase accumulée durant le processus est différente selon le chemin. Ce schéma se rapproche de celui d'un interféromètre de Landau-Zener-Stückelberg multi-passages [51].

Par la suite, on considérera un paquet d'onde dont la dispersion en vitesse fait que la population se distribuera sur plusieurs bandes. L'approximation adiabatique ne pourra pas être satisfaite pour toutes les classes d'énergie notamment près des gaps. Néanmoins, pour une distribution dont l'énergie moyenne est au centre d'une bande, on pourra considérer qu'un temps de montée de $\tau = 1$ ms est suffisant pour considérer le chargement dans le réseau comme adiabatique.

2.4.2 Propagation d'un nuage d'atomes

L'expérience réalisée par l'équipe atomes froids du laboratoire LCAR, consiste à produire un condensat de Bose-Einstein de $N = 3 \times 10^4$ atomes et de dispersion en vitesse $\Delta v = 1.9$ mm/s. Ce nuage d'atomes est accéléré à une vitesse moyenne $\bar{v} = 9.4$mm/s au moyen d'une impulsion magnétique. Puis, il est chargé en un temps $\tau_{ramp} = 1$ms au centre du réseau (2.47) d'une profondeur $U_0 = 2.5E_R$. Pour cette distribution de vitesse, le paquet d'onde, après chargement, est majoritairement sur la troisième bande et la quatrième bande. Si l'on transpose cette densité dans l'espace des positions, du fait de sa largeur en vitesse, le paquet est initialement dans deux cavités de géométries différentes (cf. Fig. 2.18.a). Ainsi, on s'attend à ce que, durant la propagation, celui-ci donne lieu à deux paquets en transmission, que l'on note α et β (cf. Fig. 2.18.a). La transmission de ces paquets peut se calculer en utilisant la formule calculée plus haut (Eq. 2.49) pour un seul aller, et en prenant une onde initialement au centre

du réseau, l'amplitude de transmission est simplement égale à la transmission au travers d'un seul gap spatial $T(E)$. Après une oscillation, cette transmission est réduite d'un facteur lié à la réflexion tel que : $T_2(E) = T(E)(1 - T(E))$. La figure 2.18.b représente ces amplitudes de transmission en fonction de la vitesse. On constate qu'après une seule oscillation, l'amplitude a fortement diminué, spécialement à haute énergie pour chaque cavité. Ceci provient simplement du fait que, la transmission étant plus élevée pour ces énergie seules les parties à basse énergie sont réfléchies. Il est donc possible d'identifier deux paquets d'onde : α et β, comme les produits d'une première réflexion sur un gap spatial, suivi d'une transmission au travers d'un autre gap spatial (symétrique du premier), et d'une propagation libre à l'extérieur du réseau optique

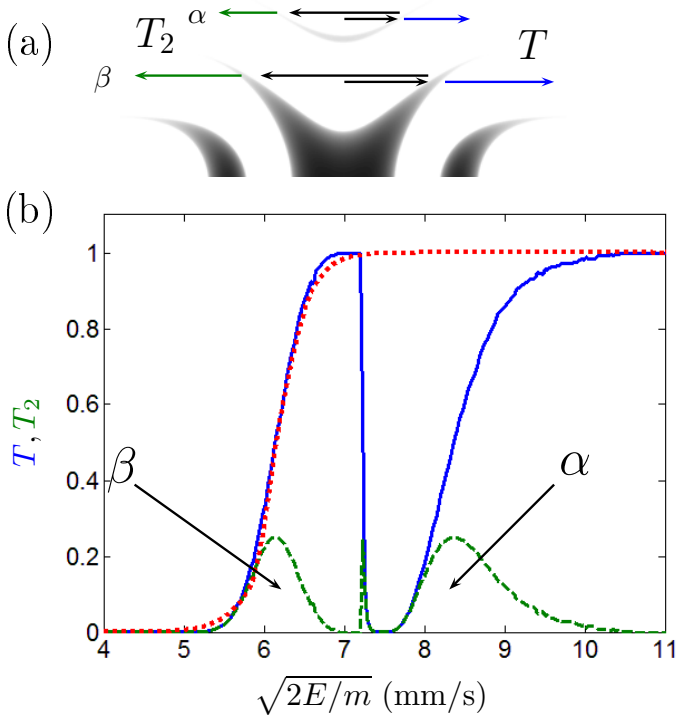


Figure 2.18

*(a) Partie imaginaire de l'exposant de Mathieu en fonction de la position et de la vitesse pour le potentiel (*Eq. *2.47). Les flèches représentent schématiquement les deux classes de vitesse mises en jeu dans les paquets d'onde α et β.(b) Probabilité de transmission au travers d'un unique gap spatial $T(E)$ (courbe bleue) et après un aller-retour dans la cavité $T_2(E)$ (courbe verte) en fonction de la vitesse.La courbe en pointillés rouges représente le calcul de la transmission tunnel au travers d'une barrière gaussienne de largeur 387 nm. Cette barrière tunnel est l'équivalent du gap spatial (de largeur $\simeq 10$ μm) créant le paquet d'onde β.*

On effectue la propagation d'un paquet d'onde ayant les mêmes caractéristiques que le condensat décrit plus haut, à l'aide d'un schéma de résolution de l'équation de Schrödinger (cf. Annexe A) que l'on compare aux données expérimentales. Les figures 2.19.a et b représentent la densité selon l'axe longitudinal au cours du temps. Le paquet d'onde va de droite à gauche sous l'effet de l'impulsion magnétique. On observe, sur les deux graphiques, qu'une grande partie des atomes est transmise sans jamais rencontrer de barrière tunnel. La densité obtenue montre que cette partie transmise est composée, en réalité, de deux paquets de vitesses moyennes différentes. Ces atomes sont ceux ayant une vitesse comprise entre 6.7 et 7.2 mm/s et supérieure à 9 mm/s (cf. Fig. 2.18.a et b).

En parallèle, on observe qu'une partie des atomes reste piégée à l'intérieur des cavités, ce qui se traduit par des oscillations de la densité. Les périodes d'oscillation peuvent être calculées à partir de la vitesse semi-classique intégrée sur le chemin parcouru :

$$T_{osc}(E) = 2\hbar x_1(E) \left(\frac{\partial E_n}{\partial k}\bigg|_E \right)^{-1}.$$

On peut estimer la période d'oscillation moyenne à 50 ms. À noter que l'amplitude d'oscillation x_1 dépend de l'énergie. Les atomes ayant une vitesse plus élevée parcourent une distance plus grande, ce qui provoque l'apparition de caustiques au bord des cavités. On verra, par la suite, qu'il est possible d'optimiser la forme du potentiel pour que la période d'oscillation ne dépende plus de l'énergie.

Du fait que ces cavités ont un certain taux de fuite on observe, à chaque rebond sur les parois, qu'une partie de la densité s'échappe par effet tunnel. Ces paquets d'onde peuvent être identifiés par leur vitesse (autant que par le temps auquel il s'échappe), aux paquets d'onde α et β identifiés sur le diagramme (Fig. 2.18.a). Il est possible d'évaluer par interpolation leur vitesse moyenne : $\bar{v}_\alpha = 7.9$ mm/s et $\bar{v}_\beta = 5.9$ mm/s.

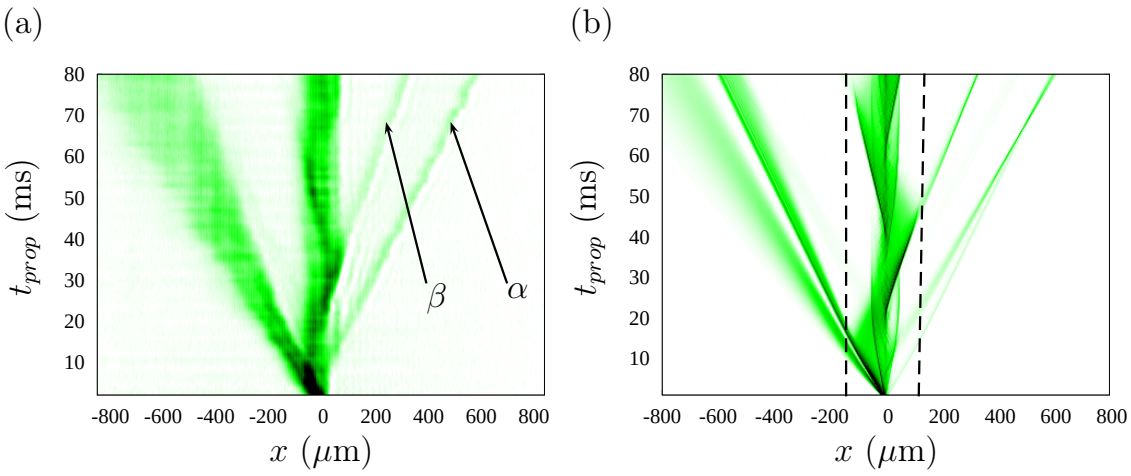


Figure 2.19

(a) Distribution en densité d'atomes obtenue expérimentalement pour différents temps de propagation (unités arbitraires) dans le potentiel (Eq. 2.47) de profondeur $U_0 = 2.5E_R$. Chaque ligne horizontale résulte de la moyenne de 4 images de la densité optique intégrée transversalement. (b) Densité obtenue par intégration de l'équation de Schrödinger pour un paquet d'onde ayant les mêmes caractéristiques que celui du condensat utilisé lors de l'expérience. Les lignes tiretées verticales représentent les limites des trois zones permettant de faire une comparaison quantitative de la probabilité de présence. Les résolutions numériques spatiales et temporelles ont été choisies de sorte à être identiques à celles de l'expérience.

Une comparaison quantitative peut être effectuée en considérant la densité d'atomes totale dans trois zones de l'espace définies par rapport à la largeur w du réseau (Fig. 2.19.a et b). Cette proportion de densité au cours du temps, à droite du réseau optique (dans la zone où $x > w$), est représentée à la figure 2.20.a. On constate un très bon accord entre les données numériques et expérimentales malgré l'absence de paramètres ajustables. La densité dans la zone de droite montre clairement l'apparition des deux paquets d'onde α et β et permet de mesurer à la fois leurs nombre d'atomes, respectivement 3.2% et 3.0% du nombre d'atomes total (soit un peu moins d'un millier d'atomes), et les temps pour lesquels ils s'échappent du potentiel, respectivement $t_{prop} \simeq 25$ ms et $t_{prop} \simeq 50$ ms (Fig. 2.20.a).

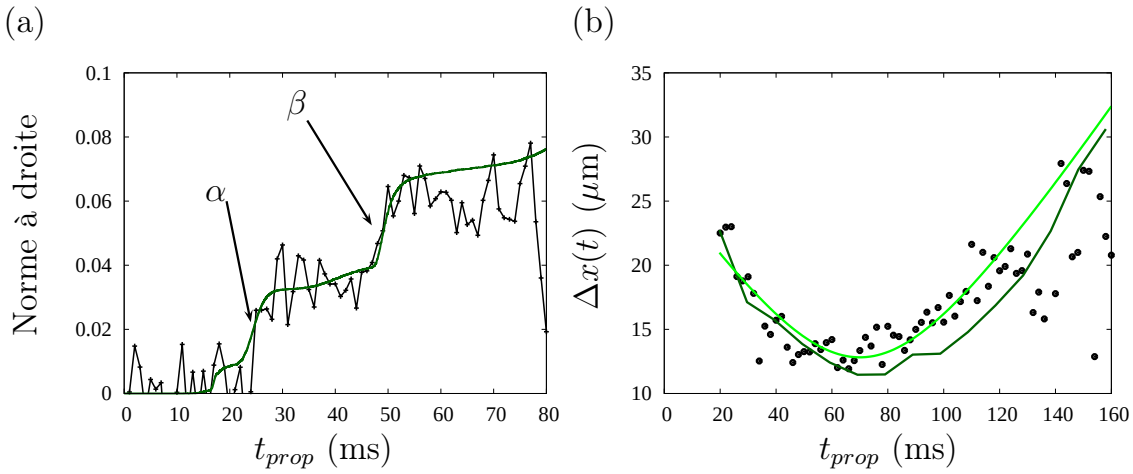


Figure 2.20

(a) Densité d'atomes totale, obtenue expérimentalement, dans la zone à droite du potentiel gaussien en fonction du temps (points noirs) comparée à la densité obtenue à partir de l'intégration de l'équation de Schrödinger (ligne continue verte). (b) Dispersion en position du paquet d'onde α calculée à partir d'un fit gaussien. Les données expérimentales (points noirs) sont mises en regard avec celles obtenues par la simulation (ligne vert foncé). Une intrapolation de la dispersion théorique (ligne vert clair) est superposée numériquement à ces résultats.

Une observation attentive des données numériques montre que ces paquets se refocalisent durant leur propagation. Cet effet n'étant pas visible clairement sur les données expérimentales, une deuxième expérience à été réalisée afin de vérifier ce phénomène avec, cette fois-ci, un paquet d'onde de vitesse moyenne $\bar{v} = 8.2$ mm.s^{-1}, de dispersion $\Delta v = 1.9$ mm.s^{-1} (les autres paramètres expérimentaux restant inchangés). Les conditions initiales étant très proches de la première expérience, on observe les mêmes oscillations et deux paquets d'onde α' et β' quittant le réseau après un rebond. La résolution spatiale étant cette fois-ci suffisamment petite, nous pouvons extraire, à partir des densités d'atomes du paquet d'onde α', une largeur $\Delta x(t)$ à partir d'un fit gaussien. Dans ces conditions, l'effet est clairement visible et on observe numériquement et expérimentalement (Fig. 2.20.b) un minimum de la largeur du paquet d'onde α pour $t_{prop} \approx 75$ ms. Étant donné la qualité des résultats obtenus nous sommes en mesure d'extraire, par interpolation, le minimum de dispersion en position de ce paquet d'onde. Pour ce faire, on fait ici l'hypothèse qu'à $t_{prop} > 25$ ms l'effet du potentiel est négligeable et que les interaction ne jouent pas de rôle. Dans ce cas, on peut associer à ces paquets d'onde une forme gaussienne, dont la dispersion en position au cours du temps s'écrit :

$$\Delta x(t) = \sqrt{\Delta x^2(0) + \Delta v^2(0)(t - t_0)^2}.$$

L'interpolation (courbe vert clair de la figure 2.20.b) donne les valeurs $\Delta x(t_0) \simeq 13$ μm ($\pm 3\%$) et $\Delta v(t_0) \simeq 330$ μm/s($\pm 4\%$), pour $t_0 \approx 70$ ms. Cette sélectivité en vitesse est très grande et peut être comparée à celle que l'on a lors d'une diffusion de Bragg ou d'une transition Raman sélective en vitesse [52]. On peut calculer à l'aide de la dispersion en vitesse à $\Delta v(t_0)$ une température de l'ordre de 10 pK.

Cet effet de pulse compressé (*chirped pulses*) provient du fait que, à cause de la distribution des gaps spatiaux, les atomes ayant les vitesses les plus élevées se situent en amont de ceux ayant les vitesses les plus basses lors de leur sortie du potentiel. La figure 2.21 schématise la propagation et la réflexion du paquet d'onde α sur le spatial gap entre les bandes III et IV. La pente dans l'espace des phases $(\sqrt{E/E_R}, x)$ permet de rendre compte de la refocalisation du paquet d'onde. Le spatial gap peut être

vu ici comme une lentille couplée à un miroir concave pour le paquet d'onde, dont la distance focale est évaluée à 500 μm (pour une vitesse de 8.2 mm.s^{-1}). Ceci constitue un nouvel outil pouvant être utilisé dans le cadre de l'optique atomique.

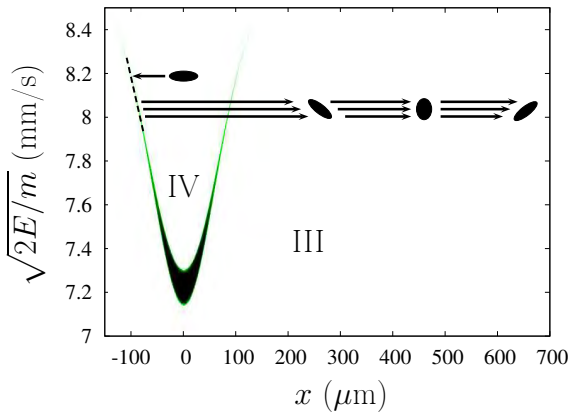


Figure 2.21

Exposant de Mathieu en fonction de la vitesse $\sqrt{E/E_{\mathrm{R}}}$ et de la position x (densité de vert). Les atomes composant le paquet d'onde α sont représentés par une ellipse initialement au centre du réseau $x = 0$ avec une vitesse dirigée vers la gauche. Après un rebond sur le spatial gap, de pente surlignée en tiret, ceux-ci sont transmis au travers du gap spatial de droite et quittent le potentiel.

En conclusion, la réalisation expérimentale de la propagation d'un condensat de Bose-Einstein dans un réseau gaussien a permis de mettre en évidence l'existence des cavités créées par les gaps spatiaux. Une comparaison entre les coefficients en transmission semi-classique et ceux obtenus à partir de la densité d'atomes est venue appuyer expérimentalement le modèle proposé. Des simulations numériques ont permis de confirmer et d'interpréter plus finement les résultats expérimentaux. Ainsi, nous avons par exemple constaté qu'une partie de la densité a pu s'échapper de la cavité par effet tunnel et que ces paquets d'onde étaient des pulses compressés avec une dispersion en vitesse très petite. Ces cavités ouvrent la voie pour un contrôle de la dispersion du nuage *in situ*, ainsi que de la période d'oscillation et du taux de transmission tunnel.

2.4.3 Design de l'enveloppe

Nous venons de voir que l'enveloppe est à l'origine de la forme de la cavité et que contrôler celle-ci permet de modifier les propriétés énergétiques des résonances. Plusieurs expériences ont démontré qu'il était possible, à l'aide de techniques holographiques, de réaliser des réseaux optiques dont l'enveloppe peut être choisie et contrôlée [53]. On discute, ici, certaines formes particulières permettant de contrôler la dispersion d'un paquet d'onde, ou d'implémenter certains modèles de physique du solide.

- **Optimisation de l'enveloppe**

Nous avons constaté que la forme gaussienne induit des tailles de cavités en fonction de l'énergie qui ne compensent pas le temps de parcours, de sorte qu'il apparaît un déphasage entre les différentes composantes du paquet d'onde. Cette limitation réduit fortement la visibilité des oscillations à l'intérieur du réseau. Les figures 2.19.a et b mettent en exergue cet effet de brouillage des oscillations de la densité.

On propose, ici, de compenser cet effet en façonnant l'enveloppe. On redéfinit le potentiel (Eq. 2.47) en prenant l'*ansatz* :

$$U(x) = -U_0 \sin^2\left(\frac{\pi x}{d}\right) \exp\left(-\frac{2x^2}{w^2}\right)\left[1 + \frac{x^2}{D^2}\right], \tag{2.57}$$

où D est une largeur ajustable. Ainsi, lorsque $D > 0$ le potentiel prend une forme plus aplatie au minimum de l'enveloppe ce qui crée des gaps spatiaux plus abrupts en fonction de l'énergie.

L'optimisation se fait par synchronisation des temps de parcours de chaque composante du paquet d'onde à l'intérieur de la cavité. Les calculs numériques des trajectoires semi-classiques peuvent se faire à l'aide des relations (2.16) et peuvent être comparés à la propagation d'un paquet d'onde composé des mêmes classes de vitesse (Fig. 2.22 a, b, c et d). Les détails de cette étude sont présentés dans la thèse de Pierrick Cheiney [54].

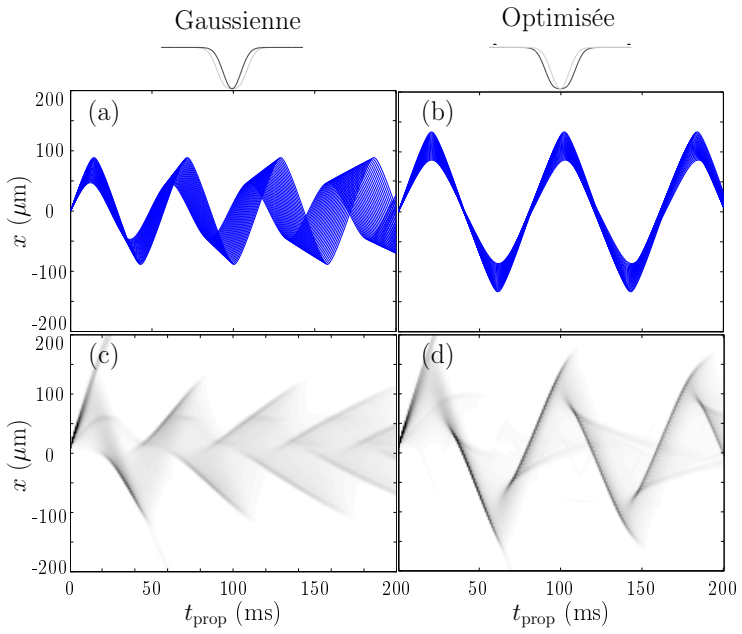


Figure 2.22

Trajectoires semi-classiques de particules initialement au centre d'un potentiel ($x = 0$) ayant (a) une enveloppe gaussienne et (b) optimisée selon (Eq. 2.57) avec $D = 0.75w = 112$ μm. Les vitesses initiales de ces particules sont prises de manière homogène entre $\bar{v} - \Delta v/2 = 8.8$ $mm.s^{-1}$ et $\bar{v} + \Delta v/2 = 10$ $mm.s^{-1}$. Propagation d'un paquet d'onde gaussien, de dispersion en vitesse $\Delta v = 1.2$ $mm.s^{-1}$, initialement chargé au centre d'un réseau optique (c) à enveloppe gaussienne et (d) à enveloppe optimisée.

- **Assemblage périodique de barrière tunnel : effet du cumul de phase**

Enfin, une des perspectives serait de réaliser l'implémentation expérimentale d'un assemblage de cavités de ce type, identiques, et couplées entre elles. Ceci passerait par la réalisation d'une distribution périodique de gaps spatiaux, ce qui nécessite simplement d'avoir une enveloppe elle-même périodique. Un tel super-réseau peut en principe être créé expérimentalement. Une méthode déjà mise en pratique utilise des technique d'holographie et, en particulier, un modulateur spatial de lumière [53]. Une autre manière serait, à l'instar du réseau optique gaussien, de réaliser l'interférence de trois faisceaux. Deux sont contrapropageants et de vecteurs d'onde $\pm k_{\mathrm{R}} \vec{e}_x$ ayant la même amplitude E_1. Le troisième a un

vecteur d'onde $(k_\mathrm{R}+\delta k)\vec{e}_x$ et une amplitude E_2. On considère alors le cas spécifique d'un réseau optique modulé en amplitude, de la forme :

$$U(x) = -U_0 \sin\left(\frac{\pi x}{d}\right)\left[1+\epsilon\cos\left(\frac{2\pi x}{D}\right)\right]. \tag{2.58}$$

Cette configuration donne lieu à deux périodes spatiales $d = 2\pi/k_\mathrm{R}$ et $D = 2\pi/\delta k$ (avec $\delta k \ll k_\mathrm{R}$). L'amplitude de modulation est alors $\epsilon = 2E_1/E_2 > 0$. Ici, le paramètre $D \geq d$ traduit le caractère périodique de l'enveloppe et ϵ correspond à l'amplitude de la modulation spatiale (voir FIG. 2.23.a pour le cas où $\epsilon = 0.25$ et $D = 5d$.). Cette périodicité doit être choisie bien plus grande que le pas du réseau ($D \gg d$), de sorte à ce que l'on satisfasse le critère d'enveloppe lentement variable.

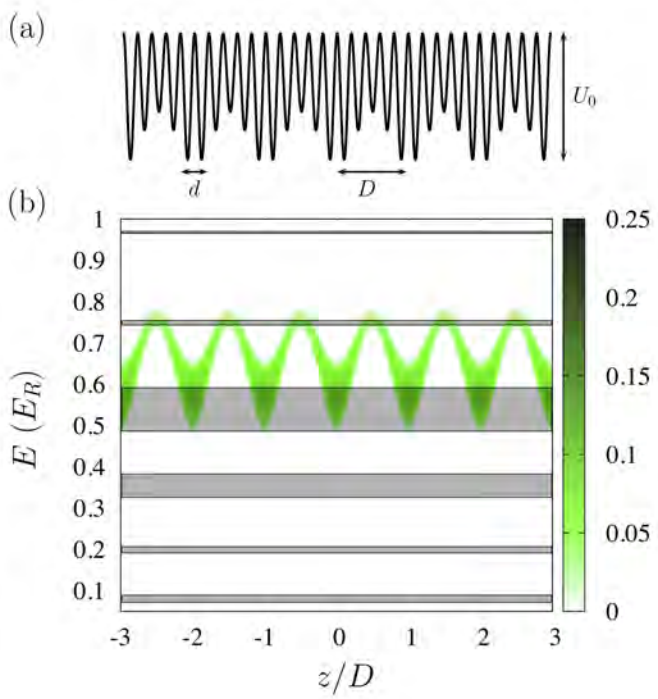


Figure 2.23

*(a) Potentiel modulé en amplitude (*EQ. *2.58) avec $\epsilon = 0.25$ et $D = 5d$. (b) Partie imaginaire de l'exposant de Mathieu local (densité verte). Les bandes grises représentent les gaps calculés à l'aide de la diagonalisation de l'hamiltonien et sont indépendantes, de fait, de la position.*

Une approche naïve consisterait à considérer l'enveloppe localement et à faire le calcul de la transmission, à partir de la somme de la partie imaginaire de l'exposant de Mathieu sur tout l'espace. Ainsi, du fait de la taille infinie du réseau, la somme de la partie imaginaire de l'exposant de Mathieu donnerait lieu à une transmission de 1 pour toutes les énergies. À l'inverse, pour des énergies se situant dans des gaps elle serait de 0.

En réalité, ce potentiel modulé en amplitude est composé de 4 périodes : d, D et $dD/(D \pm d)$. À condition que $D = nd$ avec $n \in \mathbb{N}$, la zone de Brillouin est désormais de largeur $2\pi/D$, car $D > d$. Les levées de dégénérescence en bords de zone peuvent être calculées en utilisant la méthode de Hill généralisée, ou par diagonalisation de l'hamiltonien. On trouve, alors, que le diagramme pour ce réseau infini présente de nouveaux gaps là où il n'y en avait pas auparavant (cf. zones grisées de la figure 2.23.b).

En revanche, les gaps spatiaux sont périodiquement espacés d'un facteur $2\pi/D$ (densité de vert). Cet exemple met en avant le rôle primordial que jouent les processus cohérents à l'intérieur du réseau. Il n'y a donc pas de modulation spatiale des gaps dans ce cas de figure. La formule de transmission obtenue précédemment (Eq. 2.49) rend compte des effets interférentiels. Dans le cas d'un ensemble de cavités couplés, les résonances obtenues précédemment deviennent des bandes. Il est possible d'extraire un exposant de Mathieu propre aux super-réseaux.

En dehors de ce cas particulier, les gaps spatiaux à une dimension offrent la possibilité de réaliser des cavités dont la géométrie peut être modulée en modifiant la forme du réseau optique. L'utilisation d'une enveloppe périodique crée une série de cavités couplées pour une onde de matière dont les propriétés peuvent être, elles aussi, modifiées avec l'enveloppe. Le réseau optique pouvant *a priori* avoir une enveloppe quelconque, une application serait l'implémentation d'une distribution aléatoire de gaps spatiaux qui pourrait être utilisée pour étudier la localisation d'Anderson à l'instar d'un potentiel tavelure (*speckle* en anglais) [55]. À noter qu'en comparaison de ces travaux, l'investigation de cet effet nécessite des énergies bien plus petites que la dispersion en énergie du condensat de Bose-Einstein, du fait de la largueur relativement grande de la distance moyenne entre les barrières tunnel. Ces régimes sont accessibles en utilisant des techniques de refroidissement dans l'espace des phases [2].

2.4.4 Cavités à deux dimensions

Les cavités que nous avons jusqu'à présent étudiées en dimension 1 peuvent être généralisées à des dimensions spatiales supérieures. On se place ici en dimension 2, à titre d'exemple. Dans ce cadre, la théorie des bandes présentée plus haut pour une dimension peut se généraliser. La difficulté réside dans la définition que l'on fait de l'exposant de Mathieu. En effet, le vecteur d'onde d'une particule dans le plan est désormais vectoriel. Il est de ce fait impossible de représenter un spatial gap local, comme précédemment, au moyen d'un scalaire. On procédera donc à la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire dont on extraira les gaps. Puis, après avoir défini le réseau optique à deux dimensions, on calculera pour une particule les zones pour lesquelles son énergie se situera dans un gap. Ceci définira de nouvelles cavités bidimensionnelles.

- **Réseau infini**

Le théorème de Bloch, énoncé à la section 2.2.1 est en réalité général à toutes les dimensions de l'espace. En particulier, à deux dimensions, l'équation de Schrödinger pour un potentiel périodique possède des solutions elles aussi périodiques avec la périodicité du réseau. On considère ici l'exemple d'un potentiel périodique de symétrie carrée (mais l'étude qui va suivre peut se généraliser immédiatement à d'autres types de symétries) s'écrivant :

$$V(x,y) = U_0 \left[\cos^2\left(\frac{2\pi x}{d}\right) + \cos^2\left(\frac{2\pi y}{d}\right) \right]. \tag{2.59}$$

Pour un réseau carré (Fig. 2.24.a), le pas de réseau d est le même selon l'axe x et y, on peut définir un moment k_R lié au réseau et une énergie de recul E_R.

Prenons le cas d'une particule ayant un pseudo-moment s'écrivant comme un vecteur à deux dimensions : $\vec{k} = k_x\vec{e}_x + k_y\vec{e}_y$. La pseudo-énergie associée (qui elle, par définition, est scalaire) s'écrit $E_0 = \hbar^2\sqrt{k_x^2 + k_y^2}/(2m)$. Contrairement au cas du réseau à une dimension, les gaps en énergie ne peuvent être définis de manière isotrope. Il existe des valeurs d'énergie qui, pour un $|\vec{k}|$, peuvent correspondre à une bande ou un gap selon la direction. Pour définir la théorie des gaps spatiaux, il est nécessaire de généraliser les gaps comme l'ensemble des pseudo-énergies ne correspondant à aucune valeur propre et ce, quels que soient k_x et k_y. La figure 2.24.b représente les 3 premières bandes obtenues dans le cas d'un réseau carré. La lecture de ce diagramme pouvant être compliquée (notamment pour identifier la position des gaps), il est possible d'utiliser la représentation (Fig. 2.24.c) qui est la distribution

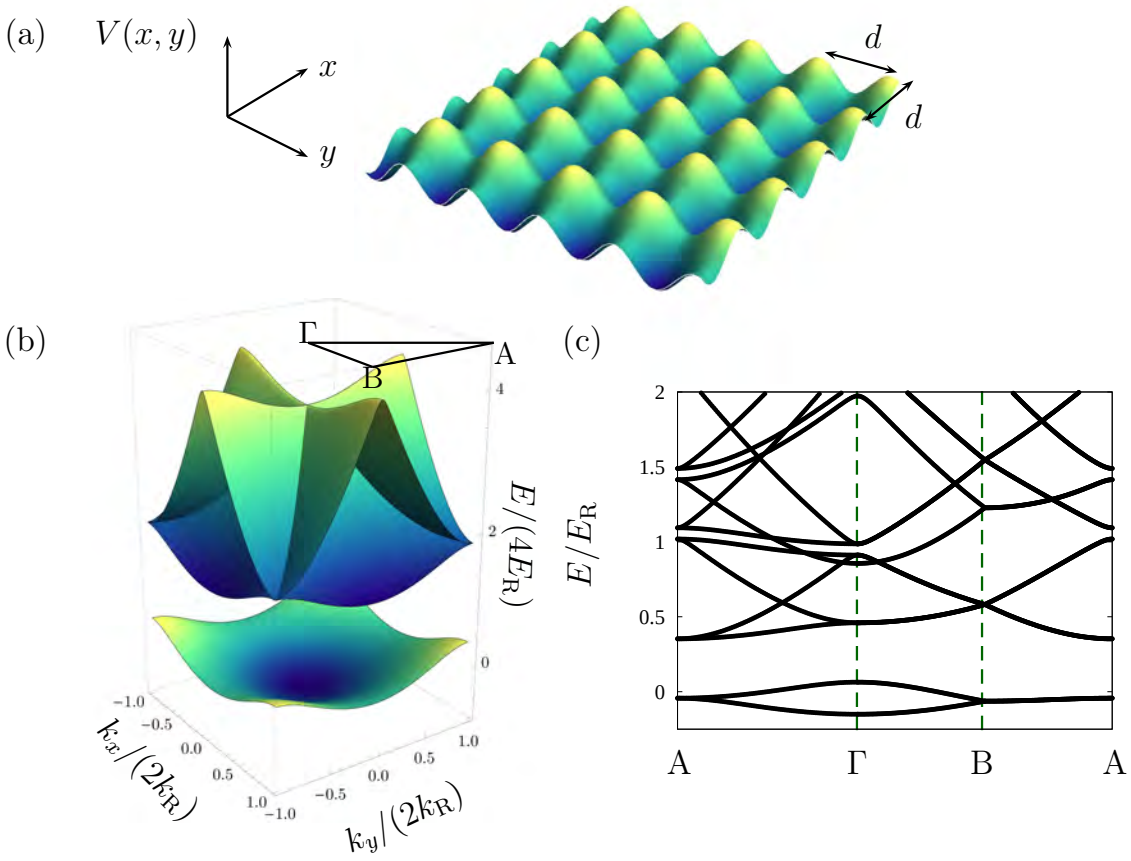


Figure 2.24

*(a) Représentation graphique du potentiel périodique carré (*Eq. *2.59) de profondeur $U_0 = 0.25E_R$.(b) Diagramme de bandes pour ce potentiel avec une profondeur de $U_0 = 0.1E_R$ (seules les trois premières bandes sont représentées) dans la première zone de Brillouin. Les axes de symétrie (A,B,Γ) sont introduit ici de manière à simplifier la représentation du diagramme de bande en projetant les valeurs propres dans un plan. (c) Valeurs propres se distribuant selon les axes de symétrie introduits à la figure (b).*

des niveaux d'énergie selon les trois axes principaux de symétrie du réseau (A,B,Γ) définies à la figure 2.24.b. Cette figure montre que la levée de dégénérescence dûe au réseau crée un gap entre les deux premières bandes. On observe, par ailleurs, un point de dégénérescence triple pour $E = E_R$ selon l'axe Γ. Celui-ci donnera lieu à un autre gap en énergie pour une profondeur de réseau plus élevée (cf. plus bas).

Malgré le fait qu'il est impossible d'associer au réseau un exposant de Mathieu qui est un scalaire complexe, le calcul des bandes à deux dimensions permet donc de définir des profondeurs de potentiel pour lesquelles la pseudo-énergie appartiendra à un gap. Ceci ouvre la voie à une généralisation de la définition des gaps spatiaux à deux dimensions et à leur implémentation expérimentale.

- **Réseau optique à deux dimensions.**

Considérons un réseau optique réalisé par l'intersection de deux paires de faisceaux gaussiens contra-propageants et cohérents entre eux (on suppose qu'il n'y a pas de phase relative entre deux faisceaux orthogonaux). Une intersection à 90 degrés de ces faisceaux crée un potentiel périodique carré pour les

atomes ayant une enveloppe gaussienne :

$$U(x,y) = -\frac{U_0}{1+\frac{y^2}{y_R^2}} \exp\left[-\frac{2x^2}{w_0^2\left(1+\frac{y^2}{y_R^2}\right)}\right] \sin^2\left(\frac{\pi y}{d}\right) - \frac{U_0}{1+\frac{x^2}{x_R^2}} \exp\left[-\frac{2y^2}{w_0^2\left(1+\frac{x^2}{x_R^2}\right)}\right] \sin^2\left(\frac{\pi x}{d}\right), \tag{2.60}$$

où x_R et y_R sont ici les longueurs de Rayleigh associées aux faisceaux. On représente ce potentiel à la figure 2.25.a. De la même manière que pour le cas à une dimension, on suppose que l'enveloppe varie lentement de sorte à pouvoir appliquer le modèle développé plus haut. Les figures 2.25.b-e représentent différents types de cavités pour ondes de matière que l'on a pour ce potentiel délimitées par des gaps spatiaux pour différentes pseudo-énergies et profondeurs de potentiel. Pour obtenir ces formes de cavité nous avons procédé de la manière suivante : (i) à chaque position on calcule le diagramme de bande 2D (cf. Fig. 2.24) associé à la profondeur locale à la position (x, y), (ii) on fixe la pseudo-énergie E_0, et (iii) on représente par un point noir les positions pour lesquelles cette pseudo-énergie est dans un gap. Cette représentation permet de donner un aperçu direct des cavités pouvant être modélisées à deux dimensions.

On peut distinguer plusieurs type de cavités avec des topologies différentes :

- En forme d'étoile à 4 branches ayant une barrière quasi-circulaire au centre (Fig. 2.24.b). Ce type de topologie rappelle celle d'un billard de Sinaï [56] (mais avec des bords dont le coefficient de réflexion n'est pas de 1). La figure 2.24.e est un autre exemple de ce type de cavité avec un obstacle central proche d'un carré.
- La figure 2.24.c est un autre exemple de cavité avec un obstacle central circulaire.
- Une cavité simple de forme proche d'un carré avec des sommets arrondies (cf. 2.24.d). Ce type de billard est proche d'un billard intégrable. Pour autant, l'influence des sommets sur la dynamique pourrait conduire aussi à un système chaotique.

Ce type de cavité pourra faire l'objet d'une étude plus détaillée dans le but de vérifier si elle présente des dynamiques mixtes.

En conclusion, nous avons démontré qu'il émerge de l'enveloppe d'un réseau périodique optique des barrières tunnel modulables en largeur et en intensité. Les propriétés de symétrie du réseau se retranscrivant dans la distribution des gaps spatiaux, nous avons pu construire et caractériser des cavités pour ondes de matière à une et deux dimensions. Ce travail peut s'inscrire dans un cadre plus large : l'atomtronique [57]. Ce domaine de recherche à pour but de créer l'équivalent de composants électroniques pour des gaz d'atomes ultra-froids [58], et exploitant la cohérence des ondes de matière. Dans la continuité de cette étude, nous allons maintenant utiliser un autre degré de liberté en ajoutant une modulation temporelle, de manière à réaliser des transitions inter-bandes cohérentes.

2.5 Manipulation cohérente d'ondes de matière

La propagation de condensats de Bose-Einstein dans des réseaux optique modulés en temps est au cœur de la simulation de nombreux modèles de matière condensée comme par exemple la récente implémentation du modèle de Haldane [48], l'effet tunnel assisté par le chaos [11] ou encore la transition métal-isolant dans l'espace des impulsions [59]. En 2013, le groupe atomes froids de Toulouse a démontré expérimentalement que l'on pouvait manipuler une densité d'atomes dans l'espace des phases à l'aide d'une modulation temporelle périodique d'un réseau optique, qui dans ce cas agit comme un filtre en vitesse pour les atomes [25]. Dans cette section, on propose d'étendre ces travaux dans le but de réaliser un contrôle dynamique de la population d'atomes à l'intérieur des cavités définies précédemment. Après avoir introduit certains éléments liés au formalisme de Floquet-Bloch pour des potentiels périodiques

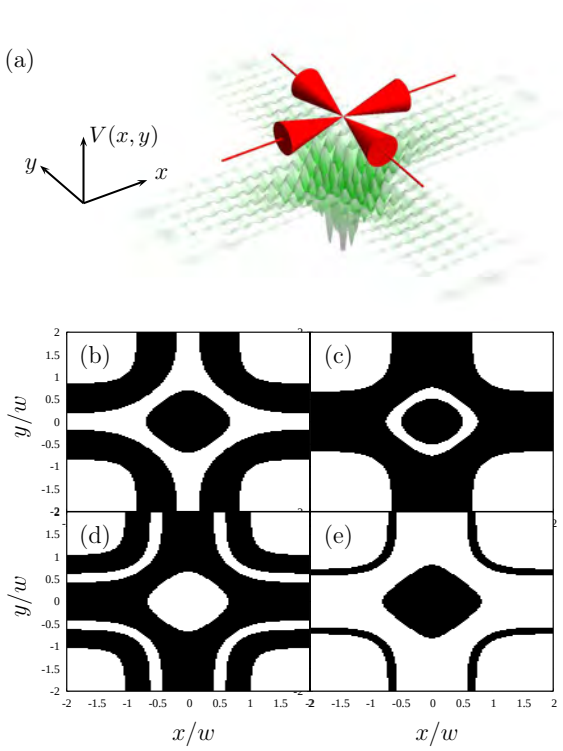


Figure 2.25

*(a) Représentation schématique du potentiel (*Eq. *2.60) pour un réseau carré réalisé à partir de deux couples de faisceaux gaussiens contrapropageants (flèches rouges). Les paramètres des gaussiennes sont ici $x_R/w_0 = y_R/w_0 = 20$. (b-e) Les zones en noir représentent les gaps spatiaux pour différentes valeurs de la pseudo-énergie E_0 et de la profondeur de potentiel U_0 : (b) $E_0 = 0.05E_\mathrm{R}$ et $U_0 = E_\mathrm{R}/2$, (c) $E_0 = 0.25E_\mathrm{R}$ et $U_0 = E_\mathrm{R}/2$, (d) $E_0 = 0.35E_\mathrm{R}$ et $U_0 = E_\mathrm{R}$, (e) $E_0 = 0.5E_\mathrm{R}$ et $U_0 = E_\mathrm{R}/2$.*

en temps, on illustrera au moyen de deux exemples un protocole permettant d'adresser une partie du nuage d'atomes, dans des cavités sélectionnées au préalable.

2.5.1 Transitions induites par modulation temporelle

On considère désormais un potentiel périodique infini $U(x) = -U_0 \sin^2(k_\mathrm{R}x)$ modulé périodiquement dans le temps, de la forme :

$$U_{mt}(x,t) = [1 + \alpha \sin(2\pi\nu t)]\ U(x), \tag{2.61}$$

où α désigne l'amplitude et ν la fréquence de modulation. Les solutions de l'équation de Schrödinger peuvent s'écrire en termes de fonctions de Floquet-Bloch. On peut montrer, dans ce cadre, que la modulation temporelle crée de nouveaux gaps d'énergie dans le diagramme de bande, pouvant être sondés expérimentalement à l'aide de la diffusion d'un condensat de Bose-Einstein [25]. Ce formalisme est développé en détail dans la thèse de Pierrick Cheiney [54]. Ici nous présentons une approche pour laquelle la modulation est considérée comme perturbative *i.e.* $\alpha \ll 1$.

Soit $|\psi_{n,k}\rangle$ l'onde de Bloch (2.2), solution de l'équation de Schrödinger stationnaire pour un potentiel périodique infini. La probabilité $\Gamma_{n,k}^{n',k'}$ de transition d'un état initial $|\psi_{n,k}\rangle$ vers un état final $|\psi_{n',k'}\rangle$, sous l'effet de la modulation temporelle (infinie dans le temps) du réseau, est donnée par la règle d'or

de Fermi [60] :

$$\Gamma_{n,k}^{n',k'} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle\psi_{n,k}|U|\psi_{n',k'}\rangle|^2\delta(\nu), \tag{2.62}$$

avec $\delta(\nu)$ le delta de Dirac. Le terme de couplage hors diagonal est ici le potentiel périodique $U(x)$. Ainsi, dans l'espace des x :

$$|\langle\psi_{n,k}|x\rangle\langle x|U|\psi_{n',k'}\rangle|^2 = \int u_{n',k}^* \sin^2(k_\mathrm{R}x)u_{n,k}\mathrm{e}^{i(k-k')x}\mathrm{d}x. \tag{2.63}$$

À résonance ($\nu = \nu_0$), comme les fonctions propres $u_{n,k}$ et $u_{n',k'}$ sont orthogonales (en l'absence de couplage entre k et k'), la probabilité de transition (2.62) est nulle si $k \neq k' \pm 2k_\mathrm{R}$. En d'autres termes, il ne peut y avoir une transition entre deux états que si le quasi-moment k est conservée*.

Lorsqu'une transition a lieu, la particule passe d'un état d'énergie $E_{n,k}$ à un autre état d'énergie $E_{n',k}$, de sorte à ce que la différence ΔE soit :

$$\Delta E = h\nu = |E_{n,k} - E_{n',k}|. \tag{2.64}$$

Ce quantum d'énergie peut être associé à une pseudo-particule, le phonon, provenant d'un apport d'énergie due à la modulation temporelle du réseau. Lors de la transition phononique, la particule voit sa vitesse (semi-classique) changer, à pseudo-moment constant. Si les indices n et n' n'ont pas la même parité, le signe de cette vitesse est changé et la particule est réfléchie. On peut associer cette réflexion à l'émission d'un phonon. À l'inverse, lorsque la parité est la même, la particule absorbe un phonon et est accélérée (ou ralentie).

Ce raisonnement, fait pour un potentiel périodique, infini, de profondeur donnée, peut être utilisé lorsque l'on considère un réseau dont l'amplitude est définie localement. Dans ce cas, il viendra s'ajouter un critère supplémentaire lié à la position. Ces transitions ne pourront avoir lieu qu'à certaines valeurs de x que l'on pourra choisir en ayant connaissance du diagramme de bande local.

2.5.2 Cavités en présence de modulation temporelle

Nous venons de montrer qu'une modulation du réseau permettait de faire des transferts de population cohérents entre bandes. Maintenant, nous reprenons un réseau $U(x)$ dont l'enveloppe est gaussienne (2.47). Les transitions définies plus haut pourront avoir lieu pour une profondeur donnée, c'est-à-dire à une position donnée. En choisissant la fréquence de manière appropriée, on pourra donc peupler localement des cavités durant la dynamique d'un paquet d'onde.

- **Paquet d'onde initialement à l'extérieur du réseau optique**

Considérons un paquet d'onde de vitesse moyenne $\bar{v} = 0.6v_\mathrm{R}$ et de largeur $\Delta v = 2.34\times10^{-4}$ m/s (*i.e.* $\Delta v \ll \bar{v},\ v_\mathrm{R}$), venant diffuser sur un réseau optique d'enveloppe gaussienne (Fig. 2.26.a) de profondeur $U_0 = 2E_\mathrm{R}$. Pour ces paramètres le paquet d'onde est totalement réfléchi (probabilité de transmission inférieure à 1%), en l'absence de modulation temporelle ($\alpha = 0$ ou $\nu = 0$). Une fois encore, nous allons utiliser, pour schématiser la dynamique du paquet d'onde, l'image semi-classique représentée par le déplacement d'une particule fictive ayant la même vitesse et la même position que le centre de masse du paquet d'onde.

Loin du potentiel, l'énergie moyenne de cette particule fictive est purement cinétique et est égale à $E_0 = mv^2/2$, qui fixera la valeur de la pseudo-énergie une fois dans le réseau. L'évolution adiabatique de cette particule durant sa propagation est représentée par des flèches tiretées (Fig. 2.26.a, b et c). Pour cette pseudo-énergie et la position $x = -104$ μm, le diagramme de bande (Fig. 2.26.b) nous enseigne

*. La conservation du quasi-moment peut aussi être obtenue en partant de la commutativité de l'hamiltonien et l'opérateur de translation dans le temps [37].

plusieurs choses : en prenant une valeur de la fréquence de modulation $\nu_1 = 0.3$ kHz, on peut promouvoir la particule sur la bande supérieure de manière à peupler la cavité principale, centrée par rapport au minimum du potentiel (ligne verticale en pointillées sur la figure 2.26.c). Par ailleurs, en utilisant une fréquence plus élevée ($\nu_2 = 3$ kHz) il est possible de peupler cette fois-ci la bande inférieure notée I. Cette bande donne lieu à une cavité latérale localisée autour de $x = -100$ μm, dont la largeur est relativement petite, en comparaison avec la cavité centrale. Les transitions résonantes entre bandes ont lieu à des positions bien définies (elles sont représentées par des lignes continues noires sur les diagrammes 2.26.b et c) et déterminent la population dans les cavités seulement dans le cas d'une vitesse négative *i.e.*, une fois que les atomes ont été réfléchis par un gap*.

La probabilité de transition augmente avec le module de l'amplitude α. Nos simulations dynamiques montrent que, pour $\nu_1 = 0.3$ kHz et $\alpha = 0.5$, 10 % des atomes sont couplés dans la cavité principale délimitée par les bandes II et III. La largeur de la cavité est de 200 μm dans notre régime de paramètres. La figure 2.26.d montre clairement des oscillations ayant une large amplitude à l'intérieur de la cavité principale. On observe que ces oscillations sont accompagnées d'un effet de reconcentration de la densité (effet déjà observé lors de l'étude expérimentale), provenant du couplage avec la cavité qui dépend de la vitesse. Pour un même paquet d'onde incident, en prenant une fréquence $\nu = 3$ kHz, on peut transférer, cette fois-ci, une partie des atomes dans la petite cavité en périphérie de la première provenant de la bande I (cf. Fig. 2.26.b, c et e). Nous observons une perte périodique de la population provenant du fait que la modulation est présente durant toute la dynamique et que les transitions sont réversibles (à la position où elles ont lieu). Par contre, il est possible de garder l'intégralité de la population si l'on coupe la modulation après qu'il y ait eu le transfert (à $t \simeq 75$ ms). Ce faisant, comme la bande I est à cette profondeur à une énergie négative, la probabilité de transmission au travers des gaps spatiaux est nulle. La densité présente dans la cavité restera constante pour le reste de la dynamique.

Nous venons de démontrer numériquement que, grâce à la modulation, il est possible de piéger une partie de la densité provenant d'un paquet d'onde diffusant sur un potentiel à enveloppe lentement variable. On peut choisir la cavité à peupler en choisissant la fréquence de modulation et la proportion de la densité qui est piégée, en changeant l'amplitude de modulation.

- **Paquet d'onde initialement à l'intérieur du réseau optique**

Jusqu'à présent nous avons étudié une expérience de diffusion. Désormais, considérons un paquet d'onde (Fig. 2.27.a) initialement au centre d'un réseau modulé en amplitude (2.61) ayant une enveloppe gaussienne et ayant une vitesse moyenne $\bar{v}$ telle que l'énergie cinétique se situe au centre de la seconde bande (dans la limite où le potentiel a une profondeur quasi-nulle) : $E_0 = mv^2/2 = 0.5625 E_\mathrm{R}$. Le potentiel est allumé adiabatiquement (en suivant le protocole présenté plus haut) jusqu'à une valeur de $U_0 = 2E_\mathrm{R}$ (A$\rightarrow$ A' sur la figure 2.27), de sorte à ce que la pseudo-énergie de la particule fictive soit proche de -0.3E_R (Fig. 2.27.b, flèches en pointillés).

En l'absence de modulation, le paquet d'onde oscille dans la cavité délimitée par les gaps spatiaux entre les bandes I et II (Fig. 2.27.d). En présence de modulation, le paquet d'onde se propage dans la cavité avec une pseudo-énergie constante jusqu'à atteindre une position pour laquelle la modulation permet une transition vers une autre bande (cf. Fig. 2.27.e). Par exemple, avec une modulation de $\nu = 5$ kHz, la transition se fait en B. Quasiment 20 % de la fonction d'onde fait la transition de B vers B'. En fait, une étude plus attentive révèle que la densité suit deux chemins distincts :

- elle est transférée dans la cavité délimitée par le gap séparant les bandes III et IV. Ces atomes oscillent avec la même amplitude mais ont une période plus petite puisque leurs énergies sont plus grandes (et, *a fortiori*, avec une vitesse plus grande que lorsqu'ils étaient sur la bande II)
- il y a un transfert vers la bande III et les atomes continuent leur propagation jusqu'au point C où une nouvelle condition de résonance est satisfaite.

∗. Car une transition ne peut se faire si les pentes entre les deux bandes sont opposées dans la représentation semi-classique.

Une conséquence de cette résonance est qu'une partie des atomes peut être transférée (de C à C') vers une cavité latérale sur la bande fondamentale I. La partie non transférée des atomes continue sa propagation (C vers D) quittant le potentiel avec une vitesse de $1.2v_{\mathrm{R}} = 8.49$ mm/s, supérieure à la vitesse initiale moyenne $\bar{v}$.

Les transitions résultant de la modulation temporelle de l'enveloppe offrent donc une large variété de possibilités pour manipuler un paquet d'onde se propageant. Nous avons vu, lors d'une expérience de diffusion, comment les voies de sortie peuvent être choisies (le paquet d'onde est à la fois réfléchi et transmis). Pour un paquet d'onde placé initialement au centre du réseau optique avec une vitesse finie, nous avons montré de quelle manière il est possible de charger une partie des atomes dans des cavités latérales et/ou centrales délimitées par des gaps spatiaux. Le couplage entre les cavités peut être modifié en changeant les paramètres de la modulation, à savoir la fréquence et l'amplitude. Qui plus est, un paquet d'onde, avec une vitesse non nulle, piégé dans un réseau de taille finie peut être considéré comme un réservoir d'atomes. Les atomes peuvent être relâchés en choisissant une fréquence de modulation appropriée. Un tel système permettrait de réaliser une source d'atomes modulable avec des propriétés dynamiques bien définies.

2.6 Conclusion et perspectives

La théorie des bandes et de l'équation de Mathieu-Hill offre un formalisme approprié pour l'étude de particules dans des potentiels périodiques. Une variation de la profondeur locale de ces potentiels, crée des barrières tunnel effectives pour toutes particules se propageant à pseudo-énergie constante, dont les propriétés peuvent être déterminées à partir de la partie imaginaire de l'exposant de Mathieu. Ces gaps spatiaux permettent de réaliser de nombreux systèmes utilisant des barrières tunnel modulables pour onde de matière.

Nous avons étudié plus spécifiquement le cas d'un réseau optique, à une dimension, crée par l'interférence de deux faisceaux contrapropageants. Celle-ci crée un potentiel à enveloppe gaussienne pour un gaz d'atomes ultra-froids. Un tel système permet de réaliser une cavité de Fabry-Perot, qui est l'analogue de celles rencontrées en optique, et dont les paramètres peuvent être ajustés expérimentalement. Nous avons montré que ses propriétés spectrales pouvaient être calculées à partir d'un modèle semi-classique.

Le chargement et la mise en mouvement de condensat de Bose-Einstein à l'intérieur de ce réseau optique ont été réalisés expérimentalement. Le bon accord entre les données numériques et expérimentales valide notre approche semi-classique, ainsi que l'hypothèe d'enveloppe lentement variable. La cavité la plus haute en énergie ayant des pertes, nous avons pu observer en particulier l'émission périodique de paquets d'atomes. Une étude détaillée de ces paquets d'atomes a montré qu'ils étaient issus de la réflexion sur un spatial gap dont la distribution dans l'espace des phases modifie celle du paquet d'onde diffusant. De tels paquets présentent, une fois à l'extérieur du réseau, une refocalisation spatiale. Cet effet assimile les gaps spatiaux à des lentilles pour onde de matière. L'avènement de dispositifs expérimentaux permettant de moduler spatialement l'enveloppe du réseau optique offre la possibilité de réaliser des cavités optimisées, afin que les oscillations intra-cavités soient synchronisées pour toutes les classes de vitesse en jeu.

Le concept de gaps spatiaux pouvant être généralisé à de plus grandes dimensions, nous avons montré qu'ils rendent possible la création de guides et de cavités dont la géométrie peut être modifiée. Nous avons vu, dans le cas d'un réseau carré à deux dimensions, que ces cavités présentent des propriétés spatiales similaires à des billards quantiques. Une étude complémentaire pourrait mettre en évidence le comportement chaotique attendu de certaines de ces cavités.

La modulation temporelle du potentiel optique ajoute la possibilité de charger, de manière cohérente, des atomes dans une cavité, ou encore de faire un transfert de population d'une cavité à une autre. Ceci permettrait un meilleur contrôle des paquets d'onde de matière et ouvrirait la possibilité de réaliser des

sources modulables d'atomes ayant des vitesses spécifiques.

Les gap spatiaux permettent, *a priori*, de tester le rôle de la dimensionnalité et des interactions sur l'effet tunnel [61, 62]. En particulier, l'effet tunnel est très différent à plus haute dimension, en permettant de sonder des dynamiques complexes et des effets tunnel comme l'effet tunnel assisté par le chaos ou l'effet tunnel chaotique, phénomènes n'existant pas à une dimension (en l'absence de modulation temporelle). L'effet des interactions a fait l'objet de très peu d'études et pourrait déboucher sur l'émergence de nouveaux effets physiques. On pourrait dans ce cadre de réseau de taille finie retrouver les instabilités qui ont été observées dans le contexte d'un condensat de Bose-Einstein dans le régime de Thomas-Fermi, se déplaçant dans un réseau [63]. Cette instabilité peut être expliquée en termes de mélange à quatre ondes [64], déclenché par une relation de dispersion à l'intérieur du réseau. Ainsi, un atome peut être transféré dans la partie supérieure d'une bande d'énergie plus petite, tandis qu'en même temps un autre est promu dans la partie inférieure d'une bande supérieure (par conservation de l'énergie) [65–67]. Puisque l'effet tunnel est favorable à plus haute énergie, un refroidissement par collisions cohérentes pourrait être observé de cette manière. Une autre perspective serait d'étudier les nouvelles possibilités offertes par les gaps spatiaux en utilisant un réseau dépendant en spin [68–70]. Ces études s'inscriraient dans la construction de nouveaux systèmes basés sur les structures émergeant des gaps produits par les réseaux optiques offrant un contrôle cohérent d'ondes de matière.

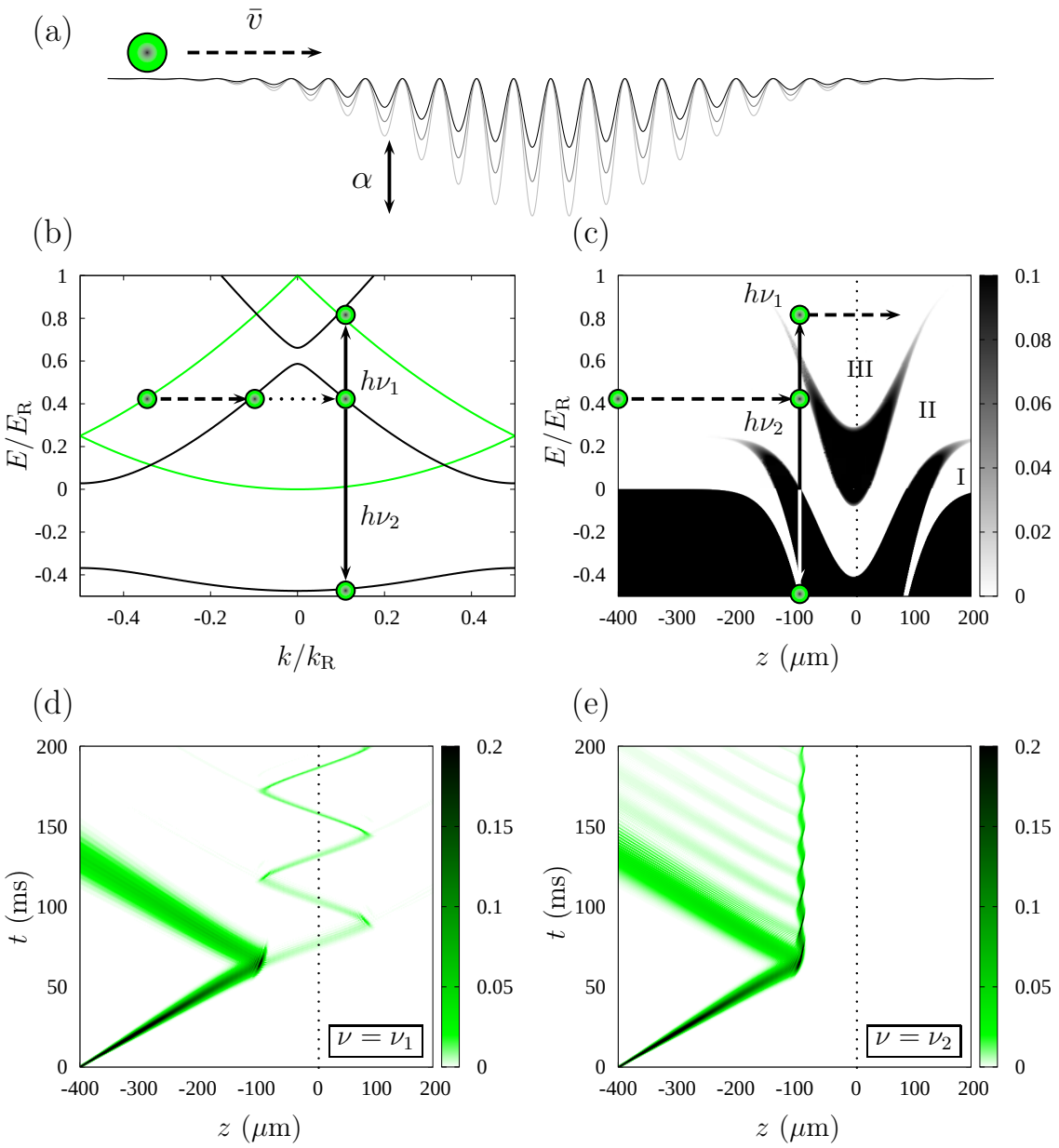


Figure 2.26

(a) Représention de la diffusion d'un paquet d'onde (de vitesse moyenne $\bar{v} = 0.65 v_R$) sur un potentiel gaussien (Eq. 2.47) modulé en amplitude de profondeur $U_0 = 2E_R$. (b) Diagramme de bande lorsque le potentiel a une profondeur quasi-nulle (ligne verte) et lorsque la profondeur locale est $0.9E_R$ pour $x = -104$ μm (ligne noire). Les points noirs représentent la « contamination » de la bande induite par la propagation en présence d'une modulation. L'énergie moyenne du paquet d'onde est $\bar{v} = m\bar{v}^2/2 = 0.45E_R$. (c) Partie imaginaire locale de l'exposant de Mathieu. Le paquet d'onde diffuse sur le gap spatial (II→III). (d-e) Propagation d'un paquet d'onde, en l'abscence d'interaction, issue de l'intégration de l'équation de Schrödinger (de vitesse moyenne $\bar{v}$ et de dispersion $\Delta v = 2.34 \times 10^{-4}$ m/s) initialement à la position $z = -400$ μm : (d) avec une modulation de fréquence $\nu_1 = 0.3$ kHz et (e) $\nu_2 = 3$ kHz (d'amplitude $\alpha = 50$ %).

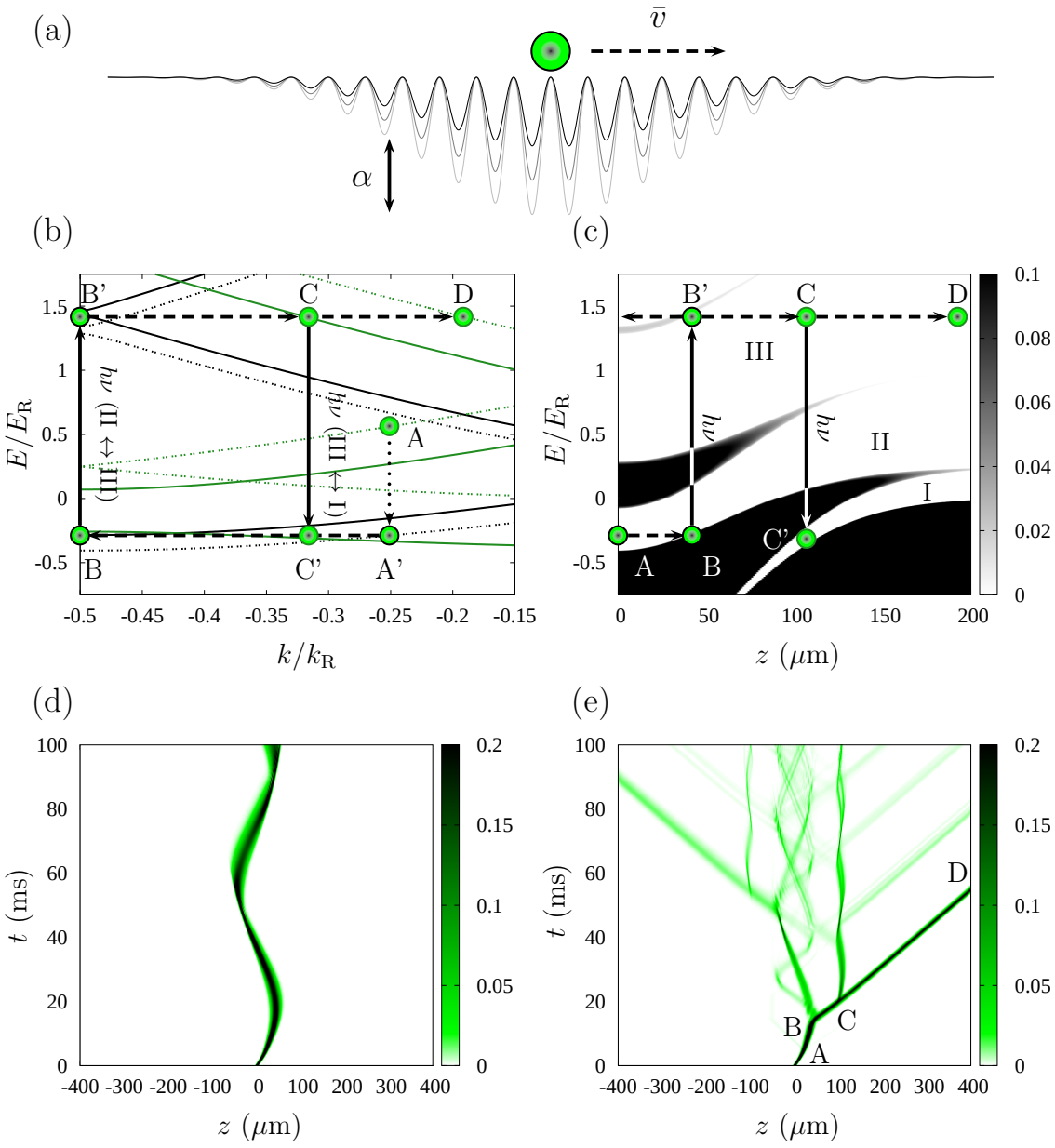


Figure 2.27

*(a) Représentation schématique de la propagation d'un paquet d'onde (de vitesse moyenne $\bar{v} = 0.75 v_R$) initialement à l'intérieur d'un réseau périodique à enveloppe gaussienne (*Eq. *2.47) de profondeur $U_0 = 2E_R$. (b) « Position » du paquet d'onde sur le diagramme de bande pour différentes profondeurs de potentiel (i.e. différentes positions x). Chargement adiabatique : de $U_0 = 0$ (ligne tiretée verte) jusqu'à $U_0 = 2E_R$ (ligne tiretée noire) en $\tau = 1$ ms. Propagation : profondeur locale $1.7E_R$ pour $x \simeq 40$ μm (ligne noire) et $V_0(x \simeq 100\ \mu m = 0.9E_R$ (ligne verte). Les flèches en pointillés représentent l'évolution de la pseudo-énergie durant la propagation pendant le chargement adiabatique du paquet d'onde. Les flèches tiretées représentent la propagation du paquet d'onde à une pseudo-énergie constante, et la ligne continue noire les transitions possibles entre deux bandes induites par la modulation. (c) Partie imaginaire locale de l'exposant de Mathieu. Propagation d'un paquet d'onde non interagissant (de vitesse moyenne $\bar{v}$ et de dispersion $\Delta v = 2.34 \times 10^{-4}$ m/s) initialement au centre du réseau $x = 0$: (d) en absence de modulation et (e) en présence de modulation à une fréquence $\nu = 5$ kHz, avec $\alpha = 33\%$.*

Bibliographie

[1] G. Gamov, *Zetischrift für Physik* **51** 204 (1928).

[2] C. Cohen-Tannoudji et D. Guéry-Odelin, *Advances in Atomic Physics*, (World Scientific, 2011).

[3] O. Morsch et M. Oberthaler, *Rev. Mod. Phys.* **78** 179 (2006).

[4] I. Bloch, J. Dalibard et W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **80** 260403 (2008).

[5] A. Eckardt, C. Weiss et M. Holthaus *Phys. Rev. Lett.* **95** 260404 (2005).

[6] H. Lignier, C. Sias, D. Ciampini, Y. Singh, A. Zenesini, O. Morsch et E. Arimondo *Phys. Rev. Lett.* **99** 220403 (2007).

[7] E. Kierig, U. Schnorrberger, A. Schietinger, J. Tomkovic et M. K. Oberthaler *Phys. Rev. Lett.* **100** 190405.

[8] S. Levy, E. Lahoud, I. Shomroni et J. Steinhauer, *Nature* **449** 579 (2007).

[9] T. A. Pasquini, M. Saba, G.-B. Jo, Y. Shin, W. Ketterle, D. E. Pritchard, T. A. Savas et N. Mulders *Phys. Rev. Lett.* **97** 093201 (2006).

[10] S. Keshavamurthy et P. Schlagheck, *Dynamical Tunneling : Theory and Experiment* (*CRC Press*, 2011).

[11] D. A. Steck, W. H. Oskay et M. G. Raizen, *Science* **293** 274 (2001).

[12] W. K. Hensinger, H. Häffner, A. Browaeys, N. R. Heckenberg, K. Helmerson, C. McKenzie, G. J. Milburn, W. D. Phillips, S. L. Rolston, H. Rubinsztein-Dunlop et B. Upcroft, *Nature* **412** 52 (2001).

[13] *Metamaterials, physics and engineering explorations*, edited by N. Engheta et R. W. Ziolkowski (John Wiley and Sons, Canada, 2006).

[14] *Nanophotonics*, edited by H. Rigneault, J.-M. Lourtioz, C. Delalande et A. Levenson (ISTE, 2006)

[15] Q. Quan et M. Loncar, *Opt. Express* **19**, 18529 (2011).

[16] L. Santos et L. Roso, *J. Phys. B* **30**, 5169 (1997).

[17] L. Santos et L. Roso, *Phys. Rev. A* **58**, 2407 (1998).

[18] I. Carusotto, M. Artoni et G. C. La Rocca, *Phys. Rev. A* **62**, 063606 (2000).

[19] I. Carusotto et G. C. La Rocca, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 399 (2000).

[20] T. Lauber, P. Massignan, G. Birkl et A. Sanpera, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44**, 065301 (2011).

[21] C.M. Fabre, P. Cheiney, G.L. Gattobigio, F. Vermersch, S. Faure, R. Mathevet, T. Lahaye et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 230401 (2011).

[22] C. Zener, *Proc. R. Soc. London Ser.* **A137**, 696 (1932).

[23] P. Cheiney, F. Damon, G. Condon, B. Georgeot et D. Guéry-Odelin, *Eur. Phys. Lett.* **103**, 50006 (2013).

[24] F. Damon, G. Condon, P. Cheiney, A. Fortun, B. Georgeot, J. Billy et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. A* **92** 033614 (2015).

[25] P. Cheiney, C. Fabre, F. Vermersch, G. L. Gattobigio, R. Mathevet, T. Lahaye et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. A* **87** 013623 (2013).

[26] A. Micheli, A. J. Daley, D. Jaksch et P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 140408 (2004).

[27] A. Ruschhaupt et J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **70**, 061604(R) (2004).

[28] J. A. Stickney, D. Z. Anderson et A. A. Zozulya, *Phys. Rev. A* **75**, 013608 (2007).

[29] J. Thorn, E. Schoene, T. Li et D. Steck, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 240407 (2008).

[30] R. A. Pepino, J. Cooper, D. Z. Anderson et M. J. Holland, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 140405 (2009).

[31] A. Ramanathan, K. C. Wright, S. R. Muniz, M. Zelan, W. T. Hill, C. J. Lobb, K. Helmerson, W. D. Phillips et G. K. Campbell, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 130401 (2011).

[32] S. Eckel, J.G. Lee, F. Jendrzejewski, N. Murray, C.W. Clark, C.J. Lobb, W.D. Phillips, M. Edwards et G.K. Campbell, *Nature* **506**, 200 (2014).

[33] M. K. Olsen et A. S. Bradley, *Phys. Rev. A* **91**, 043635 (2015).

[34] F. Bloch, *Z. Physik* **52** 555 (1928).

[35] N. W. Ashcroft et D. Mermin, *Solid state physics*, (Saunders College, Philadelphia, 1976).

[36] A. Eckardt, M. Holthaus, H. Lignier, A. Zenesini, D. Ciampini, O. Morsch et E. Arimondo, *Phys. Rev. A* **79** 013611 (2009).

[37] J. Dalibard, *Cours au Collège de France : Des cages de lumière pour les atomes*.

[38] G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **52** 191 (1937).

[39] H. Hellmann, *Einführung in die Quantenchemie*, p. 285 (1937) ; R. Feynman, *Phy. Rev.* **56** 340 (1939).

[40] W. Magnus et S. Winkler, *Hill's Equation*, (Wiley and sons, 1966, New York).

[41] E. T. Whittaker et G. N. Watson, *A course of modern analysis* (Cambridge University Press, 1962).

[42] N. W. McLachlan, *Theory and application of Mathieu functions*, (Dover, New-York, 1964).

[43] J. E. Sträng, *Acad. Roy. Belg. Bull. Cl. Sci.* **6**, 269 (2005).

[44] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, 1968).

[45] S. Derouault, *Interaction entre des impulsions électromagnétiques quantifiées et des systèmes atomiques : effets transitoires* (Thèse, Toulouse, 2015).

[46] M. B. Dahan, *Transport et relaxation d'atomes de césium : oscillations de Bloch et résonance de diffusion* (Thèse, Paris, 1997).

[47] D. Bohm, *Quantum Theory*, (Dover, New York, 1979).

[48] G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif et T. Esslinger, *Nature*, **515** 237 (2014).

[49] G. Condon, A. Fortun, J. Billy et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. A* **90**, 063616 (2014).

[50] J. H. Denschlag, J. E. Simsarian, H. Häffner, C. McKenzie, A. Browaeys, D. Cho, K. Helmerson, S. L. Rolston et W. D. Phillips, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** 3095 (2002).

[51] S.N. Shevchenko, S. Ashhab et F. Norib, *Phy. Rep.* **492**, 1 (2010).

[52] F. Vermersch, *Étude numérique sur la production, la diffusion et la manipulation d'ondes de matière*, (Thèse, Toulouse, 2012).

[53] V. Boyer, R. M. Godun, G. Smirne, D. Cassettari, C. M. Chandrashekar, A. B. Deb, Z. J. Laczik et C. J. Foot, *Phys. Rev. A* **73**, 031402 (2006).

[54] P. Cheiney, *Matter wave scattering on complex potentials* (Thèse, Toulouse, 2013).

[55] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer et A. Aspect, *Nature* **453**, 891 (2008).

[56] G. Sinaï, *Sov. Math. Dokl.* **4** 18180 (1963).

[57] B. T. Seaman, M. Krämer, D. Z. Anderson et M. J. Holland, *Phys. Rev. A* **75**, 023615 (2007).

[58] C. Ryu, M. G. Boshier, *New Journ. of Phy.* **17**, 092002 (2015).

[59] J. Chabé, G. Lemarié, B. Grémaud, D. Delande, P. Szrift-Giser et J. C. Garreau, *Phys. Rev. Lett.* **101** 255702 (2008).

[60] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. A* **114** 243265 (1927).

[61] B. Wu et Q. Niu, *Phys. Rev. A* **64** 061603 (2001).

[62] B. Wu et Q. Niu, *New J. of Phys.* **5** 104 (2003).

[63] L. Fallani, L. De Sarlo, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort et M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **93** 140406 (2004).

[64] L. Deng, E. W. Hagley, J. Wen, M. Trippenbach, Y. Band, P. S. Jullienne, J. E. Simsarian, K. Helmerson, S. L. Rolston et W. D. Phillips, *Nature* **398** 218 (1999).

[65] K. M. Hilligsœe et K. Mölmer, *Phys. Rev. A* **71** 041602 (2005).

[66] G. K. Campbell, J. Mun, M. Boyd, E. W Streed, W. Ketterle et D. E. Pritchard, *Phys. Rev. Lett.* **96** 020406 (2006).

[67] A. J. Ferris, M. J. Davis, R. W. Geursen, P. B. Blakie et A. C. Wilson, *Phys. Rev. A* **77** 012712 (2008).

[68] I. H. Deutsch et P. S. Jessen, *Phys. Rev. A* **57**, 1972 (1998).

[69] A. Widera, F. Gerbier, S. Fölling, T. Gericke, O. Mandel et I. Bloch, *Phys. Rev. Lett.* **95** 190405 (2005).

[70] N. Belmerchri, L. Föster, W. Alt, A. Widera, D. Meschede et A. Alberti, *J. Phys. B* **46** 104006 (2013).

3 Simuler le papillon d'Hofstadter avec un potentiel quasi-périodique

« Hofstadter's Law : It always takes longer than you expect, even when you take into account Hofstadter's Law. »

D. Hofstadter

Sommaire

3.1 Introduction **67**
3.2 Électrons dans un réseau 2D soumis à un champ magnétique **68**
3.2.1 Niveaux de Landau 69
3.2.2 Électrons de Bloch dans un champ magnétique uniforme 69
3.2.3 La matrice de Harper 74
3.2.4 Analyse spectrale du modèle de Harper 78
3.2.5 Rationalité de α et construction du spectre 80
3.2.6 Dimension fractale du spectre dans la limite irrationnelle 83
3.2.7 Effet Hall quantique et invariants topologiques 89
3.2.8 Diagramme de Claro-Wannier 92
3.3 Application au réseau bichromatique incommensurable **95**
3.3.1 Lien avec les réseaux optiques 96
3.3.2 Calcul du diagramme de bande du super-réseau 97
3.3.3 Transport : spectre de diffusion d'ondes planes 99
3.3.4 Autres approches possibles 102
3.4 Conclusion et perspectives **104**

3.1 Introduction

Les systèmes quantiques cristallins à deux dimensions représentent aujourd'hui une des pierres angulaires en physique de la matière condensée. Récompensés par un prix Nobel en 2010 pour leurs études portant sur le graphène, A. Geim et K. Novoselov ont montré que ces cristaux hexagonaux d'atomes de carbone, quasi-parfaits, ont des propriétés quantiques non triviales, comme l'effet tunnel de Klein causé par une relation de dispersion linéaire au voisinage des cônes de Dirac [1]. Dans ce cristal, les électrons peuvent se comporter comme des particules relativistes sans masse.

Ces systèmes ont déjà fait l'objet de nombreuses études dans le cadre de l'effet Hall quantique. D'abord prédit théoriquement par Ando, Matsumo et Uemura [2], puis ensuite observé par K. von Klitzing en 1980 [3], cet effet met en avant le fait qu'un électron dans un cristal à deux dimensions, soumis à un champ magnétique perpendiculaire au cristal, ne peut avoir que certaines énergies quantifiées. À basse énergie, c'est-à-dire lorsque l'énergie cinétique de l'électron est bien plus petite que son énergie d'interaction avec le cristal, ses niveaux électroniques présentent une structure fractale. Ce comportement très particulier du spectre d'énergie a, pour la première fois, été étudié par Douglas R. Hofstadter [4]. Dans le cas d'un réseau d'atomes, dont la distance interatomique est de l'ordre de l'angström, il est nécessaire

d'appliquer des champs magnétiques supérieurs au millier de Tesla pour espérer observer cette distribution spectrale.

Néanmoins, plusieurs expériences ont été réalisées dans le but de simuler la physique sous-jacente au modèle de Hofstadter. La première fut celle de Grenoble [5] et utilise des réseaux carrés de fils supraconducteurs d'aluminium de paramètre de maille de quelques micromètres, soumis à un champ magnétique*. Une décennie plus tard, Stöckmann et Kuhl [6] ont réalisé un simulateur utilisant des micro-ondes. L'expérience consiste, cette fois-ci, à faire une diffusion de micro-ondes sur 100 sites diffusants de hauteur ajustable. La périodicité de cette hauteur détermine une valeur de flux effective, et la transmission au travers de ce système permet de rendre compte, indirectement, du spectre de Hofstadter.

Au début de l'année 2013, de nouvelles expériences ont été menées sur ce sujet. Un réseau composé d'un couplage entre une couche de graphène et un cristal hexagonal de nitride de bore [7, 8] permet d'ajuster l'angle entre les deux couches et, ainsi, par un effet de moiré, de changer la longueur d'onde typique du motif selon un axe donné. Dans [7], le pas du super-réseau se situe entre 10 et 40 nm. Combinés à de forts champs magnétiques, ces dispositifs ont permis d'atteindre le régime du modèle d'Hofstadter et de mesurer son spectre en énergie.

Comme les niveaux d'énergies ne peuvent être mesurés qu'à partir de la conductance de Hall, il n'est pas possible, avec ce type d'expérience, de faire une mesure directe de la dimension fractale du spectre ou de faire des transitions d'un niveau à un autre dans le spectre. Dans le contexte des atomes froids, plusieurs groupes ont démontré qu'il était possible de simuler expérimentalement des champs magnétiques intenses pour des atomes neutres dans des réseaux optiques [9]. Ces champs magnétiques effectifs imposent ces atomes à se propager selon des orbites circulaires, de la même manière qu'un électron dans un champ magnétique uniforme [10, 11]. La réalisation expérimentale de ce système ne permet pas pour autant de faire une spectroscopie.

Dans ce chapitre nous proposons, dans un premier temps, de faire une étude détaillée du modèle de Hofstadter. Après avoir établi l'équation de Harper régissant l'évolution d'un électron dans un réseau carré bidimensionnel, nous verrons de quelles manières il est possible d'obtenir le spectre de Hofstadter. Nous montrerons que sa dimension fractale peut être calculée numériquement et que ce spectre suit des règles de construction issues de la théorie des nombres. Le lien entre ce modèle et l'effet Hall quantique entier sera ensuite discuté. La deuxième partie de ce chapitre sera consacrée à plusieurs études expérimental impliquant des atomes froids dans des réseaux optiques. Nous verrons que la distribution des niveaux d'énergie d'un gaz d'atomes, sans interaction, dans un potentiel quasi-périodique, a la même structure que celle du modèle d'Hofstadter, lorsque la profondeur de ce potentiel est grande. Une première approche de ce système peut se faire à l'aide de la diffusion d'une onde plane monochromatique sur un potentiel quasi-périodique de taille fini. Nous verrons que le coefficient en transmission au travers de ce potentiel permet de retrouver une trace indirecte du spectre fractal de Hofstadter.

Enfin, nous discuterons de deux méthodes expérimentales permettant de faire une spectroscopie locale d'un potentiel quasi-périodique infini.

3.2 Électrons dans un réseau 2D soumis à un champ magnétique

La première partie a pour but d'introduire les éléments permettant de réaliser l'étude d'une particule quantique chargée, plongée dans un cristal atomique à deux dimensions. Ce système pourra être traité dans le régime des liaisons fortes pour lequel les interactions entre les électrons et les atomes du réseau dominent. Le modèle rendra compte de la compétition entre le fait que les électrons sont liés au potentiel périodique, ce qui tend à distribuer leurs énergies en bandes, mais contraint par un champ magnétique, qui tend à distribuer leurs énergies en niveaux discrets.

∗. Le spectre est obtenu au moyen des oscillations de la température critique de transition superfluide lorsque l'on varie le champ magnétique dans le cadre de l'effet Little-Parks.

3.2.1 Niveaux de Landau

Considérons un électron de masse m_e et de charge e, dans un champ magnétique uniforme $\vec{B}$. La force de Lorentz s'applique sur la particule :

$$m_e \frac{\mathrm{d}\vec{v}}{\mathrm{d}t} = -e\vec{v} \times \vec{B}.$$

Nous prendrons le champ magnétique selon l'axe (Oz), $\vec{B} = B\vec{u}_z$ et la vitesse dans le plan (xOy). Classiquement, tout électron dans un plan soumis à un champ magnétique uniforme et perpendiculaire à ce plan a une trajectoire circulaire dont le rayon prend des valeurs continues, et est donné par $R_c = m_e v/eB = v/\omega_c$ où :

$$\omega_c = eB/m_e,$$

est la *fréquence cyclotron*. Quantiquement, le hamiltonien de cette particule s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{\vec{p}} - e\hat{\vec{A}}\right)^2}{2m_e} = \frac{\hbar\omega_c}{2}(\hat{\Lambda}_x^2 + \hat{\Lambda}_y^2), \tag{3.1}$$

avec $\hat{\Lambda}_x = (p_x - eA_x)/\sqrt{m_e\hbar\omega_c}$, $\hat{\Lambda}_y = (p_y - eA_y)/\sqrt{m_e\hbar\omega_c}$ et $[\hat{\Lambda}_x, \hat{\Lambda}_y] = i$. Le potentiel vecteur $\vec{A}$ est défini par $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$. Cette expression autorise plusieurs géométries de potentiel vecteur pour un même champ magnétique. Il est donc possible de faire un choix, dit de *jauge*, lors de la définition du hamiltonien. Les opérateurs $\hat{\Lambda}_x$ et $\hat{\Lambda}_y$, sont dits de translation (en impulsion), provenant de la présence de champs magnétiques. Une réécriture et la diagonalisation du hamiltonien montrent que les énergies sont quantifiées en niveaux de Landau :

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Le rayon cyclotron est désormais quantifié et s'écrit :

$$R_c = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}\sqrt{2n+1} \text{ (où } n \in \mathbb{N}).$$

qui est indépendant de la vitesse de l'électron, contrairement à son homologue classique. Le champ magnétique confine la particule dans une portion de l'espace dont l'ordre de grandeur typique est donné par la longueur magnétique $l_B = \sqrt{\hbar/(eB)}$. Le champ magnétique a donc pour effet de discrétiser le continuum énergétique auquel appartenaient les électrons. À l'instar d'une particule dans un potentiel harmonique, les niveaux d'énergie sont séparés d'un quantum $\hbar\omega_c$ de sorte que, plus le champ magnétique est intense, plus les niveaux sont espacés.

3.2.2 Électrons de Bloch dans un champ magnétique uniforme

Maintenant que nous avons caractérisé le comportement d'une particule quantique en présence d'un champ magnétique, regardons l'effet de l'introduction d'une périodicité spatiale sur les niveaux de Landau.

- **Réseau à deux dimensions**

Considérons un électron dans un réseau à deux dimensions, infini, et ayant une périodicité en x et en y : $\hat{V}(x + a_x, y + a_y) = \hat{V}(x, y)$ (cf. FIG. 3.1). En l'absence de champ magnétique, les solutions sont données par des bandes de Bloch à deux dimensions (cf. section 2.4.4).

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + \hat{V}(x, y), \tag{3.2}$$

dans ce cas, les solutions sont de la forme de Floquet-Bloch. On définit la base des vecteurs du réseau bi-dimensionnel par $\vec{a}_x = a_x\vec{e}_x$ et $\vec{a}_y = a_y\vec{e}_y$. Tout vecteur du réseau peut s'écrire sous la forme $\vec{R} = m\vec{a}_x + n\vec{a}_y$ avec $m, n \in \mathbb{Z}$. L'élément de surface élémentaire du réseau cristallin est donné par le produit vectoriel : $\vec{S} = \vec{a}_x \times \vec{a}_y$.

La présence d'un champ magnétique externe homogène nous conduit à introduire le flux magnétique $\phi = \int \vec{B}\mathrm{d}\vec{S}$ et le quantum de flux $\phi_0 = h/e$. Pour un réseau rectangulaire ($\vec{a}_x \perp \vec{a}_y$), la phase magnétique prend donc la valeur $\phi = Ba_xa_y$. Dans la suite du chapitre on considérera α, le rapport du flux électronique et du flux magnétique :

$$\boxed{\alpha = \frac{\phi}{\phi_0} = \frac{Ba_xa_y}{h/e}}, \tag{3.3}$$

défini par tous les paramètres et les constantes physiques du système (exceptée la masse de l'électron). Ultérieurement, on pourra distinguer deux régimes, celui de *Harper* pour lequel $a_xa_y/B \ll 1$ où les bandes sont étendues dans le spectre, et celui de *Hofstadter* pour lequel $a_xa_y/B \gg 1$ où les bandes sont resserrées. Remarquons que α est proportionnel au rapport de la surface élémentaire du réseau a_xa_y et de la surface décrite par l'orbite cyclotron πR_c^2 (cf. Fig. 3.1).

Le régime qui nous intéresse est celui pour lequel α est de l'ordre de 1, pour un pas typique du réseau cristallin de l'ordre de $a_x = a_y \sim 1$ angström, cela donne un champ magnétique de l'ordre de 400 000 T ! De tels champs magnétiques sont bien sûr inatteignables en laboratoire, d'où l'intérêt de trouver d'autres moyens permettant d'étudier de tels régimes.

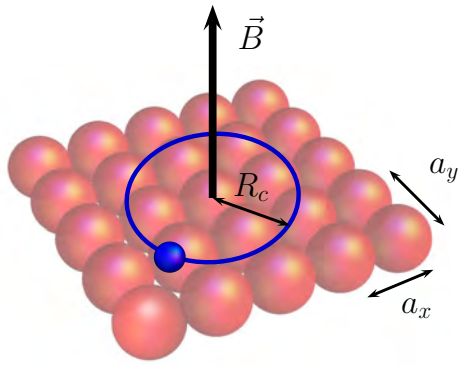


Figure 3.1

Un électron soumis à un champ magnétique externe a des niveaux d'énergies quantifiés, correspondant à des orbites circulaires perpendiculaires au champ $\vec{B}$. Lorsque cet électron se situe aussi dans un potentiel périodique, les niveaux sont représentés dans un diagramme de Bloch. La physique émergeant de la combinaison de ces deux potentiels fait l'objet de l'étude menée dans ce chapitre.

- **Point de vue de l'opérateur de translation**

L'opérateur de translation est défini par $\hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a})$ et a pour vecteurs propres les ondes planes : $\hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\vec{k}.\vec{a}}\psi(\vec{r})$. On peut le réécrire en termes d'opérateur de dérivation : $\psi(\vec{r} + \vec{a}) = \exp(\vec{a}.\partial_{\vec{r}})\psi(r)$. Si le hamiltonien est spatialement périodique, de période $\vec{a}$ alors $[\hat{T}_{\vec{a}}\hat{,}H] = 0$.

Nous avons vu lors du chapitre 2 que, dans le cas d'un potentiel périodique, les valeurs propres E_n se distribuent en bandes périodiques, dont on peut écrire le développement sous la forme d'une série de Fourier :

$$E_n(\vec{k}) = \sum_{\ell} E_n[\vec{a}_\ell]\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_\ell}. \tag{3.4}$$

L'application de l'opérateur de translation conduit alors à

$$E_n[\vec{a}_\ell]\hat{T}_{\vec{a}_\ell}\psi(\vec{r}\,) = E_n[\vec{a}_\ell]\mathrm{e}^{i\vec{k}.\vec{a}_\ell}\psi(\vec{r}\,), \tag{3.5}$$

soit encore :

$$\sum_\ell E_n[\vec{a}_\ell]\hat{T}_{\vec{a}_\ell}\psi(\vec{r}\,) = \sum_\ell E_n[\vec{a}_\ell]\mathrm{e}^{i\vec{k}.\vec{a}_\ell}\psi(\vec{r}\,) = E_n(\vec{k})\psi(\vec{r}\,). \tag{3.6}$$

Cette écriture opératorielle suggère d'écrire le hamiltonien sous la forme :

$$\hat{H} = \sum_\ell E_n[\vec{a}_\ell]\hat{T}_{\vec{a}_\ell} = \sum_\ell E_n[\vec{a}_\ell]\mathrm{e}^{i\vec{k}.\vec{a}_\ell} = E_n(-i\partial_{\vec{r}}). \tag{3.7}$$

Par exemple, dans le cas d'un réseau sinusoïdal périodique à une dimension, nous avons vu que dans le régime des liaisons fortes, la bande fondamentale prend la forme (2.14) : $E = -2t\cos(k_x a)$ et, par suite :

$$\hat{H} = -2t\cos\left(-i\hat{p}_x a/\hbar\right). \tag{3.8}$$

Sous l'effet d'un champ magnétique, la *substitution de Peierls* [12] consiste à remplacer $\vec{p}$ par $\vec{p} - e\vec{A}$. L'opérateur de translation s'écrivant à partir de l'opérateur impulsion $\hat{T}_{\vec{a}} = \exp\left(i\vec{p}\vec{a}/\hbar\right)$, un facteur de phase supplémentaire vient s'ajouter à la fonction d'onde translatée :

$$\psi(\vec{r}+\vec{a}) = \exp\left(-\frac{ie}{\hbar}\int_{\vec{r}}^{\vec{r}+\vec{a}} \vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{\ell}\right)\hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{r}\,). \tag{3.9}$$

En particulier, pour un chemin fermé, la fonction d'onde acquiert une phase de la forme :

$$\exp\left(-\frac{ie}{\hbar}\oint \vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{\ell}\right) = \exp\left(-2\pi i\frac{\phi}{\phi_0}\right). \tag{3.10}$$

Le facteur (3.10) est celui qui intervient dans l'effet Aharonov-Bohm [13]. Nous verrons, par la suite, que l'opérateur de translation pourra se généraliser en présence d'un champ magnétique.

- **Approximation de liaisons fortes**

Reprenons le formalisme introduit à la section 2.2.1, et étendons-le au cas bidimensionnel. Le hamiltonien d'un électron à un potentiel périodique à deux dimensions, s'écrit dans le régime des liaisons fortes [14] :

$$\hat{H} = -t_x\left(\hat{T}_x + \hat{T}_x^\dagger\right) - t_y\left(\hat{T}_y + \hat{T}_y^\dagger\right), \tag{3.11}$$

où t_x et t_y représentent les énergies nécessaires pour passer d'un site au site voisin, par effet tunnel, respectivement suivant x et y (cf. Fig. 3.2.a). On peut montrer de manière similaire à (Eq. 2.14) que la bande fondamentale s'écrit :

$$E_k = -2\left(t_x\cos(a_x k_x) + t_y\cos(a_y k_y)\right). \tag{3.12}$$

L'introduction de la composante liée au champ magnétique se faisant à l'aide de la substitution de Peierls (3.8), on peut écrire le hamiltonien sous la forme d'un *hamiltonien de Harper* :

$$\hat{H}_{\mathrm{H}} = -2\left(t_x\cos(\hat{K}_x a_x) + t_y\cos(\hat{K}_y a_y)\right), \tag{3.13}$$

avec $\hat{K}_x$ et $\hat{K}_y$ des variables conjuguées vérifiant la relation de commutation $[\hat{K}_x, \hat{K}_y] = i\hbar_{\mathrm{eff}}$ où $\hbar_{\mathrm{eff}} = \hbar/(eB)$ est la constante de Planck effective du système.

Au voisinage du minimum de bande, le hamiltonien de Harper ($t_x = t_y = t > 0$, $a_x = a_y = a$) peut s'approximer par :

$$\hat{H}_{\mathrm{H}} \simeq -4t + \frac{\hbar^2}{2\tilde{m}}(\hat{K}_x^2 + \hat{K}_y^2) = -4t + tK^2,$$

avec $\tilde{m} = \hbar^2/(2ta^2)$. Lorsque le flux α, défini à l'équation (3.3), est petit, les niveaux de Landau peuvent se réécrire [14] :

$$E_n = -4t + 4\pi t\left(n + \frac{1}{2}\right)\alpha, \text{ avec : } n \in \mathbb{N}.$$

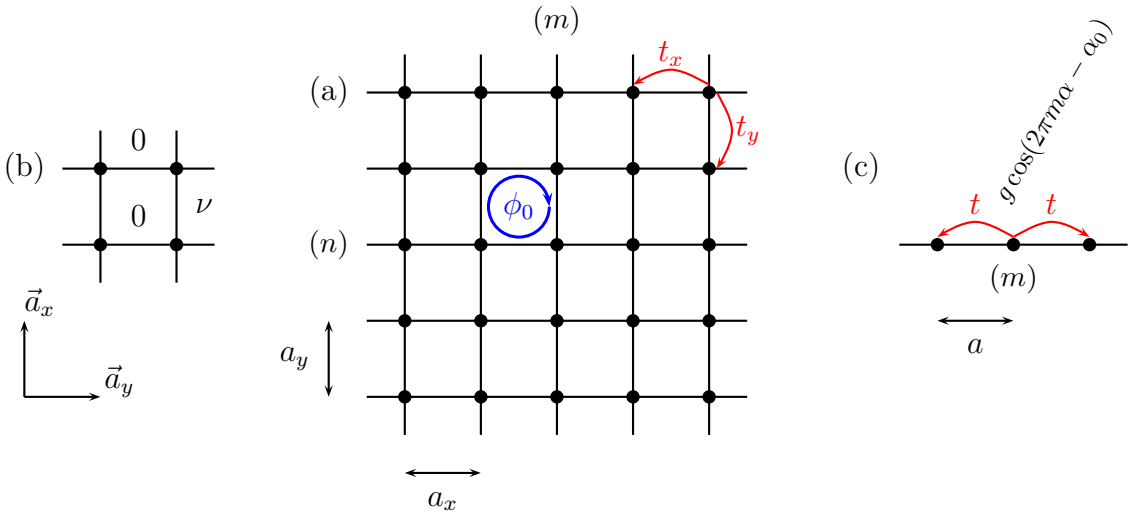


Figure 3.2

(a) Représentation schématique du réseau carré et de ses grandeurs associées. (b) Représentation schématique de la jauge de Landau qui conduit après approximation au (c) réseau à une dimension. Le paramètre g est le paramètre géométrique du modèle de Harper. Il est modulé par une sinusoïde de période α. On définit ici : $\vec{a}_x = a_x\vec{e}_x$ et $\vec{a}_y = a_y\vec{e}_y$ (cf. texte).

- **Retour de l'opérateur translation**

Nous avons vu que la substitution de Peierls ajoute un terme de phase supplémentaire dans l'opérateur de translation. On définit ici une généralisation de cet opérateur qui est l'opérateur de translation magnétique introduit par Luttinger [15] :

$$\hat{U}_x\psi(x,y) = \exp\left(\frac{ie}{\hbar}\int_x^{x+a_x}\vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{\ell}\right)\psi(x+a_x,y), \tag{3.14}$$

$$\hat{U}_y\psi(x,y) = \exp\left(\frac{ie}{\hbar}\int_y^{y+a_y}\vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{\ell}\right)\psi(x,y+a_y). \tag{3.15}$$

Ces opérateurs vérifient la relation $\hat{U}_x\hat{U}_y = \mathrm{e}^{2i\pi\alpha}\hat{U}_y\hat{U}_x$, avec α le rapport de flux (3.3), et permettent de faire la transition d'un site du réseau à un autre, en présence d'un champ magnétique.

Les nombres entiers m et n introduits à la sous-section 3.2.2 ne sont désormais plus de bons nombres quantiques. Il est nécessaire de définir une nouvelle base pour le réseau magnétique, à l'aide de la base du réseau périodique. Comme le fit Hofstadter [4], on prend* : $\vec{R}' = mq\vec{a}_x + n\vec{a}_y$, avec $q \in \mathbb{N}$. Il n'y a plus d'invariance par translation selon $m\vec{a}_x$ ($m \neq 0$). Pour pouvoir diagonaliser le hamiltonien, il faut maintenant se placer dans ce que l'on nomme la *première zone de Brillouin magnétique* (ou réduite), définie par $\vec{k} = (k_x \leq \pi/qa_x, k_y \leq \pi/a_x)$. Cette nouvelle zone de Brillouin ne peut donc être définie que si α est un nombre rationnel. Nous verrons que, dans le cas contraire, l'impossibilité de représenter le spectre dans une zone de Brillouin magnétique conduit à la fractalisation de la distribution d'énergie.

- **Modèle de Harper : dérivations discrètes**

La formulation discrète du modèle de Harper s'obtient dans deux contextes opposés : (i) le cas d'une seule bande de Bloch en présence d'un champ magnétique et (ii) le cas d'un seul niveau de Landau plus

∗. La notation q est inopportune car se heurte à celle de la profondeur du potentiel q. Sauf mention contraire, q sera associé à un nombre entier dans ce chapitre.

un potentiel périodique. L'article [16] offre une introduction pédagogique où est expliquée la validité du modèle de Harper dans ces deux cas limites.

Nous avons vu que le point de départ est la relation de dispersion pour une bande unique associée à un réseau carré (Eq. 3.12) auquel on applique la substitution de Peierls. Plusieurs choix de potentiels vecteurs s'offrent à nous. On prend *la jauge de Landau* $\vec{A} = eB(0, x, 0)$ (cf. Fig. 3.2.b). Le potentiel vecteur étant linéaire en x la substitution de Peierls, vue précédemment, introduit un déphasage, ν, uniquement selon y. Autrement dit, la jauge de Landau réalise une translation magnétique compensant la phase selon x, ce qui conduit à un système effectif à une dimension (cf. Fig. 3.2.c). On peut réécrire dans cette jauge les opérateurs translations (3.15) comme :

$$\hat{U}_x \psi(x, y) = \psi(x + a_x, y) \text{ et } \hat{U}_y = \mathrm{e}^{i\nu} \psi(x, y + a_y). \tag{3.16}$$

Le hamiltonien (3.13) peut se réécrire sous la forme :

$$\hat{H}_{\mathrm{H}} = -t_x \left(\mathrm{e}^{i\hat{p}_x a_x/\hbar} + \mathrm{e}^{-i\hat{p}_x a_x/\hbar} \right) - t_y \left(\mathrm{e}^{i(\hat{p}_y - eBx)a_y/\hbar} + \mathrm{e}^{-i(\hat{p}_y - eBx)a_y/\hbar} \right). \tag{3.17}$$

Les exponentielles contenant les opérateurs $\hat{p}_x$ et $\hat{p}_y$ étant des opérateurs de translation, l'équation de Harper s'écrit en fonction des opérateurs de translation magnétique :

$$\hat{H}_{\mathrm{H}} = -t_x \left(\hat{U}_x + \hat{U}_x^{-1} \right) - t_y \left(\hat{U}_y + \hat{U}_y^{-1} \right). \tag{3.18}$$

En posant $x = ma_x$, $y = na_y$ et $\psi(x, y) = \mathrm{e}^{i\nu m} \psi_m$ où l'on exploite l'invariance par translation selon y, il vient * :

$$\boxed{\psi_{m+1} + \psi_{m-1} + g \cos(2\pi m\alpha - \alpha_0)\psi_m = \varepsilon \psi_m}, \tag{3.19}$$

avec $\varepsilon = E/t_x$ et α_0 un terme de phase. Le facteur $g = t_y/t_x$ renferme donc la géométrie bi-dimensionnelle du système, qui se réduit maintenant à une équation selon un axe représenté à la figure 3.2.c. Plusieurs articles [17, 18] mentionnent le fait que $g = 2$ est un cas critique à la frontière entre un régime localisé ($g > 2$) et un régime étendu ($g < 2$) pour la fonction d'onde. Nous verrons qu'à l'interface entre ces deux régimes le spectre est fractal.

- **Géométrie du système**

La figure 3.3 représente le hamiltonien (3.13) dans la première zone de Brillouin. On remarque que les points $(0, 0)$ $[2\pi]$ sont des minima, les points $(\pi/2, \pi/2)$ $[2\pi]$ sont des maxima et les points $(\pi, 0), (0, \pi)$ $[2\pi]$ sont des cols. Il est intéressant de noter que l'on obtient des orbites ouvertes à condition que $-2|t_y - t_x| < E < 2|t_y - t_x|$. Cette condition énergétique permet de faire le lien avec le transport semi-classique d'électrons d'un site à l'autre. Ainsi, dans le cas du réseau carré ($t_x = t_y$), toutes les orbites sont fermées.

- **Dual du hamiltonien**

Considérons la transformation suivante :

$$\psi_m = \sum_n \tilde{\psi}_n \mathrm{e}^{in(2\pi m\alpha + \alpha_0)} \mathrm{e}^{i\beta m}, \tag{3.20}$$

que l'on insère dans l'équation d'Harper (3.18). Les $\tilde{\psi}_n$ vérifient :

$$\tilde{\psi}_{n+1} + \tilde{\psi}_{n-1} + \frac{2}{g} \cos(2\pi\alpha n + \alpha_0)\tilde{\psi}_n = E\tilde{\psi}_n, \tag{3.21}$$

∗. Le hamiltonien est parfois rencontré sous la dénomination de *almost Mathieu operator* et a fait l'objet de nombreuses études mathématiques concernant la caractérisation de son spectre. Nous donnerons par la suite quelques éléments de théorie spectrale permettant de mieux appréhender la physique du système sur lequel repose cet hamiltonien.

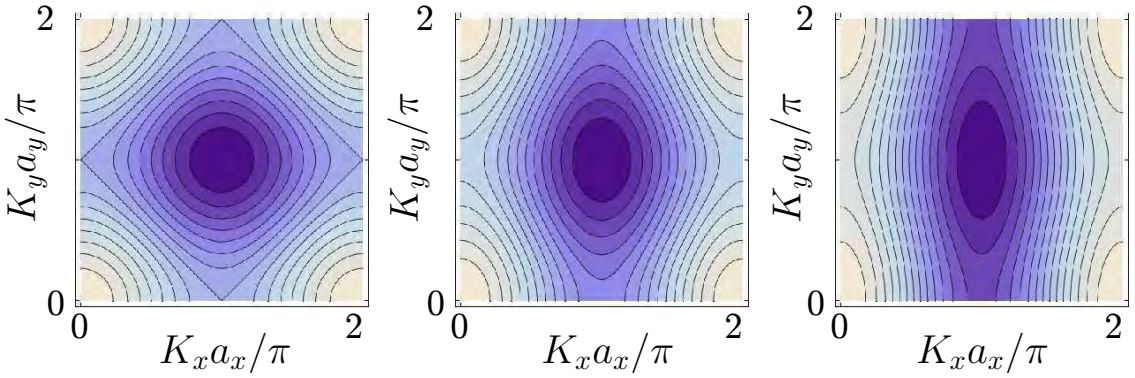


Figure 3.3

Courbes de niveau pour le hamiltonien de Harper (3.13), pour $t_x = 1$ (Gauche), $t_x = 2$ (Centre), et $t_x = 5$ (Droite) avec $t_y = 1$ fixé (ou de façon équivalente pour $t_y = 1$ (Gauche), $t_y = 1/2$ (Centre), et $t_y = 1/5$ (Droite) avec $t_x = 1$ fixé). Les valeurs les plus hautes sont données par les couleurs les plus sombres (ici pour $(x, y) = (\pi, \pi)$).

pour la même énergie propre E. Ainsi, les régimes où $g = 2t_y/t_x \to 0$ et $g \to \infty$ sont spectralement équivalents (cf. plus bas, section 4.3.3). L'interprétation physique est que la jauge de Landau utilisée précédemment est équivalente à celle où $\vec{A} = (-yB, 0, 0)$. La transformation (5.5) réalise le passage $m \to n$ (i.e. $x \to y$), autrement dit d'une jauge à l'autre. En résumé, l'auto-dualité du spectre, pour $g = 2$ est une conséquence de la géométrie du réseau sous champ magnétique.

3.2.3 La matrice de Harper

- **Représentation matricielle du hamiltonien de Harper**

L'écriture matricielle du système (3.19) est :

$$\begin{pmatrix} \psi_{m+1} \\ \psi_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon - g\cos(2\pi m\alpha - \alpha_0) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_m \\ \psi_{m-1} \end{pmatrix}. \tag{3.22}$$

Notons $\mathcal{H}(m)$ la matrice de Harper, et prenons le cas particulier où $g = 2$. Le vecteur (ψ_{m+1}, ψ_m) se déduit de (ψ_1, ψ_0) par m applications de la matrice $\mathcal{H}(m)$ sur ce vecteur*. Une solution physiquement acceptable requiert la finitude des ψ_m, autrement dit une périodicité en $Q \equiv \mathcal{H}(m)...\mathcal{H}(1)$. Si les matrices $\mathcal{H}(m)$ sont des matrices périodiques en m, Q consistent en la répétition de blocs de matrices dont la longueur est donnée par la période en m. Si q représente cette période, la condition sur α est :

$$2\pi\alpha(m+q) - \alpha_0 = 2\pi\alpha m - \alpha_0 + 2\pi p, \tag{3.23}$$

soit encore $\alpha = p/q$. Cette condition signifie que les deux valeurs propres de la matrice de Harper doivent être de module unité ou encore que $|\mathrm{Tr}\, Q(\varepsilon, \nu)| \leq 2$. La trace de Q est un polynôme de degré q en ε. La condition sur la trace est réalisée en q régions autour des q racines de Q. Si $\alpha = p/q$, la bande fondamentale de Bloch se divise en q bandes d'énergies distinctes, dégénérées p fois. Si α est irrationnel, le spectre d'énergie se « dissocie » en une infinité de sous-bandes dont la structure est fractale. Par la suite, on se placera souvent dans le cas particulier où la phase α_0 n'a pas d'incidence sur le spectre, c'est-à-dire dans la limite où α est irrationnel.

∗. Ici, la matrice de Harper peut être vue comme une matrice de transfert.

- **Représentation de Luttinger**

Reprenons le hamiltonien de Harper écrit en fonction des translations magnétiques $u_{x,y}$ [15]. Dans le cas où $\alpha = p/q$ (et $\alpha_0 = 0$), le théorème de Bloch s'applique et l'on peut écrire :

$$U_j(k_x, k_y) = \mathrm{e}^{ikj} u_j \text{ avec } j = x, y$$

et les u_j satisfont les relations :

$$u_j^q = \mathbb{I},\ u_x u_y = \mathrm{e}^{2i\pi p/q} u_y u_x. \tag{3.24}$$

Et, dans le cas particulier de q applications successives de cette dernière relation, on obtient $u_x^q u_y = \exp(2i\pi p) u_y u_x^q$, soit :

$$u_x^q u_y = u_y u_x^q. \tag{3.25}$$

Ainsi, les opérateurs u_x^q et u_y commutent entre eux et, avec le hamiltonien, définissant ainsi des bons nombres quantiques.

Un exemple de u_i est donné dans [19] par :

$$u_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & & 0 \\ & & & & 1 \\ 1 & & & & 0 \end{pmatrix} \text{ et } u_y = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \mathrm{e}^{2i\pi p/q} & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & \mathrm{e}^{2i\pi(q-1)p/q} \end{pmatrix}.$$

On rappelle que les solutions complexes de $\sqrt[q]{z} = 1$ sont toutes les $\exp(2i\pi k/q)$ telles que $0 \leq k < q$. Qui plus est, de par la forme de leur argument, les éléments diagonaux sont définis modulo q. Donc, comme $(p, q) \in \mathbb{N}^{2*}$, alors la présence des produits $(q - n)p$ (avec $0 \leq n < q$) dans la phase, implique que les éléments diagonaux de la matrice u_y, sont des racines $q^{ème}$ de l'unité.

Comme $u_y + u_y^{-1} = 2\mathrm{Re}(u_y)$, le hamiltonien de Harper peut s'écrire sous la forme de la matrice de Luttinger [14] :

$$\hat{H}_{\mathrm{H}} \hat{=} \begin{pmatrix} 2t_y \cos(k_y - 2\pi p/q) & t_x \mathrm{e}^{-ik_x} & 0 & \cdots & t_x \mathrm{e}^{ik_x} \\ t_x \mathrm{e}^{ik_x} & 2t_y \cos(k_y - 4\pi p/q) & t_x \mathrm{e}^{-ik_x} & \ddots & \vdots \\ 0 & t_x \mathrm{e}^{ik_x} & 2t_y \cos(k_y - j\pi p/q) & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & t_x \mathrm{e}^{-ikx} \\ t_x \mathrm{e}^{-ik_x} & \cdots & 0 & t_x \mathrm{e}^{ikx} & 2t_y \cos(k_y - \pi p) \end{pmatrix}. \tag{3.26}$$

Les matrices u_x et u_y sont de dimension q donc le spectre a q valeurs propres et, par conséquent, q bandes. L'obtention du spectre se fait par diagonalisation de $\hat{H}_{\mathrm{H}}$ (Eq. 3.18). Les bandes d'énergie pouvant être définies par leurs ensembles de définition, c'est-à-dire les valeurs du spectre en bord de bande, on peut se restreindre au calcul de ce dernier pour $\vec{k} = (0, 0)$ et $\vec{k} = (\pi/q, \pi/q)$.

Dans le cas général, rien ne nous oblige à choisir les opérateurs de translation tels qu'ils satisfassent les relations (3.2.3). Par exemple, on peut choisir [20] :

$$\hat{U}_x = \mathrm{e}^{ik_x} u_x,$$
$$\hat{U}_y = \mathrm{e}^{i\pi p/q} \mathrm{e}^{ik_y} \mathrm{e}^{ik_x} u_y u_x.$$

La matrice de Luttinger prend la forme anti-symétrique suivante :

$$\tilde{H}_{\mathrm{H}} = \begin{pmatrix} 0 & a_1 & 0 & \cdots & a_q^* \\ a_1^* & 0 & a_2 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2^* & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & a_{q-1} \\ a_q & & 0 & a_{q-1}^* & 0 \end{pmatrix},$$

mais ici avec :

$$a_j = \left(1 + \exp\left[i\frac{p}{q}\left(j + \frac{1}{2}\right) + ik_y\right]\right) \mathrm{e}^{ik_x}.$$

- **Analyse du modèle de Harper**

Définissons F, une fonction à valeur réelle*, comme le déterminant séculaire de la matrice de Harper :

$$F(E, k_x, k_y; \alpha) = \det(H_{\mathrm{H}} - E\mathbb{I}) = 0.$$

De par la périodicité dans l'espace des (k_x, k_y) et de par la dualité entre x et y (cf. sous-section 3.2.2) on peut montrer [21,22] que $F(E, k_x, k_y; \alpha)$ s'écrit comme la somme d'un polynôme de degré q indépendant de $\vec{k}$ [23] et d'une fonction périodique en k_x et en k_y :

$$F(E, k_x, k_y; \alpha) = F(E, 0, 0; \alpha) + 2t_x^q(1 - \cos(qk_x)) + 2t_y^q(1 - \cos(qk_y)). \tag{3.27}$$

En combinant les deux dernières équations on retrouve l'équation aux valeurs propres, qui permet de définir la fonction $G(E)$ rendant compte de la distribution des valeurs propres dans l'espace (E, α) :

$$G(E; \alpha) = F(E, 0, 0; \alpha) + 2t_x^q + 2t_y^q = 2t_x^q \cos(qk_x) + 2t_y^q \cos(qk_y). \tag{3.28}$$

Ainsi, $F(E, 0, 0; \alpha)$ est une fonction paire de E lorsque q est impair et inversement. Cela conduit au fait que $E = 0$ est un axe de symétrie de la fonction et un centre de symétrie, car le polynôme caractéristique ne contient que des puissances de E^{q-2n}.

Enfin, à l'aide de la forme $\tilde{H}_{\mathrm{H}}$ (3.2.3) de la matrice de Luttinger, on peut montrer que pour $\vec{k} = (0, \pi(1 + p/q))$, on a à la fois $2t_x^q \cos(qk_x) + 2t_y^p \cos(qk_x + qk_y) = 0$ et $a_r = 0$. On peut extraire alors une forme tridiagonale de $\tilde{H}_{\mathrm{H}}$ conduisant à une relation de récurrence donnant le polynôme G de degré q :

$$\begin{aligned}
&G^{(0)}(E) = 1 \\
&G^{(1)}(E) = -E \\
&\qquad\vdots \\
&G^{(n)}(E) = -EG^{(n-1)}(E) - 4\sin^2(\pi np/q)\, G^{(n-2)}(E) \text{ avec : } n = 1, 2, ..., q.
\end{aligned}$$

Le hamiltonien (3.13) est une fonction sinusoïdale oscillant entre -4 et 4. Ainsi, la fonction G est bornée par ces valeurs. Seules les valeurs prises dans cet intervalle sont pertinentes en ce qui concerne le spectre. L'intervalle de définition des bandes peut donc se déduire des points d'intersection entre la fonction F et les axes horizontaux 0 et 4. Prenons l'exemple de $\alpha = p/q = 1/4$ et $t_x = t_y = 1$. La figure 3.4 représente la fonction $F(E, 0, 0; 1/4)$ dans ce domaine de définition. Le spectre est alors composé de 4 bandes d'énergies, dont deux dégénérées en $E = 0$. Nous allons voir, tout de suite, que ce point conduit à une forme particulière de la relation de dispersion.

La matrice de Luttinger (3.26) s'écrit dans ce cas particulier :

$$\hat{H}_{\mathrm{H}}^{(k_x,k_y)}(\alpha = 1/4) = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.29}$$

Les valeurs propres sont :

$$E^{(\pm,\pm)}(\vec{k}) = \pm\sqrt{4 \pm \sqrt{2}\sqrt{(6 + \cos(4k_x) + \cos(4k_y))}}. \tag{3.30}$$

Ces valeurs propres vont se traduire dans le spectre par 4 bandes d'énergie séparées par deux ou trois

∗. Car la matrice H_{H} est hermitienne.

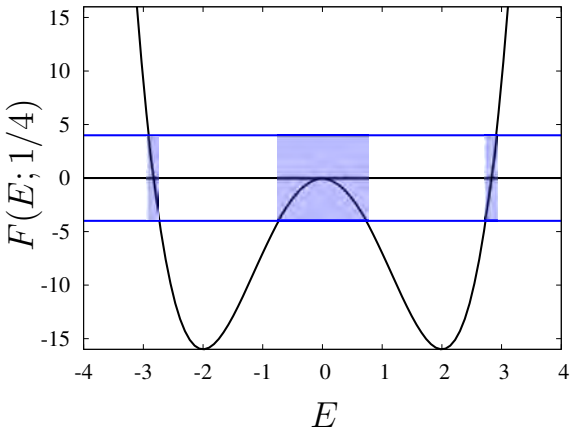


Figure 3.4

Représentation graphique du spectre correspondant à l'équation séculaire pour $\alpha = 1/4$. La courbe en trait plein correspond au polynôme caractéristique pour $(k_x, k_y) = (0, 0)$. Les droites en bleu sont les énergies à ± 4. Les zones bleues contituent les bandes d'énergies.

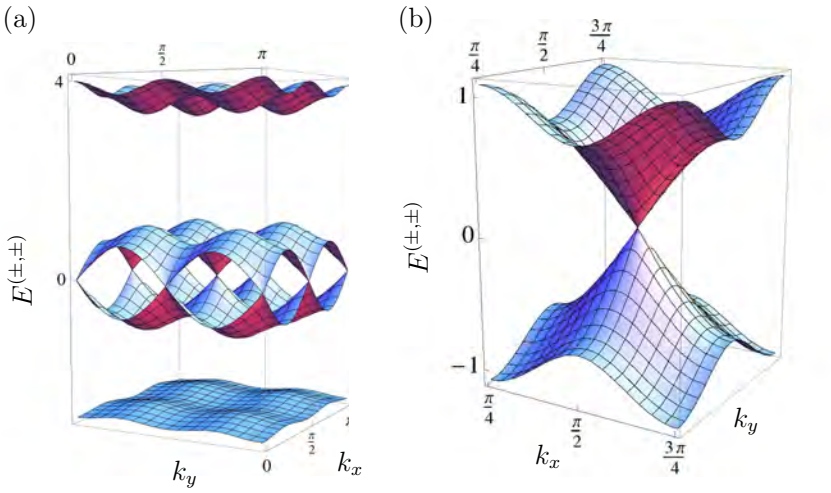


Figure 3.5

(a) Représentation graphique des 4 valeurs propres dans le cas où $\alpha = 1/4$ dans une région quatre fois supérieure à la première zone de Brillouin $(\pi/4, \pi/4)$. (b) Agrandissement de la zone de contact entre les bandes.

gaps selon les cas. Ainsi, pour $\vec{k} = (0, 0)$ et $\vec{k} = (\pi/4, \pi/4)$ on obtient respectivement : $E^{(0)} = \pm 2\sqrt{2}$ et $E^{(\pi/4)} = \pm\sqrt{2(2 \pm \sqrt{2})}$, ces valeurs correspondent aux minima et aux maxima de la dispersion représentée à la figure 3.5.

Les deux bandes centrales $E^{(+-)}$ et $E^{(-+)}$ calculées présentent une zone de contact conique pour des valeurs multiples de $\pi/4$. Ce résultat (qui a été abordé par exemple dans la thèse de A. Barelli pour

$\alpha = 1/2$ [14]) est une conséquence du développement limité * de ces valeurs propres autour du point de contact que l'on nomme dans ce cas cône de Dirac. Ainsi, on peut montrer que la relation de dispersion est de la forme approchée : $E(\vec{k} \simeq (m\pi/2, n\pi/2)) \approx \pm 2\sqrt{1 \mp 2 - k_x^2/2 - k_y^2/2}$.

En réalité, cette propriété du spectre de Harper † est générale à tous les q pairs [24]. En effet, quand $t_x = 0$, l'équation séculaire (3.28) devient $G(E) = F(E) - 2t_y^q \cos(qk_y)$. Ainsi, lorsque l'on se place à $E = 0$ après utilisation du pivot de Gauss, le calcul du déterminant se réduit à $F(0) = 2(-1)^{q/2} t_y^q$. Mais comme la dualité doit être conservée, on a aussi $F(0) = (-1)^{q/2}(t_x^q + t_y^q)$. Finalement, en injectant cette relation dans (3.28) :

$$(-1)^{q/2}(t_x^q + t_y^q) = 2t_x^q \cos(qk_x) + 2t_y^q \cos(qk_y) \Leftrightarrow \begin{cases} q = 4n \Rightarrow (k_x, k_y) = (2\pi m/q, 0) \\ q = 4n + 2 \Rightarrow (k_x, k_y) = ((2m+1)\pi/q, \pm\pi/q). \end{cases}$$

La relation de dispersion autour de chaque cône de Dirac est de la forme :

$$E \propto \pm q\sqrt{t_x^q k_x^2 + t_y^q k_y^2}.$$

3.2.4 Analyse spectrale du modèle de Harper

On procède à présent à un calcul systématique des valeurs propres E du hamiltonien de Harper (3.26) en fonction du paramètre $\alpha = p/q$, pour des valeurs de k_x et k_y prises dans la première zone de Brillouin. Pour $g = 2$, ces valeurs propres se distribuent selon la forme dite de papillon de Hofstadter (Fig. 3.6).

- **Décomposition du spectre d'un opérateur**

Soit $\hat{H}$ un opérateur d'un espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Soit $E_H(\lambda \in \mathbb{R})$ l'ensemble des λ tel que $\hat{H} - \lambda\mathbb{I}$ n'est pas inversible. On appelle le *spectre* $\sigma(\hat{H})$ de $\hat{H}$, l'ensemble fermé des points de $E_H(\lambda)$ tels que [25] :

$$\sigma(\hat{H}) = \{\lambda \in \mathbb{R} : E_H(\lambda + \epsilon) - E_H(\lambda - \epsilon) \neq 0 \text{ pour tout } \epsilon > 0\}.$$

L'ensemble de toutes les valeurs propres de $\hat{H}$ est nommé *spectre ponctuel* $\sigma_p(\hat{H})$.

On note $\mathcal{H}_p$ le sous-espace linéaire fermé généré par tous les sous-espaces $P(\lambda)\mathcal{H}$ avec $\lambda \in \sigma_p(H)$ et $P(\lambda)$, la projection orthogonale de l'espace propre associée aux valeurs propres λ. Si $\mathcal{H} = \mathcal{H}_p$ on dit que le spectre est *purement ponctuel*. Si $\mathcal{H}_p = 0$ on dit que le spectre est *purement continu*.

En général $\mathcal{H}$ peut être écrit comme la somme de deux sous-espaces H-invariants : $\mathcal{H}_p$ et $\mathcal{H}_c$. Le spectre associé à ce dernier est le spectre continu $\sigma_c(\hat{H})$. Enfin, $\mathcal{H}_c$ peut lui aussi être écrit comme la somme de deux sous-espaces orthogonaux $\mathcal{H}_{ac}$ et $\mathcal{H}_{sc}$, dont les spectres associés sont nommés respectivement *absolument continu* $\sigma_{ac}(\hat{H})$ et *singulièrement continu* $\sigma_{sc}(\hat{H})$. *In fine*, l'espace et le spectre peuvent être décomposés tels que :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_p \oplus \mathcal{H}_{ac} \oplus \mathcal{H}_{sc} \tag{3.31}$$

$$\sigma(H) = \bar{\sigma}_p(H) \cup \sigma_{ac}(H) \cup \sigma_{sc}(H). \tag{3.32}$$

- **Propriétés de symétrie et de construction récursive du spectre**

Les propriétés de symétrie de cette distribution ont été, pour la première fois, énoncées dans l'article de Hofstadter [4]. On énumère ici quelques unes des caractéristiques de ce spectre.

∗. Les cosinus et la racine sont quadratiques par développement limité lorsque l'on approche $\vec{k} = (m\pi/2, n\pi/2)$ avec $m, n \in \mathbb{Z}$.

†. Qui n'apparaît pas dans le cas d'un réseau bi-dimensionnel sans la présence d'un champ magnétique.

1. Soit $N \in \mathbb{Z}$, alors $\forall \alpha \in \mathbb{R} \ : \ \sigma(\alpha + N) = \sigma(\alpha)$. Le spectre est périodique de période 1 selon α.

2. Pour tout $\alpha \in \mathbb{R} : \sigma(-\alpha) = \sigma(\alpha)$, ce qui traduit la parité du spectre, que l'on peut déduire directement de l'équation (3.19).

3. $E \in \sigma(\alpha) \Leftrightarrow -E \in \sigma(\alpha)$, qui traduit la parité du spectre selon l'axe $E = 0$.

4. Si $E \in \sigma(\alpha)$ pour tout α alors $-4 \leq E \leq 4$.

Toute l'information concernant le spectre est contenue dans la cellule élémentaire * $(\alpha, E) \in ([0, 1], [-4, -4])$. Ainsi, on peut assigner à chaque cellule du spectre une valeur locale d'énergie et de α notées respectivement $\epsilon = \{E\}$ et $\beta = \{\alpha\}$, où les $\{\}$ représentent la partie fractionnaire. On peut voir, par ailleurs, que le hamiltonien est (3.19) identique à lui-même si l'on intervertit $\alpha = p/q$ et $1/\alpha = q/p$.

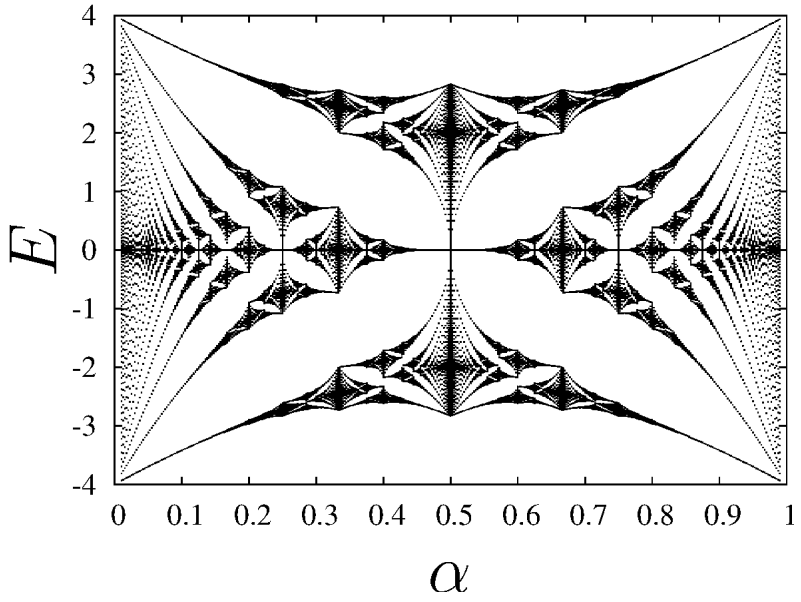
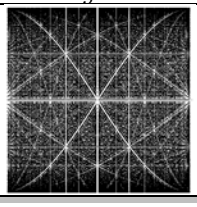
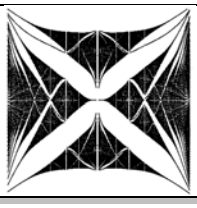
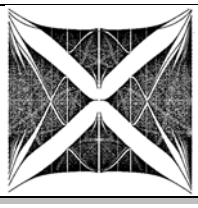
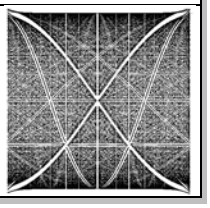


Figure 3.6

Le spectre du modèle de Harper pour $g = 2$ est couramment appelé papillon d'Hofstadter à cause de son aspect. Ce spectre présente de nombreuses symétries.

∗. Par la suite, nous considérerons implicitement que nous sommes dans cette cellule lorsque les axes ne sont pas indiqués.

- **Caractéristiques du spectre pour différentes valeurs de g et résumé des propriétés**

	$g = 0$	$g < 2\ (= 1)$	$g > 2\ (= 5)$	$g \gg 2\ (= 80)$
Spectre purement ponctuel σ_p	vide $\forall \alpha, \alpha_0$	vide $\forall \alpha, \alpha_0$	vide $\forall \alpha, \alpha_0$	non vide $\forall \alpha, \alpha_0$
Spectre singulier σ_s	vide $\forall \alpha, \alpha_0$	vide $\forall \alpha, \alpha_0$	non vide $\forall \alpha, \alpha_0$	non vide $\forall \alpha, \alpha_0$
Spectre absolument continu σ_{ac}	$\alpha \notin \mathbb{Q}$ et non vide $\forall \alpha, \alpha_0$ avec $\lvert\sigma_{ac}(\alpha, g)\rvert = \lvert\sigma(\alpha, g)\rvert \geq 4 - 2g$	non vide $\forall \alpha$	non vide $\forall \alpha, \alpha_0$	non vide $\forall \alpha, \alpha_0$ Liouville (cf. plus bas)
Représentation graphique				

3.2.5 Rationalité de α et construction du spectre

Dans cette sous-section, on procède à une description complémentaire à celle de Hofstadter concernant la construction du spectre à partir des propriétés numériques du paramètre α.

- **Approximations de nombres irrationnels par des nombres rationnels**

Hofstadter a montré que les propriétés du spectre du modèle de Harper sont étroitement liées à la rationalité de α. Dans la limite irrationnelle, les valeurs propres se décomposent en une infinité de sous bandes. On présente ici différentes façons d'approximer un nombre irrationnel par un nombre rationnel. Cette question a été un important problème de théorie des nombres. D'abord Liouville, puis Roth, ont donné une façon quantitative pour définir un bon approximant d'un nombre irrationnel.

Théorème de Thue-Siegel-Roth. *Soit $\alpha \notin \mathbb{Q}$ et $\epsilon \in \mathbb{R}^{+*}$, l'équation :*

$$0 < \left|\alpha - \frac{p}{q}\right| < \frac{1}{q^{2+\epsilon}}, \tag{3.33}$$

où $(p, q) \in (\mathbb{N}, \mathbb{N}^*)$ a un nombre fini de solutions à condition que p et q soient co-premiers.

Autrement dit, mesurer l'irrationalité d'un nombre α revient à trouver le ϵ minimum tel que l'équation (3.33) est satisfaite (parfois appelée constante de Liouville-Roth), on le note $\epsilon(\alpha) = \inf_{\epsilon \in \mathbb{R}} \epsilon$.

- **Calcul du degré d'irrationalité**

Le calcul de ce minimum permet de distinguer plusieurs cas :

- $\epsilon(\alpha) = -1$, alors α est rationnel,
- $\epsilon(\alpha) = 1$, alors α est algébrique de degré >1,
- $\epsilon(\alpha) > 1$, alors α est transcendant.

Une manière de calculer $\epsilon(\alpha)$ est de prendre le développement en fraction continue de $\alpha = [a_0, a_1, a_2, ...]$ et de calculer :

$$\epsilon(\alpha) = -1 + \lim_{n \to \infty} \sup \frac{\ln a_{n+1}}{\ln a_n} = \lim_{n \to \infty} \sup \frac{\ln q_{n+1}}{\ln q_n}. \tag{3.34}$$

Ainsi, dans le cas où $\alpha = \phi = (1-\sqrt{5})/2$ on obtient $\epsilon(\phi) = 1$, car $a_{n+1} = a_n = 1$ et aussi parce que $\phi = \lim_{n\to\infty} u_n/u_{n+1}$, où les u_n proviennent de la suite de Fibonacci. On retrouve alors le fait que le nombre d'or est algébrique (issu d'un polynôme de degré 2).

Un cas particulier très important concerne les nombres que l'on appelle *nombres de Liouville*. Ce sont les irrationnels α tels qu'il existe une séquence de couples (p_n, q_n) de sorte que $|q_n\alpha - p_n| < q_n^{-q_n}$; leur mesure d'irrationalité ϵ est infinie. Dans ce sens, les nombres de Liouville sont très bien approximés par un nombre rationnel. *A contrario*, on appelle *nombres diophantiens* les irrationnels s'approximant très mal par un nombre rationnel.

- **Développement en fraction continue**

On peut facilement se convaincre que tout nombre réel admet un unique développement en fraction continue. Pour son approche WKB du modèle de Harper, Azbel', dans un article fondateur [26], fait l'hypothèse que si l'on écrit le développement en fraction continue suivant :

$$\begin{aligned}\alpha &\approx a_0 + \frac{1}{a_1 + p_1/q_1},\\ &\approx a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2+p_2/q_2}},\\ &\approx a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2+\frac{1}{a_3+\cdots}}},\end{aligned}$$

le spectre va se scinder en $|a_1|$ bandes qui, elles-mêmes, vont se scinder en $|a_1a_2+1|$ bandes, etc. L'avantage de ce raisonnement est qu'il permet de comprendre intuitivement de quelle façon le spectre se regroupe en *agrégats* de bandes de plus en plus petites. Hofstadter fait la critique de cette intuition dans son article [4], en disant que c'est approximativement le cas mais pour des valeurs de $|a_i| \gg 1$ (validité de l'approche WKB). Des travaux plus récents ont montré que ce raisonnement reste valable pour des valeurs $|a_i| \approx 1$ [27].

On rappelle que pour un nombre rationnel $\alpha \approx p_n/q_n = [a_0, a_1, ..., a_n]$ on a les relations :

$$p_n = \det\begin{pmatrix} a_0 & -1 & 0 & \cdots & 0\\ 1 & a_1 & -1 & \ddots & 0\\ 0 & 1 & a_2 & \ddots & 0\\ 0 & 0 & 1 & \ddots & -1\\ 0 & 0 & 0 & \ddots & a_{n-1}\end{pmatrix} \text{ et } q_n = \det\begin{pmatrix} a_1 & -1 & 0 & \cdots & 0\\ 1 & a_2 & -1 & \ddots & 0\\ 0 & 1 & a_3 & \ddots & 0\\ 0 & 0 & 1 & \ddots & -1\\ 0 & 0 & 0 & \ddots & a_n\end{pmatrix}. \tag{3.35}$$

À l'inverse, il est possible de construire un développement en fraction continue à partir d'un nombre irrationnel donné. Pour ce faire, il suffit d'implémenter l'algorithme d'Euclide.

- **Règle d'Hofstadter**

Dans son article [4], Hofstadter présente une règle permettant de construire le spectre du hamiltonien du modèle de Harper de manière récursive. La méthode repose sur des règles de décomposition des bandes, et plus particulièrement sur l'hypothèse que chaque bande se sépare en sous-bandes, mises à l'échelle, regroupées en trois agrégats séparés par deux gaps principaux. Autrement dit, à chaque itération, il est toujours possible de découper le spectre en 2 agrégats de bord et un agrégat central. Pour les agrégats de bord on peut écrire que la mise à échelle s'écrit à l'aide d'une fonction $R(\alpha)$ telle

que [*] :

$$\begin{aligned} R(\alpha) &= \{1/\alpha\} && 0 < \alpha < 1/2, \\ &= \{1/(1-\alpha)\} && 1/2 < \alpha < 1, \end{aligned}$$

où $\{x\}$ représente la partie fractionnaire de x. Et pour l'agrégat central la mise à l'échelle s'écrit à l'aide de la fonction $S(\alpha)$, telle que :

$$\begin{aligned} S(\alpha) &= \{\alpha/(1-2\alpha)\} && 0 < \alpha < 1/2, \\ &= \{1-\alpha/(2\alpha-1)\} && 1/2 < \alpha < 1. \end{aligned}$$

Ces fonctions peuvent être obtenues de manière analytique, à partir d'un calcul basé sur une récurrence portant sur les différents ordres de la théorie des perturbations [28]. Ce que traduisent ces relations est que les bandes suivent des lois d'échelles. Par exemple, $\alpha \to R(\alpha)$ et de la même façon pour les bandes centrales $\alpha \to S(\alpha)$. En revanche, le vecteur d'onde (dans la première zone de Brillouin) se transforme comme : $k \to k/\alpha$.

- **Loi d'échelle**

Comme nous l'avons vu précédemment, la périodicité du système, à chaque approximant rationnel, (Eq. 3.35) est donnée alors par $q_1 = |a_1|$, puis $q_2 = |a_1 a_2 + 1|$, puis $q_3 = |a_1 a_2 a_3 + a_1 + a_3|$ etc. Un article de Thouless et Niu [29] propose une loi d'échelle sur la fonction d'onde permettant de rendre compte de la façon dont est partitionné le spectre, pour g quelconque. Ils reprennent la limite de Hofstadter $a_i \gg 1$ et considèrent que le spectre est composé de sous-parties, de blocs dont les tailles sont proches de q_n. C'est-à-dire qu'ils partent d'un bloc de taille a_1 séparé en $|a_2|$ blocs. Le spectre est alors découpé en $|a_1 a_2 + 1|$ bandes.

On peut vérifier, par la même occasion, qu'il n'est pas possible de choisir un α tel que le développement en fractions continues produise une décomposition de *chaque bande* du spectre en deux lors d'un passage à un approximant supérieur. En effet, une telle décomposition impliquerait que l'on ait $q_n = 2^n$. Or, si $q_1 = |a_1| = 2$ alors $q_2 = |a_1 a_2 + 1| = |\pm 2 a_2 + 1| = 4$, qui a pour solutions $\pm 5/2, \pm 3/2 \notin \mathbb{N}$. Autrement dit, il semble impossible de construire un ensemble de Cantor *stricto sensu* se découpant en 2^n sous ensembles à chaque ordre n.

En revanche, il est toujours possible de choisir un α de sorte à ce que la *bande centrale* se découpe en M bandes à chaque ordre. La procédure consiste simplement à itérer jusqu'à l'ordre n [29] :

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= M p_n \pm p_{n-1} \text{ avec } p_0 = 1 \text{ et } p_1 = N, \\ q_{n+1} &= N p_{n+1} + p_n, \end{aligned}$$

pour un développement en fraction continue de $p_n/q_n = [M, N, ..., N]$. Qui plus est, dans le cas particulier où $M = 0$ et $N = n$, on peut écrire [†] : $\alpha = (\sqrt{n^2+4} - n)/2 = [0, n, n, ...]$. Il est démontré que, dans ce cas, le spectre est auto-similaire [28].

Pour s'en convaincre, prenons le cas du nombre d'or, ϕ, pour lequel $n = 1$, et du nombre d'argent pour lequel $n = 2$. Dans le premier cas, on peut écrire la règle de Hofstadter (3.2.5) comme :

$$\begin{aligned} R(\phi) &= \left\{\frac{1}{\phi}\right\} = \{\phi + 1\} = \phi - 1, \\ S(\phi) &= \left\{\frac{\phi}{1-2\phi}\right\} = \left\{\frac{\phi}{\phi^2 - \phi}\right\} = \left\{\frac{1}{\phi - 1}\right\} = \left\{-1 - \frac{1}{\phi}\right\} = -\{1 + \phi\} = 1 - \phi, \end{aligned}$$

car $\phi^2 + \phi - 1 = 0$. On peut montrer que l'on obtient les mêmes relations avec le nombre d'argent. En fait ces deux nombres sont les seules valeurs de α pour lesquelles nous avons ces règles de construction

∗. Le passage d'une partie à l'autre se fait par la transformation $\alpha \to 1 - \alpha$.
†. Résultat que l'on peut mettre en regard avec le théorème de Lagrange concernant les fractions continues périodiques.

auto-similaires. À l'instar de la loi d'échelle sur α à laquelle nous venons de procéder, nous pouvons écrire une loi d'échelle concernant le vecteur d'onde $k' = bk$ qui est couplé à $g' = g^b$ (dans le cas du nombre d'or $b = 1/\phi$) [28].

3.2.6 Dimension fractale du spectre dans la limite irrationnelle

Nous présentons ici plusieurs manières de caractériser la fractalité du spectre auto-similaire du modèle de Harper, basées sur différentes grandeurs physiques complémentaires, permettant de calculer directement la dimension fractale.

- **Structure fractale du spectre**

Avron et Simon ont démontré que le spectre de Hofstadter est un *ensemble de Cantor* lorsque $\alpha \notin \mathbb{Q}$ [30]. L'article [31] propose une méthode asymptotique permettant d'extraire la dimension fractale du spectre de Harper-Hofstadter basée sur les règles de construction de Hofstadter vu précédemment. Nous proposons dans cette sous-section d'utiliser les caractéristiques d'autosimilarité du spectre pour extraire numériquement une valeur de sa dimension fractale.

On pose $\alpha_0 = 0$ sachant que, dans la limite irrationnelle, le spectre est indépendant de α_0. Comme le calcul analytique de la dimension de Hausdorff semble inaccessible, on propose ici une première approche au moyen d'une méthode numérique dite de *box-counting* (aussi nommée dimension de Minkowski–Bouligand). L'avantage de cette méthode est que, dans le cas présent d'un ensemble type ensemble de Cantor, la dimension de box-counting est égale à la dimension fractale.

- **Exemple de l'ensemble de Cantor**

Les ensembles de Cantor sont historiquement les premiers objets fractals qui ont été étudiés. Leurs constructions sont essentiellement basées sur un schéma itératif, qui consiste à prendre un ensemble continu et borné de points, à une ou plusieurs dimensions, et à enlever à chaque étape plusieurs intervalles de points selon une règle définie. À titre d'exemple, prenons l'ensemble de Cantor triadique $\mathcal{C}$ à une dimension. La règle de construction consiste à prendre un ensemble [0,1] et à le subdiviser en 3 morceaux identiques, puis à enlever le morceau central. À la première itération il reste alors $[0, 1/3] \cup [2/3, 1]$. Ensuite, on réitère cette subdivision/concaténation pour les deux morceaux restants, et ainsi de suite. Autrement dit, la masse initiale M_0 de longueur L_0 se retrouve doublée et d'une longueur triple, soit à la n-ième itération $M_n = 2M_0$ masses, pour une longueur totale de $L_n = 3L_0$. Ainsi, la relation de loi d'échelle se note simplement :

$$M(L) = 2M(L/3).$$

De la sorte, à chaque itération n on retire une fraction $2^n/3^{n+1}$ supplémentaire, d'où le total restant (cf. figure 3.7) :

$$1 - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{3^{n+1}} = 1 - \frac{1}{3}\left(\frac{1}{1-2/3}\right) = 0.$$



Figure 3.7

Ensemble de Cantor pour les 5 premiers ordres.

La dimension fractale, d_F d'un objet peut être vue comme un paramètre d'échelle. En effet, pour mesurer un objet, prenons un segment. Le nombre de segments N, de taille ϵ, nécessaire pour mesurer

cet objet croit comme : $N \propto 1/\epsilon^{d_F}$. La dimension fractale s'écrit :

$$d_F = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\log N}{\log(1/\epsilon)}. \tag{3.36}$$

Le cas pour lequel $d_F \notin \mathbb{N}$, correspond à celui où l'objet considéré est *fractal*. Dans le cas particulier de l'ensemble de Cantor, nous avons vu qu'à chaque étape on enlève une fraction de 1/3 de l'ensemble. Ainsi, la dimension fractale peut être calculée exactement car la loi d'échelle sur les masses est connue et donne $1 = 2/3^{d_F}$, soit : $d_F = \log 2/\log 3 \approx 0.6309$.

- **Le spectre d'Hofstadter comme un ensemble de Cantor**

Nous avons développé, dans la section précédente, la construction itérative du spectre à partir des règles d'Hofstadter. Voyons maintenant de quelle façon nous pouvons faire un lien direct entre ce spectre et un ensemble de Cantor. Calculons les fonctions R et S pour un ordre d'approximation du nombre d'or, en sachant que l'on peut définir $\phi_n = F_{n-1}/F_n$ où les F_n sont les différents termes de la suite de Fibonacci $F_{n+1} = F_n + F_{n-1}$ avec initialement $F_0 = F_1 = 1$. Comme, par définition, $1/2 < \phi_n < 1$, on obtient [28] * :

$$\begin{aligned}
R(\phi_n) &= \left\{\frac{1}{1-\phi_n}\right\} = \left\{\frac{1}{1-F_{n-1}/F_n}\right\} = \left\{\frac{F_{n-1}+F_{n-2}}{F_{n-2}}\right\} = \left\{1+\frac{F_{n-1}}{F_{n-2}}\right\} \\
&= \left\{1+\frac{F_{n-2}+F_{n-3}}{F_{n-2}}\right\} = \{2+\phi_{n-2}\} = \phi_{n-2}, \\
S(\phi_n) &= \left\{\frac{\phi_n}{2\phi_n-1}-1\right\} = \left\{\frac{F_{n-1}/F_n}{2F_{n-1}/F_n-1}\right\} = \left\{\frac{F_{n-1}}{F_{n-1}-F_{n-2}}\right\} = \left\{\frac{F_{n-1}}{F_{n-3}}\right\} \\
&= \left\{1+\frac{F_{n-2}+F_{n-3}}{F_{n-3}}\right\} = \left\{1+\frac{F_{n-3}-F_{n-4}}{F_{n-3}}\right\} = \{2+\phi_{n-3}\} = \phi_{n-3}.
\end{aligned}$$

Ainsi, lorsque l'on passe à la limite où $n \to \infty$, le rapport $R(\phi_n)/S(\phi_n) \to 1$. Autrement dit, le facteur d'échelle entre les bandes centrales et périphériques tend à s'uniformiser.

Une autre conséquence de cette récurrence est que le calcul numérique du rapport entre la largeur des agrégats placés sur les côtés, pour ϕ_n, et la largeur totale du spectre, pour ϕ_{n-2}, tend vers une constante $\beta = 7.59$ ($\beta = 5.77$ pour le nombre d'argent). D'un autre côté, le rapport entre la largeur de l'agrégat central pour ϕ_n et la largeur totale pour ϕ_{n-3} tend vers une autre constante $\delta = 13.74$ ($\delta = 39.59$ pour le nombre d'argent). Ainsi, dans le cas particulier du nombre d'or, à chaque itération chaque masse du spectre passe à $2M$ pour les bandes de bord, et à M pour les bandes centrales. On peut écrire la loi d'échelle [28] :

$$M(L) = 2M(L/\beta) + M(L/\delta). \tag{3.37}$$

Le spectre est alors un ensemble de Cantor à deux paramètres d'échelle †. Et on peut écrire alors :

$$1 = \frac{2}{\beta^{d_F}} + \frac{1}{\delta^{d_F}}.$$

On trouve pour le nombre d'or $d_F \approx 0.497$ et 0.496 pour le nombre d'argent. L'article [28] ne démontre pas l'universalité de cette dimension fractale mais argumente que si $\phi_n = p_n/q_n$, les q_n bandes auront une largeur moyenne de $1/q^2$. La formule générale (3.36) pour $q = N$ et $\epsilon = q^2$ conduit à un exposant fractal d'exactement $d_F = 0.5$. Cette valeur doit être confirmé par une étude numérique. On propose, dans un premier temps d'utiliser une méthode itérative de calcul de la dimension fractale.

∗. Attention : la définition de S de cet article diffère de celle employée ici.
†. On retrouve un ensemble de Cantor triadique, comme défini précédemment, dans la limite où $\beta = 3$ et $\delta \to \infty$.

- **Box-counting**

La méthode numérique la plus universelle pour mesurer la dimension fractale d'un objet est le *box-counting* [32]. Cette méthode consiste à subdiviser l'espace (fini) en un nombre n de boîtes de largeur δ. Ici, on prend un espace à une dimension, mais le raisonnement reste valable à un nombre arbitraire de dimensions. Dans ce cas, la dimension fractale de box-counting est donnée par (3.36)

Prenons, par exemple, un vecteur composé de N nombres 0 ou 1. Si l'on prend une distribution aléatoire de ces 0 ou 1 on s'attend à ce que le box-counting tende ($n \to N$) vers la probabilité d'avoir 0 ou 1 ($N \to \infty$).

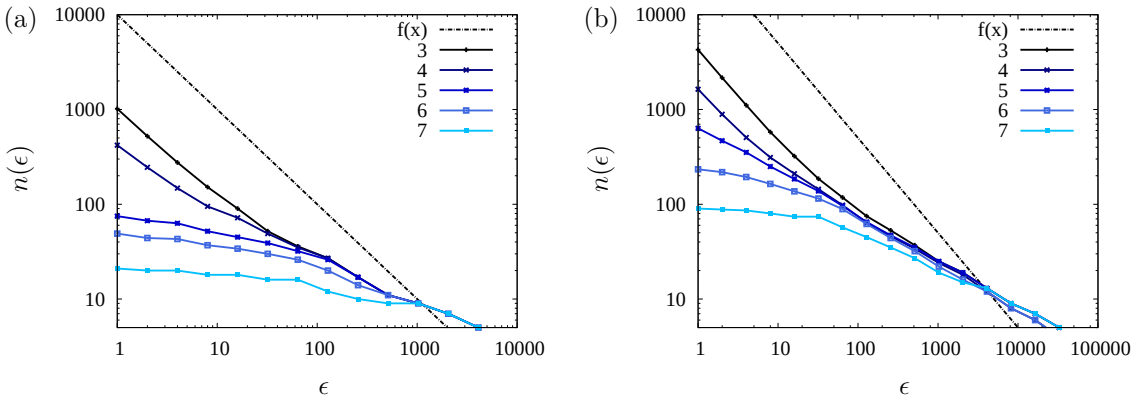


Figure 3.8

(a) Calcul de la dimension de box-counting pour différents ordres d'approximation rationnelle de (a) $\sqrt{2}$ et pour (b) le nombre d'or ϕ. La droite en pointillés a une pente de -1, qui permet de faire la comparaison visuelle avec la pente des courbes.

Le protocole utilisé ici consiste à calculer la dimension de box counting pour plusieurs approximants rationnels d'un irrationnel comme, par exemple, $\sqrt{2}$ et le nombre d'or $\phi = (1+\sqrt{5})/2$ (cf. figure 3.8 a et b). On choisit plusieurs ordres d'approximation δ :

δ	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}
p	89	233	610	1597	4181
q	55	144	377	987	2584

Le calcul de la dimension fractale du spectre de (3.18) pour des valeurs de p et q approchant le nombre d'or, montre une convergence numérique de la dimension telle que :

$$d_{\mathrm{F}} = (\sigma(\alpha = \phi)) = \lim_{\delta \to 0} \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\ln(n^{\delta}(\epsilon))}{\ln(1/\epsilon)} \approx 0.4. \tag{3.38}$$

On peut calculer cette dimension fractale pour d'autres valeurs de α et on trouve, par exemple, une dimension fractale de $d_{\mathrm{F}}(\sigma(\mathrm{e})) < 0.3$ et $d_{\mathrm{F}}(\sigma(\sqrt{2})) \approx 0.2$. Cette méthode a l'avantage d'être applicable à n'importe quel type de distribution mais, dans ce cas, la convergence se fait difficilement. On préférera utiliser une autre méthode reposant sur le caractère autosimilaire de la distribution des valeurs propres.

- **Notions concernant l'invariance d'échelle**

L'exemple précédent a montré que, par construction, l'ensemble présentait les mêmes caractéristiques à toutes les échelles. Cette propriété est commune à tous les ensembles fractals et peut être quantifiée. De manière générale, tout ensemble présentant une similarité d'échelle peut s'écrire à l'aide d'une fonction

de la forme [33] :

$$f(x) = f_0(x) + \frac{1}{b} f(ax), \tag{3.39}$$

où $f_0(x)$ est une fonction initialement déterminée, et a et b sont deux paramètres*. Par exemple dans le cas de l'ensemble de Cantor, la fonction initiale étant l'intervalle [0,1], et les paramètres d'échelles $a = 3$ et $b = 2$.

La solution générale de l'équation (3.39) peut s'écrire [33] comme :

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b^{-n} g(a^n x),$$

avec $g(x)$ étant une fonction périodique de période unité†. De manière générique, la dimension fractale de l'ensemble défini par f est donnée par le rapport :

$$d_{\mathrm{F}} = \frac{\ln a}{\ln b}. \tag{3.40}$$

Par exemple, pour l'ensemble de Cantor, on retrouve le résultat $d_{\mathrm{F}} = \ln 2 / \ln 3$.

- **De la densité d'état...**

Une autre grandeur permettant de caractériser le spectre d'un opérateur (3.19) est la densité d'état. On appelle $N(E)$ le nombre d'états d'énergie inférieure à E. La densité d'état $\rho(\alpha, E)$ est une fonction donnant le nombre d'états compris entre E et $E + \mathrm{d}E$. Par exemple, pour un gaz d'électron libre à deux dimensions, la densité d'état

$$\rho_{2D} = \frac{m}{\pi \hbar^2}, \tag{3.41}$$

est indépendante de l'énergie.‡

Dans notre cas, cette fonction peut se calculer analytiquement à partir de la fonction G (cf. Eq. 3.28) issue du déterminant du hamiltonien de Harper :

$$\rho(\alpha, E) = \rho_0(G) \left| \frac{\partial G(\alpha, E)}{\partial E} \right|.$$

Ici $\rho_0(G)$ est la densité d'état définie par [21] : $\rho_0(G)\mathrm{d}G = \mathrm{d}^2k/(2\pi)^2$. Dans le cas isotropique (où $t_x = t_y = t$, cf. Eq. 3.26) :

$$\rho_0(G) = \frac{1}{2\pi^2 q t^8} \mathrm{K}\left[\sqrt{1 - \frac{k^2}{16}}\right],$$

où K est le fonction elliptique complète de première espèce, qui peut s'écrire comme $\mathrm{K}(k)=\mathrm{F}(\pi/2, k)$, avec F la fonction elliptique de première espèce définie par $\mathrm{F}(\phi, k) = \int_0^{\phi} \mathrm{d}\phi / \sqrt{1 - k^2 \sin^2\theta}$ [34]. La fonction K présente une singularité en 0 qui diverge de façon logarithmique. Comme la fonction $G(E, \alpha)$ est un polynôme, les seules divergences que rencontrera la densité d'état, ρ, proviendra de ρ_0 et auront lieu au centre des bandes. Ces divergences sont nommées *singularités de van Hove*. À noter que la fonction ρ_0 est définie sur l'intervalle $E \in [-4, 4]$.

Reprenons l'exemple du modèle de Harper pour $\alpha = 1/4$ et $g = 2$ (Eq. 3.29). Le polynôme caractéristique, qui est la fonction G de l'équation (3.27), est alors : $G(E, 1/4) = E^4 - 8E^2$ et $|dG/dE| = |4E^3 -$

∗. Toutes les fonctions répondant à ce critère n'ont pas forcément une dimension fractale non entière, $f(x) = x^n$ en est un contre-exemple.

†. L'annexe C présente le cas correspondant à $g(x) = \cos(x)$, c'est-à-dire où $f(x)$ est une fonction de Weierstrass. On montre que, dans ce cas, le spectre peut être calculé analytiquement dans le régime perturbatif et numériquement grâce à la méthode de Hill.

‡. On peut aussi définir la densité d'état comme $\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$ (avec δ étant la fontion delta de Dirac).

16E|. Les zones bleues de (Fig. 3.4) correspondent aux valeurs d'énergie prises lorsque $|F(E, k_x, k_y)| < 4$. Ces énergies définissent les bandes (cf. 3.10. a), délimitées toujours par les valeurs propres (Eq. 3.30). Le calcul analytique de $\rho(E, 1/4) = \rho_0(G)|dG/dE|$ peut être fait. Sa représentation graphique est donnée à la figure 3.9.

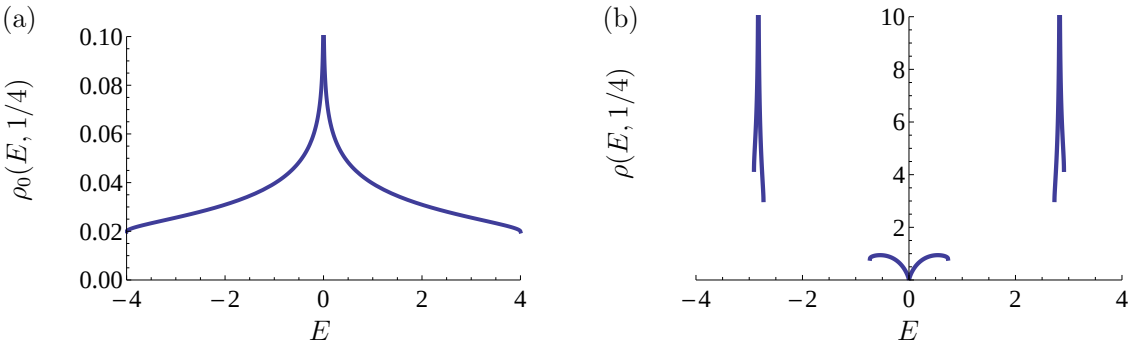


Figure 3.9

(a) Densité ρ_0 calculée à partir de l'équation ci-dessus. (b) Densité d'état pour le spectre de Hofstadter (isotrope avec $t = 1$) pour $\alpha = 1/4$.

La figure représentant la densité d'état rend donc compte des bandes et des gaps où $\rho = 0$. On observe des singularités de van Hove pour la bande la plus basse et la plus haute en énergie. En revanche, les bandes centrales présentent un comportement tout autre : pour $E \to 0$ on constate que la densité tend vers 0 avec une asymptote verticale. Ce comportement est la trace de la relation de dispersion, étudiée précédemment, qui présente des cônes de Dirac et qui se traduit donc par un trou dans la densité.

- **... vers la densité d'état intégrée**

Maintenant, considérons la densité d'état intégrée $\mathcal{N}$ définie par :

$$\mathcal{N}(\alpha, E) = \int_{-\infty}^{E} \rho(\alpha, E')\mathrm{d}E'.$$

On peut montrer que, puisque le spectre est borné, alors la densité l'est aussi, et on a : $0 \leq \rho(\alpha, E) \leq 1$ pour tout α.

À titre d'exemple, on représente la densité d'état intégrée pour plusieurs approximants du nombre d'or (Fig. 3.10.b). On remarque une symétrie centrale de la fonction par rapport au point (0,0.5), qui est une conséquence de la symétrie du spectre de Hofstadter vis-à-vis de l'axe $E = 0$. Qui plus est, à chaque valeur de α, l'intégrale de la densité prise entre -4 et 4 est toujours égale à 1 et on remarque que, plus les approximants p et q sont élevés, plus la fonction est discontinue. Ceci est une conséquence du fait que d'un ordre à l'autre, il s'opère une séparation des bandes, et donc une augmentation de la densité d'états intégrée. Une fois intégrée, la densité d'état a un comportement similaire à un *escalier du diable* dans la limite irrationnelle [35].

Comme le spectre peut s'écrire sous la forme (Eq. 3.39), la différence des densités d'état intégrées locales, en E_u et $E_u + \Delta E$ peut se réécrire à partir de la propriété en loi d'échelle :

$$\mathcal{N}(E_u + \Delta E) - \mathcal{N}(E_u) = \frac{\mathcal{N}(E_u + b\Delta E) - \mathcal{N}(E_u)}{a}. \tag{3.42}$$

On peut montrer que si l'on définit la densité d'état intégrée décalée par $\tilde{\mathcal{N}}_{E_u}(E) = \mathcal{N}(E) - \mathcal{N}(E_u)$,

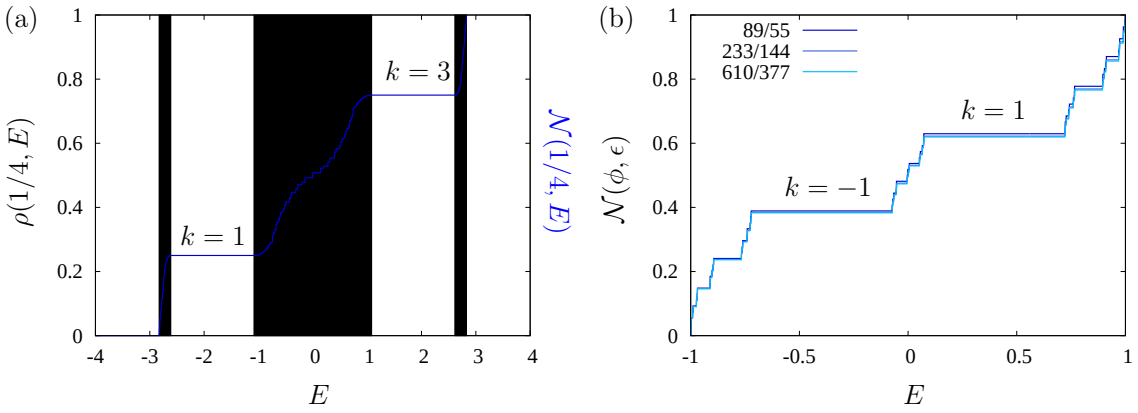


Figure 3.10

(a) Densité d'état intégrée pour $\alpha = 1/4$ (courbe bleue) comparée aux bandes. (b) Densité d'état intégrée pour plusieurs approximants du nombre d'or.

alors les solutions de l'équation précédente ont la forme [36] :

$$\tilde{\mathcal{N}}_{E_u}(E) = |E - E_u|^{d_F} \mathcal{F}\left(\frac{\ln|E - E_u|}{\ln b}\right), \tag{3.43}$$

où $\mathcal{F}$ est une fonction périodique de période unité. Ce résultat permet donc d'exprimer la densité d'état intégrée comme le produit d'une fonction oscillante et d'un terme en loi de puissance de la dimension fractale. Dans ce cadre, calculer la dimension fractale locale revient à déterminer la pente moyenne de la densité intégrée en échelle log-log.

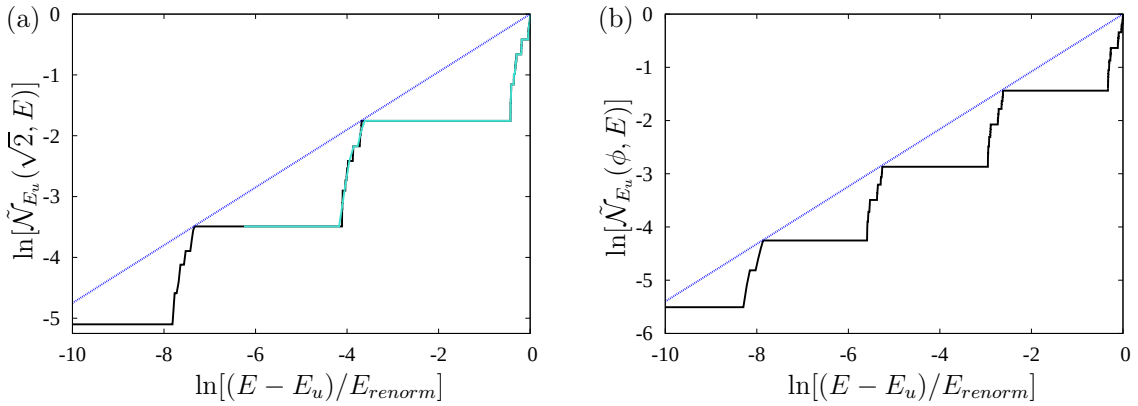


Figure 3.11

Densité d'état intégrée décalée en fonction de l'énergie pour (a) $\alpha = \sqrt{2}$ et (b) le nombre d'or, tous les deux approximés par un nombre rationnel proche à 10^{-6}. Les valeurs de E_u et E_{renorm} sont prises toutes les deux égales à 0.5.

Les figures 3.11 représentent le calcul de cette fonction pour différentes valeurs du flux α dans la limite irrationnelle. L'échelle logarithmique en énergie et en densité intégrée, révèle une périodicité d'échelle validant l'hypothèse d'auto-similarité du spectre. De plus, cette périodicité dépend de la valeur du flux, plus particulièrement de son développement en fractions continues (cf. plus bas). Enfin, à partir de l'équation (3.43), on peut identifier la pente moyenne obtenue graphiquement (droites bleues) et à la dimension fractale locale qui, ici, est la même pour tout le spectre. Ce résultat est propre au spectre

de Hofstadter, et non pas aux opérateurs quasi-périodiques, par exemple. Dans le cas de $\sqrt{2}$ on trouve une valeur $d_{\mathrm{F}}(\sqrt{2}) \approx 0.54$, et pour le nombre d'or ϕ on trouve $d_{\mathrm{F}}(\phi) \approx 0.47$.

En parallèle, il est possible numériquement de changer artificiellement la densité d'état intégrée (pour un approximant de $\alpha = p/q$ fixé), en changeant la valeur numérique de $\mathrm{d}E$ lors du calcul de l'intégrale de la densité*. On constate que l'échantillonnage de cette densité d'état joue un rôle prépondérant quant à la détermination précise de d_{F}. En effet, si l'on multiplie par un facteur 100 le taux d'échantillonnage (courbe turquoise de la figure 3.11.a) par rapport à une référence donnée (courbe noire), on perd un facteur 10 sur la densité intégrée. La résolution en densité est un critère important déterminant la fiabilité numérique de la dimension fractale.

- ***Gap labelling***

On peut démontrer, dans le cadre de la théorie de l'étiquetage de lacune (*gap labelling*), élaborée par Belissard [19] que, pour toute énergie se situant dans un gap, il existe des nombres entiers ℓ satisfaisant la relation :

$$\alpha\ell = \mathcal{N}(\alpha, E) \bmod 1, \tag{3.44}$$

ou encore :

$$\mathcal{N}(\alpha, \epsilon) = m + n = n \bmod 1. \tag{3.45}$$

Dit autrement, à chaque fois que la densité d'état intégrée est constante et différente de 0 ou de 1, on peut associer à celle-ci un multiple entier de α. Nous verrons que, dans le cadre physique du modèle de Hofstadter, ℓ est étroitement liée à la conductance de Hall. Par ailleurs, on peut montrer que le label des gaps est un *invariant topologique*. C'est-à-dire que chaque couple $[m, n]$ est indépendant de tous les paramètres liés au modèle initial, comme la profondeur du potentiel définissant le réseau. Seul α détermine les labels.

3.2.7 Effet Hall quantique et invariants topologiques

Afin de contextualiser un peu plus la physique sous-jacente du modèle de Hofstadter, on procède ici à quelques rappels concernant l'effet Hall classique et quantique entier.

- **Interprétation physique de l'effet Hall**

L'*effet Hall classique*, formulé pour la première fois par Edwin Hall en 1879 dans le cadre de sa thèse, survient lorsque l'on considère les effets de bord dans un conducteur bidimensionnel. Une plaque, *de taille finie* selon une direction y, soumise à un potentiel V selon une direction x, voit les électrons se propager selon cette direction x, créant ainsi un courant I_x. Appliquer un champ magnétique B perpendiculaire à la plaque (homogène et selon l'axe z) a pour effet de dévier les trajectoires des électrons selon l'axe perpendiculaire y à leurs trajectoires (par la force de Lorentz). Ce faisant, les électrons vont s'accumuler sur un bord et dépeupler l'autre conduisant à une différence de charge et donc de potentiel, que l'on nomme tension de Hall V_{H}. Lorsque le régime stationnaire est atteint, les équations de Lorentz (du mouvement des électrons) en présence de forces de frottement conduisent, par le biais de la formule de Drude, à l'expression :

$$\sigma_{Drude} = \frac{I_x}{V_{\mathrm{H}}} = \frac{B}{en_e}, \tag{3.46}$$

où n_e est la densité de porteur de charge e.

L'*effet Hall quantique entier*, observé pour la première fois par von Klitzing [3], provient de la subdivision des bandes du réseau cristallin bi-dimensionnel, due à l'apparition de niveaux de Landau discrets lors de l'application d'un champ magnétique perpendiculaire au réseau. Nous savons qu'en l'absence de réseau, tous les électrons soumis à un champ magnétique ont leurs énergies quantifiées en

∗. Ce qui revient à imposer une résolution minimale à la densité d'état.

niveaux de Landau (3.2.1). Ainsi, ces électrons bi-dimensionnels ont une densité d'état donnée par la formule (3.41), ce qui donne une dégénérescence par niveau de Landau :

$$n_B = \hbar\omega_c \rho_{2D} = eB/h,$$

avec ρ_{2D}, la densité d'état définie à l'équation (3.41), qui permet d'exprimer un *facteur de remplissage* :

$$\nu = n_e/n_B = \rho h/eB, \tag{3.47}$$

où ici intervient $\rho(\neq \rho_{2D})$, la densité d'état par bande de Bloch. Cette grandeur permet de décrire la conductance de Hall σ_{H} sous la forme :

$$\sigma_{\mathrm{H}} = I_x/V_{\mathrm{H}} = \frac{e\rho}{B} = \frac{\nu e^2}{h}.$$

Dans ce cas, la conductance de Hall peut s'interpréter comme l'ouverture des orbites cyclotrons empruntées par les électrons en bord du réseau, créant une différence de charge locale et quantifiée. Lorsque les niveaux de Landau sont complètement remplis par les électrons, on a : $n_e = jn_B$ (avec $j \in \mathbb{N}$). On observe un plateau dans la résistance de Hall * pour $B/(en_e) = h/(je^2)$.

- **Équation TKNN**

L'article [37] de 1982 de Thouless, Kohmoto, Nightingale et den Nijs (TKNN), donne une expression analytique de la conductance de Hall pour le hamiltonien (3.2) dans le régime de Harper ($g \neq 2$). Ils utilisent la *formule de Kubo* pour caractériser la conductance de Hall [38] :

$$\sigma_{\mathrm{H}}^{B\to\infty} = \frac{ie^2}{2\pi\hbar} \int \mathrm{Tr}\left(P(\vec{k})[\partial_{k_x} P(\vec{k}); \partial_{k_y} P(\vec{k})]\right) \mathrm{d}k_x \mathrm{d}k_y,$$

avec P le projecteur spectral associé au hamiltonien de Harper. Cette intégrale prend des valeurs dans $\mathbb{Z}$ et définit le (premier) *nombre de Chern* $C_1(P)$ [39]. Les nombres de Chern sont des invariants topologiques, indépendants de la géométrie du réseau. On peut montrer que le résultat du calcul de l'intégrale est un entier fois k, de sorte que l'on retrouve la quantification de la conductance de Hall : $\sigma_{\mathrm{H}}^{B\to\infty} = ke^2/h$.

Cet article fait le lien entre la conductance de Hall dans le régime de Harper $\sigma_{\mathrm{H}}^{B\to\infty} = t_k$ et le nombre de Chern dans le régime de Hofstadter $\sigma_{\mathrm{H}}^{B\to 0} = s_k$, pour le gap labellisé k au travers de l'équation de TKNN :

$$k = qs_k + pt_k, \tag{3.48}$$

qui est l'équation diophantienne obtenue précédemment. En fait, le théorème de Darboux stipule que, pour tout $q, p, r \in \mathbb{N}^*$, l'équation (3.48) est satisfaite à condition que : $|t_k|(\in \mathbb{Z}) < q/2$ et $0 \leq r(\in \mathbb{N}) \leq q$. Il est possible de calculer directement, dans la limite thermodynamique, la conductance de Hall à partir de la formule de Streda [22, 40] :

$$\sigma_{\mathrm{H}} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{a_x a_y} \frac{\partial\rho}{\partial B}, \tag{3.49}$$

et le facteur de remplissage par bande :

$$s_k = -(a_x a_y)^2 \frac{\partial\rho}{\partial(a_x a_y)}, \tag{3.50}$$

qui ont des valeurs entières quand l'énergie de Fermi E_{F} est dans un gap [40]. Si $E = E_{\mathrm{F}}$, alors la densité d'états des bandes occupées est exactement égale au nombre de bandes occupées r par le nombre total de bandes q, tel que : $\rho = r/q = s_k + pt_k/q$. On a, en reprenant l'équation (3.48) : $\rho = s_k + (Ba_x a_y/(2\pi))t_k$. Ainsi, on retrouve la résistance de Hall associée :

$$R_{\mathrm{H}} = \frac{h}{t_k e^2}. \tag{3.51}$$

∗. Ces plateaux ont permis une mesure très précise de la constante de von Ktizing, h/e^2, qui dépend uniquement de ces deux constantes fondamentales [3].

- **Facteur de remplissage**

Maintenant que nous connaissons la conductance de Hall, cherchons à exprimer le facteur de remplissage ν en fonction de α. On rappelle que ce rapport de flux peut être exprimé comme $\alpha = eB/(a_x a_y h)$. En reprenant la définition (3.47) :

$$\mathrm{d}\nu = \frac{h}{e}\mathrm{d}\left(\frac{\rho(a_x a_y; B)}{B}\right) = \frac{h}{e}\left[\frac{\partial\rho}{\partial B} - \frac{\rho}{B}\right]\mathrm{d}B + \frac{h a_x a_y}{e}\frac{\partial\rho}{\partial(a_x a_y)}\mathrm{d}(a_x a_y),$$

et les équations (3.49 et 3.50), on obtient :

$$\mathrm{d}\nu = \left(\frac{h}{e^2}\sigma_{\mathrm{H}} - \nu\right)\frac{\mathrm{d}B}{B} - \alpha s\frac{\mathrm{d}(a_x a_y)}{(a_x a_y)}.$$

On peut écrire la différentielle sur α, telle que :

$$\mathrm{d}\alpha = -\alpha\left(\frac{\mathrm{dB}}{B} + \frac{\mathrm{d}(a_x a_y)}{a_x a_y}\right).$$

Ainsi, à α constant, l'avant-dernière équation peut se factoriser en :

$$\mathrm{d}\nu = (\sigma_{\mathrm{H}} - \nu + \alpha s)\frac{\mathrm{d}B}{B},$$

et, puisque le facteur de remplissage est constant à α constant, on obtient la relation :

$$\nu = \sigma_{\mathrm{H}} + \alpha s, \tag{3.52}$$

qui est une équation diophantienne lorsque $\alpha = p/q$ est rationnel et lorsque l'énergie de Fermi se situe dans un gap. Dans ce cas, toutes les valeurs de ν pour lesquelles un gap apparaît pourront s'écrire sous la forme d'un rationnel $\nu = t_k/p$, où p est la dégénérescence des niveaux de Landau. Ainsi, les $\nu(\alpha)$ sont toutes les droites générées par l'équation (3.52), lorsque σ_{H} et s décrivent les entiers naturels.

- **Diagramme de phase**

Osadchy et Avron [41] ont développé un modèle permettant de calculer la conductance de Hall de façon systématique, à partir du *gap labelling* du spectre. La méthode est essentiellement basée sur la théorie des nombres. Prenons un nombre rationnel $\alpha = p/q$, tel que p et q soient premiers entre eux. Les $q-1$ gaps découpant le spectre peuvent être labellisés (cf. Eq. (3.44)) tels que, à partir de l'équation TKNN (3.48) le j-ème gap suive la relation :

$$pk = j \mod q.$$

Nous avons vu, précédemment, que ce *gap labelling* pouvait être déduit directement de la densité d'état intégrée. On représente à la figure 3.12.a, cette densité intégrée en fonction de α. La renormalisation implique que sa valeur moyenne est de 0.5. On peut démontrer que, pour un couple (p, q) et j donnés, il existe une unique solution pour chaque gap ouvert telle que $|k| < q/2$. Pour un q donné, toutes les valeurs entières non-nulles de k apparaissent une fois entre $\lfloor -q/2 \rfloor$ et $\lfloor q/2 \rfloor$. Et, pour q impair, la valeur centrale du gap peut prendre *de facto* uniquement la valeur $\pm q/2$. L'algorithme permettant de calculer les indices k, pour un $\alpha = p/q$ donné, consiste alors, en un premier temps, à calculer* PGCD(p, q), d'extraire les nombres entiers (l, m) tels que $g = lp + mq$. Ensuite, on calcule le vecteur $k = \lfloor s \times [0 \to q] + 0.5 \rfloor$, où $[0 \to q]$ est un vecteur faisant l'énumération de tous les entiers entre 0 et q compris. Finalement, l'indice du gap est donné par $s \times [0 \to q] - k + q$.

Ainsi, à partir de la figure 3.12.a, et par application de la méthode modulaire décrite plus haut, on obtient le spectre de Hofstadter coloré (Fig. 3.12.b). Cette représentation graphique montre le comportement de l'indice k dans le cas particulier du spectre de Hofstadter pour des valeurs d'indice modulo 16. On retrouve les propriétés de symétrie de la conductance de Hall :

$$k(\alpha, E) = -k(1-\alpha, E) = -k(\alpha, -E),$$

décrite plus haut dans l'étude du spectre de Hofstadter.

*. Plus Grand Commun Dénominateur

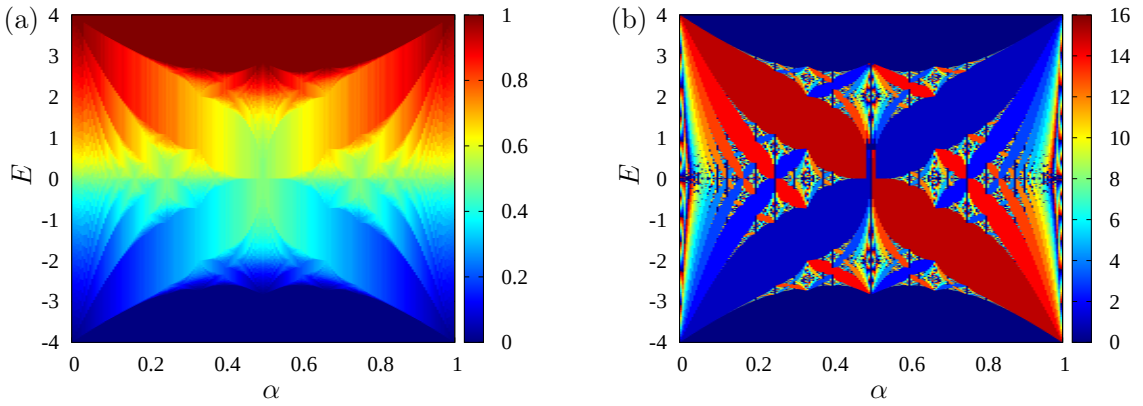


Figure 3.12

(a) Densité d'état intégrée pour le spectre de Hofstadter en fonction de α. (b) Spectre de Hofstadter coloré, les couleurs représentent différentes valeurs de la conductance de Hall. Les valeurs inférieures à 8 sont en fait des nombres entiers négatifs et, par opposition, celles supérieures à 8 sont les entiers positifs.

3.2.8 Diagramme de Claro-Wannier

Dans cette sous-section, on présente une autre manière de représenter le spectre de Hofstadter à partir de la densité d'état et de l'équation diophantienne (3.48).

- **Construction à partir du spectre de Hofstadter**

Deux années après l'article de Hofstadter [4], son directeur de thèse Wannier, écrivit un article [42] dans lequel il représente le spectre du modèle de Harper indépendamment de l'approximation rationnelle de α. Nous avons fait précédemment une brève introduction à la théorie de gap labelling et nous avons constaté qu'à chaque gap du spectre, nous pouvions associer un nombre entier. Dans cet article, Wannier fait le choix (comme nous précedemment) de fixer la densité d'état totale à 1. Les q bandes composant le spectre d'énergie se voient attribuer un *poids statistique* W égal à $1/q$.

Par ailleurs (cf. sous-section 3.2.4), nous avons identifié plusieurs propriétés de périodicité conduisant à définir des variables locales pour chaque cellule du spectre. Ici, reprenons la définition de la règle d'Hofstadter (3.2.5) pour un flux α :

$$R(\alpha) = \left\{ \frac{1}{\alpha} \right\}, \text{ pour } : 0 < \alpha \leq 1/2,$$
$$S(\alpha) = \left\{ \frac{1}{1-\alpha} \right\}, \text{ pour } : 1/2 \leq \alpha < 1,$$

où les symboles $\{\}$ représentent la partie décimale. De la sorte, $\beta = \alpha - N$ (où N est la partie entière de la cellule) varie continûment. En d'autre termes on peut dénombrer, dans chaque cellule, p bandes (de poids statistique $1/q$). Le poids total de la zone de gauche dans une cellule est donc la somme p/q qui est aussi égale à α. En conclusion, le poids statistique de Wannier est une grandeur qui varie continûment en fonction de α et est indépendant du fait que α soit un nombre rationnel. Un des objets de l'article [42] est de définir récursivement les zones de poids constant, W_n, à chaque ordre n. Nous présentons ici cette construction récursive.

Ordre 0. Il n'y a qu'une seule zone, et le calcul du poids statistique est constant et égal à 1, comme chaque cellule du spectre.

Ordre 1. On prend, à cette étape, les quatre régions principales (cf. couleurs FIG. 3.13) et on associe un poids statistique à chaque zone du spectre tel que :

Zones	Jaune	Rouge	Bleu	Vert
Poids statistique	α	$2\alpha - 1$	$1 - \alpha$	$1 - 2\alpha$

Ainsi, lorsque l'on somme les différentes contributions, on obtient deux droites W_1 et W_1' (cf. diagonales principales de la figure 3.13), telles que :

$$W_1(\alpha) = \alpha \Leftarrow \begin{cases} W_{vj} & = \alpha \\ W_{rb} & = (2\alpha - 1) + (1 - \alpha) = \alpha, \end{cases}$$

$$W_1'(\alpha) = 1 - \alpha \Leftarrow \begin{cases} W_{rj} & = 1 - \alpha \\ W_{vb} & = (1 - 2\alpha) + \alpha = 1 - \alpha. \end{cases}$$

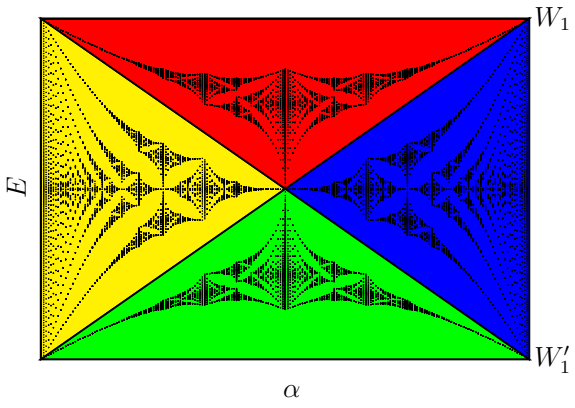


Figure 3.13

(a) Le spectre de Hofstadter superposé aux zones de poids cumulé W. Les couleurs font référence aux zones définies dans le tableau.

Ordre $n+1$. Enfin, on peut démontrer par récurrence que, si W_{n-1} et W_n sont linéaires en α, alors W_{n+1} l'est aussi [42]. Autrement dit, les W_n délimitent linéairement des frontières mais ceci, de manière arbitraire. C'est-à-dire que c'est uniquement de manière *a priori* que l'on isole des régions du spectre. On représente aux figures 3.14, la relation géométrique liant le diagramme de Wannier (a) au spectre de Hofstadter (b) à l'aide de quatre exemple (zones de couleur).

En conclusion, les poids statistiques doivent satisfaire l'équation diophantienne :

$$W = m + \alpha n \text{ avec : } (m, n) \in \mathbb{Z}^2. \tag{3.53}$$

Cette relation traduit le fait que les lignes que forment W ne peuvent pas croiser de bande du spectre. Qui plus est, si $\text{PGCD}(p, q) = 1$ pour un α donné, l'intersection des lignes se fait à k/q, avec k un entier quelconque. Ce type de diagramme peut également être obtenu à partir du facteur de remplissage $\nu(\alpha)$ des niveaux de Landau calculé précédemment (EQ. 3.52). Le lien avec l'équation TKNN (3.48) et la distribution des niveaux de Landau en fonction de α est directe. C'est cette correspondance qui est exploitée expérimentalement lors de la réalisation du spectre de Hofstadter avec des super-réseaux de graphène [7]. On peut montrer, à cette occasion, que les droites se coupent pour des valeurs $(n, m) = (n_0 - kq, m_0 + kp)$. Dans ce cadre, la conductance de Hall a pour valeur $\sigma_{xy} = e^2\nu/h$, aux intersections des lignes avec la droite $\alpha = 0$.

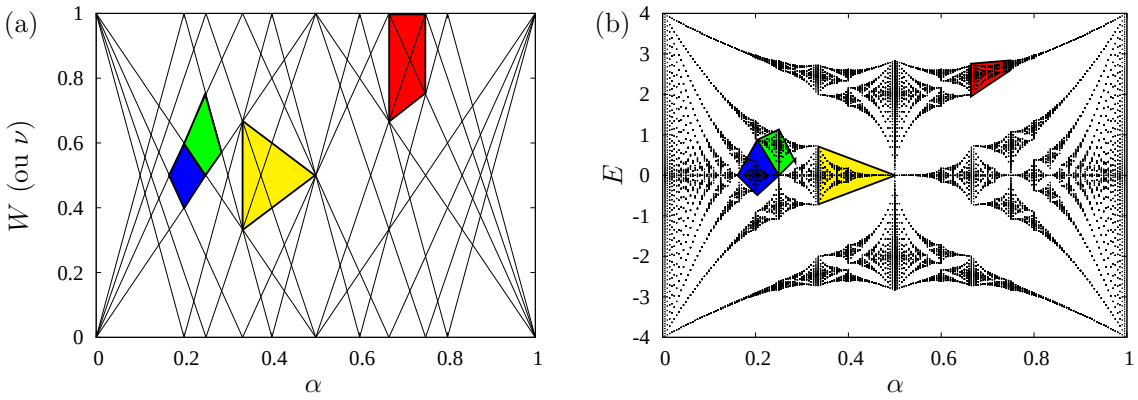


Figure 3.14

(a) Diagramme de Wannier pour des valeurs de $m, n \leq 5$ et sa comparaison avec (b), le spectre de Hofstadter. Les couleurs représentent différentes zones prises de manière à illustrer la correspondance entre les deux représentations.

- **Lien avec les diagrammes de Farey et l'arbre de Stern-Brocot**

Une approche du diagramme de Wannier et de sa construction peut se faire avec un diagramme de Farey. À l'origine, le but de ce type de diagramme est de construire itérativement l'ensemble des p/q où p et q sont deux nombres entiers premiers entre eux. Pour ce faire, la méthode repose sur une construction géométrique simple. On part d'un ensemble composé de deux segments, dont les minima et maxima sont les valeurs $0/1$ et $1/1$. Autrement dit, la séquence de Farey à l'ordre 1 donne : $F_1 = \{\frac{0}{1}, \frac{1}{1}\}$. On relie les valeurs qui s'opposent par des droites (cf. FIG. 3.15) qui donc se coupent en $1/2$. Puis, on projette cette valeur sur le segment du bas (rouge). On obtient ainsi la séquence de Farey au premier ordre $F_2 = \{\frac{0}{1}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1}\}$. Puis, partant de ce point, on trace des droites allant au bord du segment supérieur. Celles-ci interceptent les droites tracées précédemment en deux points d'abscisses $1/3$ et $2/3$. Ainsi, on construit $F_3 = \{\frac{0}{1}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}, \frac{1}{1}\}$. Les ordres suivants sont :

$$F_4 = \left\{\frac{0}{1}, \frac{1}{4}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}, \frac{3}{4}, \frac{1}{1}\right\} \text{ et } F_5 = \left\{\frac{0}{1}, \frac{1}{5}, \frac{1}{4}, \frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{1}{2}, \frac{3}{5}, \frac{2}{3}, \frac{3}{4}, \frac{4}{5}, \frac{1}{1}\right\}. \tag{3.54}$$

En résumé, le diagramme de Wannier peut être vu comme un arbre de Stern-Brocot [43] dont la construction permet de générer récursivement l'ensemble des nombres rationnels $\mathbb{Q}$. Cette analyse du spectre permet de mettre en exergue le lien rare qui existe entre ce modèle physique et la théorie des nombres.

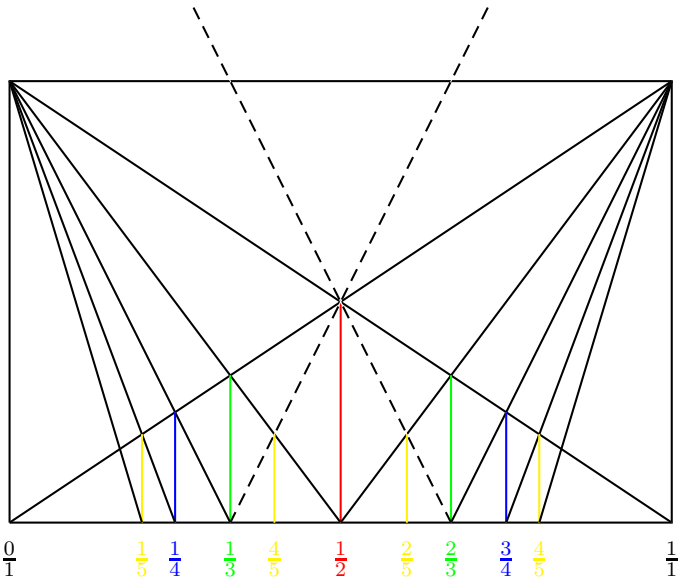


Figure 3.15

Diagramme de Farey à l'ordre 5. Les lignes noires continues représentent les droites principales à l'origine des intersections de la forme $1/n$ et $(n-1)/n$, tandis que les lignes noires en pointillés représentent des intersections permettant d'écrire l'ensemble des nombres rationnels à l'ordre n. On peut les voir comme reliant les points $(1/n, 1/n)$ (ou de manière équivalente (n, n)) aux points $((n-1)/n, (n+1)/n)$.

3.3 Application au réseau bichromatique incommensurable

> « *In physics we have dealt hitherto only with periodic crystals. To a humble physicist's mind, these are very interesting and complicated objects ; they constitute one of the most fascinating and complex material structures by which inanimate nature puzzles his wits. Yet, compared with the aperiodic crystal, they are rather plain and dull.* »
>
> E. Schrödinger

Nous avons discuté précédemment le fait qu'il semble difficile de réaliser le modèle d'Hofstadter en pratique, parce qu'il nécessite des champs magnétiques très intenses, pour une maille atomique de l'ordre de l'angström. Malgré cela, la réalisation expérimentale d'un double réseau de graphène créant un Moiré modulable a permis de contourner cette difficulté et, les expériences récentes [7], ont montré une conductance de Hall répondant à l'équation diophantienne (3.48). En revanche, même s'il est possible d'extraire de ces mesures la position des gaps, leur caractère fractal n'a pu être mesuré.

Dans cette section, on propose les prémisses d'une méthode expérimentale permettant la mesure directe de l'exposant fractal du spectre, au moyen d'une expérience d'atomes froids dans des réseaux bi-chromatiques. Plusieurs approches sont présentées ici. La première est basée sur une expérience de diffusion d'un nuage d'atomes au travers d'un potentiel de taille finie.

3.3.1 Lien avec les réseaux optiques

Nous avons développé dans le cadre du chapitre 2 une des thématiques principales du groupe atomes froids de Toulouse qui consiste en l'étude du comportement de condensats de Bose-Einstein dans un guide d'onde, soumis à un potentiel périodique à une dimension spatiale. Dans ce cadre, nous nous sommes tournés vers une proposition faite par Holthaus consistant à utiliser un réseau optique ayant deux longueurs d'onde différentes [44]. Il montre que, lorsque la profondeur de potentiel des réseaux est suffisamment grande, tout atome plongé dans un tel réseau a une dynamique régie par l'équation de Harper. Ce simulateur quantique du modèle de Harper-Hofstadter n'a toujours pas été réalisé expérimentalement.

La proposition expérimentale faite dans [44], de cet hamiltonien, nécessite la superposition de deux réseaux optiques de nombres d'ondes respectifs $k_1 = k_\mathrm{R}$ et $k_2 = \alpha k_\mathrm{R}$ (avec $k_1 \geq k_2$). Le hamiltonien de ce système est alors, sous sa forme générale :

$$\hat{H}(\alpha) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - U_0 \sin^2(k_\mathrm{R} x) - U_0 \epsilon \sin^2(\alpha k_\mathrm{R} x + \alpha_0), \tag{3.55}$$

où $\alpha = k_2/k_1 \in \mathbb{R}$ le rapport des fréquences entre les potentiels et α_0 leur déphasage*. On choisit une période d de référence permettant de définir un vecteur d'onde de réseau $k_\mathrm{R} = 2\pi/d$ indépendant de α et on introduit un paramètre libre ϵ associé à la profondeur relative du deuxième réseau optique.

- **Identification selon un modèle type liaisons fortes**

L'hypothèse des liaisons fortes présuppose ici que U_0 soit suffisamment grand devant l'énergie de recul $E_\mathrm{R} = \hbar^2 k_\mathrm{R}^2/2m$, c'est-à-dire supérieur à $10E_{\mathrm{R}_1}$. On peut montrer que, dans le régime des liaisons fortes, il est possible de réécrire ce hamiltonien à l'aide des fonctions de Wannier, que l'on note ici $|w\rangle$. La partie cinétique s'écrit (cf. Eq. 2.13) :

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} |\ell\rangle\langle\ell+1| + |\ell+1\rangle\langle\ell|, \tag{3.56}$$

où t caractérise le taux de transmission tunnel d'un état de Wannier $|\ell\rangle$ à l'un de ses plus proches voisins. Le super-réseau crée dans ce régime une modulation de l'énergie sur site :

$$\hat{H}_1 = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} J\cos(2\pi\alpha\ell + \alpha_0)\,|\ell\rangle\langle\ell| \tag{3.57}$$

Ainsi, le hamiltonien $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ de ce système est équivalent à celui du modèle de Harper (Eq. 3.19) [44] dans ce régime. Le paramètre α qui sera pour la suite de ce chapitre le rapport entre les deux fréquences du potentiel, joue le même rôle que précédemment dans le modèle. L'identification dans cette limite entre les deux hamiltoniens réside dans la transformation [44]

$$t = U_0\epsilon/E_\mathrm{R} = \epsilon\alpha^2, \tag{3.58}$$

$$J \approx 1.43(U_0/E_\mathrm{R})^{0.98}\exp(-2.07\sqrt{U_0/E_\mathrm{R}}). \tag{3.59}$$

À noter que l'on peut étendre ce modèle au cas où l'on se trouve en présence d'un seuil de mobilité (*mobility-edge*) pour lequel J prend la valeur [44] :

$$J \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2(U_0/E_\mathrm{R})^{3/4}}\exp\left(-2\sqrt{U_0/E_\mathrm{R}} + \frac{\alpha^2}{\sqrt{U_0/E_\mathrm{R}}}\right). \tag{3.60}$$

∗. Pour des raisons de simplicité on prendra par la suite $\alpha_0 = 0$. Fixer expérimentalement le α_0 nécessite un asservissement ou, pour le moins, un contrôle en phase relative des lasers générant les deux réseaux optiques. On peut répertorier une autre méthode dont le spectre d'application est limité mais, qui est potentiellement très puissante et qui a été démontrée expérimentalement dans le groupe de M. Weitz. Cette méthode est baptisée *Fourier-synthetize shaped periodic potentials*. Elle repose sur les propriétés dispersives de l'absorption Raman multiphotonique [45,46] et générant un réseau doublement périodique pouvant être contrôlé en phase.

Remarquons que la propriété d'auto-dualité (cf. sous-section 3.2.2) du hamiltonien résulte ici de l'approximation des liaisons fortes [44]. Pour U_0 petit devant E_R, cette propriété disparaît. L'objet de l'article de Holthaus est précisément l'étude de cette disparition. Il regarde, pour ce faire, la variance spatiale des états propres en diagonalisant H sur la base de Wannier. À relativement faible profondeur cette variance en fonction de l'intensité de U_0 exhibe des plateaux, lorsque ϵ varie, rendant compte indirectement de la distribution du spectre d'énergie.

3.3.2 Calcul du diagramme de bande du super-réseau

Nous avons développé, dans le chapitre 2, le formalisme traitant le cas d'une particule quantique dans un milieu périodique (spatialement ou temporellement). Nous cherchons ici à appliquer ce formalisme dans la limite où le milieu devient non périodique. Pour ce faire, nous procédons de façon similaire au traitement du hamiltonien, c'est-à-dire que chaque potentiel non périodique sera approximé par un potentiel périodique proche. On prend ici un hamiltonien composé de deux potentiels périodiques (Eq. 3.55). Dans l'annexe B, on propose deux méthodes permettant la diagonalisation de ce hamiltonien (3.55) pour n'importe quelle valeur de $\alpha = p/q \in \mathbb{Q}$, dont les valeurs propres se distribuent dans la première zone de Brillouin $k \in [-k_\mathrm{R}/2q, k_\mathrm{R}/2q)$.

À l'instar du spectre de Harper, toute l'information concernant le spectre de (3.55) réside dans les positions des bords de bande. Ainsi, la diagonalisation du hamiltonien en $k = 0$ et $k = 1/2q$ suffit à caractériser l'ensemble du spectre. De plus, pour une gamme d'énergie donnée, et pour un α tel que p et q soient petits, il n'est pas nécessaire de prendre une taille de matrice grande. Réaliser un *cut-off* énergétique consiste à prendre une taille de matrice n telle que $n = \textit{nombre de bandes min} \times q$.

- **Discussion du spectre**

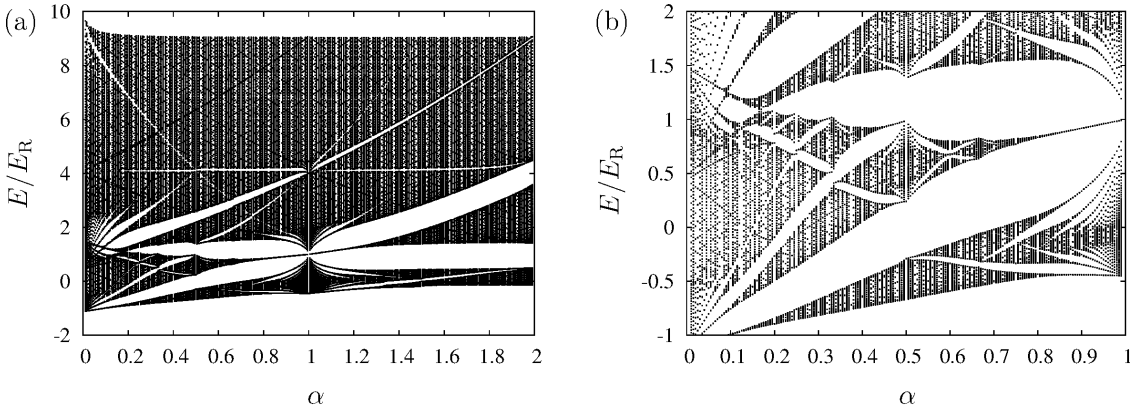


Figure 3.16

(a) Spectre du hamitonien bichromatique (3.55) dans un régime perturbatif où $U_0 = 0.5E_\mathrm{R}$ pour différentes valeurs de α. (b) Zoom de la partie du spectre pour laquelle les énergies sont proches de $\pm E_\mathrm{R}$. Chaque point représente un bord de bande dans la première zone de Brillouin.

Régime perturbatif. À titre d'exemple, on peut choisir de prendre $\epsilon = 1$, $\alpha_0 = 0$ et $U_0 = 0.5E_\mathrm{R}$ (Fig. 3.16.a). Pour un α donné, il est toujours possible de découper le spectre en plusieurs parties [47] : à haute énergie, le spectre admet des bandes très étendues et, par opposition, des gaps petits. Plus l'énergie est élevée, plus le spectre se comporte comme un continuum d'énergie. À l'inverse, pour des énergies proches de E_R, le spectre est très discontinu et les bandes sont très étroites. Lorsque la profondeur du

potentiel est proche de E_{R}, la zone où le spectre fait apparaître des gaps n'est visible qu'à basse énergie. Néanmoins, il est toujours possible de se placer dans une région où $\alpha < 1$ et $E/E_{\mathrm{R}} < 2$ (FIG. 3.16.b) afin d'observer une structure similaire à celle du spectre de Hofstadter. Les bandes se décomposent en sous-bandes, de plus en plus fines à l'approche d'un nombre irrationnel mal approximé par des nombres rationnels. En accord avec [44], le régime pour lequel on s'attend à observer un spectre de type Hofstadter est bien celui des liaisons fortes pour lequel $U_0 \gg E_R$.

Régime liaison forte. On cherche à obtenir une zone pour laquelle le spectre a une structure type Hofstadter pour une large gamme d'énergies. Pour ce faire, on utilise le fait que, plus la profondeur du potentiel U_0 est grande, plus les gaps sont importants. La figure 3.17 représente le diagramme de bande (rouge) pour un potentiel monochromatique auquel on ajoute un deuxième potentiel perturbatif afin de composer le hamiltonien (3.55). Tout d'abord, on observe une séparation des bandes qui est d'autant plus importante que le potentiel perturbatif est grand. Enfin, on peut remarquer que, lorsque ϵ augmente, il s'opère un recouvrement partiel des bandes. Le modèle d'Hofstadter est un modèle à une bande. On doit donc se placer dans une domaine d'énergie pour lequel le « recouvrement » est nul, *i.e.* pour lequel les bandes sont séparées quelle que soit la valeur de ϵ.

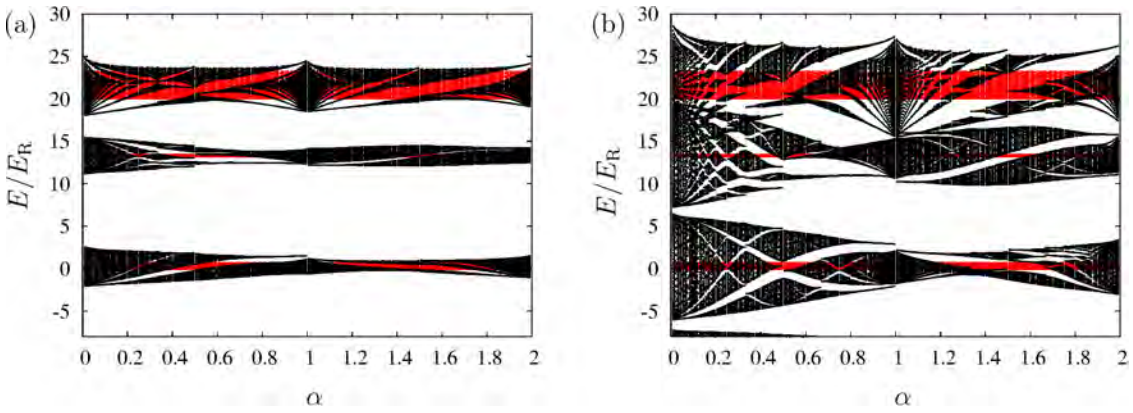


Figure 3.17

Spectre du hamitonien bichromatique (3.55) dans le cas où $U_0 = 10\ E_{\mathrm{R}}$ pour (a) $\epsilon = 0.1$ et (b) $\epsilon = 0.3$. Les bandes rouges représentent le spectre dans le cas où $\epsilon = 0$, c'est-à-dire le spectre de l'opérateur monochromatique.

- **Densité d'état intégrée**

À l'instar du spectre de Hofstadter, on peut réaliser le calcul de la densité d'état intégrée pour le spectre obtenu lors de la diagonalisation de (3.55). Le théorème de gap labelling nous informe que, pour toute énergie E_{gap} qui se situe dans un gap, il existe un unique couple d'indices $(n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2$, tel que la densité d'état intégrée s'écrit [47] :

$$\mathcal{N}(\alpha, E_{gap}) = \frac{n_1}{\alpha} + n_2. \tag{3.61}$$

Par exemple, dans le cas particulier du nombre d'or ϕ, on a la relation* : $1/\phi + 1 = \phi$ qui conduit au fait que $\mathcal{N}(\phi, E_{gap}) = n_2 - n_1 + \phi n_1$, qui n'est autre qu'une équation diophantienne identique à celle de Wannier (3.53) lorsque l'on pose $m \equiv n_2 - n_1$ et $n \equiv n_1$. On représente à la figure 3.18.a la densité d'état intégrée et les labels correspondants.

∗. Qui est directement issue du fait que ϕ est une solution de l'équation $x^2 - x - 1 = 0$.

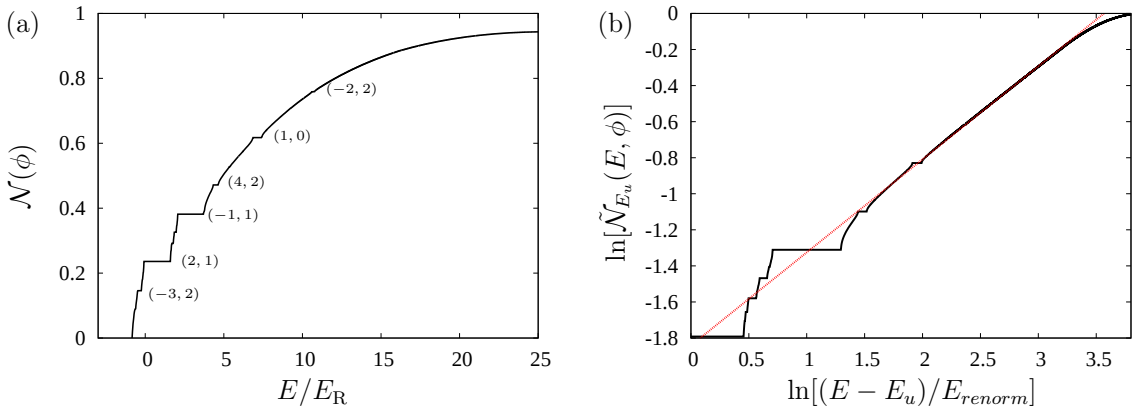


Figure 3.18

(a) Densité d'état intégrée du hamitonien bichromatique (3.55) dans le cas où $\alpha = \phi$, $U_0 = E_{\mathrm{R}}$ et $\epsilon = 1$. La matrice diagonalisée pour obtenir le spectre, pour 10 valeurs différentes de k, a une taille de $5q = 4935$ soit autant de bandes. (b) Calcul de la dimension fractale au moyen de la densité d'état intégrée. Ici la pente de la droite rouge est de $d_{\mathrm{F}} = 0.516$ avec une incertitude de $\pm 0.03\%$.

Cette densité d'état intégrée peut être renormalisée, puis représentée en échelle log-log de manière à pouvoir mesurer la dimension fractale à partir d'un ajustement linéaire. Le coefficient de la droite donne la valeur de cette dimension, et on trouve une valeur proche de celle obtenue dans le cas du modèle de Harper, pour cette même valeur de α (cf. Fig. 3.18.b).

3.3.3 Transport : spectre de diffusion d'ondes planes

L'article de Stöckmann et Kuhl [6] présente une réalisation expérimentale de la diffusion de micro-ondes sur 100 sites diffusant, de hauteur réglable, visant à simuler l'équation de Schrödinger discrétisée avec un terme de potentiel dont la fréquence spatiale variable, et dont l'équation stationnaire est donnée par l'équation de Harper. Ainsi, le coefficient en transmission en onde plane d'impulsion k permet, lorsque l'on fait varier α, de remonter au diagramme de Wannier. La physique de la propagation et la diffusion des micro-ondes ne relève pas directement de la résolution de l'équation de Schrödinger contrairement à une expérience avec atomes froids, par exemple.

De manière similaire à cette expérience on propose, ici, de réaliser un calcul numérique impliquant la diffusion d'une onde plane au travers du potentiel (3.55) afin d'en extraire un coefficient en transmission de manière à avoir une trace indirecte du spectre.

À l'instar de la référence [6], commençons par vérifier la séparation des bandes pour des fréquences commensurables. Ce résultat peut être retrouvé de plusieurs manière : lors d'un calcul de stabilité de l'équation de Hill pour ces harmoniques, ou pour un calcul de bande. On s'attend à ce que chaque bande du premier réseau se sépare en deux, par leur milieu, lorsqu'on ajoute un deuxième réseau avec une commensurabilité en $\alpha = 1/2^n$. Les flèches noires de la figure 3.19 représentent les gaps apparaissant lors de l'ajout du deuxième réseau. Ces gaps proviennent d'une levée de dégénérescence en bord de zone de Brillouin pour $k = \pm k_{\mathrm{R}}/2^n$.

Ce calcul de transmission peut se généraliser à d'autres valeurs de α. On représente sur les figures 3.20.a et 3.20.b le résultat de cette transmission pour deux valeurs de ϵ. On remarque que les bandes provenant du premier potentiel (indépendant de α) se séparent en plusieurs sous-bandes pour des valeurs non rationnelles de α, et se retrouvent pour des valeurs entières de α. En revanche, on observe à k et α petit un regain de la réflexion quantique qui a pour effet de déformer les gaps de transmission. Ces gaps ont des largeurs qui dépendent de ϵ, donc provenant du deuxième potentiel. Dans ce régime, les

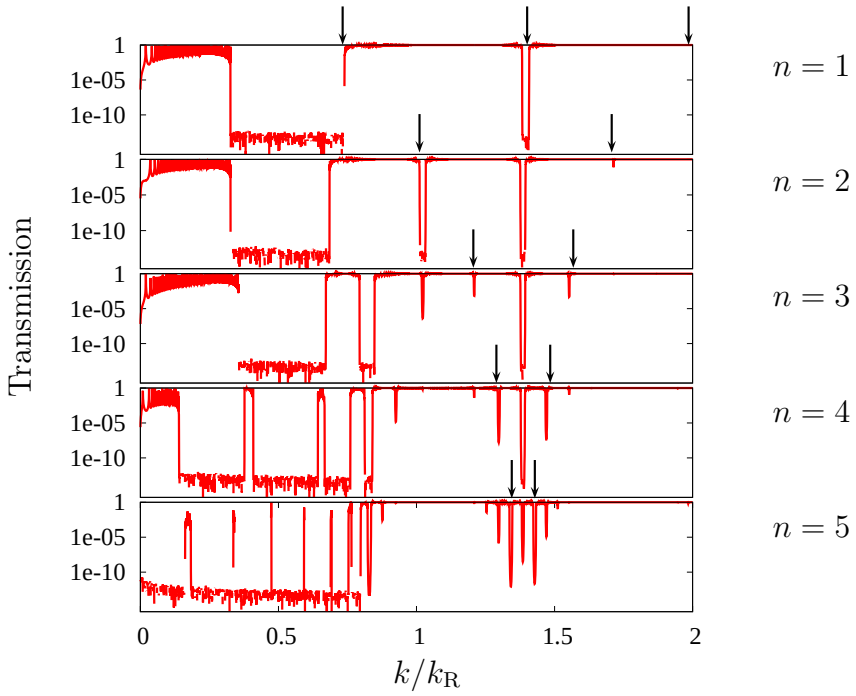


Figure 3.19

Transmission d'une onde plane de vecteur d'onde k au travers d'un potentiel bichromatique de fréquence commensurable de rapport $\alpha = 1/2^n$ et de $\epsilon = 0.5$. Les flèches représentent les valeurs de k pour lesquelles le coefficient en transmission prend des valeurs différentes de 1 à cause de la présence du deuxième potentiel perturbatif.

bandes se découpent et se rejoignent pour des valeurs commensurables de α (cf. Fig. 3.20.b). Lorsque α est rationnel, les bandes sont définies de manière générale dans une zone de Brillouin de largeur égale à $\mathrm{PGCD}(k_1, k_2)$. Nous rappelons ici que la normalisation est faite par rapport à $k_{\mathrm{R}} = k_{\mathrm{R}_1}$, ce qui n'est pas pertinent * quand $k_{R_1} < k_{R_2}$.

Un agrandissement du spectre en transmission (Fig. 3.21) permet de mieux apprécier sa structure en fonction de α. La première chose que l'on peut constater est que les gaps se rejoignent de façon symétrique par rapport à un axe ($k = 1.024\ k_{\mathrm{R}}$) qui est la valeur moyenne des deux premiers gaps. Les droites d'intersections sont de la forme † : $\alpha = k/n$ et $\alpha' = -(k-1)/n'$ où $(n, n') \in \mathbb{N}^2$. Elles se coupent alors pour $\alpha = \alpha' \Leftrightarrow k = n/(n'+n) \leq 1$. Il est très étonnant de constater, pour un k donné de cette forme et $\alpha \leq 1/2$, que la valeur de α supérieure telle que α soit un nombre rationnel est l'inverse d'un nombre premier :

$$\sup_{\alpha \in \mathbb{Q} \leq 1/2} \frac{k(\alpha)}{k_{\mathrm{R}}} = \frac{1}{p} \qquad p \in \text{ensemble des nombres premiers.} \tag{3.62}$$

Par exemple, la droite d'équation $k/k_{\mathrm{R}} \approx 1.148$ a une valeur de p de 3. $k/k_{\mathrm{R}} \approx 1.10$ a une valeur de 5 etc. À l'inverse, la valeur 1/6 arrive après la valeur 1/2 d'un côté et après la valeur 1/3 de l'autre, car 6 est un multiple de 2 et de 3. Dans ce sens, on peut alors affirmer que les croisements de ces bandes forment une sorte de crible d'Ératosthène dans l'espace (k, α). La figure 3.22 représente la construction de ce crible.

∗. Ceci pourrait être à l'origine du déplacement non-linéaire des bandes à k petit.

†. On prend une convention qui nous permet de définir la première bande comme étant l'origine des k et l'écart à la deuxième bande étant l'unité.

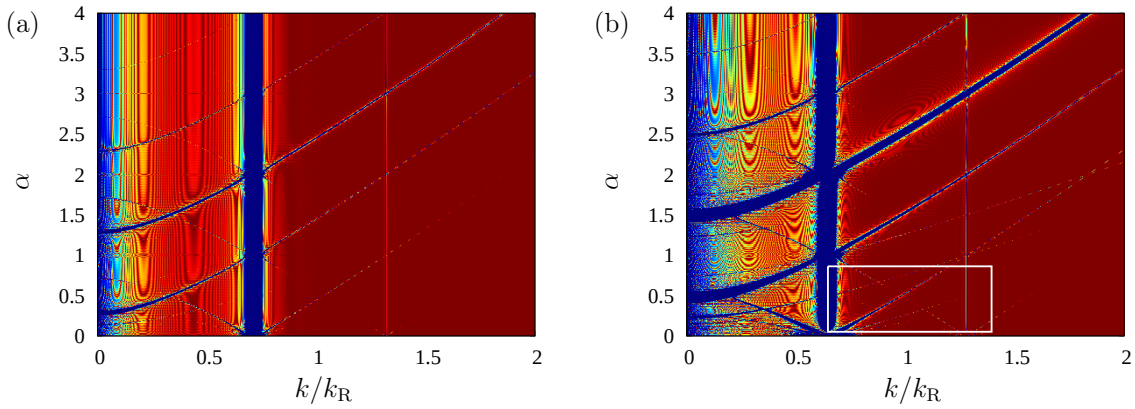


Figure 3.20

Transmission, en échelle logarithmique, d'une onde plane monochromatique au travers d'un potentiel bichromatique de profondeur $V_0 = E_R$, pour le cas (a) où $\epsilon = 0.05$ et (b) où $\epsilon = 0.25$. Les zones en rouges représentent une transmission de 1 et les zones bleues une transmission de 0. (L'effet de moiré provient ici d'une résolution finie de la transmission.)

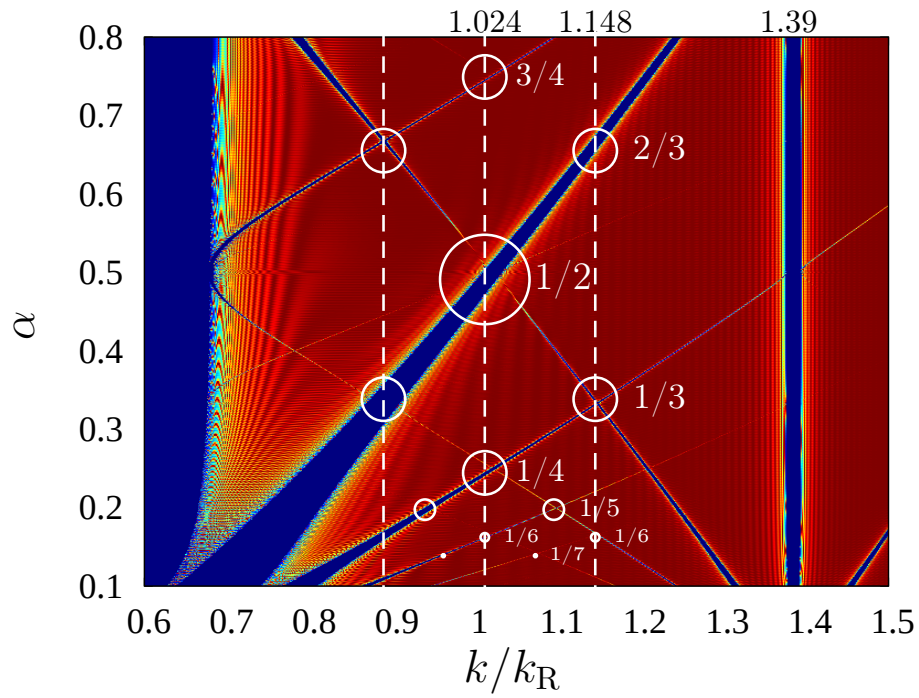


Figure 3.21

Agrandissement de la zone définie par un rectangle blanc sur la figure 3.20.b. Chacune des intersections (cercles) correspond à des valeurs de α rationnelles. Ceci peut être constaté pour n'importe quelle valeur de U_0 et de ϵ, seule l'ouverture des bandes dépend de ces paramètres.

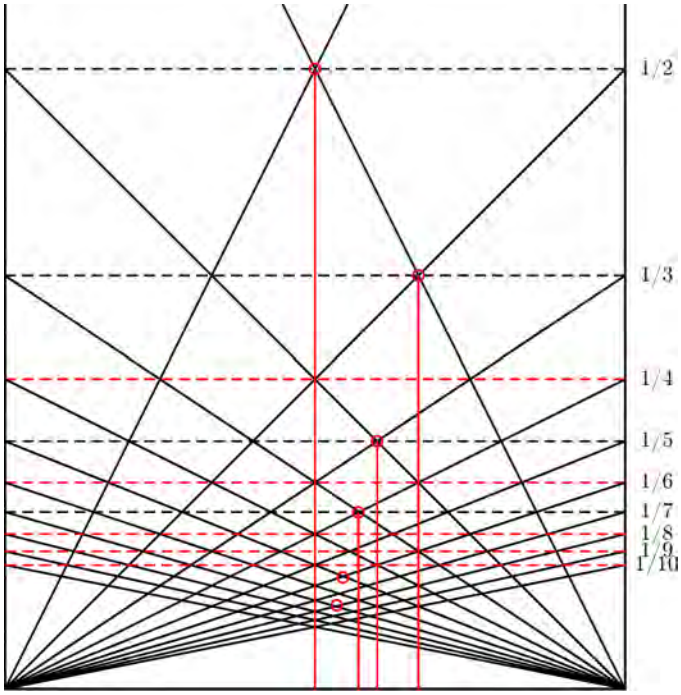


Figure 3.22

Schéma représentant la construction d'un crible de type de celui d'Ératosthène à partir du diagramme de Wannier obtenu lors du calcul en transmission d'une onde plane au travers d'un potentiel bichromatique dans l'espace α, $\tilde{k}$ qui est une normalisation du vecteur d'onde. Les lignes continues noires représentent les lignes de transmission nulle reliant les points $(0, 1/n)$ et $(1, 1/n)$ (et inversement) avec n un nombre entier. Partons d'une valeur de $\alpha = 1/2$. On trace une ligne verticale rouge partant du point $(\alpha = 1/2, \tilde{k} = 0.5)$ (cercle rouge). Si cette ligne intersecte deux droites continues noire ayant une même valeur de $1/n$ on trace une ligne rouge en pointillés. On réitère le même processus en partant du point $(\alpha = 1/3, \tilde{k} = 2/3)$ puis pour tous les points de la forme $(1/n, 1/n)$ n'étant pas encore intersectés par une ligne en pointillées (cercle rouge). Lorsque $n \to \infty$ les points marqués par des cercles rouges sont tous les points de la forme $(1/p, 1/p)$, avec p premier.

3.3.4 Autres approches possibles

Jusqu'à présent nous avons considéré une expérience de diffusion d'un paquet d'onde sur un potentiel bichromatique. Ce type de système présente plusieurs limitations concernant l'observation du spectre. Le paquet d'onde diffusant n'ayant qu'une partie cinétique il est, de fait, impossible de sonder des états liés (cf. chapitre 4). Or, c'est précisément ces états qui nous intéressent lorsque l'on souhaite faire une spectroscopie du potentiel. Par ailleurs, une mesure du spectre énergétique d'un potentiel périodique, au moyen d'un coefficient en transmission, ne peut se faire que si celui-ci est de taille finie (cf. plus haut). Dans le régime où α tend vers un irrationnel il peut être difficile, en pratique, de réaliser un calcul numérique, la taille de la boîte numérique devant contenir plusieurs périodes du super-réseau. Plus encore, on peut montrer numériquement que le contraste des gaps en transmission dépend du caractère abrupt de l'enveloppe.

On présente, ici, plusieurs pistes pouvant amener à une spectroscopie *locale* des états liés du réseau bichromatique. Le but étant, *in fine*, de réaliser une mesure directe de la dimension fractale du spectre au moyen d'une mesure de la densité d'atomes. Ainsi, l'objectif de ces méthodes consiste à permettre

de projeter la densité d'état dans l'espace réel.

- **Oscillation de Bloch**

Nous avons vu dans le cadre du chapitre 2 que toute particule plongée dans un potentiel périodique, de profondeur U_0, voit son énergie se distribuer en bandes. En présence d'une force constante, pouvant être créée, par exemple, par un champ magnétique ou un champ de gravité, cette particule va subir une accélération se traduisant par un changement de son pseudo-moment k. De par la périodicité de la première zone de Brillouin, k va explorer toutes les valeurs comprises entre $-k_R/2$ et $k_R/2$. Cette dynamique, dans l'espace des k, conduit à une oscillation de sa densité de probabilité de présence dans l'espace des positions appelée *oscillation de Bloch*. L'amplitude et la fréquence de ces oscillations donnent une trace directe de la distribution des bandes d'énergie par l'intermédiaire de la vitesse de groupe semi-classique (Eq. 2.16).

Le principe de la méthode consiste à charger adiabatiquement, initialement, un nuage d'atomes dans un réseau optique de taille infinie soumis à une force constante. La dynamique dans l'espace des k peut se résumer en 3 étapes (cf. Fig. 3.23.a) :

(A) À cause de la force les particules explorent le diagramme de bande d'un bord de la zone de Brillouin à l'autre.

(B) Les particules ont une certaine probabilité de réaliser une transition non adiabatique de Laudau-Zener entre deux bandes, lors de leurs oscillations de Bloch. La probabilité de transition dépend de la largeur du gap entre ces deux bandes [48].

(C) Les particules ayant été transférées sur une bande d'énergie supérieure ont une plus grande amplitude d'oscillations dans l'espace des positions du fait de leur vitesse dans le réseau plus élevée.

Une mesure de la proportion d'atomes ayant transité d'une bande à l'autre permet de faire une mesure indirecte de la largeur du gap.

La réalisation expérimentale d'oscillations de Bloch avec un gaz d'atomes froids dans un potentiel bichromatique a été réaliser en l'absence d'interaction [49]. Les oscillations présentes un amortissement lorsque les deux fréquences sont très proches. En revanche il a été prédit que la présence d'interactions dans le système contrecarre l'amortissement induit par le désordre, augmentant ainsi la durée de vie des oscillations [50, 51].

- ***Band Mapping***

La méthode de spectroscopie, dite de *band mapping*, a été démontrée pour la première fois expérimentalement, par le groupe de I. Bloch [52] dans le cadre d'un gaz de rubidium 87 bosonique dans un réseau optique 2D et, plus récemment, avec un gaz de fermions et de bosons par le groupe de K. Sengstock [53] dans un réseau à une dimension. Dans cette dernière expérience, le principe de la spectroscopie se décompose en plusieurs étapes (cf. Fig. 3.23.b) :

(1) Le chargement adiabatique dans un réseau optique d'un nuage d'atomes, dont la vitesse moyenne est nulle. La largeur en vitesse du nuage étant suffisamment petite, toute la population est chargée sur la bande fondamentale.

(2) Une modulation temporelle est appliquée de sorte à réaliser un transfert de population sur des bandes supérieures (cf. chapitre 2). Les atomes ayant été excités ont une vitesse supérieure après transfert.

(3) Après avoir éteint le réseau, la distribution en énergie des atomes dans l'espace libre est une projection (à pseudo-énergie constante) de la distribution en énergie lorsque le réseau était allumé, dans la première zone de Brillouin.

Lorsque la fréquence de modulation balaye l'ensemble des écarts énergétiques entre deux bandes adjacentes, cette méthode permet de retrouver une trace directe du diagramme de bande après un temps de vol du nuage d'atomes. Cette méthode est, *a priori*, applicable à n'importe quel type de potentiel

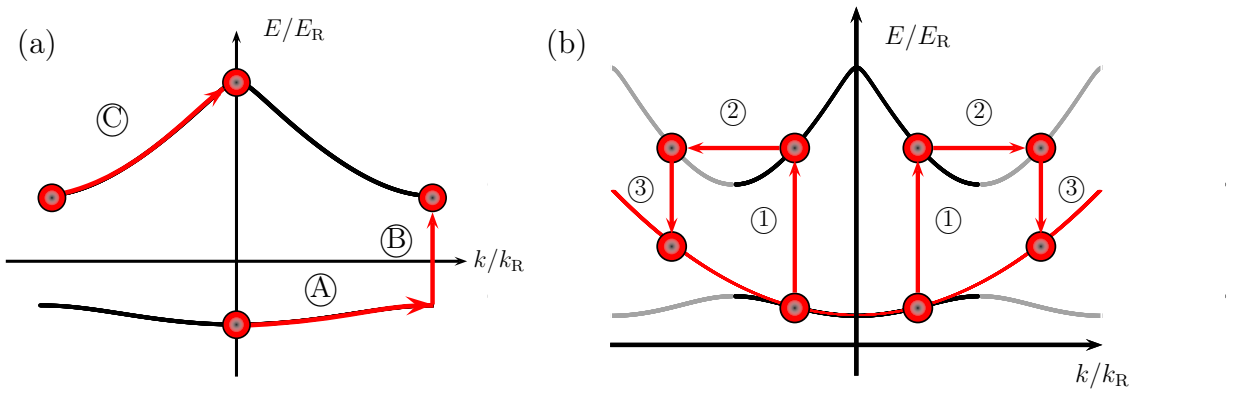


Figure 3.23

(a) Représentation schématique d'un oscillation de Bloch. Un paquet d'onde (point rouge) initialement en $k = 0$ vient explorer, sous l'effet d'une force la première zone de Brillouin. Une partie des atomes peut être transférée, par transition Landau-Zener, d'une bande à une autre durant le processus. (b) Représention schématique du processus de band-mapping (voir texte).

périodique et devra être testé dans la limite d'un potentiel quasi-périodique. Néanmoins, la thèse [54] met en avant le fait que, expérimentalement, le contraste sur la densité d'atomes obtenue dans le cas d'un nuage d'atomes bosoniques est bien inférieur au cas d'un nuage de fermions.

Ces méthodes devront être testées numériquement afin de déterminer leur efficacité dans le cas d'un réseau bichromatique dans la limite où le rapport des deux fréquences tends vers un nombre irrationnel.

3.4 Conclusion et perspectives

Tout électron plongé dans un réseau cristallin à deux dimensions a une distribution d'énergie qui se répartit selon des bandes de Bloch. Lorsque ce système est plongé dans un fort champ magnétique homogène et uniforme selon un axe normal au réseau, ces bandes se séparent en sous-bandes. Le hamiltonien d'un tel système ne dépend que de deux paramètres, l'un rendant compte de l'aspect géométrique du réseau et l'autre du flux magnétique au travers du réseau. Nous avons vu que dans le régime des liaisons fortes, pour lequel l'énergie cinétique de l'électron est bien inférieure à l'énergie potentielle du réseau, cette distribution pouvait s'interpréter dans le cadre du modèle de Hofstadter. Une analyse spectrale détaillée a révélé que la distribution énergétique dépend fortement du flux magnétique normalisé par le quanta de flux. Et notamment du fait que ce rapport soit rationnel ou non. Lorsque celui-ci est rationnel, le spectre se distribue en bandes pouvant donner lieu à des cônes de Dirac dans la première zone de Brillouin. Dans la limite irrationnelle, la distribution suit des règles de construction donnant lieu à une structure autosimilaire et fractale du spectre.

Une méthode numérique de calcul de la dimension fractale, basée sur la fonction densité d'état intégrée, a permis d'extraire une valeur avec une faible incertitude (relativement à la méthode de *box-counting*). Par ailleurs, cette densité d'état intégrée est au cœur de l'analyse de *gap labelling* : chaque gap du spectre d'énergie se voit assigner une valeur entière pouvant être interprétée physiquement en termes d'une conductance de Hall quantifiée. Les labels de ces gaps peuvent être décrit par une équation diophantienne permettant de représenter le spectre fractal du modèle de Hofstadter sous la forme d'un diagramme de Wannier, composé de segments dont les intersections décrivent l'ensemble des nombres rationnels.

Dans une deuxième partie, nous avons présenté notre étude de la distribution spectrale d'un système d'une particule soumise à un potentiel composé de deux périodes spatiales. Ce système est un simulateur quantique du modèle de Hofstadter, dans la limite où la profondeur du potentiel est grande devant l'énergie de recul. Nous avons montré, par le calcul du diagramme de bande (lorsque le rapport des fréquences est commensurable), que la distribution de ce spectre est fractale et qu'elle est, de par sa construction, similaire à celle de Hofstadter. Par ailleurs, le calcul numérique de la transmission d'une onde plane, au travers d'un potentiel bichromatique, à enveloppe carrée a révélé une distribution des gaps proche de celle du diagramme de Wannier. La réalisation expérimentale d'un tel système est très difficile car elle nécessite un double réseau optique de taille finie dont l'enveloppe doit être très abrupte. Nous avons également discuté de deux approches permettant une spectroscopie locale d'un potentiel périodique. Ainsi, la possibilité de réaliser une mesure de la densité d'état à l'aide de la densité d'atomes dans l'espace des positions pourrait, lorsque le rapport des longueurs d'onde tend vers un nombre irrationnel, conduire à une mesure directe de la dimension fractale du spectre de Hofstadter.

Bibliographie

[1] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov et A. K. Geim, *Nature Physics* **2** 620 (2006).

[2] T. Ando, Y. Matsumoto, et Y. Uemura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **39** 279 (1975).

[3] K. von Klitzing, G. Dorda et M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45** 494 (1980).

[4] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* **14** 2239 (1976).

[5] B. Pannetier, J. Chaussy, R. Rammal et J. C. Villegier, *Phys. Rev. Lett.* **53** 1845 (1984).

[6] U. Kuhl et H.-J. Stöckmann, *Phys. Rev. Lett.* **80** 3232 (1998).

[7] C. R. Dean, L. Wang, P. Maher, C. Forsythe, F. Ghahari, Y. Gao, J. Katoch, M. Ishigami, P. Moon, M. Koshino, T. Taniguchi, K. Watanabe, K. L. Shepard, J. Hone et P. Kim, *Nature* **497** 59 (2013).

[8] L. A. Ponomarenko, R. V. Gorbachev, G. L. Yu, D. C. Elias, R. Jalil, A. A. Patel, A. Mishchenko, A. S. Mayorov, C. R. Woods, J. R. Wallbank, M. Mucha-Kruczynski, B. A. Piot, M. Potemski, I. V. Grigorieva, K. S. Novoselov, F. Guinea, V. I. Fal'ko et A. K. Geim, *Nature* **497** 594 (2013).

[9] M. Aidelsburger, M. Atala, S. Nascimbène, S. Trotzky, Y.-A. Chen et I. Bloch, *Phys. Rev. Lett.* **107** 255301 (2011).

[10] M. Aidelsburger, M. Atala, M. Lohse, J. T. Barreiro, B. Paredes et I. Bloch, *Phys. Rev. Lett.* **111** 185301 (2013).

[11] H. Miyake, G. A. Siviloglou, C. J. Kennedy, W. C. Burton et W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **111** 185302 (2013).

[12] R. Peierls, *Z. Phys* **80** 763 (1933).

[13] Y. Aharonov et D. Bohm, *Phys. Rev.* **115** 485 (1959).

[14] A. Barelli, *Approche algébrique de la limite semi-classique : Electrons bidimensionnels en champ magnétique et localisation dynamique* (Thèse, Toulouse, 1992).

[15] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **84** 814 (1951).

[16] G. Petschel et T. Geisel, *Phys. Rev. Lett.* **71** 239 (1993).

[17] T. Geisel, R. Ketzmerick et G. Petschel, *Phys. Rev. Lett.* **66** 1651 (1991).

[18] M. Kohmoto and L. P. Kadanoff et C. Tang, *Phys. Rev. Lett.* **50** 23 (1983).

[19] J. Bellissard, *The gap labelling theorem for Schrödinger's operators* (*From number theory to physics*, Springer-Verlag, 1993).

[20] O. Lipan, *J. Phys. A* **33** 6875 (2000).

[21] Y. Hasegawa, Y. Hatsugai, M. Kohmoto et G. Montambaux, *Phys. Rev. B* **41** 9171 (1990).

[22] B. A. Bernevig et T. L. Hughes, *Topological insulators and topological superconductors* (Princeton University Press, 2013).

[23] W. G. Chambers, *Phys. Rev.* **140** A135 (1965).

[24] X. G. Wen, F. Wilczek et A. Zee, *Phys. Rev. B* **39** 11413 (1989).

[25] T. Kato, *Perturbation theory for linear operators* (Springer, New-York, 1966).

[26] M. Ya. Azbel', *Sov. Phys. JETP* **19** 634 (1964).

[27] B. J. Sokoloff, *Phys. Rev. B* **23** 2039 (1981).

[28] S. C. Bellet et R. B. Stinchcombe, *J. Phys. A* **22** 717 (1988).

[29] D. J. Thouless et Q. Niu, *J. Phys. A* **16** 1911 (1982).

[30] J. Avron et B. Simon, *Comm. Math. Phys.* **82** 101 (1981).

[31] A. Rüdinger et F. Piéchon, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30** 117 (1997).

[32] E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems*, (*Cambridge University Press*, 2002).

[33] E. Akkermans, *preprint arXiv* 1210.6763 (2012).

[34] F. W. J. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert et C. W. Clark, *NIST Handbook of Mathematical Functions* (Cambridge, 2010).

[35] B. B. Mandelbrot, *The fractal geometry of Nature* (W. H. Freeman and Company, New-York, 1977).

[36] D. Tanese, E. Gurevich, A. Lemaître, E. Galopin, I. Sagnes, A. Amo, J. Bloch et E. Akkermans, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 146404 (2014).

[37] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, et M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49** 405 (1982).

[38] G. de Nittis, *Hunting colored (quantum) butterflies* (Thèse, 2010).

[39] J. Dalibard, *Cours au Collège de France : Le Magnétisme artificiel pour les gaz d'atomes froids*.

[40] P. Streda, *J. Phys. C* **15** L717 (1982).

[41] D. Osadchy et J. E. Avron, *J. Math. Phys* **42** 5667 (2001).

[42] G. H. Wannier, *Phys. Stat. Sol.* **88** 757 (1978).

[43] A. Brocot, *Revue Chonométrique* **3** 186-194 (1861).

[44] D. J. Boers, B. Goedeke, D. Hinrichs et M. Holthaus, *Phys. Rev. A* **75** 063404 (2007).

[45] M. Weitz, G. Cennini, G. Ritt et C. Geckeler, *Phys. Rev. A* **70** 043414 (2004).

[46] G. Ritt, C. Geckeler1, T. Salger, G. Cennini et M. Weitz, *Phys. Rev. A* **74** 063622 (2006).

[47] Roberto B. Diener, Georgios A. Georgakis, Jianxin Zhong, Mark Raizen, et Qian Niu, *Phys. Rev. A* **64**, 033416 (2001).

[48] M. B. Dahan, *Transport et relaxation d'atomes de césium : oscillations de Bloch et résonance de diffusion* (Thèse, Paris, 1997).

[49] S. Drenkelforth, G. Kleine Büning, J. Will, T. Schulte, N. Murray, W. Ertmer, L. Santos et J. J. Arlt, *New J. Phys.* **10**, 045027 (2008).

[50] T. Schulte, S. Drenkelforth, G. Kleine Büning, W. Ertmer, J. Arlt, M. Lewenstein et L. Santos, *Phys. Rev. A* **77** 023610 (2008).

[51] S. Walzer, D. Schneble et A. C. Durst, *Phys. Rev. A* **81** 033623 (2010).

[52] I. Bloch, *Nature Physics* **1** 23 (2005).

[53] J. Heinze, S. Götze, J. S. Krauser, B. Hundt, N. Fläschner, D.-S. Lühmann, C. Becker et K. Sengstock, *Phys. Rev. Lett.* **107** 135303 (2011).

[54] B. Hundt, *Momentum-Resolved Optical Lattice Modulation Spectroscopy on Bose-Fermi Mixtures*(Thèse, Hambourg, 2011).

4 Les solitons comme sonde pour des potentiels locaux

« Ne dites jamais : "c'est naturel" afin que rien ne passe pour immuable. »

B. Brecht

Sommaire

4.1 Introduction **109**
4.2 Équation de Schrödinger à N corps **110**
4.2.1 Équation de la dynamique du gaz 110
4.2.2 Bilan énergétique 112
4.3 Équations de Schrödinger non linéaires à basses dimensions **115**
4.3.1 Gross-Pitaevskii 1D 115
4.3.2 Équation de Schrödinger non polynomiale 116
4.3.3 Solution propagative : le soliton 118
4.4 Diffusion d'un soliton sur un potentiel de taille finie **120**
4.4.1 Puits de potentiel et ordres de grandeur 120
4.4.2 Paquets transmis après diffusion 127
4.5 Sonder des états de surface **129**
4.5.1 Approche analytique 130
4.5.2 Diffusion de solitons 134
4.6 Conclusion et perspectives **137**

4.1 Introduction

Sonder des états stationnaires et résonants d'un potentiel, de manière à observer directement les états propres, demeure un vrai défi. Un tel objectif implique de pouvoir peupler ces états afin d'obtenir une image directe de ceux-ci, grâce à la densité d'atomes. L'énergie des états liés que l'on souhaite sonder étant négative, il semble impossible par conservation de l'énergie de peupler de telles énergies avec un gaz en interaction répulsive. On prendra ici un gaz en interaction inter-atomique attractive, traité en champ moyen au travers de l'équation de Gross-Pitaevskii [1, 2]. Dans ce cas nous verrons que, lors de la diffusion de ce gaz, qu'une partie des atomes peut se déposer dans un état lié du potentiel. Un gaz d'atomes à trois dimensions, en interaction attractive, doit remplir certaines conditions de stabilité que l'on discutera. On procédera à une réduction de la dimensionnalité du système qui conduira à une solution particulière d'équilibre : le soliton. Cette solution apparaît dans de nombreux milieux non linéaires, comme en hydrodynamique, dans le cadre de l'équation de Korteweg-de Vries [3], en optique lorsque les non-linéarités de Kerr jouent un rôle important [4], ou encore lors de l'étude de l'équation de sine-Gordon.

Dans le domaine des atomes ultra-froids, l'étude de ce type de non-linéarité a gagné un regain d'intérêt, ces dernières années, avec la production expérimentale de solitons sombres [5–7] (trou dans la densité d'atome) et de solitons brillants [8–11] (forte densité locale). L'utilisation des résonances de Fano-Feshbach permet de changer le signe des interactions inter-atomiques en modifiant un paramètre

extérieur (qui est ici le champ magnétique) [2], et a pu être exploitée pour produire des solitons brillants avec du lithium [8] et du rubidium 85 [9–11].

La mise en mouvement des solitons ainsi produits a permis à l'équipe de L.S. Cornish de réaliser, en 2013, une expérience de diffusion sur une barrière répulsive créée par un faisceau laser gaussien [12] et, plus réçemment, sur une barrière attractive [11]. Dans ce chapitre, nous proposons d'utiliser des solitons brillants comme une sonde à énergie négative pour un puits de potentiel et un réseau optique de taille finie. Nous verrons, au moyen de simulations numériques que, dans le cas du puits de potentiel, il est possible de peupler efficacement les différents niveaux d'énergie du puits, correspondant à des états liés ou résonants (ces états sont toutefois renormalisés par les interactions). Une application de cette technique sera de peupler les états de surface apparaissant dès que l'on considère un potentiel périodique de taille finie. Nous verrons que la topologie de cette interface joue un rôle prépondérant dans la distribution des niveaux d'énergie.

4.2 Équation de Schrödinger à N corps

Lorsqu'on souhaite réaliser l'étude d'un gaz de Bose réel (sans spin), nous nous trouvons confrontés à la nécessité de prendre en compte les interactions entre chacune des particules de ce gaz. Ce problème à N corps est hautement non trivial dans le cas général. Il est néanmoins possible de réaliser une approche de l'équation de Schrödinger à N corps basée, par exemple, sur des méthodes du type de celle de Hartree-Fock [13]. Ces méthodes sont très robustes (notamment à température élevée) mais aussi très coûteuses numériquement. Une autre approche consiste à considérer qu'à température nulle, le hamiltonien à N particules peut se réduire à un hamiltonien à une particule. Cette approche, dite de champ moyen, fait l'hypothèse que toutes les particules interagissent avec un potentiel d'interaction résultant de l'ensemble des interactions avec les $N-1$ autre particules.

4.2.1 Équation de la dynamique du gaz

Pour un gaz suffisamment dilué on peut faire l'approximation de ne prendre en compte que des interactions à 2 particules, les détails des interactions entre ces deux particules ne jouant pas de rôle direct lors d'une diffusion. En effet, dans cette limite de basse énergie, la diffusion est entièrement déduite d'un unique paramètre scalaire a, appelé longueur de diffusion. En seconde quantification la fonction d'onde à N corps $\hat{\Psi}$ est quantifiée. L'hamiltonien de ce champ de bosons est alors donné par la relation (dans le cas d'un gaz dilué de densité n, tel que $|a| \ll n^{-1/3}$, pour lequel les corrélations entre atomes à courte distance sont négligées) :

$$\hat{H} = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla\hat{\Psi}^\dagger \nabla\hat{\Psi} + \hat{\Psi}^\dagger V_{ext}(\vec{r})\hat{\Psi} \right) \mathrm{d}\vec{r} + \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\Psi}(\vec{r}')^\dagger V(\vec{r}'-\vec{r})\hat{\Psi}(\vec{r}')\hat{\Psi}(\vec{r})\mathrm{d}\vec{r}'\,\mathrm{d}\vec{r},$$

avec $V(\vec{r}'-\vec{r})$ le potentiel à 2 corps. Comme dans le cas de bosons les relations de commutation sont : $[\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')] = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$ et $[\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}(\vec{r}')] = 0$. L'opérateur du champ en représentation de Heisenberg obéit à une équation de type Schrödinger :

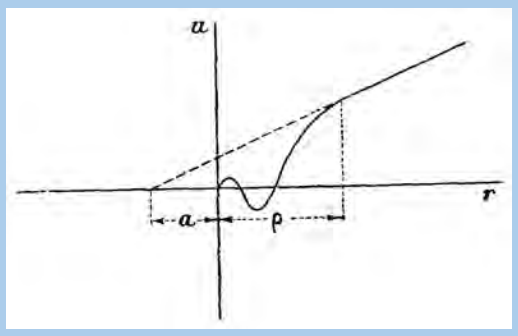
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{\Psi}(\vec{r},t) = [\hat{\Psi}(\vec{r},t), \hat{H}] \tag{4.1}$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r},t) + (N-1)\int \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}',t)V(\vec{r}'-\vec{r})\hat{\Psi}(\vec{r},t)\mathrm{d}\vec{r}' \right] \hat{\Psi}(\vec{r},t), \tag{4.2}$$

où $V_{ext}(\vec{r})$ est généralement un potentiel de confinement harmonique et $V(\vec{r}'-\vec{r})$ est un potentiel d'interaction à 2 particules. Dans le cas d'un gaz de bosons où presque tous les atomes sont condensés, il est possible d'écrire l'opérateur champ en deux composantes :

$$\hat{\Psi}(\vec{r},t) = \Psi_0(\vec{r},t) + \delta\hat{\Psi}(\vec{r},t) \qquad (\Psi_0 \in \mathbb{C}). \tag{4.3}$$

La première $\Psi_0(\vec{r})$ est traitée classiquement et rend compte du mode du condensat, c'est la fonction d'onde macroscopique (paramètre d'ordre de Landau-Ginzburg), tandis que la seconde $\delta\hat{\Psi}(\vec{r})$ est celle du nuage thermique qui peut être négligée en première approximation.



Pseudo-potentiel. Afin d'interpréter les expériences de ses collègues portant sur l'excitation d'un gaz d'atomes de Rydberg [14], Enrico Fermi proposa un modèle d'interactions inter-atomiques à basse énergie. Ici $u(r)$ (cf. figure) est solution de l'équation de Schrödinger, dans le cas d'un potentiel type noyau dur dont la largeur est de l'ordre de grandeur de a. C'est la *distance de collision*. Elle peut être négative et dépend de la distance typique de variation de la fonction d'onde.

Le potentiel de diffusion en onde-s est de type sphère dure en δ de Dirac tel que (l'interprétation physique de ce pseudo-potentiel de contact est donnée dans l'encadré ci-dessus) :

$$V(\vec{r}' - \vec{r}) = N\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta(\vec{r}' - \vec{r}) = Ng\delta(\vec{r}' - \vec{r}), \quad \text{avec la constante de couplage : } g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \tag{4.4}$$

En insérant (4.3) dans (4.2) et en considérant (4.4), l'équation de la dynamique du champ classique devient :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_0(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r},t) + Ng|\Psi_0(\vec{r},t)|^2\right]\Psi_0(\vec{r},t), \tag{4.5}$$

qui est l'équation de Gross-Pitaevskii [1]. On définit, à partir de cette équation, une action de la forme :

$$S = \int \mathrm{d}t\ \mathrm{d}\vec{r}\ \Psi_0^*(\vec{r},t)\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - U(\vec{r}) - \frac{1}{2}gN|\Psi_0(\vec{r},t)|^2\right]\Psi_0(\vec{r},t). \tag{4.6}$$

Par la suite, on utilisera cette action afin de dériver des équations de propagation effectives d'un gaz à basse dimension lorsque l'on souhaite prendre en compte certaines contraintes physiques liées au système.

- **Solution stationnaire**

L'obtention de l'équation stationnaire se fait en posant une solution de la forme : $\Psi_0(\vec{r},t) = \psi_0(\vec{r})\exp(-i\mu t/\hbar)$. En insérant cette ansatz dans l'équation (4.5), on obtient l'équation aux valeurs propres suivantes :

$$\mu\psi_0(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) + Ng|\psi_0(\vec{r})|^2\right)\psi_0(\vec{r}), \tag{4.7}$$

Dans ce cadre μ tient le rôle de l'énergie propre et est analogue à un potentiel chimique : c'est la variation d'énergie du système lorsque l'on ajoute à celui-ci un atome ($\mathrm{d}E = \mu\mathrm{d}N$).

- **Particule libre**

On peut mentionner, à titre d'exemple, qu'il est possible d'extraire la relation de dispersion d'un gaz de N particules en prenant un ansatz propagatif de la forme (solution de Hartree) :

$$\psi_0(\vec{r}) = \sqrt{\frac{N}{V}}\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{r}},$$

dans le cas simple où il n'y a pas de potentiel extérieur $V_{ext}(\vec{r}) = 0$. En insérant cette solution dans l'équation (4.7), on obtient la relation de dispersion suivante :

$$\mu\sqrt{\frac{N}{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + g\frac{N}{V}\right)\sqrt{\frac{N}{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Rightarrow \mu(\vec{k}) = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} + g\frac{N}{V}.$$

Cette relation de dispersion correspond à celle que l'on peut obtenir dans le cas de l'équation de Schrödinger pour une particule libre, plus un terme d'énergie d'interaction * gN/V.

4.2.2 Bilan énergétique

On peut aussi considérer μ comme le multiplicateur de Lagrange associé à un nombre fixé de particules afin d'extraire de (4.7) une intégrale fonctionnelle sur l'énergie totale du système [2] :

$$E_{tot}[\Psi_0(\vec{r}); N] = N\int d\vec{r}\ \Psi_0^*(\vec{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\vec{r},t) + \frac{(N-1)g}{2}|\psi_0(\vec{r})|^2\right]\Psi_0(\vec{r}). \tag{4.8}$$

Par là-même, il est possible de déduire de (4.8) que :

$$\mu(N) = \frac{\partial E_{tot}[\Psi_0]}{\partial N},$$

on retrouve la définition de μ en tant que potentiel chimique. Plus encore, cette dernière relation nous conduit à décomposer, après dérivation, l'équation (4.8) en trois contributions :

$$\mu = \frac{E_{cin} + E_{pot} + 2E_{int}}{N},$$

qui sont : l'énergie cinétique † :

$$E_{cin} = N\frac{\hbar^2}{2m}\int d\vec{r}\left|\vec{\nabla}\Psi(\vec{r},t)\right|^2, \tag{4.9}$$

l'énergie potentielle :

$$E_{pot} = N\int d\vec{r}V_{ext}(\vec{r},t)\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2, \tag{4.10}$$

et l'énergie d'interaction :

$$E_{int} = \frac{N(N-1)}{2}g\int d\vec{r}|\Psi(\vec{r},t)|^4. \tag{4.11}$$

On peut, par invariance en loi d'échelle, retrouver le théorème du viriel [16] :

$$2E_{cin} - 2E_{pot} + 3E_{int} = 0.$$

Par la suite, on considérera un potentiel harmonique anisotrope à trois dimensions de la forme :

$$V_{ext} \equiv \frac{1}{2}m\omega^2(\epsilon x^2 + y^2 + z^2), \tag{4.12}$$

avec ϵ un paramètre géométrique.

∗. Ce terme venant s'ajouter provoque une levée de dégénérescence du spectre d'énergie lorsque $a < 0$, ce qui fait l'objet du théorème de Hugenholtz-Pines [15].

†. En pratique, on préfèrera calculer cette énergie dans l'espace des k.

- **Interactions répulsives : approximation de Thomas-Fermi**

On considère ici, à titre d'exemple, une solution de l'équation (4.5) lorsque les interactions sont répulsives ($a > 0$) et dans la limite où $gN \gg 1$ *i.e.* lorsque l'énergie d'interaction est bien plus grande que l'énergie cinétique (cf. 4.7). Il s'agit du régime de Thomas-Fermi. On peut écrire :

$$\mu\psi(\vec{r}) \approx (V_{ext}(\vec{r}) + g|\psi(\vec{r})|^2)\psi(\vec{r}).$$

Lorsque $V_{ext}(\vec{r})$ est un potentiel harmonique et comme μ est une constante, la solution est un profil de densité, dit de Thomas-Fermi, en parabole inversée :

$$n(\vec{r}) = \frac{1}{g}\left(\mu - \frac{m}{2}\omega_0^2\vec{r}^2\right). \tag{4.13}$$

Par normalisation, on obtient l'expression du potentiel chimique :

$$\mu = \frac{\hbar\omega_0}{2}\left(\frac{15Na}{a_{oh}}\right)^{2/5}. \tag{4.14}$$

Ce cas de figure, où les interactions répulsives dominent, sera discuté plus en détail dans le cadre du chapitre 5. Dans ce chapitre on s'intéresse, en particulier, au cas où les interactions sont attractives, ce qui nécessite d'être plus prudent quant au domaine de stabilité du gaz dans un régime d'interaction forte.

- **Interactions attractives : nuage gaussien à 3D**

On cherche maintenant les solutions de l'équation stationnaire de Gross-Pitaevskii à 3 dimensions de sorte à identifier le domaine de stabilité d'un nuage d'atomes dans le cas où les interactions sont prises comme attractives. On fait l'hypothèse que le potentiel extérieur appliqué au nuage est celui d'un oscillateur harmonique tridimensionnel anisotrope (cf. Eq. 4.12) selon la direction x avec $\epsilon \neq 1$. Dans ce cas on pose, par extension de la solution sans interaction, une fonction d'onde gaussienne de forme générale :

$$\Psi_0(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{3/2}w^2\sigma a_{oh}^3}}\exp\left[-\frac{x^2}{2a_{oh}^2\sigma^2} - \frac{y^2+z^2}{2a_{oh}^2w^2}\right], \tag{4.15}$$

où a_{oh} est la longueur caractéristique de l'oscillateur harmonique défini par relation $a_{oh} = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$. Les grandeurs sans dimension σ et w, sont les paramètres géométriques associés à l'extension spatiale du nuage selon l'axe x et selon y, z respectivement.

En insérant l'ansatz (4.15) dans l'équation fonctionnelle (4.8), et après intégration sur tout l'espace, on obtient l'expression générale pour l'énergie suivante :

$$E_{tot}[\sigma, w, N] = N\hbar\omega_0\left[\frac{1}{4\sigma^2} + \frac{1}{2w^2} + \frac{\epsilon^2\sigma^2}{4} + \frac{w^2}{2} + \frac{\chi}{\sqrt{2\pi}\sigma w^2}\right]. \tag{4.16}$$

En l'absence d'interaction, le minimum de cette fonction est obtenu pour $w = \sigma = 1$, qui est le cas de l'oscillateur harmonique à 3 dimensions, où l'on a défini le paramètre d'interaction :

$$\chi = \frac{Na}{a_{oh}},$$

qui permettra de faire la distinction entre le cas de faible interaction $\chi \ll 1$ et le régime de forte interaction $\chi \gg 1$.

On choisit de prendre le cas d'un condensat rubidium 85 dont la longueur d'interaction attractive est de $a = 0.34$ nm. Lorsque l'on représente l'énergie totale en fonction de la largeur caractéristique de confinement transversal w et du paramètre d'interaction χ on observe que, pour des $\chi > 0.65$, l'énergie

totale n'admet plus de minimum. Autrement dit, la partie cinétique (aussi nommée terme de *pression quantique*) ne compense plus le terme d'interaction. Ainsi, le condensat n'est plus stable pour une valeur de $w \neq 0$: on dit que le condensat s'effondre (*bosanova*). Ceci a lieu lorsque le nombre d'atomes (dans le cas où $\sigma = w$) est, d'après l'ansatz gaussien de :

$$N_c = \frac{8\pi^2}{9}\frac{\hbar^{5/2}}{\sqrt{\omega}|g|m^{3/2}} = \frac{2\pi}{9}\frac{a_{oh}}{a} \approx 0.698\frac{a_{oh}}{a}. \tag{4.17}$$

Cette valeur de N_c n'est pas prise en compte lorsque l'on traite de l'équation de Gross-Pitaevskii à une dimension, d'où l'importance de faire une étude préliminaire de manière à connaître les domaines de validité du modèle. La figure 4.1.a représente l'énergie d'un condensat de Bose-Einstein en fonction des paramètres géométriques w et σ. Cette surface d'énergie nous informe que pour le potentiel (4.12) (pris isotrope *i.e.* $\epsilon = 1$), un nuage initialement isotrope ($\sigma = w = 2$) va minimiser son énergie vers un minimum local, à condition que $\chi < \chi_c$. Dans le cas contraire (Fig. 4.1.b), ce minimum local disparaît si bien que le nuage s'effondre.

Il est également possible de faire disparaître ce minimum local en changeant la valeur du paramètre d'anisotropie ϵ. On peut montrer que pour $\epsilon > 7$, il n'y a plus de minimum local. Autrement dit, lorsque la fréquence du piégeage longitudinal est 7 fois plus grande que la fréquence de piégeage transverse, il y a collapse. La manière la plus naturelle de caractériser la stabilité d'un condensat est de calculer l'énergie totale du système dans le plan (σ,w). De cette façon, c'est la géométrie du piège qui dicte le choix du nombre d'atomes que l'on peut condenser dans celui-ci pour une longueur d'interaction donnée. Ainsi, on peut définir N_c comme étant la valeur maximale d'atomes pour laquelle il existe encore un minimum local dans le plan (σ,w).

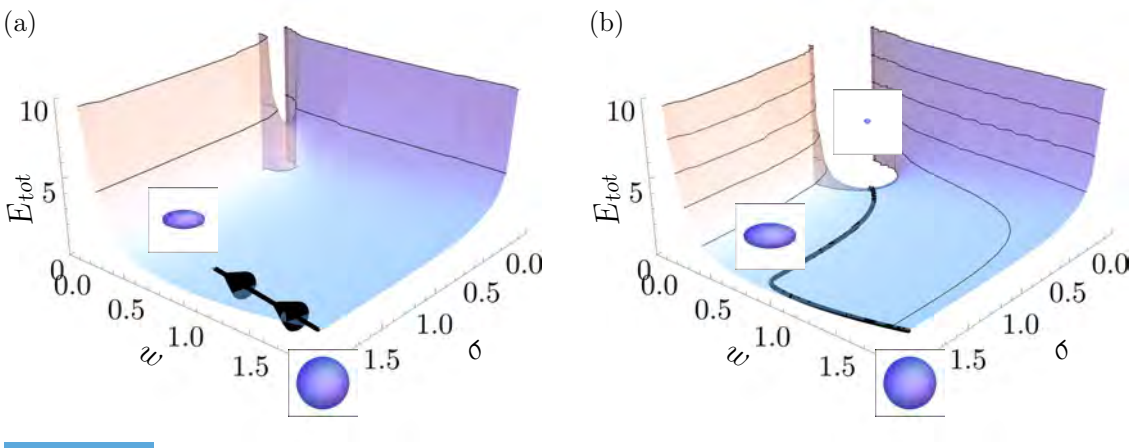


Figure 4.1

*Représentation graphique de l'énergie totale d'un condensat de (^{85}Rb) avec interactions attractives, en fonction de sa largeur w et du nombre d'atomes N, plongé dans un potentiel harmonique isotrope (*Eq. *4.12). On part, par exemple, d'un condensat isotrope $\sigma = w = 2$, et on fait évoluer son énergie au cours du temps (trajectoires noires). Dans le cas où $\chi \approx 0.32 < \chi_c$ (a), le condensat est à l'équilibre au minimum pour $w \approx 1$ et $\sigma \approx 1.7$. Dans le cas où $\chi \approx 0.77 > \chi_c$, il n'y a plus de minimum et le condensat originellement isotrope devient infiniment petit (effondrement), passant par un équilibre instable à $w \approx 0.7$ et $\sigma \approx 2$.*

La recherche du minimum peut se faire en calculant directement :

$$\frac{\partial E_{tot}}{\partial \sigma} = 0 \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial E_{tot}}{\partial w} = 0 \tag{4.18}$$

Que l'on peut réécrire sous la forme du système suivant :

$$\epsilon^2\sigma^4 - \frac{1}{2} + \frac{C\sigma}{w^2} = 0$$
$$w^4 - 1 + \frac{C}{\sigma} = 0,$$

où $C = \chi/\sqrt{2\pi}$. À défaut de solution analytique, un calcul numérique nous permet de déterminer, dans le cas où $N = N_c$, l'unique solution : $\sigma \approx 0.861$ et $w \approx 0.759$, pour $\epsilon = 1$.

4.3 Équations de Schrödinger non linéaires à basses dimensions

On s'intéressera, par la suite, à des systèmes physiques à une dimension. Il est donc nécessaire de procéder à une réduction de dimensionnalité. On présente, dans cette section, trois méthodes permettant de réduire l'équation générale de Gross-Pitaevski à une équation effective à une dimension, tout en conservant une empreinte du système réel à trois dimensions.

4.3.1 Gross-Pitaevskii 1D

Nous procédons à une réduction de dimensionnalité en considérant un nuage à l'équilibre, dans un piège harmonique anisotrope, pour lequel la fréquence du piège transverse est bien plus grande que la fréquence longitudinale, *i.e.* $\epsilon \gg 1$. Le condensat adopte alors la forme d'un cigare allongé. On cherche une solution de (4.5) de la forme : $\Psi_0(\vec{r}, t) = \phi(y, z)f(x, t)$ avec :

$$\phi(y, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi w^2 a_{oh}^2}} \exp\left[-\frac{y^2 + z^2}{2w^2 a_{oh}^2}\right],$$

qui correspond à l'état fondamental du potentiel harmonique induisant le confinement transverse. Rappelons que $a_{oh} = \sqrt{\hbar/(m\omega_0)}$ est la largeur typique de ce potentiel harmonique de fréquence ω_0. En introduisant cet ansatz dans l'équation de Gross-Pitaevskii à trois dimensions, l'équation différentielle vérifie pour f :

$$i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}\phi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\phi + f\nabla_{y,z}^2\phi\right) + V(\vec{r})f\phi + gN|f|^2 f|\phi|^2\phi. \tag{4.19}$$

Si l'on multiplie des deux côtés par ϕ^* puis si l'on intègre l'équation selon y et z on a :

$$i\hbar\frac{\partial f}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{f}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \int_{\mathbb{R}^2}\nabla_{y,z}^2\phi \mathrm{d}y\mathrm{d}z\right) + \frac{m\omega^2}{2}\int_{\mathbb{R}^2}(y^2 + z^2)|\phi|^2\mathrm{d}y\mathrm{d}z + gN|f|^2\int_{\mathbb{R}^2}|\phi|^4\mathrm{d}y\mathrm{d}z\right] f.$$

Ici, la fonction ϕ est solution d'une équation de Schrödinger stationnaire pour un potentiel harmonique à deux dimensions. Dans ce cas, la fonction f est multipliée par une phase : $\exp\left[\frac{it}{\hbar}\int_{\mathbb{R}^2}\nabla_{y,z}^2\phi\mathrm{d}y\mathrm{d}z\right]$, ce qui permet de simplifier le deuxième terme de la contribution cinétique. Cette approximation ne prend pas en compte les degrés de liberté transverses. Nous verrons, par la suite, qu'il est possible de réduire la dimension tout en gardant cette information.

Ainsi, il ne reste plus que le calcul du terme :

$$\int_{\mathbb{R}^2}|\phi|^4\mathrm{d}y\mathrm{d}z = \frac{m\omega}{2\pi\hbar},$$

pour obtenir l'équation de Gross-Pitaevskii à une dimension, effective sur f :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + g_{1D}N|f(x, t)|^2\right) f(x, t) \tag{4.20}$$

où nous avons défini le paramètre d'interaction à une dimension : $g_{1D} = 2a\hbar\omega$.

De manière similaire, on peut extraire une équation stationnaire à une dimension et il est possible, dans le cas particulier où $V_{ext}(x) = 0$ de trouver une solution d'équilibre. Cette solution s'écrit pour $x > 0$ [17] :

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{n_0}{N}} \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi}\right), \tag{4.21}$$

où $\xi = \hbar/\sqrt{2mn_0g}$ est la *longueur de cicatrisation* (*healing length*), avec n_0 la densité à $x \to \infty$. On reviendra, plus loin, sur l'obtention de cette solution.

4.3.2 Équation de Schrödinger non polynomiale

Une réduction de dimensionnalité s'accompagne toujours d'hypothèses sur les degrés de liberté réduits. Plus haut, nous n'avons pas pris en compte les degrés de liberté transverses de sorte à simplifier leurs contributions cinétiques. Cette approximation n'est pas toujours valide et notamment lorsque l'on ne peut plus considérer, lors d'une diffusion par exemple sur un potentiel d'énergie typique E_{R}, que : $\hbar\omega\epsilon \gg E_{\mathrm{R}}$. Il est donc parfois utile de garder une information quant à la dynamique effective des états transverses. C'est précisément ce que font les équations effectives présentées ici.

- **Obtention de l'équation**

Une autre façon de réduire l'équation de Gross-Pitaevskii à une dimension est de prendre un ansatz où, cette fois-ci, la fonction d'onde s'écrit [19] : $\Psi_0(\vec{r}, t) = \phi(y, z; w(x,t))f(x,t)$, avec :

$$\phi(x, y; w(x,t)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi w(x,t)^2 a_{oh}^2}} \exp\left[-\frac{y^2+z^2}{2a_{oh}^2 w(x,t)^2}\right]. \tag{4.22}$$

On remarque que, en l'occurence, la fonction d'essai est une fonctionnelle dont la largeur typique longitudinale du gaz est $w(x,t)$. L'idée sous-jacente est de prendre en compte la possibilité d'exciter des niveaux transverses, lors de la dynamique longitudinale au travers de cette fonction. Dans ce cadre, on peut écrire que la partie cinétique est une composante principale transverse $\nabla \approx \nabla_\perp$. Ainsi, l'action (4.6) s'écrit :

$$S = \int \mathrm{d}t\mathrm{d}x\ f^* \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V_{ext} - \frac{gN}{2}\frac{1}{2\pi w^2}|f|^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{w^2} - \frac{m\omega^2}{2}w^2\right] f. \tag{4.23}$$

Les équations d'Euler-Lagrange :

$$\frac{\partial S}{\partial f^*} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial S}{\partial \dot{f}^*} = 0 \text{ et } \frac{\partial S}{\partial w} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial S}{\partial \dot{w}} = 0$$

conduisent au système :

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{ext} + \frac{gN}{2\pi w^2}|f|^2 + \frac{\hbar^2}{2mw^2} + \frac{m\omega^2 w^2}{2}\right] f \\ 0 &= \frac{\hbar^2}{2mw^2} - \frac{m\omega^2 w}{2} + \frac{gN}{4\pi w^3}|f|^2 \end{aligned}$$

La dernière équation permet d'exprimer la largeur typique $w^2(x,t) = a_{oh}^2\sqrt{1+2aN|f|^2}$ que l'on insère dans la première qui donne l'*équation de Schrödinger non polynomiale*, proposée par Salasnich [18, 19] :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{ext} + g_{1D}N\frac{|f|^2}{\sqrt{1+2aN|f|^2}} + \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{1+2aN|f|^2}} + \sqrt{1+2aN|f|^2}\right)\right] f. \tag{4.24}$$

Cette équation effective peut être résolue aisément numériquement à l'aide d'un schéma de type split-step Fourier (cf. annexe A) à une dimension, en ajoutant au potentiel ces termes non polynomiaux en $|f|^2$.

- **Formulation hydrodynamique**

Cette approche est obtenue en insérant dans l'équation (4.24) une fonction d'onde dont la forme est celle de Madelung (à une dimension) :

$$\psi(x,t) = \sqrt{n(x,t)}\mathrm{e}^{iS(x,t)} \quad \text{avec} \quad |\psi(x,t)|^2 = n(x,t). \tag{4.25}$$

Après insertion dans l'équation (4.24), simplification et identification de la partie imaginaire et de la partie réelle on obtient, respectivement :

$$\partial_t n + \partial_x(nv) = 0 \tag{4.26}$$

$$-m\partial_t v = \partial_x\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial_{xx}\sqrt{n}}{\sqrt{n}} + \frac{mv^2}{2} + V_{ext} + \frac{\hbar\omega + (g_{1D} + \hbar\omega a)Nn}{\sqrt{1+2aNn}}\right], \tag{4.27}$$

où l'on a défini $v(x,t) = (\hbar/m)\partial_x S(x,t)$ la vitesse du « fluide ». La première est l'équation de continuité de la densité, tandis que la seconde a la forme de l'équation d'Euler en mécanique des fluides. Par la suite, on définit la fonction $\epsilon(n) = [2\hbar\omega + (g_{1D} + \hbar\omega a)Nn]/\sqrt{1+2aNn}$.

On considère une petite fluctuation au premier ordre de la densité et de la vitesse autour de son équilibre stationnaire $n_0(x)$, de la forme :

$$n(x,t) = n_0(x) + \delta n(x,t)$$
$$v(x,t) = v_0(x) + \delta v(x,t).$$

Dans le régime de Thomas-Fermi (approximation de densité locale), on peut négliger le premier terme (cinétique) de (4.27) et obtenir, dans le cas statique :

$$\mu = V_{ext}(x) + \epsilon(n_0(x)) \quad \text{et} \quad v_0(x) = 0. \tag{4.28}$$

À partir des deux équations (5.2) et (4.27) on obtient une relation générale pour l'évolution de $\delta n(x,t)$:

$$m\partial_{tt}\delta n(x,t) = -\partial_x\left[n_0(x)\partial_x\left(\delta n(x,t)\left.\frac{\partial\epsilon}{\partial n}\right|_{n_0}\right)\right]. \tag{4.29}$$

Ainsi, la vitesse du son locale est donnée par :

$$c^2(x) = \frac{1}{m}n_0\left.\frac{\partial\epsilon}{\partial n}\right|_{n_0} \tag{4.30}$$

Avec :

$$\left.\frac{\partial\epsilon}{\partial n}\right|_{n_0} = N\frac{(g_{1D} + a\hbar\omega)(1 + an_0N) - a\hbar\omega}{(1+2an_0N)^{3/2}}. \tag{4.31}$$

- **Obtention de l'équation avec quantification des vortex**

Une autre proposition d'équation effective a été faite par Munoz Mateo et Delgado dans un contexte un peu plus général d'un condensat mono et bi-dimensionnel et contenant des vortex axisymétriques de charge q. Le premier article [20] fait le calcul du potentiel chimique transverse d'un tel objet :

$$\frac{\mu_\perp(n_1)}{\hbar\omega} = (|q|+1) + \sqrt{\beta_q^2 + 4an_1} - \beta_q, \tag{4.32}$$

avec :

$$\beta_q = \frac{2^{2|q|}(|q|!)^2}{(2|q|)!},$$

et n_1 étant la densité locale transverse définie par :

$$n_1(x,t) = N\int \mathrm{d}z\mathrm{d}y|\Psi(x,y,z,t)|^2.$$

Ainsi, lorsque l'on sépare les termes transverses et longitudinaux de l'équation de Gross-Piatevskii (4.5) elle prend la forme :

$$\left(i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}-V_{ext}f\right)\phi(y,z;n_1)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{y,z}\phi+V(y,z)\phi+gn_1(x,t)|\phi|^2\phi\right)f(x,t). \quad (4.33)$$

en multipliant cette dernière expression par $\phi^*(y,z;n_1)$ on obtient l'équation longitudinale :

$$i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+V_{ext}(x)f+\mu_\perp(n_1)f. \quad (4.34)$$

Dans la limite où la longueur de cicatrisation est bien plus petite que la variation spatiale de f selon x, on peut insérer (4.32) dans (4.34) afin d'obtenir l'équation [21, 22] :

$$i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+V_{ext}(x)f+\hbar\omega\sqrt{\beta_q^2+4aN|f|^2}f,$$

avec un paramètre d'interaction prenant ici la forme : $g_{1D}=2a\hbar\omega/\beta_q$.

L'avantage d'utiliser cette méthode est que, en plus d'être plus fidèle que l'équation de Schrödinger non-linéaire (4.24) vis-à-vis de l'équation de Gross-Pitaevskii à trois dimensions, elle est aussi valable dans le régime de Thomas-Fermi c'est-à-dire, ici, dans la limite où $4an_1 \gg \beta_q^2$. Enfin, en l'absence de vortex, il est possible de généraliser cette équation à des condensats bidimensionnels.

- **Équation d'un gaz de Fermions effective**

Nous verrons au chapitre (5) qu'un autre système peut être traité au moyen d'une équation de Schrödinger non polynomiale, qui est celui d'un gaz de bosons impénétrables et en interaction répulsive, souvent appelé gaz de Tonks-Girardeau. Dans ce cas particulier, l'équation (4.5) se réduit à une dimension à [23] :

$$i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+V_{ext}(x)f+\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}|f|^4 f. \quad (4.35)$$

Lors d'une dynamique, le terme non linéaire crée une répulsion quantique plus forte que pour l'équation de Gross-Pitaevskii à une dimension, ce qui tend à diluer plus rapidement le nuage d'atomes.

Le point commun à toutes ces équations de Schrödinger non linéaires, est qu'elles admettent une solution stationnaire (en l'absence de potentiel). Le choix que l'on fait dans ce chapitre est de traiter le cas de l'équation de Gross-Pitaevskii à une dimension (4.20) uniquement. Implicitement on supposera donc que la dynamique longitudinale de la fonction d'onde n'a aucune conséquence sur ses composantes transverses. Une étude plus approfondie utilisant l'équation (4.24) ou (4.34) pourra être envisagée dans l'optique de tester cette hypothèse.

4.3.3 Solution propagative : le soliton

Dans la suite de ce chapitre nous allons particulièrement nous intéresser à une solution analytique de l'équation de Gross-Pitaevskii (4.20), le soliton. On peut montrer que l'équation de Gross-Pitaevskii à une dimension, dépendante du temps, admet des solutions propagatives de la forme [24] :

$$\psi(x,t)=\frac{A(x,t)}{\cosh\left(\frac{x-vt}{l}\right)},$$

où $A(x,t)\in\mathbb{C}$ est une amplitude qui reste à déterminer. On peut montrer, par ailleurs, que le soliton est aussi solution de l'équation de Schrödinger non linéaire (4.24) et de l'équation (4.34).

- **Calcul analytique**

Si l'on insère cet ansatz dans (4.20), on obtient l'équation portant sur A suivante :

$$i\hbar\left(\frac{\partial_t A}{\cosh(s)}+\frac{c}{l}\frac{\sinh(s)}{\cosh(s)}\frac{A}{\cosh(s)}\right)=\frac{\hbar^2}{m}\left[-\frac{\partial^2_{xx}A}{2\cosh(s)}+\partial_x A\frac{\sinh(s)}{\cosh(s)^2}+\frac{A}{2l^2\cosh(s)}\left(\frac{2}{\cosh(s)^2}-1\right)\right]$$
$$+Ng_{1D}\frac{|A|^2}{\cosh(s)^2}\frac{A}{\cosh(s)},$$

où l'on a posé $s=(x-vt)/l$. Il est nécessaire d'annuler chaque terme de $1/\cosh^n(s)$ de cette équation qui, pour $n=3$, conduit à la relation : $\hbar^2/ml^2=-2N_0a\omega|A|^2$. Par ailleurs, les termes en $1/\cosh(s)$ et en $1/\cosh^2(s)$ donnent respectivement :

$$i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}-\frac{\hbar^2 A}{2ml^2}\text{ et }i\hbar\frac{v}{l}A=\frac{\hbar^2}{ml}\frac{\partial A}{\partial x}.$$

La deuxième relation donne, après intégration, un terme de phase : $\exp(imv(x-x_0)/\hbar)$. Ainsi, en insérant une solution de la forme $A=\lambda\exp(i\phi(t))\exp(imv(x-x_0)/\hbar)$ on obtient, après intégration sur le temps, une phase :

$$\phi(t)=i\left[N\omega\lambda^2|a|-\frac{mv^2}{2\hbar}\right](t-t_0).$$

La normalisation de la fonction d'onde *i.e.* de la détermination de λ donne finalement l'équation générale d'un soliton* *brillant* :

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{N|a|}{2\sigma^2}}\frac{\exp\left[i\frac{mv}{2\hbar}(2(x-x_0)+(v-Na\omega)(t-t_0)\right]}{\cosh\left[\frac{N|a|}{\sigma^2}\left((x-x_0)-v(t-t_0)\right)\right]},\tag{4.36}$$

avec $\sigma=\sqrt{\hbar/m\omega}$. On peut montrer que la variance Δx de cette solution est indépendante du temps et égale à [24] :

$$\Delta x=\frac{\pi}{2\sqrt{3}}\frac{\hbar^2}{am^2N\omega^2},$$

ce qui en fait une solution d'équilibre de l'équation (4.20).

- **Soliton dans le vide**

En l'absence de potentiel extérieur $V_{ext}=0$ ($\omega=0$), le calcul de l'énergie totale se fait en introduisant (4.36) dans (4.9) et (4.11), on trouve :

$$E_{tot}=E_{cin}+E_{int}=\frac{a^2mN^2\omega^2}{3}-\frac{a^2mN^2\omega^2}{6},$$

Il transparaît de cette relation que le soliton est une solution d'équilibre du gaz en interaction car, en effet, les différentes énergies entrant en jeu sont indépendantes du temps. La forme solitonique du gaz minimise l'énergie totale de celui-ci. Une application numérique de cette formule avec les caractéristiques suivantes : $N=1000$ atomes, $a=6.5a_{\mathrm{B}}$, $\omega=2\pi\times200$ Hz et $v=0$ donne une énergie totale $E_{tot}=-1.253\times10^{-3}E_{\mathrm{R}}$.

On peut montrer à partir d'un calcul des énergies (Eq. 4.9) et (Eq. 4.10) portant sur la fonction d'onde (4.36) que, dans le cas d'un soliton immobile ($v=0$), on a la relation [25] :

$$E_{int}/E_{cin}=-2.\tag{4.37}$$

Il est souvent utile de vérifier le caractère « solitonique » d'une fonction d'onde directement à l'aide du calcul de ce rapport.

∗. On peut aussi retrouver l'équation du soliton à partir de la conservation de ψ par translation $x-vt$.

- **Réalisation expérimentale**

Plusieurs groupes dans le monde ont réalisé la production de solitons brillants à une dimension à partir de condensats de Bose-Einstein [26]. On répertorie ici leurs caractéristiques :

Equipe	Atome	N	a	m (kg)
Paris [8]	^{7}Li	6000	$-3.97a_{\mathrm{B}}$	$1.165\ 034 \times 10^{-26}$
Houston [9]	^{6}Li	5000	$-3a_B$	$9.988\ 339 \times 10^{-27}$
Durham [10]	^{85}Rb	1000	$-6.5a_{\mathrm{B}}$	$1.409\ 993 \times 10^{-25}$

où l'on a introduit a_{B}, le rayon de Bohr. On choisit de prendre, pour toutes les simulations numériques à venir, des solitons de rubidium 85, proches de ceux obtenus par l'équipe de Durham. On fixe la longueur d'interaction à $a = -5\ a_{\mathrm{B}}$ pour la suite de ce chapitre.

4.4 Diffusion d'un soliton sur un potentiel de taille finie

Le soliton s'avère être un objet très intéressant pour les expériences de diffusion. Cette solution a une dynamique classique dans le sens où la collision de deux solitons a un caractère élastique [27]. Par ailleurs, il a été démontré numériquement, au-delà d'un traitement des interactions de type champ moyen, que la diffusion sur une barrière permet de réaliser une superposition d'états [28, 29].

Une première étude menée ici traite de la diffusion sur un puits. Le soliton se comporte comme un réservoir d'énergie négative et peut ainsi peupler des états liés ou quasi-liés du continuum ($E \gtrsim 0$).

Récemment, le groupe de S. L. Cornish a réalisé la diffusion d'un soliton brillant d'environ $N = 6000$ atomes (avec $a = -3.5$ nm) sur un puits de potentiel de largeur 1.9 µm [11]. Lors de cette diffusion, le soliton se sépare en trois parties : une réfléchie, une transmise et une confinée dans le puits de potentiel. Dans ce cadre, ils observent une réflexion quantique à hauteur de 25 %, et un confinement induit par les interactions de plus de 7 %. Dans cette section, on réalise une étude numérique visant à sonder les états liés au moyen de la densité d'atomes confinés après diffusion.

4.4.1 Puits de potentiel et ordres de grandeur

Un des objectifs de ce chapitre est de montrer que les solitons peuvent servir de sonde des états de surfaces d'un potentiel périodique d'extension finie. On choisit un puits de potentiel issu de la restriction d'un potentiel sinusoïdal à une période du réseau (Fig. 4.2.a) :

$$U(x) = -U_0 \cos^2\left(\frac{\pi x}{d}\right) \quad \text{pour} \quad -d/2 \leq x \leq d/2. \tag{4.38}$$

Le paramètre de réseau d est pris égal à 0.65 μm pour tout le reste du chapitre.

Un des avantages d'utiliser un tel puits de potentiel est qu'il garantit la continuité de sa première dérivée en tous points. Il est possible de calculer numériquement les valeurs et les états propres en fonction de la profondeur du puits (cf. Fig. 4.2). On peut d'ailleurs vérifier que, dans le cas où U_0 est grand devant E_{R}, l'état fondamental converge vers l'état fondamental de l'approximation harmonique (états gaussiens) de ce puits de potentiel :

État	Profondeur d'entrée U_0/E_R
0	0.35
1	1.85
2	4.65
3	8.65

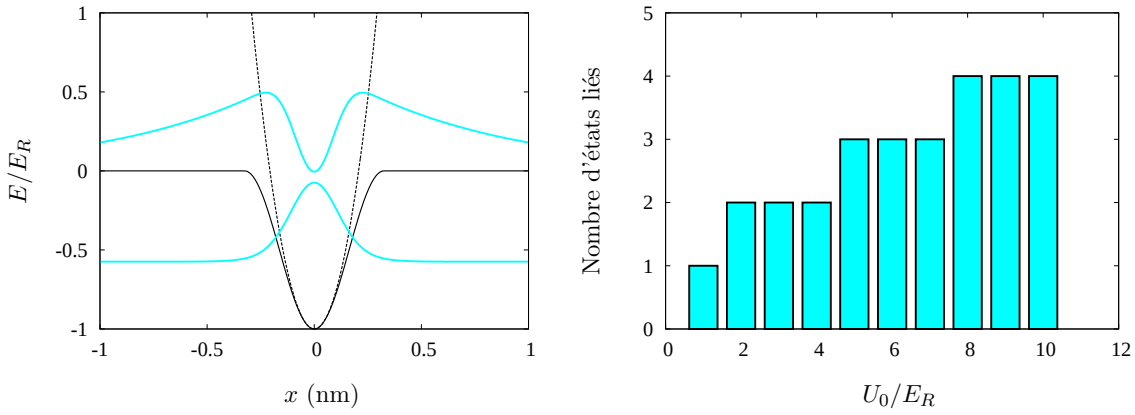


Figure 4.2

(a) Représentation du potentiel (4.38) (trait plein noirs), de son approximation harmonique (traits tiretés noirs) et des vecteurs propres correspondant à des valeurs propres de plus basses énergies : $n = 0$ et $n = 1$ (traits turquoise). (b) Nombre d'états liés ($E < 0$) en fonction de la profondeur du puits de potentiel.

Le tableau ci-dessus montre que, pour des profondeurs de puits croissantes, il y a un nombre d'états liés disponibles croissant (cf. Fig. 4.2). Ces états nous permettrons, par la suite, de déterminer, par projection, quels sont les états qui entrent en jeu lors de la diffusion de solitons sur ce puits de potentiel.

- **Dynamique du soliton**

On réalise ici la diffusion d'un soliton sur ce puits de façon à peupler des états liés. Plusieurs paramètres doivent être pris en compte. Un choix raisonnable est de prendre un gaz en interaction attractive dont les caractéristiques sont celles de l'expérience de Durham. En revanche on peut, lors de cette étude numérique, prendre le nombre d'atomes N comme paramètre variable. Malgré le fait qu'il est en pratique difficile de créer des solitons composés d'un nombre arbitrairement grand d'atomes, on peut néanmoins, de manière prospective, regarder la dynamique de solitons composés de $N < 10\,000$ atomes.

Plusieurs phénomènes apparaissent lors de la diffusion du soliton (cf. Fig. 4.3). Une partie est réfléchie (quantiquement) par le puits, et celle-ci entre en expansion, car la densité n'est pas suffisante pour contrecarrer les effets du terme de pression quantique. Une deuxième partie est transmise et semble se propager sans se déformer. Pour $N \geq 4000$ (Fig. 4.3.b), on observe qu'une partie des atomes du soliton est piégée dans le puits. Plus le soliton initial a d'atomes, plus le nombre d'atomes dans le piégé est grand. Le profil logarithmique de densité, à un temps final $t = 20$ ms, montre l'apparition d'un pic centré sur le potentiel.

On définit trois zones de l'espaces afin de quantifier les densités au cours du temps de la façon suivante :

$$R(t) = \int_{-\infty}^{-d/2} \mathrm{d}x|\psi(x)|^2,\ C(t) = \int_{-d/2}^{d/2} \mathrm{d}x|\psi(x)|^2 \text{ et } T(t) = \int_{d/2}^{\infty} \mathrm{d}x|\psi(x)|^2, \tag{4.39}$$

avec $R(t) + C(t) + T(t) = 1$. On prend, à titre d'exemple, deux cas représentatifs : $N = 1000$ et $N = 10000$. Un calcul numérique de ces grandeurs, au cours du temps, permet d'établir les proportions d'atomes piégés d'un soliton dont la vitesse de centre de masse est fixée initialement à $v_{CdM} = 0.4v_R$, pour un puits de profondeur $U_0 = E_R$ pour $C(t \to \infty)$. Ainsi, pour $N = 1000$, cette proportion est de l'ordre de 10^{-6}, tandis qu'elle est de 11.7% pour $N = 10000$. De plus, la partie réfléchie $R(t)$ n'excède pas les 10% de la norme totale.

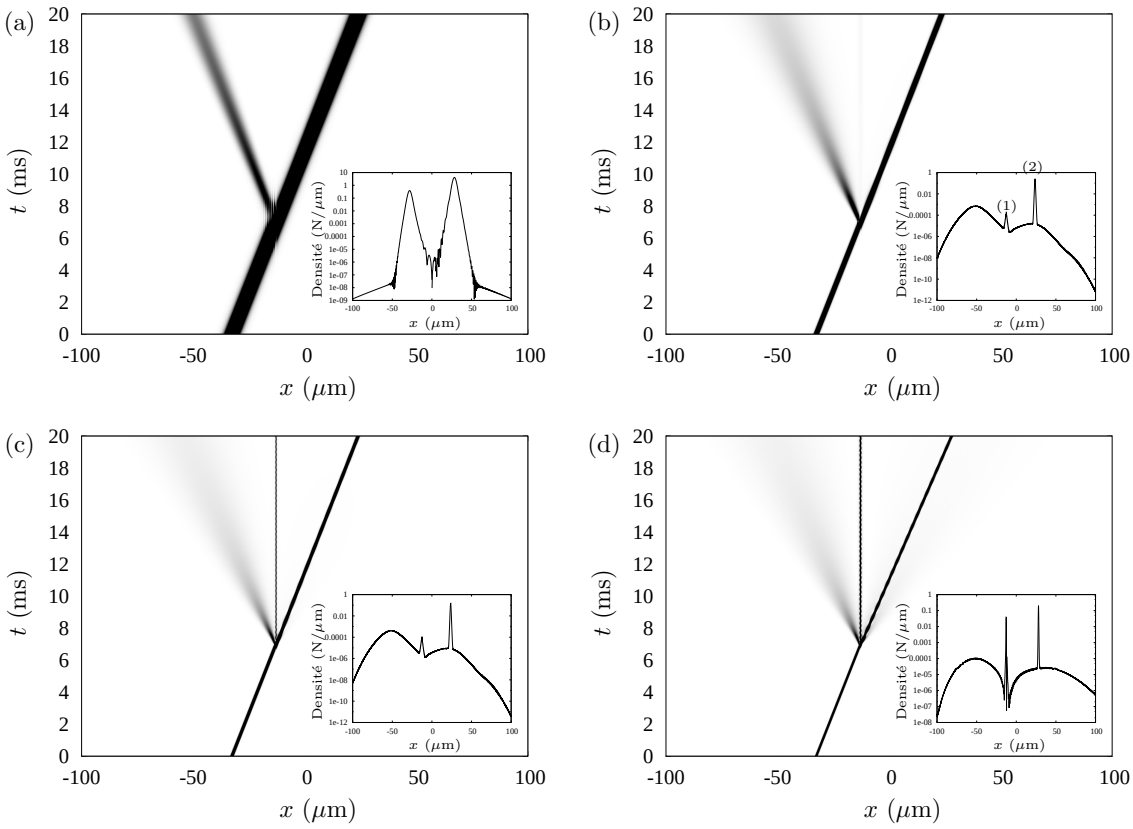


Figure 4.3

Effet du nombre d'atomes lors de la diffusion d'un soliton sur le puits de potentiel (4.38) dans la cas où : (a) $N = 1000$, (b) $N = 4000$, (c) $N = 7000$ et (d) $N = 10000$. Ici $U_0 = E_R$ et le soliton a une vitesse de centre de masse de $v_{CdM} = 0.4v_R$. L'inset représente la densité à $t = 20$ ms en échelle logarithmique. Par exemple à la figure b, l'échelle logarithmique permet d'observer l'apparition d'un pic de densité piégé dans le puits noté (1) invisible en échelle linéaire.

- **Projection sur des états stationnaires du puits sans interaction**

La première chose que l'on peut faire consiste à vérifier la stabilité de la solution stationnaire obtenue par diagonalisation du hamiltonien sans interaction, au moyen d'un calcul dynamique de la fonction d'onde. On prend, par exemple, un puits de profondeur $U_0 = E_{\mathrm{R}}$: nous avons donc un état fondamental, et un état excité disponible (sans interaction). On définit la fidélité associée au deux premiers niveaux du puits par * :

$$F_{n=0,1}(t) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{n=0,1}(x)\psi(x,t)\mathrm{d}x \right| . \tag{4.40}$$

On s'attend alors à ce que (si les interactions ne jouent pas un rôle trop important) cette grandeur reste constante au cours du temps et égale à 1. Ici on prend toujours $a = 5$ nm.

On observe (Fig. 4.4) que la fidélité du niveau fondamental oscille autour d'une valeur constante mais inférieure à 1, tandis que le niveau excité a une fidélité qui oscille fortement entre 0 et 1. Ainsi, on peut en conclure que, dans ce régime de paramètre d'interaction (loin du régime dilué), les états stationnaires du puits ne sont pas ceux du hamiltonien avec interaction. L'objectif est alors de caractériser les états

∗. À noter que la fidélité utilisée ici est définie comme la racine carée de la fidélité usuelle.

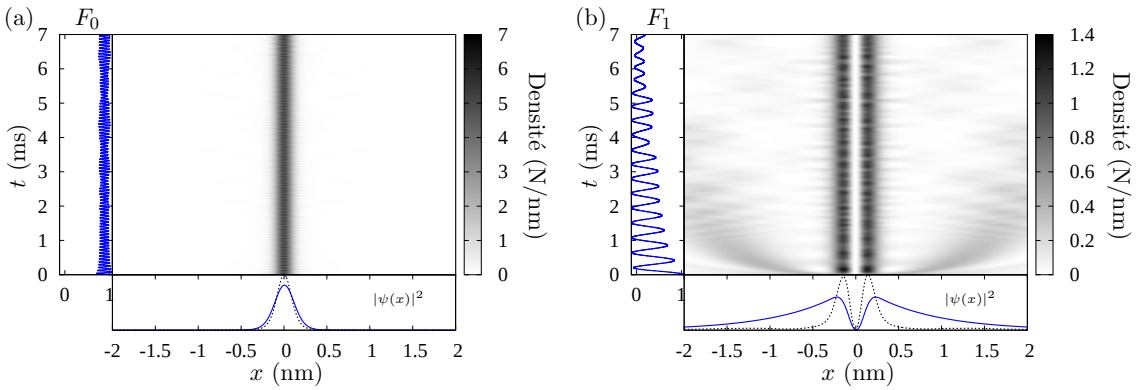


Figure 4.4

Dynamique des deux premiers états stationnaires du puits (4.38) donc pour $n = 0$ (a) et $n = 1$ (b). On représente dans les sous-graphiques la densité initiale (lignes pleines bleues) et finales (lignes en pointillés noirs) et le calcul temporel de la fidélité (4.40).

stationnaires du puits. On s'attend à ce que le potentiel d'interaction abaisse les énergies de ces états liés, ce qui pourrait se traduire par des états propres plus « localisés » sur le site.

- **Calcul des états liés du puits en présence d'interactions**

La méthode que nous avons utilisée pour calculer le fondamental d'un puits de potentiel en présence d'interactions repose, essentiellement, sur le changement de variable : $t \to it$ (rotation de Wick), qui transforme l'équation de Gross-Pitaevskii 1D en une équation de diffusion. Ainsi, lors d'une dynamique, le niveau fondamental qui, par définition, a l'énergie la plus basse (donc le plus grand coefficient $\exp(-E_n t)$) sera la dernière à disparaître (cf Annexe A). La méthode du split-Fourier est très adaptée à ce calcul en temps imaginaire, l'algorithme propageant la fonction d'onde est similaire. La figure 4.5.a permet de vérifier la stabilité numérique de la fonction d'onde du fondamental (avec interaction) dans le puits de potentiel (Eq. 4.38), lors d'une dynamique de 2 ms, pour $1 - F = 10^{-6}$.

Ayant connaissance de la fonction d'onde de l'état fondamental du puits (pour un N donné), nous pouvons projeter cet état sur la fonction d'onde, après la diffusion d'un soliton de $N = 10000$ atomes sur ce puits. La figure 4.5.b représente le taux de population dans l'état fondamental en fonction de la vitesse de centre de masse du soliton incident. On constate que, pour $N = 10000$, ce taux est supérieur à 90% pour des vitesses $0.5 v_{\mathrm{R}}$. En revanche, il montre un minimum autour de $v_{CdM} = 0.2 v_R$: ce résultat devra être corroboré par le calcul de la population du niveau excité. Il faut garder à l'esprit que ce taux est à mettre en regard avec le pourcentage de la densité piégée (ici, autour de 15% des atomes composants le soliton diffusant, soit une fraction totale de 13.5 %.).

Une étude systématique du taux de population dans le niveau fondamental en fonction de N et v_{CdM} (Fig. 4.6.a), montre que les taux les plus élevés dans l'état fondamental sont obtenus lorsque N et v_{CdM} sont grands. Qui plus est, le pourcentage de la densité totale au centre $C(t)$ prend aussi ses valeurs maximales dans ces régimes.

Il est donc nécessaire de pouvoir projeter la fonction d'onde sur l'état excité pour conclure que l'on a bien affaire à une superposition d'états stationnaires dans le puits. Le calcul de cet état, à partir de la méthode décrite précédemment, se révèle plus compliqué que celui de l'état fondamental. En effet, la méthode repose sur le fait que la fonction d'onde la plus stable, lors de la diffusion, est celle qui a la valeur propre la plus petite. Ainsi, même lorsque l'on définit initialement une fonction d'onde avec une parité identique à celle du premier niveau excité, son instabilité fait que l'on réobtient, finalement, le

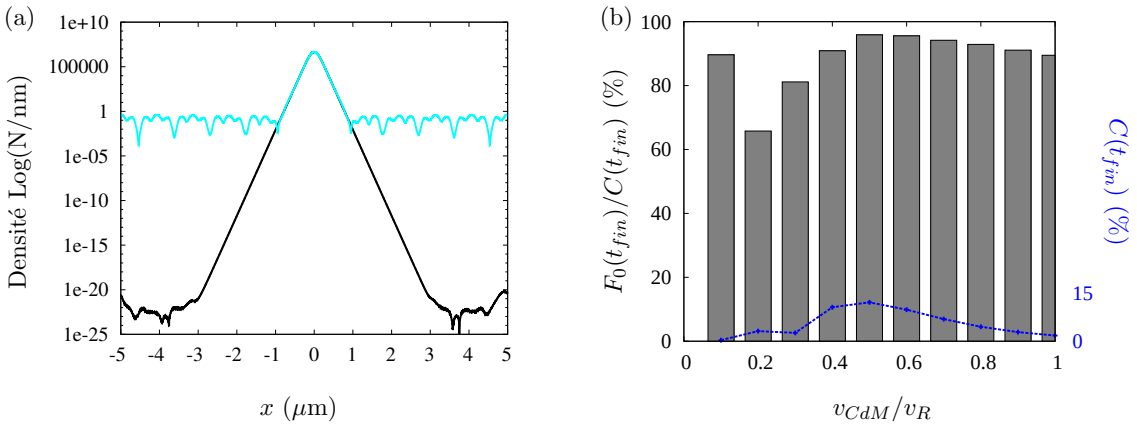


Figure 4.5

*(a) Densité du niveau fondamental (noir) pour $N = 10000$, et après un calcul dynamique ($t = 2$ ms) en prenant une fonction d'onde initialement localisée dans un puits de potentiel (*Eq. *4.38) de profondeur $U_0 = E_R$ (turquoise). (b) Taux de peuplement dans l'état fondamental après la diffusion d'un soliton de $N = 10000$ atomes sur un potentiel de profondeur $U_0 = E_R$ pour différentes vitesses de centre de masse. La courbe bleue représente la fraction de la densité totale localisée dans le puits.*

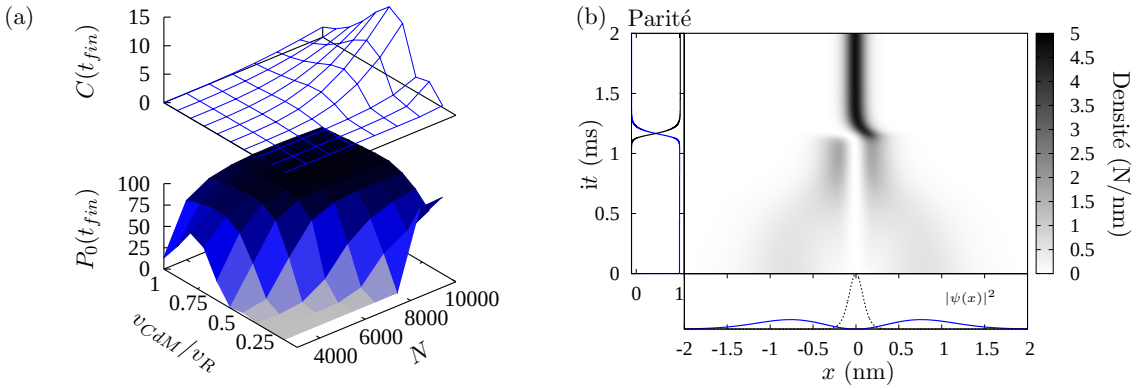


Figure 4.6

(a) Taux de population en fonction de N et de la vitesse de centre de masse du soliton incident v_{CdM} (graphique du bas), et $C(t_{fin})$ en fonction de ces mêmes paramètres (graphique du haut). (b) Diffusion en temps imaginaire et calcul de la partie paire P (noire) et impaire I (bleue). Le graphique du bas représente la fonction d'onde initiale (bleue) et finale (noire).

niveau fondamental (Fig. 4.6.b). Le calcul de la parité (+) et de l'imparité (-) se fait à l'aide du calcul de :

$$P, I(t) = \int_{-d/2}^{d/2} \frac{|\psi(x,t) \pm \psi(-x,t)|^2}{4} \mathrm{d}x. \tag{4.41}$$

Pour $it \approx 1.2$, la fonction d'onde bascule d'un état impair à un état pair (4.6.b).

Une façon de résoudre ce problème consiste à redéfinir, à chaque pas de temps, la fonction d'onde de façon à ce qu'elle respecte cette parité en faisant la transformation $\psi(x,t) \to (\psi(x,t) - \psi(-x,t))/2$. Cette méthode conduit à une fonction d'onde antisymétrique (Fig. 4.7.b) pour le puits de potentiel. Lorsque l'on projette cet état sur la fonction d'onde, après diffusion, on obtient le résultat montré à la

figure 4.7.a. On constate que la somme des projections est complémentaire, à quelques pourcents près, les pourcentages restants provenant de la contributions des autres états résonants.

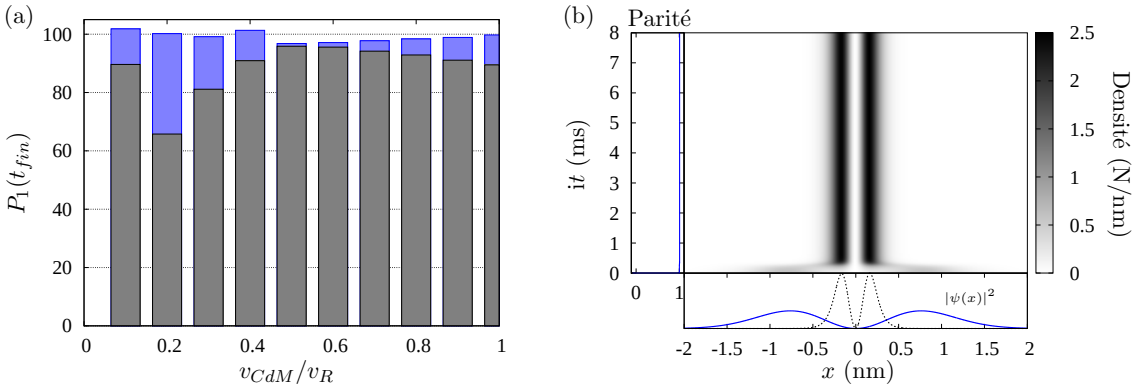


Figure 4.7

(a) Taux de projection sur l'état fondamental (gris) et sur l'état excité (bleu) en fonction de v_{CdM}, après renormalisation des fonctions d'ondes. (b) Diffusion en temps imaginaire et calcul de la partie paire P (noire) et impaire I (bleue). Le graphique du bas représente la fonction d'onde initiale (bleue) et finale (noire).

- **Population d'états résonants**

Maintenant que nous connaissons les deux premiers états du puits, calculons leur projection après diffusion. On restreint ici l'espace des paramètres à U_0 et N, en fixant la vitesse à $v_{CdM} = 0.3v_{\mathrm{R}}$. Lorsque l'on calcule la proportion de la fonction d'onde dans le potentiel, après la diffusion d'un soliton de N atomes sur un potentiel de profondeur U_0, on constate que celle-ci n'est pas monotone en fonction de ces deux paramètres (cf. FIG. 4.8.a). En effet, bien que pour une profondeur donnée le taux de peuplement augmente toujours avec le nombre d'atomes initial, lorsque la profondeur augmente, on observe au moins deux seuils pour lesquels on dépose plus de 50% des atomes du soliton initial.

Par ailleurs, lorsque l'on calcule la densité dans le potentiel à un temps final, on constate qu'en fonction de la profondeur (pour $N = 9000$) la parité de la fonction d'onde change après un seuil à $U_0 \simeq E_{\mathrm{R}}$ (cf. FIG. 4.8.b). On peut donc supposer que l'on peuple des états supplémentaires lorsque l'on augmente la profondeur. Les états résonants jouent un rôle majeur dans la dynamique de cette densité et il est nécessaire de pouvoir les caractériser [25, 30].

La lecture des figures 4.9 montre la projection de la fonction d'onde sur les états stationnaires avec interaction et indique que l'on peuple majoritairement les deux premiers états liés, dans ce domaine de profondeur et de nombre d'atomes. Le paramètre U_0 modifie drastiquement le résultat de la diffusion. Il est par ailleurs, étonnant de voir que, même pour un petit nombre d'atome, on obtient un grand taux de peuplement de ces états. Ces profondeurs doivent être mises en regard avec celles obtenues à la figure 4.8.b. Nous concluons donc qu'il est possible de peupler un état cible en prenant une profondeur de puits adéquat.

- **Stabilité des états en l'absence d'interaction**

Une manière de vérifier la stabilité des états liés ainsi peuplés, consiste à annuler les interactions adiabatiquement (ici à $t = 36$ ms) durant un temps de 1 ms. La dynamique à temps long de la densité montre que le taux de peuplement de l'état choisi (ici l'état fondamental, cf. FIG. 4.10.a) demeure inchangé durant le processus adiabatique. La figure 4.10.a montre, en échelle logarithmique, cette densité

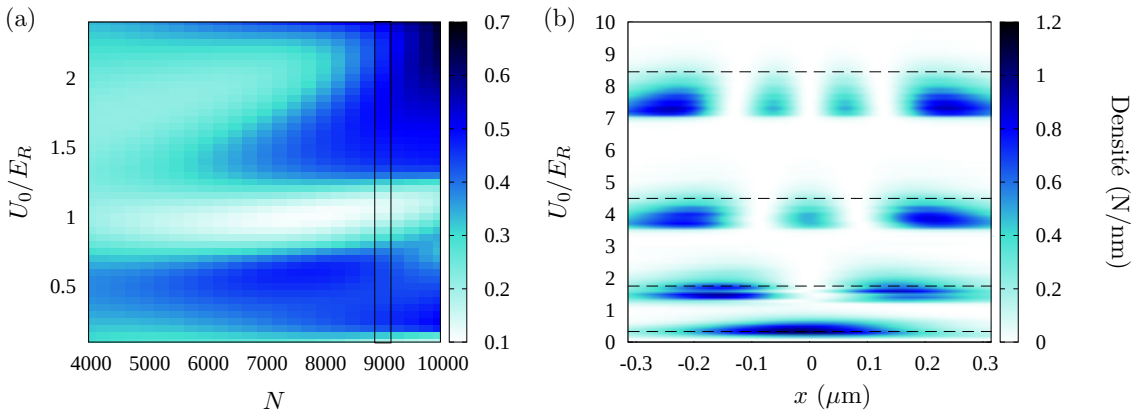


Figure 4.8

(a) Densité finale dans le puits après la diffusion d'un soliton de vitesse initiale arbitrairement égale à $v_{CdM} = 0.3\ v_R$ et de N atomes, sur un puits de potentiel de profondeur U_0. (b) Profil de densité d'atomes dans un puits de profondeur U_0, après la diffusion d'un soliton de $N = 9000$ atomes et de vitesse initiale $v_{CdM} = 0.3\ v_R$ (encadré noir de la figure a). Les lignes horizontales en pointillés représentent les profondeurs pour lesquelles un nouvel état stationnaire sans interaction entre dans le puits.

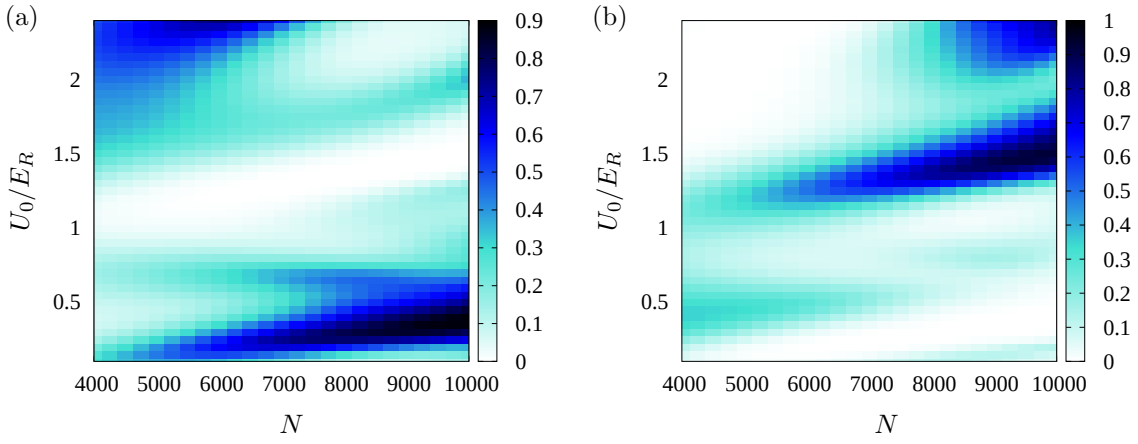


Figure 4.9

Projection de la fonction d'onde sur (a) l'état fondamental et (b) excité après diffusion d'un soliton de vitesse initiale arbitrairement égale à $v_{CdM} = 0.3\ v_R$ et de N atomes, sur un puits de potentiel de profondeur U_0.

au cours du temps. La stabilité de l'état provient maintenant uniquement du fait que les particules, dans le puits, ont des énergies négatives et sont donc piégées.

La comparaison, à t_{fin}, entre le module carré de l'état fondamental du puits en l'absence d'interaction et la densité d'atomes renormalisée dans le puits montre un bon accord (cf. FIG. 4.10.b). La légère différence existant peut provenir du fait qu'une partie des atomes se trouve dans l'état excité. À noter la différence entre cette densité finale et celle obtenue lorsque les interactions sont maintenues (courbe bleu foncé FIG. 4.10.b obtenue lors d'une dynamique en temps imaginaire d'un paquet d'onde pour le potentiel (4.38). Voir annexe A.). De plus, on constate qu'après la coupure des interactions le taux d'émission de la densité d'atomes hors du potentiel est bien supérieur. Ceci explique le fait qu'à t_{fin}

une partie de la norme dans le potentiel est inférieure aux ≈ 50% de la figure 4.8. La renormalisation de la densité au centre par le nombre de particules (FIG.4.10.b) dans le puits $C(t_{fin})$ donne une bonne comparaison avec l'état propre en l'absence d'interactions. Ceci confirme que l'on peuple bien les états propres du puits lorsque l'on réalise la diffusion d'un soliton et ce, avec un taux de remplissage susceptible d'être très élevé.

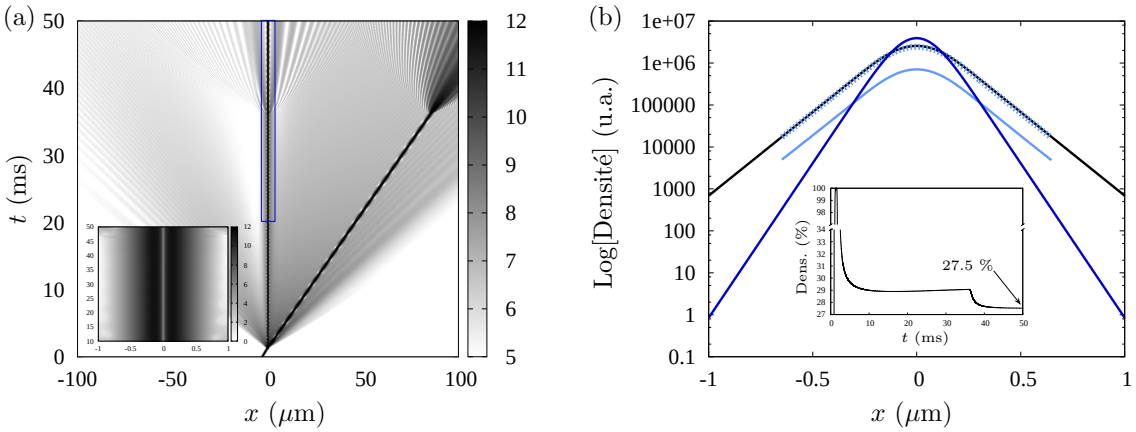


Figure 4.10

(a) Diffusion d'un soliton de vitesse de centre de masse initiale $v_{CdM} = 0.3v_R$ et de $N = 9000$ atomes sur un potentiel de profondeur $U_0 = 0.5E_R$. L'inset représente l'agrandissement du logarithme de la densité autour du puits après la diffusion (on constate une variation de la densité pour $t > 45$ ms, elle provient de l'interaction avec le paquet de droite qui est en expansion). (b) Logarithme de la densité d'atomes, $C(t)$, à $t = 50ms$ dans le puits (ligne bleu clair continue) comparée au module carré de l'état fondamental sans interaction (ligne noire) et à l'état fondamental avec interaction (bleu foncé). La ligne bleu clair en pointillés représente la densité renormalisée par la densité finale $C(t_{fin}) = 0.275$. L'inset représente la variation du pourcentage de la densité d'atomes dans le puits au cours du temps (on remarque la décroissance exponentielle de la densité après la coupure des interactions à $t = 36$ ms.).

4.4.2 Paquets transmis après diffusion

Nous avons vu précédemment que, lorsque l'on réalise une expérience de diffusion sur un puits de potentiel quelconque, on obtient trois voies de sortie possibles : une partie réfléchie, une piégée et une transmise. C'est à cette dernière partie que nous nous intéressons maintenant. Nous allons voir qu'il est possible d'extraire des informations liées aux énergies des états du puits à partir de cette densité. La différence spatiale que l'on peut obtenir entre le centre de masse du paquet transmis avec et sans potentiel permet de rendre compte des caractéristiques énergétiques du potentiel diffusant.

- **Le délai de Wigner**

Cette sous-section a pour but de caractériser numériquement les états du puits au moyen d'une grandeur liée à la dynamique de la partie transmisse lors de la diffusion d'un soliton.

Lors de la propagation d'un paquet d'onde* : $\psi(x,t) = \int_0^\infty \mathrm{d}k\ \tilde{\psi}(k,k_0)\exp[i(k(x-x_0) - E(k)t/\hbar)]$, de vitesse de groupe k_0 au travers d'une barrière (ou d'un puits) de potentiel, la partie transmise de

∗. En l'absence d'interaction, car sinon le principe de superposition ne s'applique plus.

celui-ci acquiert une phase $\theta(E)$ et une vitesse de groupe v_g. On la note alors :

$$\psi(x,t) = t\int_0^\infty \mathrm{d}k\ \tilde{\psi}(k,k_0)\exp[i(k(x-x_0)+\theta(E)-Et/\hbar)].$$

La distance de propagation moyenne est donnée par :

$$\langle x\rangle = x_0 + v_g(t-\tau_w),$$

où v_g est la vitesse de groupe après diffusion et τ_w est le temps de Wigner* définis respectivement par :

$$v_g = \mathrm{d}E/\mathrm{d}k \text{ et } \tau_w = \hbar\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}E. \tag{4.42}$$

Ainsi, en l'absence de potentiel le délai de Wigner est nul. La phase θ est difficile à exprimer analytiquement dans le cas général. Malgré cela il est toujours possible de caractériser le délai de Wigner au moyen d'une étude numérique. On étend ici cette grandeur au cas d'un paquet d'ondes interagissant. Ce délai rendra compte de la position énergétique des résonances pour différents régimes de paramètre.

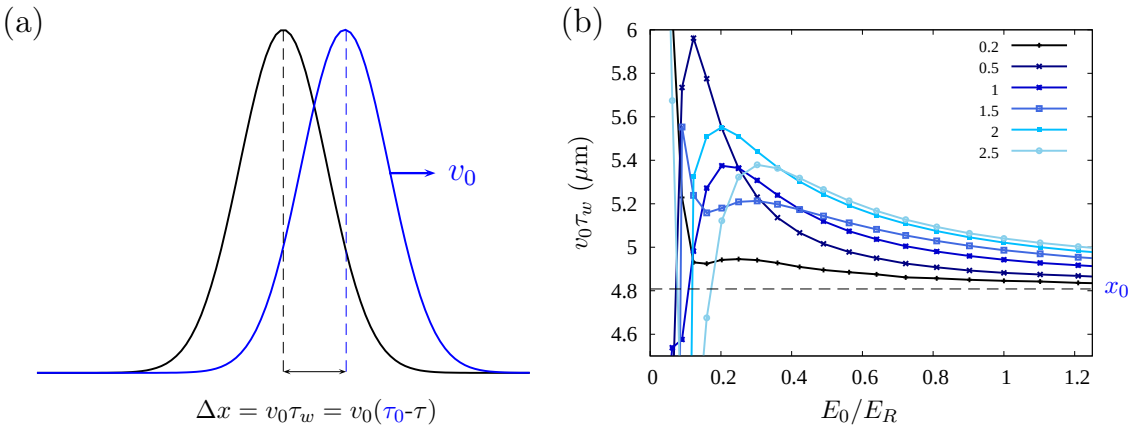


Figure 4.11

(a) Représentation des grandeurs entrant en jeu dans le calcul du délai de Wigner. (b) Délai spatial, Δx, en fonction de l'énergie (cinétique) incidente du soliton pour différentes valeurs de U_0/E_R. (Le maximum du délai pour $U_0/E_R = 0.2$, qui n'est pas visible sur la figure, est d'environ 9.45 µm et a lieu en $E_0/E_R \approx 0.022$.)

Le calcul du délai† se fait en prenant la différence entre le temps de parcours dans le vide τ_0 et le temps de parcours τ après diffusion sur un puits de potentiel de profondeur U_0 (Eq. 4.38). La figure 4.11 rend compte de ce temps pour différentes profondeurs et vitesse initiales de paquet d'onde. Ce calcul montre qu'il y a une résonance de ce délai qui apparaît pour des vitesses de plus en plus petites au fur et à mesure que l'on diminue la valeur de la profondeur. Enfin, à grande vitesse, on retrouve la valeur $x_0 = 4.8$ µm, qui correspond à la position du maximum de la densité d'un soliton libre de vitesse v.

On constate que la position du maximum du décalage $v_0\tau_w$ varie en fonction de U_0. Pour des profondeurs de potentiel croissantes, on observe des énergies, E_0, croissantes jusqu'à la valeur $U_0 = 1.5E_R$. Pour cette valeur, il se produit un « retour » du maximum à des énergies petites, puis lorsque l'on

∗. Le pendant de ce délai dans le cas d'une barrière de potentiel est une avance du maximum du paquet transmis par rapport au déplacement de centre de masse. C'est l'*effet Hartman*.

†. Pour des raisons de temps de calcul numérique, on prend en pratique une distance de parcours fixée à $L_{prop} = 10$ µm (sachant que la position initiale est $x_{ini} = -8d = -5.2$ µm), donc pour une vitesse v_{CdM} le temps final est variable $t_{fin}(v) = L_{prop}/v_{CdM}$. Pour chaque vitesse, on mesure la position du maximum de la densité après diffusion ($\neq \langle x\rangle$). Cette position est ensuite comparée systématiquement à celle d'un soliton libre $x_0 = v_0 t_{fin}(v) = cte$.

augmente la profondeur on retrouve une comportement similaire à celui que l'on avait pour des valeurs de $U_0 < 1.5E_R$. L'interprétation que l'on peut faire est que lorsque l'on dépasse cette valeur de potentiel une deuxième résonance, plus haute en énergie, entre en jeu. Ainsi, le *Wigner time delay* appliqué à la diffusion d'un soliton sur un puits de potentiel permet d'observer l'entrée de nouvelles résonances dans le puits.

Limite des grandes énergies cinétiques incidentes. Pour des énergies cinétiques initiales $E_0 \gg E_R$, on peut interpréter l'avancement spatial (donc temporel) classiquement. En effet, dès lors que l'on considère l'interaction entre un paquet d'onde (ou un soliton en particulier) et un potentiel attractif, ce dernier a pour effet d'accélérer le paquet. Ainsi, un soliton qui a interagi faiblement avec le puits a malgré tout subi une accélération qui implique que comparativement au cas du soliton libre, celui qui a traversé le puits se trouvera en avance (bien qu'ayant la même vitesse finale par conservation de l'énergie).

Le calcul de ce décalage temporel peut être fait classiquement et correspond à celui d'une balle roulant dans un puits de potentiel. La conservation de l'énergie conduit à :

$$\frac{mv_0^2}{2} = \frac{mv^2}{2} + V(x),$$

soit encore :

$$\mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{v_0^2 - 2V(x)/m}}.$$

Ainsi, le décalage temporel correspond à :

$$\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{v_0} - \frac{1}{\sqrt{v_0^2 - 2V(x)/m}} \right) \mathrm{d}x.$$

Dans le cas de notre puits potentiel sinusoïdal centré en 0 de largeur d et de profondeur U_0, on peut réécrire cette intégrale comme :

$$\tau = \int_{-d/2}^{d/2} \left(\frac{1}{v_0} - \frac{1}{\sqrt{v_0^2 - 2U_0 \sin^2(\pi x/d)/m}} \right) \mathrm{d}x.$$

Cette intégrale est une intégrale elliptique notée K, on peut donc réécrire le décalage spatial comme :

$$\Delta x(v_0 \gg v_R) = v_0 \tau = d \left(1 - \frac{2\mathrm{K}\left[\frac{c}{c+v_0^2}\right]}{\pi\sqrt{c+v_0^2}} \right), \tag{4.43}$$

avec $c = 2U_0/m$. En conclusion, lorsque l'on considérera un diffusion sur une chaîne de puits de potentiel, on trouvera dans ce régime des décalages temporels multiples de ce Δx. Un calcul numérique visant à comparer le Δx analytique à celui obtenu avec la propagation d'un soliton montre une bonne correspondance asymptotique (Fig. 4.12.a).

Limite des petites énergies cinétiques incidentes. Dans le cas inverse de celui étudié précédemment, on peut se placer dans le régime où $v \lessapprox v_R$. Ici, plusieurs effets sont à prendre en compte. Tout d'abord, on peut montrer que dans ce régime les interactions jouent un rôle prépondérant et impliquent une augmentation du taux de réflexion [25]. De même, on a montré que ceci permet de piéger une partie de la densité dans des états résonants [30]. Ainsi, le taux de transmission est le reflet de ces deux phénomènes simultanément (Fig. 4.12.b).

4.5 Sonder des états de surface

Nous venons de démontrer qu'il est possible de peupler des états liés d'un puits de potentiel à partir de la diffusion d'un soliton. On souhaite étendre cette expérience à un potentiel comprenant un

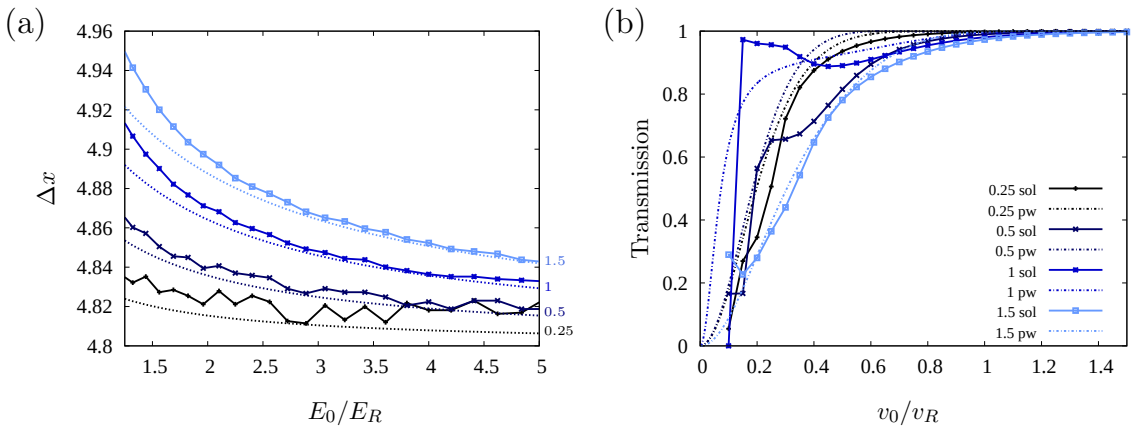


Figure 4.12

(a) Comparaison entre le calcul de la fonction (4.43) (lignes en pointillés) et le calcul du décalage numérique issu de la diffusion d'un soliton (lignes continues) pour différentes valeurs de profondeur. (b) Coefficient en transmission d'ondes planes (pw : lignes en pointillés) et de soliton (sol : lignes continues) au travers d'un potentiel pour différentes valeurs de profondeur.

assemblage fini et périodique de puits. Nous avons déjà observé à la section 2.2.3 du chapitre concernant les gaps spatiaux que le calcul des valeurs propres, pour ce type de potentiel, différait de la transmission d'une onde plane et que certaines valeurs propres de l'hamiltonien apparaissaient dans des gaps en transmission (cf. FIG. 2.5). Ces valeurs propres peuvent être associées à des états de surface à énergie positive. Dans cette section, nous nous attacherons plus particulièrement aux états de surface liés. Nous verrons, avec l'appui d'un calcul analytique, qu'il est possible de caractériser ces états de surface pour un potentiel à enveloppe carrée et de les sonder lors d'une expérience de diffusion.

4.5.1 Approche analytique

De manière à mieux appréhender la physique des états de surface, on considère de nouveau un potentiel périodique de période d, à enveloppe carrée (FIG. 4.13), de forme générale :

$$U(x) = -U_0 \left[\sin^2 \left(\frac{\pi(x - x_0)}{d} \right) [H(x - x_0 + \mathcal{N}d) - H(x - x_0)]/2 - \Upsilon \right], \tag{4.44}$$

où $H(x)$ est la fonction de Heaviside, $\mathcal{N}$ le nombre de sites et Υ est un terme d'offset supplémentaire. On considérera (sauf mention contraire) que le nombre de sites $\mathcal{N}$ est grand. Le hamiltonien de l'équation de Schrödinger étant réel, les ondes de Bloch sont dégénérées, et on a l'égalité $\psi_{n,k}(x) = \psi^*_{n,-k}(x)$. Ainsi, la solution générale à l'intérieur du réseau peut s'écrire comme une combinaison linéaire de ces deux solutions :

$$\psi_{bulk}(x) = A u_{n,k}(x) \mathrm{e}^{i\kappa x} + B u_{n,-k}(x) \mathrm{e}^{-i\kappa x}, \tag{4.45}$$

où A et B sont deux constantes à déterminer, κ est l'exposant de Mathieu et $u_{n,k}(x)$ sont les fonctions de Bloch, états propres du hamiltonien. La fonction d'onde à l'extérieur du potentiel prend la forme d'une onde évanescente, dont la décroissance dépend de l'écart en énergie entre la barrière de potentiel à franchir et l'énergie considérée (cf. section 2.2.3). Nous allons voir que seule une décroissance exponentielle à l'intérieur et à l'extérieur du réseau permet de caractériser un état de surface, et de localiser spatialement la fonction d'onde. Par la suite, on utilisera le formalisme de Bloch afin de caractériser les états de surface de ce potentiel. Pour autant, il est possible d'obtenir les mêmes résultats dans le formalisme de Mathieu [31].

- **États de surface**

Dans un réseau de profondeur constante seuls des exposants de Mathieu κ réels sont autorisés. Nous avons vu au chapitre 2 que ce n'est pas le cas lorsque la profondeur du potentiel dépend de la position. En particulier, à la surface $\mathrm{Im}[\kappa(x = x_0)] \neq 0$, ce qui permet d'écrire à l'interface avec le vide ($x < x_0$) une solution de la forme :

$$\psi_{vide}(x) = C\mathrm{e}^{-\kappa_0 x} \text{ avec : } \kappa_0 = k_\mathrm{R}\sqrt{(U_0\Upsilon - E)/E_\mathrm{R}}, \tag{4.46}$$

où C est une constante à déterminer. Cette solution est exponentiellement décroissante à condition que $U_0\Upsilon < E$.

Le raccordement de ces solutions et de leurs dérivées en $x = x_0$ conduit à écrire le système d'équations suivant :

$$Au_{n,k}(x_0) + Bu_{n,-k}(x_0) = C \tag{4.47}$$

$$A[u'_{n,k}(x_0) + i\kappa u_{n,k}(x_0)] + B[u'_{n,-k}(x_0) - i\kappa u_{n,-k}(x_0)] = C\kappa_0. \tag{4.48}$$

On doit considérer deux cas de figure :

- $\mathrm{Im}[\kappa] = 0$: l'énergie est valeur propre du hamiltonien pour le réseau infini $E = E_{n,k}$. Le système (4.48) est linéaire et on peut le résoudre pour n'importe quelles valeurs des coefficients A, B et C. Ainsi, les valeurs propres du hamiltonien pour le réseau infini sont aussi valables à la surface.
- $\mathrm{Im}[\kappa] > 0$: l'énergie est dans un gap. Pour conserver une norme finie de la fonction d'onde on déduit, pour qu'elle soit décroissante lorsque $x \to +\infty$, que $A = 0$. Le système (4.48) se réduit à une équation dont l'intégration sur x donne une solution :

$$u_{n,-k}(x \approx x_0) = D\exp\left[-x_0(\mathrm{Im}[\kappa] - \kappa_0)\right], \tag{4.49}$$

avec D une constante d'intégration.

Cet état est localisé à la surface car étant doublement exponentiellement décroissant des deux côtés de l'interface (à condition que $\mathrm{Im}[\kappa] > \kappa_0$), *i.e.* dans le vide et dans le réseau. La fonction d'onde à l'intérieur du réseau est accompagnée d'un partie oscillante de même période que le réseau. Le coefficient de décroissance à l'intérieur du réseau permet de mesurer la valeur de la partie imaginaire de l'exposant de Mathieu connaissant κ_0, c'est-à-dire l'énergie E.

- **États de Shockley et de Tamm**

Le traitement de la continuité de la fonction d'onde à l'interface conduit à l'apparition d'un état doublement exponentiellement décroissant. Dans un article de 1939 [32], William Shockley caractérisa les propriétés de tels états localisés dans le régime où la profondeur du potentiel U_0 est petite, on se place ici dans ce régime. Ces états ont depuis été observés dans des métaux simples comme Ag, Al, Au, Be, Cu, ou Mg [33].

Loin de la surface ($x \ll x_0$), le potentiel peut être abordé comme un potentiel périodique infini. Nous avons vu au chapitre 2 qu'il est possible de résoudre l'équation de Schrödinger si l'on considère le potentiel infini comme perturbatif ($U_0 \approx 0$). Prenons le premier gap se situant entre les deux premières bandes d'énergie pour $k = \pm k_\mathrm{R}/2$. Au bord de la zone de Brillouin, la fonction d'onde (4.45) devient :

$$\psi_{bulk}(x) = Au_{n,k}(x)\mathrm{e}^{i\kappa x} + Bu_{n,-k}(x)\mathrm{e}^{-i(\kappa - k_\mathrm{R})x}. \tag{4.50}$$

La partie réelle de l'exposant peut se développer en $\mathrm{Re}[\kappa] = k_\mathrm{R}/2 + \delta\kappa$, où $\delta\kappa$ est petit devant k_R. La solution stationnaire (4.50) devient alors [34, 35] :

$$\psi_{surf}(x) = A'\mathrm{e}^{i\delta\kappa x}\left[\mathrm{e}^{ik_\mathrm{R}x/2} + \frac{4}{q}\frac{E^{(\pm)}}{E_\mathrm{R}}\mathrm{e}^{-ik_\mathrm{R}x/2}\right], \tag{4.51}$$

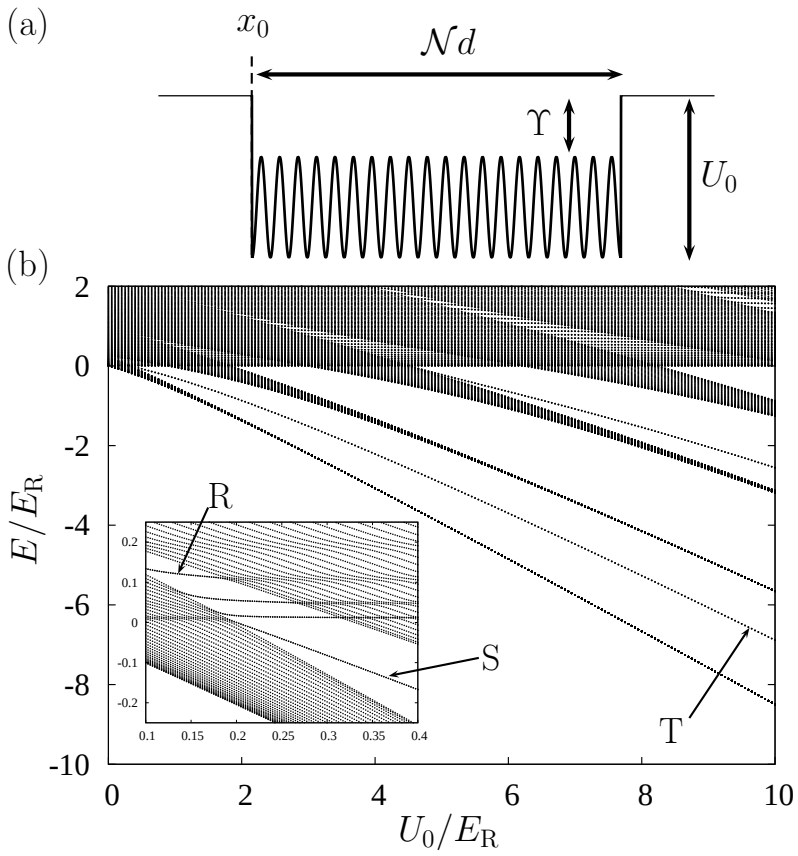


Figure 4.13

(a) Potentiel à enveloppe carrée (4.44) pour $\mathcal{N} = 20$ sites. La valeur de ϕ est choisie de sorte à ce que la discontinuité soit maximale entre le vide et le potentiel périodique, afin de favoriser l'apparition d'états de surface. (b) Valeurs propres de l'équation de Schrödinger pour ce potentiel avec $\mathcal{N} = 30$ en fonction de U_0. La valeur $\Upsilon = 0.5$ étant fixée. Les états fléchés par les lettres R, S et T, sont respectivement des états de surface résonants, de Shockley et de Tamm.

où A' est une constante à déterminer et $E^{(\pm)}$ sont les valeurs propres du système (2.8).

Nous avons vu précédemment que, proche de la surface, l'exposant de Mathieu pouvait prendre des valeurs imaginaires. Prenons maintenant $\delta\kappa \to i\delta\kappa$. Une réécriture de (4.52) conduit à [34] :

$$\psi_{surf}(x) = F\mathrm{e}^{\delta\kappa x \mp i\alpha}\left[\exp\left(\frac{i}{2}(k_{\mathrm{R}}x \pm \alpha)\right) \mp \exp\left(-\frac{i}{2}(k_{\mathrm{R}}x \pm \alpha)\right)\right], \tag{4.52}$$

où l'on a posé $\sqrt{2}\sin(2\alpha) = 4\delta k/(qk_{\mathrm{R}})$ et F une constante. Dans le cas d'un réseau à enveloppe carrée, le traitement de l'interface doit être fait de chaque côté du réseau. Il en résulte deux états de surface dégénérés, pair et impair. On représente à la figure 4.14 un état de Shockley impair. La différence avec un état de Bloch du massif (*bulk*) est remarquable de par la décroissance exponentielle à l'intérieur du réseau. A l'extérieur du réseau, en revanche, la décroissance est comparable, car cette partie de la fonction d'onde ne dépend pas de la partie imaginaire de l'exposant de Mathieu.

Les valeurs propres obtenues plus haut lors du calcul perturbatif (2.10) deviennent :

$$\frac{E_{\delta\kappa}^{(\pm)}}{E_{\mathrm{R}}} = \frac{1}{4} - \left(\frac{\delta k}{k_{\mathrm{R}}}\right)^2 \pm \frac{q}{4}\sqrt{1 - \left(\frac{4\delta k}{q^2 k_{\mathrm{R}}}\right)^2}. \tag{4.53}$$

Il est surprenant de constater que ces deux valeurs propres ne dépendent pas de la hauteur supplémentaire Υ du potentiel*. Ainsi, on le verra par la suite, il est possible d'observer dans le spectre des états de surface même dans le cas où $\Upsilon = 0$ (à condition que l'énergie E soit négative.). Ces états sont représentés à la figure 4.13.b et décroissent lorsque la profondeur du potentiel, U_0, augmente. On observe, dans le régime de Shockley, *i.e.* à faible profondeur, que les états de surface apparaissent (pour $U_0 \approx 0.2E_{\mathrm{R}}$) à l'intérieur des gaps et émergent de la bande inférieure dans le modèle à deux bandes (hypothèse de liaisons faibles). Le modèle présenté ici n'étant valable que pour le premier gap, il ne rend pas compte du fait que ces états de surface n'apparaissent que pour les gaps pairs. En effet, aucun état n'est présent dans les gaps 1 et 3.

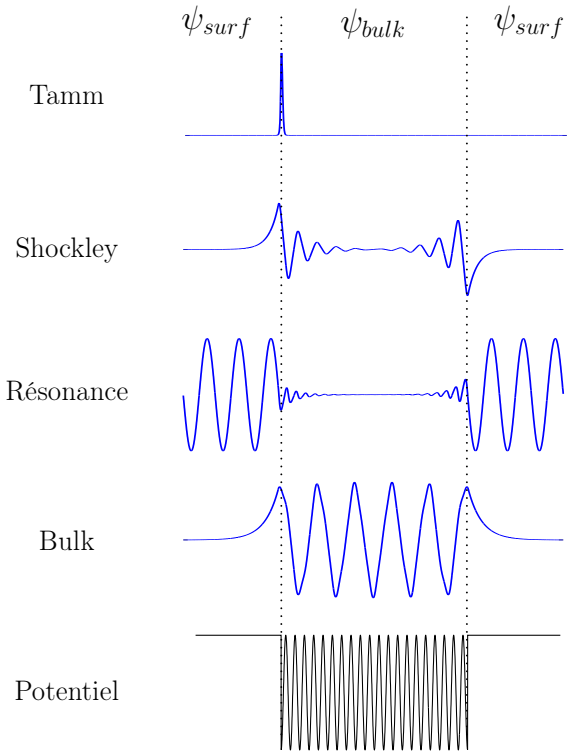


Figure 4.14

On représente ici les différents types de topologies obtenus lors du calcul des états propres de l'équation de Schrödinger pour le potentiel (4.44).

Nous avons vu précédemment que, lorsque la profondeur du potentiel U_0 est grande devant E_{R}, les états se regroupent en bandes séparées d'une différence d'énergie $\hbar\omega_0$ (où ω_0 est la pulsation propre de chaque puits pris individuellement). Les états de surface demeurent dans ce régime et ont été caractérisés, pour la première fois, par Tamm [36]. Contrairement au cas précédent, les états de Tamm ne sont pas symétriques vis-à-vis du centre du réseau (ou anti-symétriques). Ceci n'est possible que si les deux états symétriques sont dégénérés. Un couplage effet tunnel même très faible induit une levée de

∗. En fait, la hauteur Υ décale toutes les valeurs propres vers des énergies plus basses.

dégénérescence entre ces états et crée un état symétrique et un état anti-symétrique, mais la résolution numérique ne permet pas de le voir ici. Pour autant, la partie de la fonction à l'intérieur du réseau est oscillante de période d, malgré le fait qu'il est impossible de distinguer ces oscillations en échelle linéaire (FIG. 4.14). Cette figure montre que ces états restent quasi-dégénérés, même lorsque la profondeur U_0 est grande devant E_R. Une observation de la fonction d'onde associée à ces états propres montre qu'ils se dissymétrisent progressivement jusqu'à se localiser sur chaque discontinuité (Fig. 4.14, état de Tamm).

Enfin, on relève un autre type d'état propre dont l'énergie propre associée repose dans un gap mais, contrairement aux états de surface, à énergie positive. Ce sont des résonances dont la fonction d'onde associée décroît aussi exponentiellement à l'intérieur du réseau (cf. FIG. 4.14), car l'exposant de Mathieu associé a une partie imaginaire non nulle. Ces états ne sont pas liés et donc pas stationnaires et, *a fortiori*, ne sont pas stables [37].

4.5.2 Diffusion de solitons

Lors de la section précédente, nous avons démontré numériquement qu'il était possible de peupler à l'aide de la diffusion d'un soliton, les états résonants et liés d'un puits de potentiel. Ici nous souhaitons faire le même type de diffusion, mais dans le but de peupler des états de surfaces du potentiel (4.44). Nous rappelons qu'un soliton est défini par sa vitesse v_{CdM} et son nombre de particules N (pour un paramètre d'interaction g_{1D} fixé). De la même manière que pour le cas du puits de potentiel, on réalise une étude systématique du peuplement des états liés du potentiel.

Cette première étape d'exploration de l'espace des paramètres a révélé la très grande richesse du système. En effet, pour ce type de diffusion, de nombreuses voies de sortie sont possibles pour le soliton :

- son énergie totale se situe dans une bande et est transmis,
- son énergie totale se situe dans un gap et est réfléchie,
- son énergie totale se situe dans un gap mais correspond à un état de surface.

Nous allons nous intéresser au troisième cas plus précisément dans cette sous-section.

- **Étude préliminaire**

Prenons ici le cas du potentiel (4.44) dont la profondeur est fixée à $0.25E_R$. La phase peut être choisie de sorte qu'à l'interface, le potentiel présente une discontinuité (*i.e.* $\phi = \pi/2$). Afin de connaître les régimes de paramètres pour lesquels il est possible de peupler un état de surface par diffusion d'un soliton, on fixe la valeur du nombre de particules, N, à 6000 atomes* et on fait varier la vitesse de groupe. On observe que, pour une vitesse d'environ 0.1 v_R, une grande partie de la densité est figée sur les premiers sites du réseau.

On souhaite maintenant vérifier que cette densité peuple bien l'état de surface recherché, c'est-à-dire que la fonction d'onde correspondante est celle de l'état propre (EQ. 4.52). Nous sommes ici en présence d'un état propre du hamiltonien avec interaction, il est donc nécessaire, comme précédemment, d'éteindre adiabatiquement les interactions de manière à réaliser cette comparaison. De plus, la diffusion amène, *a priori*, à une superposition d'états stationnaires. On fait alors, en parallèle, une diminution de la profondeur du potentiel dans le but « d'éliminer » ces états supplémentaires. Le résultat de cette diffusion est représenté à la figure 4.15.a. On observe qu'une grande partie de la densité est piégée dans l'état de surface. Après un long temps de propagation (t_{prop} =1 s) et après coupure des interactions, la densité est figée et l'on peut faire une comparaison directe avec l'état cible calculé au moyen de la résolution exacte de l'équation de Schrödinger. La figure 4.15.b nous montre un bon accord entre ces deux densités, sur plusieurs ordres de grandeur. Du fait que la diffusion ait eu lieu de la gauche vers la droite, l'on ne peut avoir une densité symétrique par rapport au centre du réseau. Ainsi, contrairement

∗. On choisit ce nombre d'atomes suffisamment élevé pour que l'énergie d'interaction soit relativement importante relativement à l'énergie cinétique.

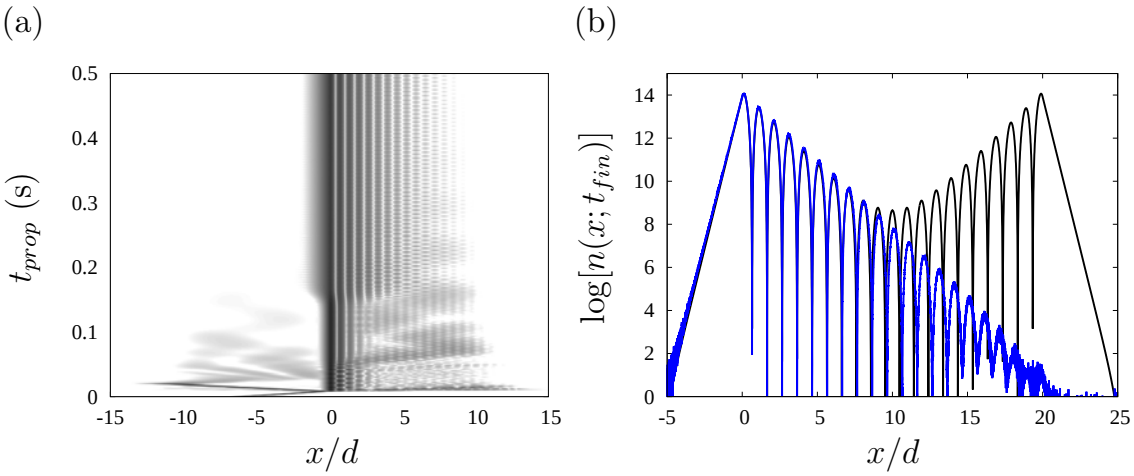


Figure 4.15

(a) Logarithme de la densité d'atomes au cours du temps. La position du bord correspondant au 0 en position. La coupure adiabatique des interactions se fait à $t_{prop} = 20$ ms et la diminution adiabatique du potentiel jusqu'à une valeur de $0.25E_R$ se fait à $t_{prop} = 150$ ms. (b) Densité d'atomes finale après un temps de propagation $t_{fin} = 1$ s (ligne bleue), comparée au module carré du premier état de surface (situé dans le premier gap) du potentiel sondé (courbe noire).

au puits de potentiel, la diffusion amène à une solution quasi-stationnaire* brisant les symétries du potentiel. Ce cas de figure ne se présente pas lorsque l'on a affaire à un état lié du puits qui est dans une bande (cf. FIG. 4.10.b).

Ici, la comparaison entre les différentes énergies (EQ. 4.10 et EQ. 4.9) amène à une différence relative qui est négligeable ($\simeq 0.3\%$ pour l'énergie potentielle et $\simeq 2.5\%$ pour l'énergie cinétique). La figure 4.15.b montre les deux décroissances exponentielles, à l'intérieur et à l'extérieur du potentiel, caractéristiques de l'état de surface. En échelle logarithmique ces décroissances donnent lieu à des pentes pouvant être directement comparées à la formule de l'état de Shockley (FIG. 4.52). On trouve un très bon accord avec les données numériques†.

- **Potentiel à enveloppe lentement variable**

Les états de surface se manifestant dès lors que l'on considère un potentiel périodique de taille finie présentant une discontinuité, il est légitime de se poser la question de leur existence en l'absence de discontinuité abrupte. En effet, les états de surface sont des états dont l'énergie se situe dans un gap du spectre en énergie d'un potentiel périodique équivalent et infini. Dans le cadre du chapitre 2, nous avons discuté du fait qu'une variation de l'enveloppe pouvait être à l'origine de gaps spatiaux, dont l'énergie peut être positive, ou négative. Dans le deuxième cas, on peut supposer que ces gaps présentent des états de surface. Calculons la distribution d'énergie d'un potentiel de la forme :

$$U(x) = -\frac{U_0}{2}\sin^2\left(\frac{2\pi x}{d} + \phi\right)\left[1 - \tanh\left(\frac{x - x_0}{\varsigma}\right)\right], \tag{4.54}$$

∗. Le terme quasi-stationnaire est employé pour marquer le fait que la fonction d'onde n'est pas exactement égale à l'état stationnaire. Des effets tunnels entre puits adjacents peuvent entrer en jeu durant la dynamique. L'inverse de la différence énergétique entre cet état propre et la fonction d'onde finale donne le temps typique de relaxation de la fonction d'onde dans cette état stationnaire.

†. L'emploi de cette formule trouve sa justification dans le fait que la profondeur du potentiel est relativement petite par rapport à E_R.

où ς est un paramètre de pente, et ϕ est une phase arbitraire. On représente cette fonction à la figure 4.16.a. Cette forme de l'enveloppe du potentiel offre l'avantage de tendre vers la fonction d'Heaviside lorsque ς tend vers 0.

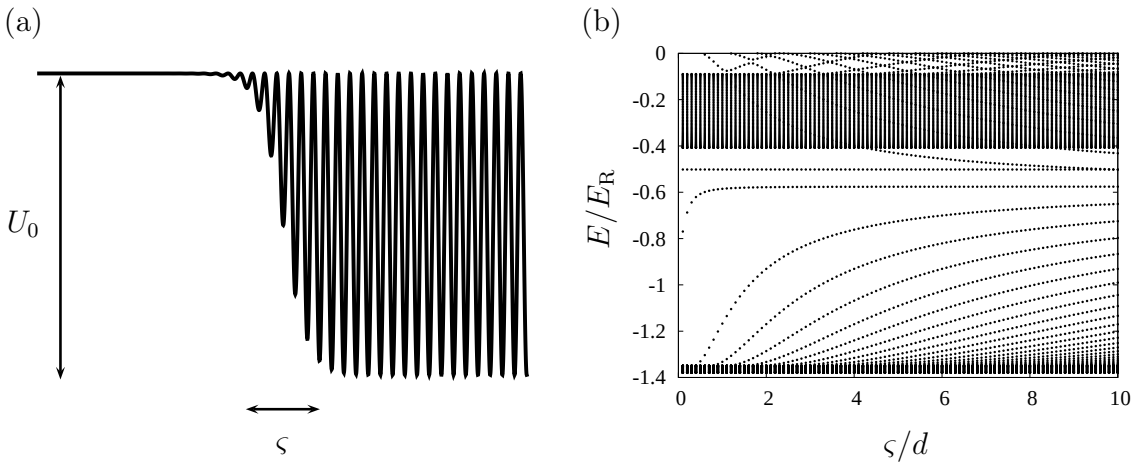


Figure 4.16

(a) Représentation schématique du potentiel (4.54). (b) Distribution des niveaux d'énergie pour le potentiel (4.54) en fonction du paramètre de pente ς, pour une profondeur fixée à $2E_R$. Pour faciliter la lecture graphique on prend $x_0 = 0$.

Afin de comprendre la dépendance des niveaux d'énergie en fonction de ce paramètre, on représente à la figure 4.16.b leur distribution pour une profondeur fixée à $U_0 = 2E_R$. Lorsque l'enveloppe est discontinue $\varsigma \to 0$, on retrouve la distribution obtenue à la figure 4.13, c'est-à-dire un spectre composé d'un seul état lié de surface d'énergie environ égale à $-0.5E_R$. En revanche, dès que la pente (en x_0) diminue, on observe l'apparition d'états de surface supplémentaires et ce, dans les deux gaps présents à énergie négative. Leur évolution en fonction de la pente est particulièrement riche :

- L'état de surface déjà présent à pente infinie ne dépend pas de la pente.
- Le nombre d'états dans le premier gap augmente lorsque la pente diminue et tend à uniformiser leur répartition.
- La valeur $\varsigma \simeq d$ voit l'apparition d'un état de surface dans le gap entre la deuxième et la troisième bandes.
- Les états présents dans le deuxième gap montrent un comportement du type « croisement évité ».

Ainsi, plus la pente est faible, plus il y a d'états de surface. Ce résultat semble alors très favorable pour espérer observer le peuplement de tels états, au moyen de la diffusion d'un soliton, dans le cas d'un réseau optique gaussien (cf. sous-section 2.3.2).

Nous avons vu que l'état de surface présent dans le cas de l'enveloppe carrée demeure inchangé (d'un point de vue de son énergie) lorsque l'on fait varier la pente. On suppose donc que la diffusion du même soliton (de $N = 6000$ atomes et de vitesse de groupe $v_{CdM} = 0.27v_R$) permettra de sonder ce même état de surface. La figure 4.17.a représente la densité d'atomes au cours du temps. La dynamique de la densité révèle un battement entre deux états localisés autour de x_0. L'état final $|\psi\rangle$ est alors une superposition de deux états de surface $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$, d'énergie propre E_1 et E_2. On peut alors écrire la dynamique de cet état à partir de ces grandeurs telle que :

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{iE_1 t/\hbar}|\psi_1\rangle + \mathrm{e}^{iE_2 t/\hbar}|\psi_2\rangle.$$

Le fait que ces deux énergies propres ne soient pas dénégérées conduit à un battement de la densité que l'on retrouve à la figure 4.17.b. La fréquence de ce battement est comparable à la différence entre les

deux énergies $|E_1 - E_2|/\hbar$. Ce type de superposition d'état avait déjà été observé lors de la diffusion d'un soliton sur un puits de potentiel (cf. sous-section 4.4.1). Ici, nous utilisons le fait que l'écart énergétique entre les états peut être supérieur à la résolution énergétique du soliton, de sorte à ne peupler que quelques niveaux, et non pas un grand nombre comme ça pourrait être le cas dans une bande d'énergies.

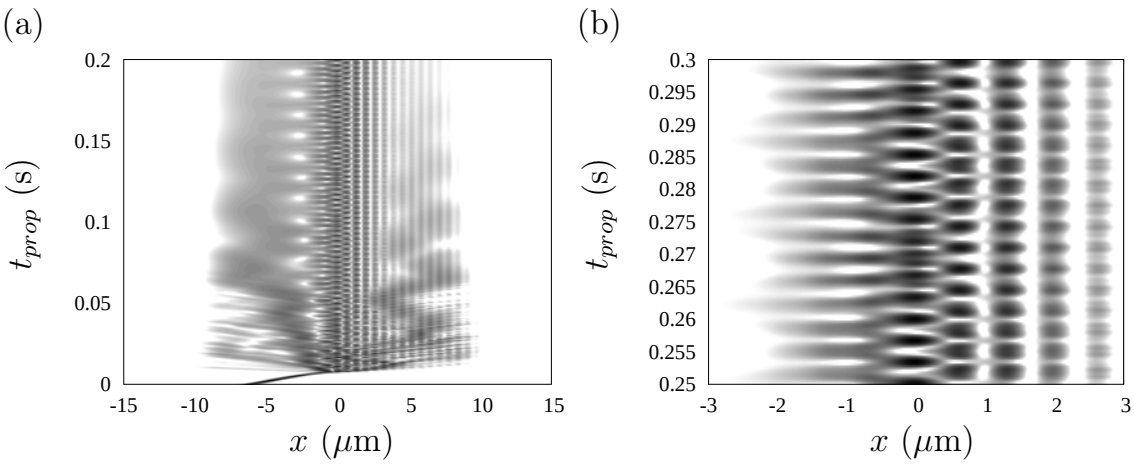


Figure 4.17

(a) Diffusion d'un soliton de $N = 6000$ atomes et de vitesse moyenne $v_{CdM} = 0.27 v_{\mathrm{R}}$ sur le potentiel (4.54) de profondeur $U_0 = 5E_{\mathrm{R}}$ et de pente $\varsigma = 2d$. (b) Agrandissement de la densité autour du maximum des états de surface. Le contraste est plus grand pour la figure (a) de manière à mieux distinguer les oscillations.

4.6 Conclusion et perspectives

Nous avons démontré numériquement que la diffusion d'un soliton sur un potentiel attractif permettait de peupler des états liés et résonants du puits. Cette sonde, à énergie négative, offre la possibilité d'imager avec une grande fidélité les états internes d'un système. Dans le cas du puits de potentiel, en faisant varier la profondeur de potentiel, on observe l'entrée d'états virtuels dans le spectre. Ces états correspondent à des états liés en l'absence d'interaction mais apparaissant à plus grande profondeur. Il est possible de peupler une fraction macroscopique des atomes dans ces états lors de la diffusion. De manière complémentaire, nous avons revisité le concept de *Wigner time delay* dans le cadre de la diffusion de solitons permettant de retrouver les profondeurs de potentiel pour lesquelles on observe l'entrée dans le puits d'une nouvelle résonance.

Un potentiel périodique de taille finie a différents types de niveaux d'énergie de par leurs topologies et leurs distributions dans le spectre. Nous nous sommes particulièrement intéressés aux états de surface qui apparaissent comme le résultat de l'extension finie du potentiel. Leur particularité est, qu'à énergie négative, ils sont décroissants exponentiellement à l'intérieur et à l'extérieur du potentiel. On peut donc facilement les reconnaître de par leur forme. D'un point de vue énergétique, ils se placent dans un gap entre deux bandes d'énergie du potentiel périodique infini équivalent. La diffusion d'un soliton ayant une énergie d'interaction et une énergie cinétique bien choisie, a montré qu'il était possible de peupler ces états avec une très grande efficacité. Modifier l'aspect de l'enveloppe du potentiel périodique offrirait la possibilité de changer le nombre et la distribution spectrale de ces états de surface et, ainsi, de réaliser des superpositions d'états de surface.

Sonder ce type d'états avec un nuage d'atomes froids reste un challenge expérimental pour plusieurs raisons. Tout d'abord, la réalisation d'un soliton ayant les propriétés requises nécessite des techniques poussées de contrôle des interactions et ne peut se faire qu'avec quelques types d'atomes. La deuxième difficulté consiste à réaliser un réseau optique dont l'enveloppe est assez abrupte pour exhiber des états de surface bien résolus énergétiquement. Des techniques holographiques basées sur les modulateurs de lumière spatial (*Spatial light modulator*) pourraient être utilisées à ces fins.

Une des perspectives de cette étude pourrait être d'étudier la diffusion d'un soliton sur un potentiel local mais dans un formalisme plus général où la dynamique du nuage d'atomes est calculée à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger à N corps [38, 39]. Il a été montré que dans ce cas, les solutions solitoniques présentent des instabilités amenant à la création spontanée de paquets appelés *fragmentons* [40] contrairement à une dynamique calculée à partir de l'équation de Gross-Pitaevskii. Ces instabilités apparaissent lorsque l'énergie d'interaction dépasse un certain seuil. Il pourrais être intéressant d'étudier cet effet lorsqu'une partie de la densité d'atome est confinée par un potentiel local.

Nous verrons, dans le prochain chapitre (5), que la diffusion d'un gaz d'atomes en interaction répulsive sur un potentiel permet aussi de sonder des résonances ultra-fines en énergie. Les interactions répulsives, venant s'ajouter à l'énergie cinétique, augmentent la pression quantique du gaz et accroissent les corrélations position-vitesse. Cette technique permettra de mesurer, avec une bonne résolution, les énergies propres d'un puits de potentiel.

Bibliographie

[1] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii et S. Stringari, *Rev. Mod. Phys* **71** 3 (1999).

[2] C. Cohen-Tannoudji et D. Guéry-Odelin, *Advances in Atomic Physics*, (World Scientific, 2011).

[3] D. J. Korteweg et G. de Vries, *Phi. Mag.* **39** 422 (1895).

[4] A. Barthelemy, S. Maneuf et C. Froehly, *Opt. Comm.* **55** 201 (1985).

[5] S. Burger, K. Bongs, S. Dette, W. Ertmer, K. Sengstock, A. Sanpera, G. V. Shlyapnikov et M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **83** 5198 (1999).

[6] J. Denschlag, J. E. Simsarian, D. L. Feder, Charles W. Clark, L. A. Collins, J. Cubizolles, L. Deng, E. W. Hagley, K. Helmerson, W. P. Reinhardt, S. L. Rolston, B. I. Schneider et W. D. Phillips, *Science* **287** 98 (2000).

[7] B. P. Anderson, P. C. Haljan, C. A. Regal, D. L. Feder, L. A. Collins, C. W. Clark et E. A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **86** 2926 (2001).

[8] L. Khaykovich, F. Schreck, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, L. D. Carr, Y. Castin et C. Salomon, *Science* **296** 1290 (2002).

[9] K. E. Strecker, G. B. Partridge, A. G. Truscott et R. G. Hulet, *Nature* **417** 150 (2002).

[10] S. L. Cornish, S. T. Thompson et C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* 96 17040 (2006).

[11] A. L. Marchant, T. P. Billam, M. M. H. Yu, A. Rakonjac, J. L. Helm, J. Polo, C. Weiss, S. A. Gardiner et S. L. Cornish, *preprint arXiv:1507.04639* (2015).

[12] A. L. Marchant, T. P. Billam, T. P. Wiles, M. M. H. Yu, S. A. Gardiner et S. L. Cornish, *Nat. Comm.* **4** 1865 (2013).

[13] K. Sakmann, *Many-Body Schrödinger Dynamics of Bose-Einstein Condensates*, (Springer, Berlin, 2011).

[14] E. Fermi, *Nuovo Cimento* **11** 157 (1934).

[15] N. M. Hugenholtz et D. Pines, *Phys. Rev.* **116** 489 (1959).

[16] L. Pitaevskii et S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, (Oxford Science Publication, 2003).

[17] F. Gerbier, *Condensats de Bose-Einstein dans un piège anisotrope.* (Thèse, Paris, 2003).

[18] L. Salasnich, *Eur. Phy. J. Spe. Top.* **222** 613 (2013).

[19] L. Salasnich, A. Parola et L. Reatto, *Phys. Rev. A* **65** 043614 (2002).

[20] A. Munoz Mateo et V. Delgado, *Phys. Rev. A* **75** 063610 (2007).

[21] A. Munoz Mateo et V. Delgado, *Phys. Rev. A* **77** 013617 (2008).

[22] A. Munoz Mateo et V. Delgado, *Ann. Phys* **324** 709 (2008).

[23] E. B. Kolomeisky, T. J. Newman, J. P. Straley et Xiaoya Qi, *Phys. Rev. Lett.* **85** 1146 (2000).

[24] Y. S. Kivshar et B. A. Malomed, *Rev. Mod. Phys.* **61** 4 (1989).

[25] T. Ernst et J. Brand, *Phys. Rev. A* **81** 033614 (2010).

[26] T. P. Billam, A. L. Marchant, S. L. Cornish, S. A. Gardiner et N. G. Parker, *preprint arXiv* 1209.0560.

[27] J. H. V. Nguyen, P. Dyke, D. Luo, B. A. Malomed et R. G. Hulet, *Nat. Phys.* **10** 918 (2014).

[28] B. Gertjerenken, T.P. Billam, C.L. Blackley, C.R. Le Sueur, L. Khaykovich, S.L. Cornish et C. Weiss, *Phys. Rev. Lett.* **111** 100406 (2013).

[29] C. Weiss et Y. Castin, *Phys. Rev. Lett.* **102** 010403 (2009).

[30] T. L. Belyaeva et V. N. Serkin, *Eur. Phys. J.* **66** 153 (2012).

[31] J. D. Levine, *Phys. Rev.* **117** 701 (1968).

[32] W. Shockley, *Phys. Rev.* **57** 317 (1939).

[33] N. Memmel, *Surf. Sci. Rep.* **32** 91 (1998).

[34] H. Lüth, *Surfaces and Interfaces of Solid Materials*, (Springer, 1993).

[35] V. G. Bordo et H.-G. Rubahn, *Optics and Spectroscopy at Surfaces and Interfaces*, (Wiley, 2005).

[36] I. Tamm, *Physik. Zeit. Sowjetunion 1* 733 (1932).

[37] H. Krakauer, M. Posternak et A.J. Freeman, *Phys. Rev. Lett.* **41** 1072 (1978).

[38] A. I. Streltsov, O. E. Alon et L. S. Cederbaum, *Phys. Rev. A* **80** 043616 (2009).

[39] K. Sakmann, *Many-Body Schrödinger Dynamics of Bose-Einstein Condensates* (Springer Theses, 2011).

[40] A. I. Streltsov, O. E. Alon et L. S. Cederbaum *Phys. Rev. Lett.* **100** 130401 (2008).

[41] I. Carusotto, D. Embriaco et G. C. La Rocca, *Phys. Rev. A*, **65** 053661 (2002).

5 Réduction de vitesse locale par un potentiel linéaire

« On ne peut vaincre la nature qu'en lui obéissant. »

F. Bacon

Sommaire

5.1 Introduction **141**
5.2 Obtention des lois d'échelle **142**
5.2.1 Cas général 143
5.2.2 Cas d'un gaz d'atomes non interagissant 143
5.2.3 Cas d'un gaz interagissant 144
5.3 Distribution de Wigner et grandeurs locales **145**
5.3.1 Définitions et propriétés 145
5.3.2 Grandeurs globales et locales 146
5.3.3 Moments en vitesse 149
5.3.4 Dynamique d'un gaz initialement confiné 150
5.4 Domaines de validité **152**
5.4.1 Application à un gaz sans interaction 153
5.4.2 Application à un condensat de Bose-Einstein dans le régime de Thomas-Fermi 153
5.5 Application : sonder des résonances inférieures au pico-Kelvin **156**
5.5.1 Paramètre de monochromaticité locale 156
5.5.2 Gain d'un découplage progressif lors de la diffusion d'un nuage d'atomes sur un potentiel local 157
5.6 Conclusion **160**

5.1 Introduction

Un des enjeux de la physique des gaz d'atomes ultra-froids est de diminuer la dispersion en vitesse afin de réaliser des interféromètres très contrastés comme, par exemple, dans le cadre des horloges atomiques. Une autre application est d'utiliser un gaz d'atomes ultra-froids guidé afin de sonder des résonances très résolues en énergie lors d'une expérience de diffusion. Dès lors, l'observation d'une unique résonance implique que la dispersion soit du même ordre de grandeur énergétique que la résonance étudiée, mais ceci à la *position de l'objet diffusant*. À cause des interactions inter-atomiques répulsive, le nuage voit sa dispersion en vitesse globale augmentée durant sa propagation dans le guide (contrairement au cas précédemment étudié du soliton). Autrement dit, la caractérisation de résonances fines implique qu'initialement, le nuage ait une dispersion globale plus petite encore. Atteindre ces régimes de température avec une expérience d'atomes froids peut être un vrai défi. Et malgré de nombreuses techniques de refroidissement [1, 2], il est difficile d'observer un effet lié à une unique résonance de largeur inférieure au pico-Kelvin [3] à l'aide des grandeurs globales liées au nuage atomique.

Nous présentons ici une méthode à visée expérimentale, permettant de court-circuiter ces difficultés techniques par l'utilisation de grandeurs dynamiques locales. Les grandeurs globales peuvent être définies en mécanique classique à partir de la trajectoire englobant toutes les informations sur la position

et la vitesse. Cependant, en mécanique quantique, du fait que les opérateurs liés à ces deux observables ne commutent pas, il n'est pas possible d'associer à une position donnée une vitesse donnée. Cela ne signifie pas pour autant que le concept de vitesse locale soit dénué de sens [4]. Nous verrons dans ce chapitre qu'un formalisme basé sur l'utilisation de la fonction de Wigner [5,6] permet de définir un cadre théorique approprié pour définir ces vitesses locales.

Durant la propagation libre d'un nuage atomique, la variance locale des vitesses diminue : si l'on considère un nuage atomique sans interaction et dont la densité dans l'espace des phases initiales ne présente aucune corrélation position-vitesse, alors les particules les plus rapides vont arriver avant les plus lentes, avec une vitesse bien définie, à une position d'observation en aval de la position initiale. Ainsi, il se crée durant la propagation une *corrélation entre la position des particules et leurs vitesses*. Si nous nous intéressons qu'à une partie de la distribution de vitesse, alors la plupart des particules (arrivant dans « le bon » intervalle de temps de sorte à remplir nos conditions) doivent être écartées en pratique. On proposera à la place un mécanisme permettant à toutes les particules d'avoir une vitesse bien définie en dépit de leur temps d'arrivée. Pour ce faire on aura besoin uniquement d'une force constante qui peut dans le cas d'une expérience d'atomes froids être simplement la gravité ou encore un gradient de champ magnétique pour des atomes polarisés. Nous exposerons, à l'aide d'un exemple pratique, la possibilité de rendre compte expérimentalement de résonances ultra-fines à l'aide d'un gaz d'atomes dans différents régimes d'interactions inter-atomiques.

Ces travaux ont fait l'objet d'une publication dans *Physical Review A* [7].

5.2 Obtention des lois d'échelle

Dans cette première section, on fait le calcul détaillé des lois d'échelle dans le cas particulier d'un gaz quantique mono-dimensionnel de N particules, de masse m, en interaction répulsive. On a montré par ailleurs (cf. chapitre 4) que, sous certaines approximations, la dynamique de ce gaz à température nulle est décrite par une équation dont le terme d'interaction est un terme de champ moyen fonction de la densité $f(|\Psi(x,t)|)$. De manière générale, la dynamique de la fonction d'onde est donnée par l'équation de Gross-Pitaevskii dépendante du temps (cf. chapitre 4) :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{ext}(x,t) + g_{1\mathrm{D}} f(|\Psi(x,t)|)\right)\Psi(x,t). \tag{5.1}$$

Ici f dénote une fonction du module de la fonction d'onde, pouvant prendre différentes expressions selon le système physique considéré.

On peut montrer (de manière similaire au chapitre soliton) que, sous l'hypothèse d'une transformation de Madelung de la forme : $\Psi(x,t) = \sqrt{n(x,t)}\exp(iS(x,t))$ avec $n(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$, l'équation (5.1) donne deux équations (l'une issue de la partie réelle et l'autre de la partie imaginaire) :

$$\partial_t n + \partial_x(nv) = 0, \tag{5.2}$$

$$m\partial_t v = -\partial_x\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial_{xx}\sqrt{n}}{\sqrt{n}} + \frac{mv^2}{2} + V_{ext} + g_{1\mathrm{D}} f(\sqrt{n})\right], \tag{5.3}$$

$$\text{avec } v(x,t) = \frac{\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x}S(x,t). \tag{5.4}$$

Il s'agit de la formulation hydrodynamique de l'équation (5.1). Le terme d'interaction est une fonction de la densité, ce qui rend l'équation non linéaire. Par conséquent, il est très difficile de trouver une solution générale de celle-ci. Toutefois, on pourra extraire dans certains cas particuliers des solutions, grâce à la méthode des lois d'échelle portant, non pas sur la fonction d'onde, mais sur plusieurs paramètres régissant la dynamique du système. Ces équations seront appelées lois d'échelle.

Dans cette section, on réalise l'étude de lois d'échelle du gaz libre. On appliquera ces lois d'échelle à des gaz initialement confinés dans des potentiels harmoniques de pulsation propre ω_0, puis abruptement « relâchés » à $t = 0$ dans l'espace libre.

5.2.1 Cas général

Le calcul des lois d'échelle repose sur le caractère auto-similaire des équations (5.2) et (5.3). En effet, un changement de variable en $x \to \alpha x$ laisse ces équations identiques à elles-mêmes (à un facteur multiplicatif près), à condition que le terme d'interaction soit de la forme $f(|\Psi|) = |\psi|^{2/s}$ où $s > 0$ est choisi comme constante. La valeur de cette constante permet de décrire différents régimes d'interaction entre atomes composant le gaz quantique :

- $g_{1\mathrm{D}} = 0$: équation de Schrödinger à une dimension.
- $g_{1\mathrm{D}} \neq 0$ et $s = 1$: équation de Gross-Pitaevskii à une dimension (4.20).
- $g_{1\mathrm{D}} \neq 0$ et $s = 1/2$: équation de propagation d'un gaz de Tonks-Girardeau (4.35).

Le constat de l'autosimilarité de la dynamique de l'ensemble de ces gaz nous pousse à poser un ansatz général de la forme :

$$\Psi(x,t) = \frac{\sqrt{n_0(x/\alpha)}}{\sqrt{\alpha}} \mathrm{e}^{iS(x,t)}, \text{ soit : } n(x,t) = \frac{n_0(x/\alpha)}{\alpha}, \tag{5.5}$$

avec $n_0(x) = |\Psi(x,0)|^2$. Le facteur α est une fonction du temps uniquement et rend compte de la dilatation spatiale, on a donc $\alpha(0) = 1$. La normalisation quant à elle, reste préservée grâce au préfacteur $1/\alpha$.

À ce stade, nous sommes en mesure de calculer le champ de vitesse en fonction de ce paramètre d'échelle. En effet, l'équation de continuité conduit à :

$$\partial_t n + \partial_x(nv) = 0 \Leftrightarrow \partial_x n_0 \left(-\frac{\dot{\alpha}}{\alpha} x + v \right) - n_0 \left(\dot{\alpha} - \alpha \partial_x v \right) = 0.$$

Les deux termes de l'équation conduisent à la même conclusion, à savoir que le champ de vitesse est de la forme :

$$v(x,t) = \frac{\dot{\alpha}}{\alpha} x. \tag{5.6}$$

En utilisant (5.6), on obtient la forme explicite du facteur de phase :

$$S(x,t) = \frac{m}{\hbar} \frac{\dot{\alpha}}{2\alpha} x^2 + S_0(t), \tag{5.7}$$

dans la suite on pose sans perte de généralité $S_0(t) = 0$. À noter qu'aucune hypothèse n'a été faite sur la nature du gaz faisant l'objet de l'étude *i.e.*, toute l'information concernant le type et la force des interactions inter-atomiques est implicitement incluse dans la fonction $\alpha(t)$. Nous appliquerons, par la suite, le formalisme précédent au cas d'un gaz sans interaction puis à celui d'un gaz pour lequel les interactions sont prises en compte sous la forme d'un champ moyen.

5.2.2 Cas d'un gaz d'atomes non interagissant

Considérons ici un gaz de particules sans interaction. Sa dynamique est régie par les équations hydrodynamiques avec $g_{1D} = 0$. Nous savons que, dans ce cas, le paquet d'onde gaussien est solution de l'équation de Schrödinger. C'est donc, naturellement, que nous posons un ansatz pour la densité de la forme :

$$n(x,t) = n_0\left(\frac{x}{\alpha}\right) = \frac{1}{\alpha\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{\alpha^2\sigma^2}\right). \tag{5.8}$$

Lorsque l'on insère cette solution dans l'équation hydrodynamique on obtient l'équation différentielle qui permet de déterminer l'évolution du facteur d'échelle :

$$\ddot{\alpha} = \frac{\omega_0^2}{\alpha^3}, \tag{5.9}$$

avec $\omega_0 = \hbar/(2m\sigma^2)$. Par définition, on a $\alpha(0) = 1$ et $\dot{\alpha}(0) = 0$. Cette équation étant une équation d'Ermakov-Pinney, elle s'intègre directement :

$$2\dot{\alpha}\ddot{\alpha} = 2\dot{\alpha}\omega_0^2/\alpha^3 \;\Leftrightarrow\; \dot{\alpha}^2 = 2\omega_0^2\left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right) \;\Leftrightarrow\; \alpha(t) = \sqrt{1+\omega_0^2 t^2}. \tag{5.10}$$

Le champ de vitesse prend donc la forme :

$$v(x,t) = \frac{\omega_0^2 t}{1+\omega_0^2 t^2} x. \tag{5.11}$$

Cette solution analytique est à mettre en regard avec la solution bien connue de l'expansion d'un paquet d'onde gaussien dans le vide [8]. L'expression du paramètre d'échelle est connue de manière analytique tout comme le champ de vitesse. Mais qu'en est-il du cas plus complexe où l'on est en présence d'interactions entre atomes ?

5.2.3 Cas d'un gaz interagissant

On se place dans le cas d'un gaz pour lequel les interactions entre atomes sont modélisées par un terme [9] en $f(n) = n(x,t)^{1/s}$ mais, ici, avec s fini. L'obtention de l'équation de Schrödinger stationnaire se fait en réalisant une séparation des variables temps et position *i.e.* en posant une fonction d'onde de la forme : $\Psi(x,t) = \psi_0(x)\exp(i\mu t/\hbar)$. L'équation (5.1) devient :

$$\mu\psi_0 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + g_{1D}|\psi_0|^{2/s}\right)\psi_0,$$

où μ est le potentiel chimique. Dans ces conventions le nombre de particules est $N = \int |\Psi|^2 \mathrm{d}x$. Lorsque $\chi = Na_{sc}/a_0 \gg 1$, on est dans un régime d'interaction forte, et on peut considérer que le terme d'énergie cinétique dans l'hamiltonien est négligeable. Dans ce régime, dit de Thomas-Fermi, l'équation stationnaire se réduit à :

$$\psi_0(x) = \sqrt{C(s)}\left[\left(1 - \frac{x^2}{R_{\mathrm{TF}}^2}\right)\right]^{s/2}, \tag{5.12}$$

avec $R_{\mathrm{TF}} = \sqrt{2\mu/(m\omega^2)} = \sqrt[3]{3g_{1D}N/(2m\omega^2)}$, le rayon de Thomas-Fermi, et où $C(s) = (N/(\sqrt{\pi}R))\Gamma(s+3/2)/\Gamma(s+1)$ est une constante de normalisation [9], avec $\Gamma(z)$ la fonction gamma d'Euler.

Il est désormais possible de faire le même traitement que pour le cas d'un gaz non interagissant. On peut, en effet, insérer cette solution dans l'équation hydrodynamique (5.3) et il vient :

$$\ddot{\alpha} = \frac{\omega_0^2}{\alpha^{1+1/s}}. \tag{5.13}$$

À ma connaissance, il n'est pas possible de résoudre cette équation différentielle analytiquement dans le cas général (nous avons déjà vu que pour certains cas particuliers comme par exemple $s = 1/2$, cette équation est intégrable). On peut toutefois toujours intégrer cette dernière équation pour obtenir une formulation en termes d'intégrale première :

$$\dot{\alpha} = \sqrt{2s}\omega_0\sqrt{\frac{1}{\alpha^{1/s}} + \frac{1}{\alpha(0)^{1/s}}} \;\Leftrightarrow\; \int_{\alpha(0)}^{\alpha(t)} \frac{\mathrm{d}\alpha}{\sqrt{1/\alpha(0)^{1/s} + 1/\alpha^{1/s}}} = \sqrt{2s}\omega_0 t. \tag{5.14}$$

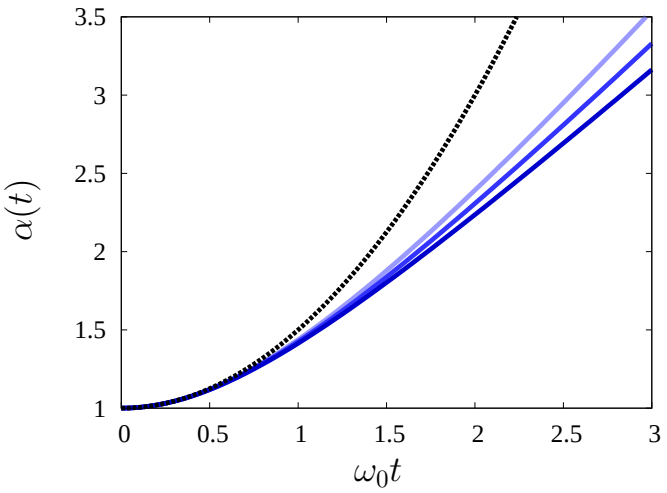


Figure 5.1

Solution numérique de l'équation (5.13), pour $s = 0.5$ (bleu clair) correspondant au cas d'un gaz sans interaction ou à un gaz de Tonks-Girardeau, pour $s = 0.75$ (bleu) un régime intermédiaire, et pour un gaz avec interaction atome-atome répulsive $s = 1$ (bleu foncé). Les conditions initiales étant $\alpha(0) = 1$ et $\dot{\alpha}(0) = 0$. On compare ces solutions à la fonction $f(x) = 0.5x^2$ (courbe noire tiretée), c'est-à-dire la solution triviale du cas où $s \to \infty$.

Qu'en est-il maintenant du cas où l'exposant du terme d'interaction est $s = 1$ (ce qui correspond au cas de l'équation de Gross-Pitaevskii à une dimension) ?

L'intégration du terme de gauche permet d'écrire $\alpha(t)$ sous la forme d'une équation paramétrique implicite :

$$\sqrt{2}\omega_0 t = \sqrt{\alpha(\alpha-1)} + \frac{1}{2}\ln\left(2\alpha - 1 + 2\sqrt{\alpha(\alpha-1)}\right). \tag{5.15}$$

En résumé, on représente sur la figure 5.1 la fonction $\alpha(t)$ pour différentes valeurs du paramètre d'interaction s. Pour $\omega_0 t \ll 1$ la solution admet un développement limité de la forme $\alpha(t \to 0) \simeq 0.5(\omega_0 t)^2 + 1$ qui est indépendant de s. Pour $t \gg 1$ on observe que la fonction décroit linéairement. En effet, d'après l'équation (5.14), $\dot{\alpha} \sim 2\sqrt{s}\omega_0$ lorsque $t \to \infty$.

Le comportement global de la densité peut être ainsi connu de manière analytique asymptotiquement, et ce, pour n'importe quel type d'interaction en champ moyen. On testera ce modèle par la suite à l'aide d'une intégration numérique de la dynamique d'un paquet d'onde.

5.3 Distribution de Wigner et grandeurs locales

Dans ce paragraphe, l'on procède à de brefs rappels sur le formalisme de la transformation (distribution) de Wigner que l'on l'utilisera ensuite pour introduire plusieurs grandeurs locales dont l'évolution sera discutée en regard de leurs équivalents globaux.

5.3.1 Définitions et propriétés

La distribution de Wigner d'une fonction d'onde à une dimension $\psi(x)$ s'écrit :

$$W(q,p) = \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\ \psi^*(q+y)\psi(q-y)\mathrm{e}^{2ipy/\hbar}. \tag{5.16}$$

Le préfacteur garantit la normalisation $\int \mathrm{d}p \int \mathrm{d}q W(q,p) = N$, où N est le nombre de particules. Cette distribution est le pendant de la fonction de Liouville en mécanique classique, mais prend en compte le fait que la position et l'impulsion sont des observables quantiques qui ne commutent pas et que l'espace des phases est quantifié par le quantum d'action h. Cette fonction est réelle et peut prendre des valeurs négatives, contrairement à son homologue classique. De plus, elle a de nombreuses propriétés, notamment celle d'être invariante sous les transformations de Galilée et par réflexions spatiale et temporelle : si $\psi(q) \to \psi(-q)$ alors $W(q,p) \to W(-q,-p)$, et si $\psi(q) \to \psi^*(q)$ alors $W(q,p) \to (p,-q)$. On peut montrer que toute l'information associée aux densités de probabilité dans l'espace des positions et des moments peut être obtenue par projection de cette distribution selon leurs grandeurs conjuguées respectives :

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(q,p)\mathrm{d}p = |\psi(q)|^2 \text{ et } \int_{-\infty}^{\infty} W(q,p)\mathrm{d}q = |\tilde{\psi}(p)|^2.$$

Cette fonction très utilisée pour représenter la fonction d'onde d'un système quantique dans son espace des phases, sera largement utilisée par la suite pour caractériser de nouvelles grandeurs dynamiques.

5.3.2 Grandeurs globales et locales

Dans cette section, nous faisons l'étude d'un gaz quantique initialement piégé dans un potentiel harmonique puis, relâché dans un potentiel linéaire (Fig. 5.2). Ce cas de figure se présente couramment dans de nombreux systèmes tels que les horloges atomiques, dans les gravimètres à atomes froids où encore dans la préparation de lasers à ondes de matière guidées. De façon à simplifier le problème, l'étude qui suit est réalisée à une dimension, mais peut se généraliser sans complication à un plus grand nombre de dimension. Le but est ici de définir puis d'utiliser des grandeurs dynamiques telles que la vitesse moyenne ou la dispersion, mais *de façon locale*. Ces nouvelles grandeurs pourront être calculées grâce au formalisme de la fonction de Wigner. Ce traitement particulier sera utilisé par la suite pour sonder des résonances dont la résolution en énergie peut a priori sembler inaccessible si l'on considère uniquement les grandeurs dynamiques globales usuelles.

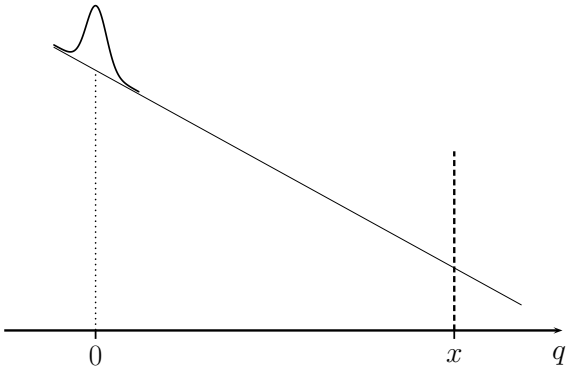


Figure 5.2

Propagation d'un paquet d'ondes soumis à un potentiel linéaire (ici $x_0 = 0$). La région d'interaction est localisée à la position $q = x$.

Notre étude est basée sur l'utilisation d'une double moyenne, l'une sur les positions $q = x$ de l'espace et l'autre sur le moment p pour un temps t donné. De la sorte, le champ de vitesse rencontré plus haut (cf. formulation hydrodynamique) peut s'écrire comme l'intégrale de la distribution de Wigner renormalisée par la densité de particules divisée par le nombre d'atomes N (dénominateur) :

$$v_x(t) = \frac{\int \mathrm{d}p\ vW(x,p;t)}{\int \mathrm{d}p W(x,p;t)}, \tag{5.17}$$

où $v = p/m$. Ce champ de vitesse n'a de sens que si l'on sonde la vitesse des particules entre x et $x + \mathrm{d}x$ de façon simultanée.

En pratique, lors d'une expérience impliquant un détecteur situé à une position $q = x$ (cf. Fig. 5.2), les particules arrivent avec un certain flux (dépendant du temps) tel que la grandeur d'intérêt n'est plus le nombre de particules compris dans une petite portion de l'espace $\mathrm{d}x$, mais plutôt le nombre de particules arrivant en x avec une vitesse comprise entre v et $v + \mathrm{d}v$. Cette quantité n'est autre que le produit $NvW(x, p; t)\mathrm{d}v\mathrm{d}t$. La vitesse locale à une position x peut alors être écrite comme le rapport :

$$\bar{v}_x(t) = \frac{\int \mathrm{d}p\ v^2 W(x, p; t)}{\int \mathrm{d}p\ vW(x, p; t)} = \frac{1}{J_x(t)} \int \mathrm{d}p\ v^2 W(x, p; t), \tag{5.18}$$

ici le dénominateur est la densité de courant (flux de particule) que l'on écrira par la suite $J_x(t)$. De même, on supposera que les particules arrivent de gauche à droite (cf. Fig. 5.2). De façon générale, on a : $J_x(t) \geq 0$ et $\int J_x(t)\mathrm{d}t = 1$.

Définissons la fraction d'atomes $\mathrm{d}^2 N_x^{(v)}(t)$, telle que leurs vitesses soient comprises entre v et $v + \mathrm{d}v$, lorsqu'elles croisent la position $q = x$ entre t et $t + \mathrm{d}t$:

$$\mathrm{d}^2 N_x^{(v)}(t) = W(x, p; t)\mathrm{d}p\mathrm{d}t \equiv P_x(v, t)\mathrm{d}v\mathrm{d}t. \tag{5.19}$$

Ici on introduit la distribution de probabilité $P_x(v, t)\mathrm{d}v\mathrm{d}t$ représentant la densité de probabilité de trouver une particule avec la vitesse v passant par la position x à un temps t, normalisée à 1 tel que $\int \mathrm{d}v\mathrm{d}t\ P_x(v, t) = (\int \mathrm{d}t J_x(t) =)1$. Par conséquent, on peut exprimer le flux $J_x(t)$ comme le flux atomique local, qui normalisé par le nombre d'atomes N :

$$J_x(t) = \frac{\mathrm{d}N_x(t)}{\mathrm{d}t} = \int \frac{\mathrm{d}^2 N_x^{(v)}(t)}{\mathrm{d}t} = \int W(x, p; t)v\mathrm{d}p, \tag{5.20}$$

où N_x est la probabilité de trouver une particule à $q > x$. Désormais, on peut définir un ensemble de grandeurs dynamiques que l'on peut regrouper en deux catégories. La première concerne les grandeurs issues d'une moyenne spatiale de sorte que celles-ci soient définies pour tout temps t. A l'inverse, la deuxième catégorie concerne les grandeurs issues d'une moyenne temporelle, et donc étant définies pour chaque point de l'espace : elles sont dites locales.

Afin de définir ces grandeurs moyennes locales, nous avons besoin d'introduire une densité de probabilité conditionnelle $P_x(v|t)$, de sorte que $P_x(v|t)\mathrm{d}v$ soit la probabilité de trouver une particule dont la vitesse est comprise entre v et $v + \mathrm{d}v$, sachant qu'elle a traversé la position x dans un intervalle de temps compris entre t et $t + \mathrm{d}t$; probabilité que l'on peut normaliser à 1 : $\int P_x(v|t)\mathrm{d}v = 1$. La loi de Bayes nous permet de relier cette densité de probabilité conditionnelle à la densité de probabilité dans l'espace des vitesses définie plus haut, par l'intermédiaire de la densité de particule :

$$P_x(v, t) = P_x(v|t)J_x(t). \tag{5.21}$$

Cette densité de probabilité conditionnelle permet de réécrire la vitesse moyenne locale et de définir la vitesse quadratique moyenne locale, à une position x et à un temps t, respectivement comme :

$$\overline{v_x}(t) = \iint vP_x(v|t)\mathrm{d}v \text{ et } \overline{v^2}(t) = \iint v^2 P_x(v|t)\mathrm{d}v.$$

Dès lors, il est possible d'intégrer temporellement ces grandeurs afin de calculer les vitesses moyennes locales :

$$\langle v \rangle_x = \iint vP_x(v, t)\mathrm{d}v\mathrm{d}t = \iint v^2 W(x, p; t)\mathrm{d}p\mathrm{d}t = \int \bar{v}_x(t)J_x(t)\mathrm{d}t.$$

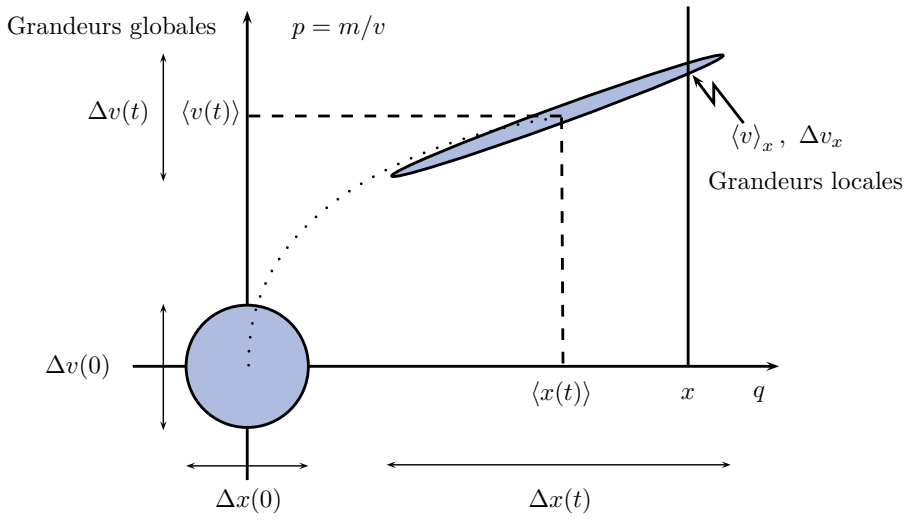


Figure 5.3

Représentation schématique de la distribution de Wigner à deux instants de la dynamique d'un paquet d'ondes soumis à un potentiel linéaire, ainsi que les grandeurs lui étant associées.

De la même manière, on peut calculer la variance locale de la vitesse :

$$\begin{aligned}(\Delta v_x)^2 &\equiv \langle (v-\langle v\rangle_x)^2\rangle_x = \iint (v-\langle v\rangle_x)^2 P_x(v,t)\mathrm{d}v\mathrm{d}t \\ &= \iint (v-\bar{v}_x+\bar{v}_x-\langle v\rangle_x)^2 P_x(v,t)\mathrm{d}v\mathrm{d}t \\ &= \iint \left[(v-\bar{v}_x)^2+(\bar{v}_x-\langle v\rangle_x)^2\right] P_x(v,t)\mathrm{d}v\mathrm{d}t \\ &= \int \left[\int (v-\bar{v}_x)^2 P_x(v|t)\mathrm{d}v + (\bar{v}_x-\langle v\rangle_x)^2\right] J_x(t)\mathrm{d}t \\ &= \int \left[\sigma^2_{v|x}(t)+D^2_{v|x}(t)\right] J_x(t)\mathrm{d}t, \end{aligned} \tag{5.22}$$

où :

$$\sigma^2_{v|x}(t) \equiv \frac{1}{J_x(t)}\int (v-\bar{v}_x)^2 P_x(v,t)\mathrm{d}v \text{ et } D^2_{v|x}(t) \equiv (\bar{v}_x-\langle v\rangle_x)^2, \tag{5.23}$$

étant respectivement les variances locales en vitesse et le carré de la déviation à la vitesse moyenne locale. D'après l'équation (5.22), la variance de la vitesse à une position x a une forme similaire à celle de son homologue la variance en vitesse globale Δv. Mais, elle est la somme de deux termes : la moyenne temporelle de la variance locale instantanée et de la variance de la vitesse moyenne instantanée.

La figure 5.3 résume schématiquement les différentes grandeurs définissant la fonction de Wigner d'un paquet d'ondes. Quelque soit le temps d'observation, les variances en vitesse et en position sont reliées par le principe d'Heisenberg tel que $\Delta x(t)\Delta v(t) \geq \hbar/(2m)$. En revanche, les grandeurs locales tel que Δv_x que l'on a défini ici ne sont pas liées par une telle contrainte. Plus encore, on montrera par la suite que $\partial_x \Delta v_x \leq 0$. Ce qui nous conduit à dire que plus la position x est choisie loin de la position initiale du paquet plus cette grandeur sera susceptible d'être utilisable pour sonder de petits domaines en énergie.

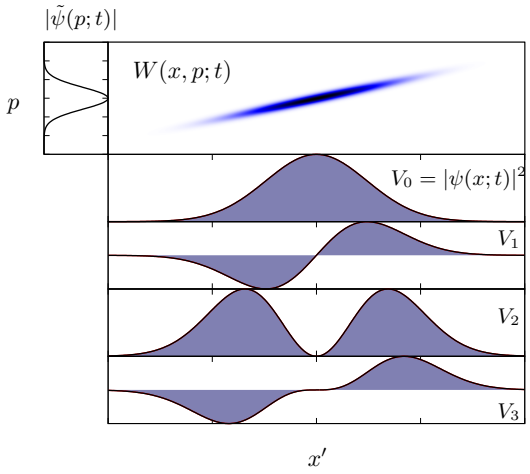


Figure 5.4

Distribution de Wigner pour une fonction gaussienne après une propagation libre dans l'espace des phases (densité bleue). On représente ses 4 premiers moments issus des intégrations selon p définies à l'équation (5.24). Ces moments sont représentés en unités arbitraires à l'instar des unités en position et moment. Ici on se place dans le référentiel de centre de masse x'. On retrouve par intégration selon x la densité de population $|\tilde{\psi}(p;t)|$ dans l'espace des p.

5.3.3 Moments en vitesse

Jusqu'à présent, nous avons défini des grandeurs globales et locales à partir des distributions de probabilité. Ces grandeurs peuvent également être exprimées à partir de la distribution de Wigner dans l'espace des phases. On peut donc naturellement se demander quelles sont les expressions de ces grandeurs dans le formalisme de la fonction de Wigner.

Pour ce faire, on commence par définir les moments en vitesse d'ordre n associés à la fonction de Wigner, que l'on exprime sous la forme générale :

$$V_n(x;t) = \int \left(\frac{p}{m}\right)^n W(x,p;t)\mathrm{d}p, \tag{5.24}$$

Le moment d'ordre 0 n'est autre que la densité d'atome $V_0(x;t) = |\psi(x;t)|^2 = n(x;t)$, d'après la définition de la distribution de Wigner. Le moment d'ordre 1, quant à lui, peut être identifié au flux de particules : $V_1(x;t) = J_x(t)$, en vertu de l'équation (5.20). Le moment d'ordre 2 est le produit du flux $J_x(t)$ et de la vitesse moyenne locale $\bar{v}_x(t)$:

$$\bar{v}_x(t) = \frac{1}{J_x(t)} \int v^2 W(x,p;t)\mathrm{d}p = \frac{V_2}{V_1}. \tag{5.25}$$

De la même façon, on peut démontrer les relations suivantes impliquant les grandeurs locales définies plus haut :

$$\begin{aligned}
\overline{v_x^2}(t) &= \frac{1}{J_x(t)} \int v^3 W(x,p;t)\mathrm{d}p = \frac{V_3}{V_1}, \\
\sigma^2_{v|x}(t) &= \frac{V_3}{V_1} - \left(\frac{V_2}{V_1}\right)^2, \\
\langle v \rangle_x &= \iint v^2 W(x,p,t)\mathrm{d}p\mathrm{d}t = \int \mathrm{d}t V_2(x,t), \\
D^2_{v|x}(t) &= \left(\frac{V_2(x,t)}{V_1(x,t)} - \int V_2(x,t')\mathrm{d}t'\right)^2.
\end{aligned}$$

Enfin, la variance en vitesse globale indépendante de la position (celle rentrant en jeu dans l'inégalité d'Heisenberg) s'écrit dans ce formalisme :

$$\Delta v(t) = \sqrt{\int V_2(x,t)\mathrm{d}x - \left(\int V_1(x,t)\mathrm{d}x\right)^2}. \tag{5.26}$$

En résumé, il est possible de dériver toutes les grandeurs d'intérêt uniquement à partir des trois premiers moments en vitesse de la fonction de Wigner. La figure 5.4 montre ces moments pour une fonction d'onde gaussienne après une propagation libre durant un temps t. Dans le référentiel du centre de masse, l'intégrale des moments impairs s'annulent par symétrie. Ainsi, afin de caratériser analytiquement ces variables dynamiques, on utilisera donc systématiquement par la suite ce formalisme basé sur les moments en vitesse de la fonction de Wigner.

5.3.4 Dynamique d'un gaz initialement confiné

L'étape initiale de toute expérience impliquant un gaz d'atome ultra-froids est celle d'un gaz confiné spatialement par un potentiel (quasi-)harmonique (cf. chapitre d'introduction). Afin de rester fidèle à la réalité de ces expériences, on s'impose une fonction de Wigner initiale W_0 dont les propriétés tiennent compte de ce piégeage. Dans un premier temps on exploite le formalisme développé plus haut pour un gaz quantique en l'absence d'interaction. Puis, dans un deuxième temps, on étudie la dynamique de cette fonction de Wigner en prenant en compte les interactions entre atomes.

- **Exemple du gaz d'atomes non interagissants**

On cherche à modéliser la dynamique d'un gaz d'atomes initialement dans un piège harmonique de fréquence angulaire ω_0. Pour un gaz sans interaction, la distribution de Wigner $W_0(x,p)$ associée à la fonction d'onde stationnaire obéit à l'équation différentielle [7] :

$$p\frac{\partial W_0}{\partial x} = m^2\omega_0^2 x\frac{\partial W_0}{\partial p},$$

qui n'est autre que l'équation de Liouville dans le cas d'un gaz classique [10]. L'intégration de cette équation permet de retrouver la relation associée à l'oscillateur harmonique classique :

$$\langle p^2\rangle_0 = m^2\omega^2\langle x^2\rangle_0. \tag{5.27}$$

Intéressons-nous maintenant à la dynamique de ce gaz, dans le cas où l'on relâche abruptement le confinement harmonique initial. On peut montrer que, si ce gaz est soumis à un potentiel linéaire $U(x) = -m\gamma x$ (cf. Fig. 5.2), l'équation régissant la dynamique revêt la forme :

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial x} - m\gamma\frac{\partial W}{\partial p}. \tag{5.28}$$

Afin de trouver une solution à cette équation dynamique, on pose une fonction d'essai (*ansatz*) en loi d'échelle de la forme :

$$W(x,p;t) = W_0(X,P), \tag{5.29}$$

où l'on impose la transformation linéaire (cf. Fig. 5.5) :

$$\begin{pmatrix} X \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\alpha & 0 \\ -m\dot{\alpha} & \alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x-\eta \\ p-m\dot{\eta} \end{pmatrix}, \tag{5.30}$$

avec $\alpha(t)$ une fonction dépendant uniquement du temps à déterminer, et $\eta(t)$ le déplacement du centre de masse obéissant à la loi de Newton $\ddot{\eta} = \gamma$. Pour un gaz initialement confiné, les conditions initiales

s'écrivent : $\eta(0) = 0$, $\dot{\eta}(0) = 0$, $\alpha(0) = 1$, et $\dot{\alpha}(0) = 0$. Ainsi, $P(t = 0) = p$ et $X(t = 0) = x$. En faisant ce changement de variables, les différents termes de l'équation (5.28) peuvent se réécrire :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial W}{\partial t} &= \dot{X}\frac{\partial W_0}{\partial X} + \dot{P}\frac{W_0}{\partial P}, \\
\frac{\partial W}{\partial x} &= X'\frac{\partial W_0}{\partial X} + P'\frac{\partial W_0}{\partial P}, \\
\frac{\partial W}{\partial p} &= \frac{\partial P}{\partial p}\frac{\partial W_0}{\partial P}.
\end{aligned}$$

En insérant ces relations dans l'équation de la dynamique, on obtient :

$$\frac{P}{m\alpha^2}\frac{\partial W_0}{\partial X} - [m\alpha(\ddot{\eta} - \gamma) + mX\alpha\ddot{\alpha}]\frac{\partial W_0}{\partial P} = 0. \tag{5.31}$$

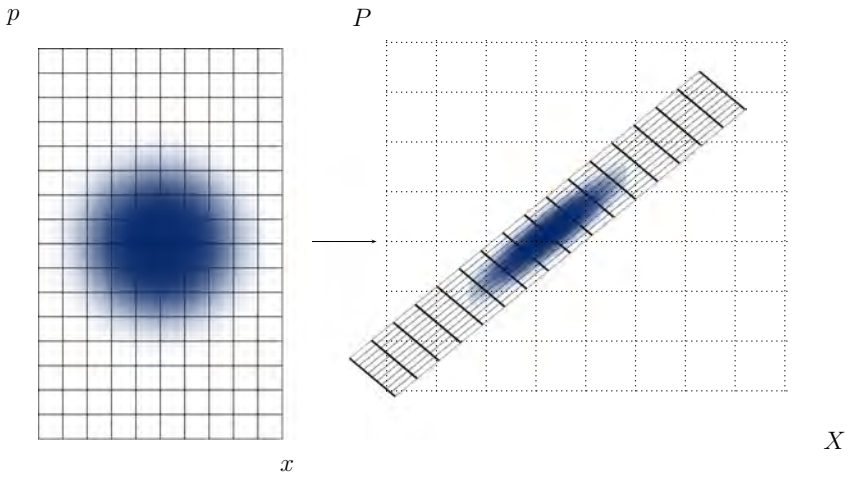


Figure 5.5

Schéma de principe de la transformation (5.30). On considère initialement une distribution définie dans les coordonnées (x, p). Puis, on applique la transformation et on définit de nouvelles coordonnées (X, P), ce qui nécessite de réaliser une interpolation (linéaire) entre la grille déformée (lignes continues) et la nouvelle grille (lignes pointillées).

L'intégration de l'équation (5.31) selon X et P permet de retrouver l'équation du centre de masse $\ddot{\eta} = \gamma$, et l'intégration de (5.31) multipliée par le produit XP, conduit à l'équation différentielle portant sur le paramètre d'échelle :

$$\ddot{\alpha} = \frac{\langle P^2 \rangle_0}{m^2 \langle X^2 \rangle_0}\frac{1}{\alpha^3} \equiv \frac{\omega_0^2}{\alpha^3},$$

en utilisant la relation concernant les conditions initiales (5.27). Ainsi, la dynamique de la distribution de Wigner d'un gaz quantique en l'absence d'interaction est entièrement gouvernée par les lois d'échelles énoncées à la section précédente.

- **Cas général**

Le formalisme développé plus haut dans le cas particulier d'un gaz sans interaction n'est pas propre à celui-ci. En effet, on peut montrer que le même raisonnement peut se faire dans le cas où l'on introduit des interactions répulsives entre atomes. Dans ce cas l'équation portant sur le paramètre d'échelle prend la forme (cf. sous-section 5.2.3) :

$$\ddot{\alpha} = \frac{\omega_0^2}{\alpha^p}, \tag{5.32}$$

où $p = 1 + 1/s$ prend différentes valeurs selon le type de gaz considéré (cf. plus haut).

Ainsi, tous les moments en vitesse liés à la fonction de Wigner peuvent s'écrire en combinant les relations (5.24) et (5.29) dans les coordonnées (X, P), tels que :

$$V_n(x,t) = \int \left[\frac{P}{m\alpha} + u(X,t)\right]^n W_0(W,P)\frac{\mathrm{d}P}{\alpha}, \tag{5.33}$$

avec $u(X,t) = \dot{\eta} + \dot{\alpha}X$. On peut exprimer les quatre premiers moments à partir de la relation (5.33) en fonction des moments initiaux $V_0^{(0)}(X)$ et $V_2^{(0)}(X)$, et de $\alpha(t)$ et $u(t)$:

$$V_0(x,t) = V_0^{(0)}(X)/\alpha, \tag{5.34}$$
$$V_1(x,t) = uV_0^{(0)}(X)/\alpha, \tag{5.35}$$
$$V_2(x,t) = V_2^{(0)}(X)/\alpha^3 + u^2V_0^{(0)}(X)/\alpha, \tag{5.36}$$
$$V_3(x,t) = 3uV_2^{(0)}(X)/\alpha^3 + u^3V_0^{(0)}(X)/\alpha. \tag{5.37}$$

Ces résultats ont été obtenus par utilisation de la propriété de symétrie de la fonction de Wigner : $W_0(x,p) = W_0(x,-p)$. De fait, pour tout t, *tous les moments d'ordre inférieur à 3 peuvent s'écrire uniquement à partir des moments initiaux 0 et 2 et du paramètre d'échelle* α, ce qui simplifie fortement le traitement analytique du problème. Enfin, la dispersion en vitesse peut être calculée en utilisant ces expressions et la relation (5.26). Elle prend la forme générale :

$$\Delta v^2(t) = \frac{\Delta v^2(0)}{\alpha^2} + \frac{2\omega_0^2}{p-1}\left(1 - \alpha^{1-p}\right)\Delta x^2(0). \tag{5.38}$$

On remarque qu'elle ne dépend que des variances en position et vitesse initiales et du paramètre d'échelle. Par exemple, dans le cas d'un gaz sans interaction pour lequel $p = 3$, cette dispersion est constante, résultat bien connu de l'expansion libre d'un paquet d'ondes.

Au contraire, dans le cas avec interaction, on a $\Delta v(t) > \Delta v(0)$. Il y a transfert d'énergie d'interaction en énergie cinétique durant la propagation (voir ci-après) et lorsque $p = 2$, c'est-à-dire pour le cas d'un condensat de Bose-Einstein dans le régime de Thomas-Fermi, asymptotiquement, on trouve :

$$\Delta v(t \to \infty) = \sqrt{2}\omega_0 \Delta x(0), \tag{5.39}$$

qui est en accord avec le théorème du viriel.

5.4 Domaines de validité

Le traitement des moments de la fonction de Wigner décrit précédemment est valable dans le régime de Thomas-Fermi. En pratique, il n'est possible d'atteindre ce régime idéal que dans la limite où $\chi = Na_{sc}/a_0 \to \infty$ (avec la longueur de collision $a_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$). Nous étudions ci-après le domaine pour lequel l'erreur associée à cette approximation est négligeable. Pour ce faire, on réalise une série de comparaisons numériques entre la résolution temporelle de l'équation de Gross-Pitaevskii et notre modèle analytique qui ne requiert la connaissance que des moments en vitesse initiaux.

5.4.1 Application à un gaz sans interaction

Une fois encore, partons du cas analytique d'un paquet d'ondes gaussien qui est le fondamental d'un puits de potentiel harmonique, correspondant au minimum de la relation d'incertitude de Heisenberg, soit $\Delta x(0)\Delta p(0) = \hbar/2$. La fonction de Wigner s'écrit :

$$W_0(x,p) = \frac{1}{2\pi}\frac{1}{\Delta x(0)\Delta p(0)} \mathrm{e}^{-x^2/2\Delta x^2(0)} \mathrm{e}^{p^2/2\Delta p^2(0)}. \tag{5.40}$$

On pose* $\sigma \equiv \Delta x(0)$. Les moments initiaux d'ordre 0 et 2 s'écrivent :

$$V_0^{(0)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\mathrm{e}^{-x^2/2\sigma^2} \text{ et } V_2^{(0)}(x) = \left(\frac{\hbar}{2m\sigma}\right)^2 V_0^{(0)}(x),$$

avec ici (cf. Eq. 5.10) :

$$\alpha(t) = \sqrt{1+\omega_0^2 t^2} \text{ et } u(x,t) = \gamma t + \frac{(x-\gamma t^2/2)\omega^2 t}{1+\omega^2 t^2},$$

où $\omega_0 = \hbar/(2m\sigma^2)$. On suppose de nouveau qu'après une ouverture instantanée du piège, le paquet d'ondes est soumis à une force constante $F = \gamma m$.

Ayant connaissance de $V_2^{(0)}$ et $V_0^{(0)}$, on peut déterminer l'expression de, par exemple : $\bar{v}_x(t)$, $\overline{v_x^2}(t)$ et $\sigma^2_{x|v}(t)$. En effet, ces grandeurs ne dépendent que de rapports de la forme $V_{n>1}(x,t)/V_1(x,t)$. Par ailleurs, nous avons démontré (Eq. 5.37) que ces rapports ne sont fonction que du rapport $V_2^{(0)}(X)/V_0^{(0)}$ qui est une constante dans le cas du paquet d'ondes gaussien. Finalement, on obtient les relations :

$$\bar{v}_x(t) = \frac{u^2 + (u^2t^2+\sigma^2)\omega_0^2}{u(1+\omega_0^2t^2)}, \tag{5.41}$$

$$\overline{v_x^2}(t) = u\bar{v}_x(t) + \frac{2\sigma^2\omega_0^2}{1+\omega_0^2t^2}. \tag{5.42}$$

Et, par ailleurs, on trouve les moyennes globales :

$$\langle v\rangle(t) = \int V_1(x,t)\mathrm{d}x = gt, \tag{5.43}$$

$$\langle v^2\rangle(t) = \int V_2(x,t)\mathrm{d}x = \frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^2} + g^2t^2. \tag{5.44}$$

Ainsi, on retrouve bien les grandeurs moyennes que l'on peut calculer par ailleurs à l'aide de l'intégration directe de l'équation de Schrödinger. Ceci permet donc de valider de manière analytique, dans le régime sans interaction, notre approche basée sur la fonction de Wigner. Voyons maintenant ce qu'il en est dans le cas avec interactions.

5.4.2 Application à un condensat de Bose-Einstein dans le régime de Thomas-Fermi

On fait ici le choix de se placer dans le cadre d'un régime d'interaction répulsive entre les atomes constituant le condensat de Bose-Einstein. Contrairement au cas précédent, il n'est pas possible dans ce cas de résoudre la dynamique analytiquement. Par conséquent, on propose de faire ici une double étude numérique. La première basée sur une intégration dynamique de l'équation de Gross-Pitaevskii. La deuxième approche numérique repose sur les lois d'échelles définies plus haut. À titre d'exemple, on représente à la figure 5.6.Gauche, la fonction de Wigner calculée pour un gaz dans le régime de Thomas-Fermi initialement confiné dans un potentiel harmonique et, à la figure 5.6.Droite, la fonction de Wigner calculée après une propagation de 2 ms.

*. Attention, ici σ représente la variance globale en position qui ne doit pas être confondue avec $\sigma_{v|x}$, la variance locale.

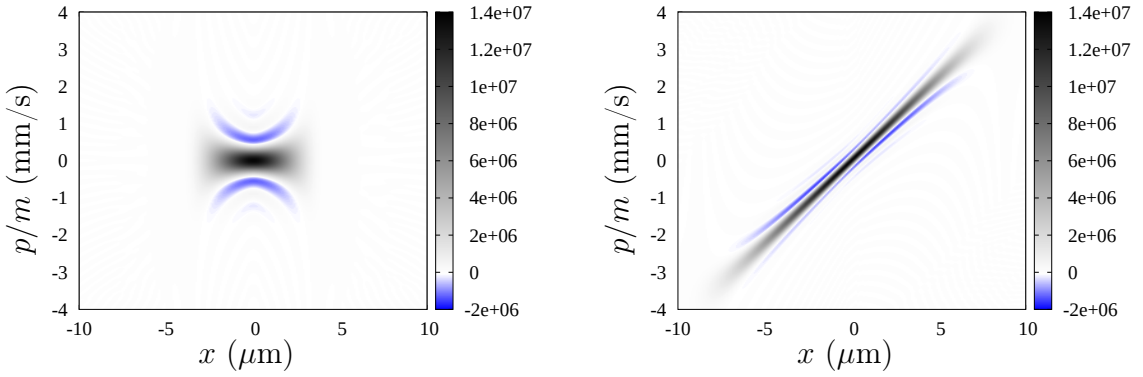


Figure 5.6

Calcul numérique de la fonction de Wigner pour un gaz de 5000 atomes de Rubidium 87 en interaction répulsive (Gauche) initialement dans un potentiel harmonique de fréquence $\omega_0 = 2\pi \times 150$ Hz et (Droite) après une expansion libre de 2 ms.

À la sous-section 5.2.3, nous avons démontré que, en régime d'interactions fortes, la densité atomique a un profil parabolique ($s = 1$) et l'évolution temporelle peut s'écrire à l'aide d'une loi d'échelle (Eq. 5.13). Nous nous posons ici la question de la validité de cette approche pour la détermination des moments locaux du champs de vitesse, dans le cas où χ est fini. Les paramètres numériques sont pris pour un gaz de N atomes de rubidium 87, de longueur de diffusion $a = 5$ nm, piégés dans un potentiel harmonique de pulsation $\omega_0 = 2\pi \times 150$ Hz. On représente la fonction de Wigner à la figure 5.6.Gauche. Avec ces choix, la valeur pour laquelle $\chi = 1$ correspond à $N \approx 176$ atomes.

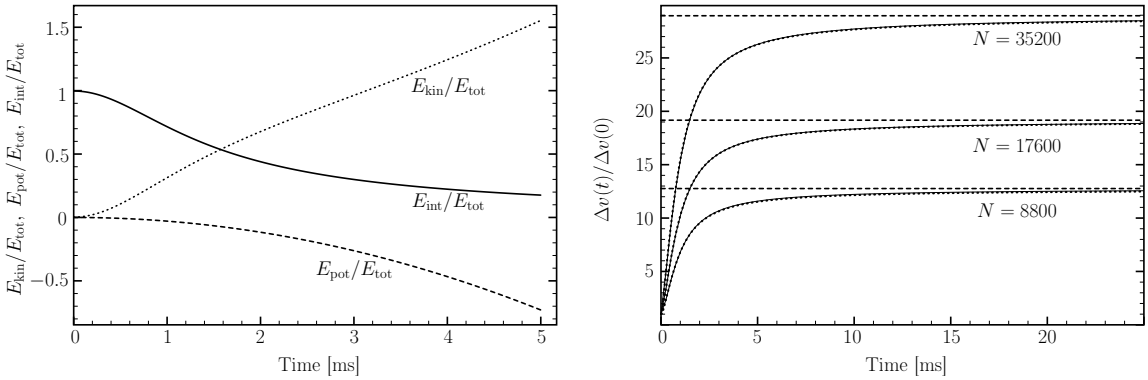


Figure 5.7

(Gauche) Variation temporelle des énergies d'un condensat de Bose-Einstein lors de sa propagation le long d'un potentiel linéaire (ces énergies sont renormalisées par l'énergie totale $E_{tot} = E_{cin}+E_{pot}+E_{int}$). La fonction d'onde initiale est un condensat 1D de rubidium 87 dans le régime de Thomas-Fermi avec $N = 17600$ atomes ($\chi = 100$). On suppose que celui-ci est initialement à l'équilibre dans un potentiel de fréquence angulaire $\omega = 2\pi \times 150$ Hz et que ce piège est éteint brutalement à $t = 0$, de sorte que le gaz soit uniquement soumis ensuite à une force constante. (Droite) Évolution temporelle de la dispersion en vitesse globale renormalisée par rapport à sa valeur initiale, pour un condensat de Bose-Einstein ayant trois valeurs différentes du nombre d'atomes $N = 8800$ ($\chi = 50$), 17600 ($\chi = 100$) et 35200 ($\chi = 200$). En trait plein est représentée la valeur obtenue à l'aide des lois d'échelle, en pointillé celle issue de l'intégration numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii à une dimension. Les asymptotes verticales correspondent à leurs valeurs théoriques (Eq. 5.39) à temps long.

La première conséquence de la valeur finie de χ est la modification de la fonction d'onde par rapport au profil de parabole inversée pour les régions où le potentiel chimique est du même ordre de grandeur que le potentiel harmonique. En effet, il n'est plus possible de négliger le terme lié à l'énergie cinétique en regard de l'énergie d'interaction. Ceci a pour conséquence de faire apparaître des « ailes » exponentielles aux bords de la fonction d'onde [11]. C'est précisément à ce niveau que l'approche en loi d'échelle diverge par rapport à la la dynamique attendue. Nous évaluerons, ci-après, l'impact sur les moments locaux en vitesse.

La méthode de comparaison employée ici consiste à calculer dans un premier temps la fonction d'onde initiale en résolvant numériquement l'équation de Gross-Pitaevskii 1D (4.20), à l'aide d'une propagation en temps imaginaire par une méthode de split-step Fourier (cf. Annexe A). On considère ensuite sa dynamique dans un potentiel linéaire $V(x) = m\gamma x$ de pente $\gamma = 0.6$ m/s^2. Dans ce paragraphe, on suppose que le potentiel de confinement est abruptement éteint initialement. On verra, par la suite, le cas d'une ouverture progressive du potentiel de piégeage.

Au cours de sa propagation, l'énergie d'interaction dominant initialement est convertie en énergie cinétique. On constate sur la Fig. 5.7.Gauche qu'après 5 ms, l'énergie d'interaction du condensat a été réduite de plus de 80 %. En parallèle, on peut calculer la dispersion globale des vitesses en fonction du temps, pour 3 valeurs différentes de N (Fig. 5.7.Droite). On observe pour tous les cas étudiés ici qu'à des temps supérieurs à 5 ms, cette dispersion a atteint 90 % de sa valeur asymptotique. Ainsi, on fera pour la suite l'approximation que l'on est dans un régime quasi-asymptotique à $t = 5$ ms. On remarque le très bon accord entre le calcul basé sur les lois d'échelle (Eq. 5.38) et l'intégration numérique.

Réalisons maintenant une comparaison directe, cette fois-ci, des distributions de Wigner associées à ces fonctions d'onde. Pour ce faire, on se place à $t = 5$ ms et on intègre de façon à obtenir les moments $V_0(x,t)$ et $V_2(x,t)$ (cf. Fig. 5.8) dans le référentiel de centre de masse. On observe, dans le cas où N est grand, un très bon accord entre les moments obtenus par intégration des deux distributions de Wigner, même pour des régions de l'espace se situant autour des bords de la fonction d'onde.

Un dernier test, plus quantitatif, consiste à définir la grandeur :

$$\epsilon(N) = \left| 1 - \frac{\Delta v_2(t = 5 \text{ ms})}{\Delta v_1(t = 5 \text{ ms})} \right|, \tag{5.45}$$

où Δv_1 et Δv_2 sont les dispersions en vitesse globale, respectivement pour la fonction de Wigner obtenue par intégration directe et la fonction de Wigner déterminée par la transformation en loi d'échelle. Cette grandeur ϵ, définit l'erreur relative entre ces deux modes de calcul. Le résultat de ces calculs est résumé dans le tableau 1. On constate que plus le nombre d'atomes est grand, plus l'accord est bon. La description en loi d'échelle est exacte dans le régime de Thomas-Fermi pour $N \to \infty$.

N	176	880	1760	8800	17600	35200
χ	1	5	10	50	100	200
ε	0.278	0.0741	0.0397	0.0132	0.0104	0.009

Tableau 1 : *Valeurs numériques obtenues pour* $\varepsilon(N)$.

En conclusion de cette analyse numérique, on peut retenir que les lois d'échelle sont d'autant plus pertinentes que l'on approche le régime où $\chi(N)$ est grand devant 1. Ce résultat est d'autant plus important que c'est précisément dans ce régime où le temps de calcul lié à l'intégration numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii devient un facteur limitant. Par la suite, on utilisera, dans ce régime, l'approche des lois d'échelle appliquée à la fonction de Wigner dans le but de définir une grandeur nécessaire à la mesure de résonances très fines en énergie.

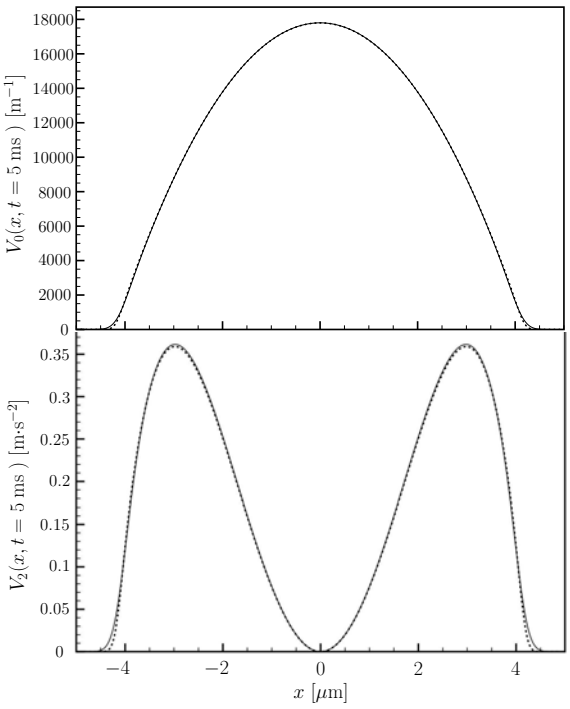


Figure 5.8

Moment en vitesse $V_0(x', t = 5\ ms)$ et $V_2(x', t = 5\ ms)$ pour un condensat de $N = 32500$ atomes, où les positions sont exprimées dans les coordonnées de centre de masse $x' = x - \eta$. Sont représentés, en pointillés, les moments provenant de l'intégration de la fonction de Wigner obtenu à partir des lois d'échelle et, en lignes pleine, ceux provenant de l'intégration numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii à une dimension.

5.5 Application : sonder des résonances inférieures au pico-Kelvin

Nous avons vu dans le cadre du chapitre 2 que l'on peut, avec certains types de potentiels, voir apparaître des résonances dont la largeur en énergie est inférieure (parfois de plusieurs ordres de grandeur) à la dispersion en énergie d'un condensat de Bose-Einstein. Il est donc nécessaire de trouver une nouvelle méthode pour sonder de telles résonances ultra-fines. Puis, on pourra en tester l'efficacité à l'aide d'un système simple faisant intervenir des résonances : la double barrière de potentiel.

5.5.1 Paramètre de monochromaticité locale

Usuellement, lorsque l'on souhaite caractériser la largeur relative en moments d'un condensat de Bose-Einstein ou, plus généralement, d'un gaz d'atomes, on calcule le rapport entre sa variance et sa moyenne en vitesse. De la même manière, l'on peut définir un équivalent local à ce paramètre de monochromaticité en vitesse à une position x donnée :

$$\mathcal{M}_x = \frac{\Delta v_x}{\langle v \rangle_x} = \frac{\sqrt{\int_0^\infty V_3(x,t)\mathrm{d}t - \left(\int_0^\infty V_2(x,t)\mathrm{d}t\right)^2}}{\int_0^\infty V_2(x,t)\mathrm{d}t}. \tag{5.46}$$

En d'autres termes, le paramètre de monochromaticité locale permet d'évaluer la largeur relative en vitesse du nuage de particules arrivant à une position x. Celle-ci peut être réécrite à partir des moments

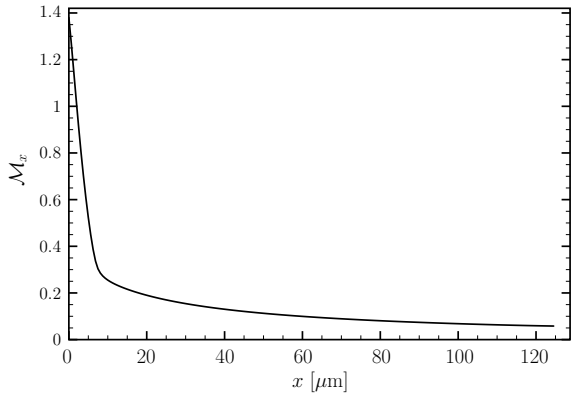


Figure 5.9

*Paramètre de monochromaticité locale (*Eq. *5.46) en fonction de la distance x, calculée pour un gaz de $N = 32500$ atomes en interactions répulsives préparée initialement dans un piège harmonique de fréquence $\omega_0 = 2\pi \times 150$ Hz. La position x est la distance à la position initiale du centre du gaz.*

en vitesse de la fonction de Wigner et donc peut être calculée à l'aide des lois d'échelle. C'est ce qui est effectué à la figure 5.9. On remarque que, plus l'on s'éloigne de la position initiale, plus le paramètre de monochromaticité* décroît, de sorte qu'elle perd un ordre de grandeur en quelques centaines de micromètre. Ceci traduit le fait que, lors de la propagation d'un condensat, celui-ci s'étale de sorte que les atomes le composant sont des vitesses relativement proches à des positions données, loin de leur position initiale. Ainsi, simplement à l'aide d'une expansion libre (qui est d'autant plus importante que les interactions répulsives sont grandes) et d'une accélération, il est possible d'utiliser cette grandeur comme une sonde pertinente pour des résonances ultra-fines.

Le paramètre de monochromaticité locale dépend donc essentiellement de la préparation du gaz, de son nombre d'atomes et de la force des interactions. Plus le paramètre χ va être grand, plus les variances $\Delta v(t)$ et $\Delta x(t)$ augmenteront vite avec le temps. De la sorte, l'extension dans l'espace des phases de la fonction de Wigner, à un temps donné, est d'autant plus grande que χ est grand (cf. Fig. 5.3). Ainsi, comme il y a conservation de la densité dans l'espace des phases, on s'attend à ce que le paramètre de monochromaticité locale décroisse asymptotiquement plus rapidement pour de grandes valeurs de χ. Une autre possibilité permettant de minimiser ce paramètre de monochromaticité serait de relâcher progressivement le nuage.

5.5.2 Gain d'un découplage progressif lors de la diffusion d'un nuage d'atomes sur un potentiel local

Jusqu'à présent nous avons considéré le cas d'un nuage d'atomes initialement dans un potentiel harmonique que l'on éteint en un temps infiniment court. Réaliser un découplage progressif permet de diluer le nuage plus rapidement. En effet, à chaque intervalle de temps, durant cette étape, une partie des atomes peut s'échapper du puits de sorte à ce que, *in fine*, l'extension spatiale globale du gaz soit supérieure au cas d'un découplage instantanée [12]. Dans cette sous-section, on réalise la diffusion de paquets d'onde au travers d'une double barrière répulsive, et on compare les transmissions tunnel associées à : (i) un paquet d'onde ayant une vitesse de groupe donnée en l'absence de potentiel extérieur, (ii) une onde de matière issue d'un découplage progressif, en présence d'une force constante.

∗. À noter que, par définition, plus le paramètre de monochromaticité est petit plus la variance en vitesse locale est petite.

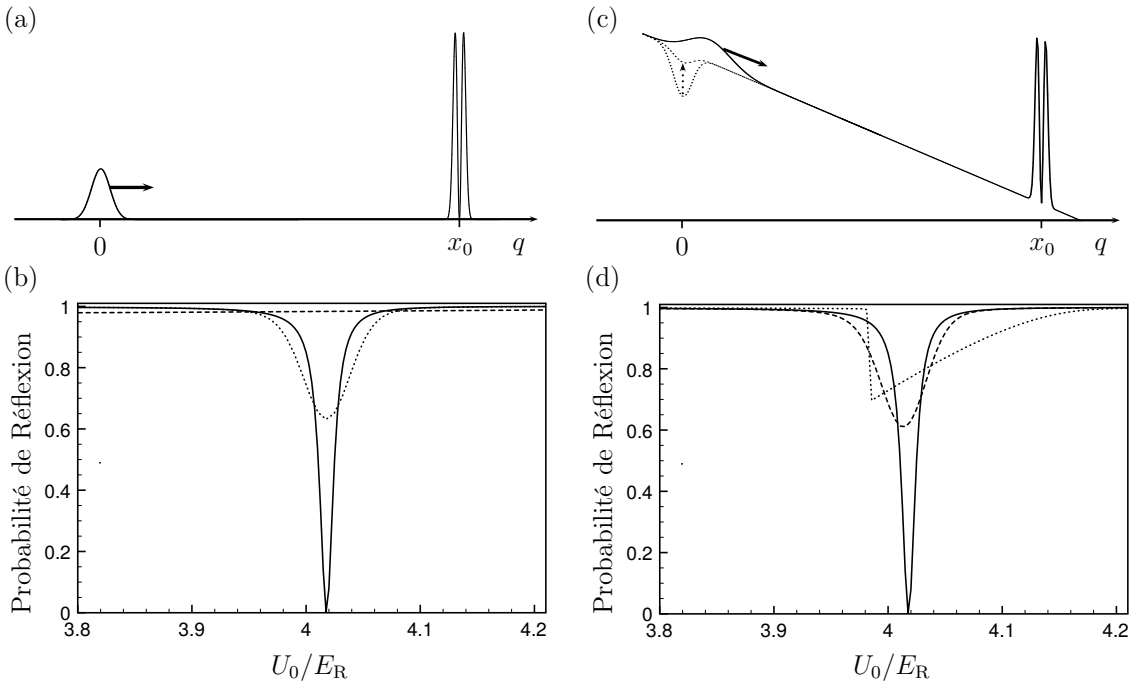


Figure 5.10

(a) Représentation schématique de la propagation d'un paquet d'onde sur le potentiel (5.47) en l'absence de potentiel extérieur. (b) Probabilité de réflexion d'une onde plane (ligne continue), d'un paquet d'onde gaussien de dispersion en vitesse $\Delta v = 20$ μm (ligne en pointillés) et de dispersion $\Delta v = 600$ μm (ligne tiretée). (c) Représentation schématique de la propagation d'une onde de matière issue d'un découplage adiabatique d'un puits de potentiel (lignes pointillées) sur une pente, et diffusant sur le potentiel (5.47). (d) Probabilité de transmission d'une onde plane (ligne continue) d'une onde de matière issue d'un nuage piégé de dispersion initiale $\Delta v = 600$ μ/s relâché durant un temps $\tau = 80$ ms (ligne tiretée) ; d'une onde de matière découplée adiabatiquement à partir d'un condensat de Bose-Einstein de dispersion de l'ordre de 2 mm/s durant un temps $\tau = 100$ ms (ligne en pointillés).

L'objet diffusant que l'on considère ici est une double barrière composée d'une unique période d'un potentiel sinusoïdal se situant à une position $q = x_0$, tel que :

$$U_{DB}(x) = 2U_0 \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi(x - x_0)}{d}\right)\right] H(x - x_0 + d)H(x_0 + d - x), \tag{5.47}$$

où U_0 est la hauteur du potentiel, d le pas du réseau et H la fonction de Heaviside (définie par $H(x < 0) = 0$ et $H(x \geq 0) = 1$). Ce potentiel, qui est une cavité Fabry-Perot pour onde de matière de largeur d, est représenté schématiquement sur les figures 5.10.a et 5.10.c. Par la suite, on choisira les paramètres numériques suivant : $x_0 = 201$ μm et $d = 0.48\mu$m, soit : $v_R = h/(md) = 9.565$ μm. Ce potentiel présente plusieurs résonances et nous en étudierons une en particulier, se situant à une énergie $E_0 = mv_0^2/2$ avec $v_0 = 1.62v_R = 15.53$ mm/s, pour une barrière dont la hauteur est $16.08E_R = 6.13E_0$. La largeur de cette résonance est 1000 fois plus petite que E_0 soit, en unités de température, égale à 0.36 pK, ou encore à une dispersion de vitesse de 8.3 μm/s. À titre de comparaison, il est possible d'atteindre avec un condensat de Bose-Einstein de rubidium une dispersion de l'ordre du mm/s (à noter qu'il est toutefois possible d'améliorer cette dispersion par des techniques de delta-kicked cooling [1, 2]).

De manière à estimer la probabilité de transmission au travers de ce potentiel, en fonction de la hauteur du potentiel, on peut réaliser la diffusion d'ondes planes de vecteur d'onde $k_0 = mv_0/\hbar$ fixé (cf.

Annexe A). Le résultat obtenu est représenté par la ligne continue du graphique 5.10.b, et on observe que cette vitesse coïncide avec une résonance lorsque $U_0 = 4.02E_\mathrm{R}$. La variance en termes de profondeur de cette résonance peut être obtenue à l'aide d'un fit et est de $\Delta U_0 \simeq 0.008E_\mathrm{R}$. Cela signifie que pour réaliser expérimentalement une telle double barrière à l'aide d'un système optique, il est nécessaire de pouvoir stabiliser l'intensité des lasers à mieux de 1 pour mille, et non pas de plus que la largeur de la résonance qui est de : $E_\mathrm{R}/1000$. Ceci a pour conséquence de faciliter la détection de cette résonance.

Plaçons-nous maintenant dans le cas de la diffusion d'un paquet d'onde sur ce potentiel en l'absence d'interaction. La figure 5.10.b représente le résultat obtenu numériquement pour un paquet d'onde d'une largeur $\Delta v = 20$ μm (ligne en pointillés). On observe que la largeur et le contraste de la résonance sont inférieurs à ceux obtenus dans le cas de l'onde plane car, à résonance, 38% des atomes sont transmis (on rappelle que l'ordre de grandeur typique de la dispersion d'un condensat de Bose-Einstein est 100 fois plus grande). Plus encore, lorsque la dispersion excède 200 μm (ligne tiretée) la résonance devient impossible à résoudre par transmission.

Considérons maintenant le cas d'un paquet d'onde initialement piégé dans un potentiel harmonique, puis relâché dans un potentiel linéaire. Celui-ci subit une accélération due à la pente γ et le potentiel ressenti par les atomes s'écrit :

$$U(x,t) = m\gamma(x - x_0) - U_0 e^{-t/\tau} \exp\left(\frac{-2x^2}{w_0^2}\right) + U_{DB}(x), \tag{5.48}$$

où w_0 est la largeur à mi-hauteur du piège. La position initiale $x = 0$ est choisie de sorte que sa vitesse moyenne soit égale à v_0 lorsqu'il arrive à la position $q = x_0$, c'est-à-dire $\gamma = v_0^2/(2d) = 0.6$ m/s^2, qui correspond à l'énergie de la résonance que l'on étudie. Le temps de fermeture du piège τ (qui tend vers 0 dans le cas de la fermeture instantanée discuté plus haut), est désormais un paramètre. Nous avons démontré plus haut que l'utilisation des corrélations moment-position qui apparaissent durant la propagation permet de réduire considérablement la dispersion en vitesse locale. L'ouverture progressive du piège permet de bénéficier de ces corrélations car, classiquement, les atomes qui ont la probabilité la plus grande de sortir sont ceux qui ont la plus grande énergie cinétique [*]. Ainsi, grâce à cette ouverture lente on dispose d'un nuage d'atomes ayant une dispersion en vitesse locale très petite après propagation.

Afin d'illustrer cette idée, on réalise à la figure 5.10.d la propagation d'une onde de matière en l'absence d'interaction, issue d'un découplage progressif en un temps $\tau = 80$ ms, avec initialement une dispersion de 600 μm/s. On observe ici plus de 40 % de réflexion lorsque l'on fait varier la hauteur du potentiel, ce qui est comparable au cas précédent en l'absence de pente, mais avec une dispersion qui était elle 30 fois plus petite. Ceci démontre que les corrélations améliorent nettement le contraste.

Maintenant, voyons ce qu'il en est dans le cas réaliste d'un condensat de Bose-Einstein en interaction atome-atome répulsive, de dispersion initiale $\Delta v = 2$ mm/s. La figure 5.10.d (ligne en pointillés) représente la transmission obtenue après un découplage de temps $\tau = 100$ ms. On observe un contraste de 30% comparable à celui obtenu dans cas précédent. La conversion de l'énergie d'interaction en énergie cinétique tend à diminuer la dispersion en vitesse locale (cf. paragraphe précédent), qui est d'autant plus petite à la position $q = x_0$ que τ est grand. À titre de comparaison, un découplage instantané conduit à un contraste de 10 % sur la transmission (qui, en l'absence d'interaction, correspond à un paquet d'onde de dispersion égale à 50 μm/s, soit 40 fois plus petite que celle d'un condensat). On remarque que la forme de la transmission en fonction de la hauteur du potentiel est différente de celle obtenue dans le cas sans interaction. Ceci provient de la forme du profil de Thomas-Fermi et, plus particulièrement, des ailes brusquement décroissantes au bords de la densité, ce qui change la conversion des corrélations position-vitesse durant la propagation.

∗. C'est d'ailleurs cette stratégie qui est mise à l'œuvre dans la création d'ondes de matière guidées.

5.6 Conclusion

Nous avons montré que grâce aux interactions répulsives d'un gaz d'atomes sur une pente, il est possible de diminuer la dispersion en vitesse locale. Une analyse du système basée sur une loi d'échelle, a rendu possible le calcul analytique de la dynamique de sa fonction de Wigner dans différents régimes d'interactions inter-atomiques. À partir de cette distribution de Wigner il a été possible de définir une distribution en vitesse locale, dont la dispersion décroît avec la position à laquelle on réalise la mesure contrairement à son homologue global. Une étude numérique a permis de déterminer le domaine de validité du modèle, et a montré que celui-ci se situe dans des régimes accessibles par des expériences d'atomes froids actuelles. Ainsi, on a pu démontrer dans le cadre de ce formalisme, la possibilité de sonder des résonances inférieures au pico-Kelvin, par l'intermédiaire d'un condensat de Bose-Einstein en régime d'interactions fortes découplé initialement de son piège.

Cette étude peut être directement étendue à des systèmes de dimensions supérieures à un, ainsi qu'à la diffusion sur d'autres types de potentiels comportant des résonances [3]. Dans l'article [13], l'auteur propose de réaliser un effet de blocage atomique dans le cadre d'une cavité de Fabry-Perot. Le principe est de piéger un atome unique entre une double barrière ayant très peu de résonance qui se situe à des énergies différentes si l'atome est présent dans la cavité ou non. En pratique, il est difficile de sonder avec un gaz d'atomes de telles résonances de par leur finesse en énergie. En revanche, l'utilisation des corrélations position-vitesse permettrait, à l'aide de la transmission d'un gaz d'atome lors de sa diffusion sur ce complexe atome-cavité, de conclure quant à la présence de l'atome.

Bibliographie

[1] H. Ammann et N. Christensen, *Phys. Rev. Lett.* **78** 2088 (1997).

[2] G. Condon, A. Fortun, J. Billy et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. A* **90** 063616 (2014).

[3] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, W. Guérin, A. Aspect et P. Bouyer, *Ann. Phys.* **32** 17 (2007).

[4] J. G. Muga, J. P. Palao et R. Sala, *Phys. Lett. A* **238** 90 (1998).

[5] E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **40** 749 (1932).

[6] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully et E. P. Wigner, *Phy. Rep.* **106** 121 (1984).

[7] F. Damon, F. Vermersch, J. Gonzalo Muga et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. A* **89** 05362 (2014).

[8] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë. *Mécanique quantique*. (Collection Enseignement des Sciences, Hermann, Paris, 1973).

[9] P. Öhberg et L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* **89** 240402 (2002).

[10] J. Liouville, *Journ. de Math.* **3** 349 (1838).

[11] F. Dalfovo, L. Pitaevskii et S. Stringari, *Phys. Rev. A* **54** 4213 (1996).

[12] F. Vermersch, C. M. Fabre, P. Cheiney, G. L. Gattobigio, R. Mathevet et D. Guéry-Odelin, *Phys. Rev. A* **84**, 043618 (2011).

[13] I. Carusotto, *Phys. Rev. A* **63** 023610 (2001).

6 Conclusion Générale

« *L'avenir, c'est du passé en préparation.* »

P. Dac

Dans ce manuscrit, j'ai développé les travaux que nous avons réalisés durant ma thèse concernant l'étude de l'interaction de condensats de Bose-Einstein avec des potentiels façonnés. Plusieurs thématiques se sont dégagées durant ces recherches. La première consistait à utiliser un réseau dont la profondeur dépend de la position, comme objet générant des barrières tunnels modulables pour les atomes. Le formalisme qui a été utilisé est l'extension de la théorie des bandes aux ondes évanescentes, ce qui a permis dans ce cas de définir un nouveau type de barrière tunnel. Dans les expériences, l'enveloppe du réseau optique provient du croisement de deux faisceaux lasers gaussiens. Ce réseau peut être vu comme une cavité de type Fabry-Perot pour des atomes initialement au centre de celle-ci. Les résonances de cette cavité peuvent être calculées à l'aide d'un modèle semi-classique qui a révélé que la finesse de la cavité dépend fortement de l'énergie.

Cette étude théorique a été mise en regard avec les expériences menées par le groupe atomes froids du laboratoire collisions agrégats et réactivité en 2013. Un condensat de Bose-Einstein, préalablement mis en mouvement, a été initialement chargé adiabatiquement au centre d'un réseau optique, de manière à ce que celui-ci soit, en même temps, dans plusieurs cavités de propriétés différentes. Les barrières tunnels créées par l'enveloppe ont permis l'observation d'oscillations de la densité ainsi que de l'émission de plusieurs paquets d'atomes. Une étude plus détaillée de ces paquets a montré qu'ils proviennent d'une première réflexion sur un des bords de la cavité, avant d'être transmis au travers de l'autre bord. Cette réflexion a pour effet de re-focaliser le nuage d'atomes durant sa propagation. Ce type d'effet lentille pourrait être utilisé pour créer une source d'atomes cohérente et focalisée. Un nouveau design de la forme de l'enveloppe pourrait également être mis en place expérimentalement, de manière à synchroniser les oscillations de toutes les classes de vitesse à l'intérieur de la cavité, le but étant de réaliser l'équivalent atomique d'un laser pulsé *mode-locked*. Les études théoriques que j'ai menées ont aussi porté sur la possibilité de réaliser des cavités à l'aide d'un réseau optique à deux dimensions. La topologie des cavités, créées par le réseau, est alors proche de celle de billards dont le dynamique pourrait présenter un caractère non-ergodique et chaotique. Enfin, l'ajout d'une modulation temporelle (périodique) de l'enveloppe du réseau permet de réaliser des transitions résonantes d'une bande à une autre. Utiliser ce degré de liberté, dans le cas d'un potentiel périodique avec une enveloppe, permet de réaliser des transitions locales. J'ai pu montrer qu'un choix judicieux de la fréquence de modulation permet de déplacer une partie de la densité dans des cavités latérales et/ou centrales. Lorsque la fréquence permet de faire une transition entre un état résonnant et un état lié, la cavité créée par cet état lié n'a aucune perte car la probabilité de transmission est, par définition, nulle. Piéger des atomes dans ce type de cavité, pourrait permettre la réalisation de réseaux de cavités dont la transmission tunnel est assistée par la modulation.

Dans la continuité de ces travaux, nous avons fait une étude spectroscopique d'un potentiel quasi-périodique à une dimension. Composé de deux fréquences spatiales, il a été démontré que ce système, dans le régime des liaisons fortes, a le même spectre d'énergie que le papillon d'Hofstadter. Celui-ci peut s'observer dans un système d'un électron plongé dans un réseau cristallin bidimensionnel, soumis à un fort champ magnétique uniforme et perpendiculaire au plan du réseau. Les propriétés de ce spectre sont nombreuses, mais la plus fascinante est, sans doute, sa fractalité. Une mise à l'échelle de cette

distribution d'énergie nous a permis d'établir une mesure précise de sa dimension fractale. De nombreux travaux expérimentaux ont vu le jour récemment dans le but de simuler ce système, sans pour autant être parvenus à mesurer directement cette dimension. Dans le cadre d'atomes froids dans un réseau bichromatique, le diagramme de bande se découpe en une infinité de bandes lorsque les fréquences deviennent incommensurables. Un de nos objectif est de réaliser une expérience rendant compte de cette complexité et permettant de faire une spectroscopie avec une grande résolution en énergie. Les travaux menés jusqu'à présent ont permis d'éliminer quelques pistes et d'autres sont encore à l'étude.

Une deuxième partie de cette thèse a été consacrée au rôle des interactions inter-atomiques dans un expérience de diffusion sur un potentiel local. Lorsque l'on considère un condensat de Bose-Einstein, on peut faire l'approximation que tout le nuage atomique est régi par une seule et unique fonction d'onde à N corps. À température nulle, les interactions peuvent être décrites par un seul terme de champ moyen dans l'équation de la dynamique du nuage d'atomes, dite de Gross-Pitaevskii. Nous avons vu que cette équation différentielle non-linéaire admet une solution particulière (en l'absence de potentiel extérieur) dans le cas où les interactions sont attractives : le soliton. Cette solution d'équilibre est aujourd'hui observée dans des expériences d'atomes froids, par plusieurs groupes et avec différents types d'atome. Nous avons démontré qu'il est possible d'exploiter l'énergie d'interaction de ce soliton, lors d'une diffusion sur un potentiel local, afin d'en sonder les états stationnaires et résonnants. Une étude numérique a mis en évidence qu'au passage du soliton, une partie de ses atomes est déposée dans le puits, puis y reste piégée. Une étude systématique dans l'espace des paramètres a conduit à l'observation numérique d'états de surface localisés à l'interface entre un potentiel périodique et l'espace libre.

Enfin, nous avons développé un formalisme permettant d'exploiter les interactions répulsives d'un gaz d'atomes monodimensionnel, lors de son expansion dans un champ de force constant, dans le but de sonder des résonances très fines en énergie. L'étude est basée sur l'emploi de grandeurs dynamiques locales qui, contrairement à leurs homologues globales, décroissent au cours de la dynamique. Celles-ci peuvent être calculées à partir des moments en vitesse de la distribution de Wigner du nuage. Nous avons pu valider l'application d'une loi d'échelle sur cette distribution, pour le cas d'un gaz d'atomes non interagissants et d'un gaz réel, en la comparant directement à l'intégration numérique de l'équation de Schrödinger (resp. Gross-Pitaevskii) dépendante du temps. Une application directe de ce formalisme concerne le découplage progressif d'un gaz initialement piégé. Nous avons montré, lors de sa diffusion sur un potentiel local ayant une résonance en énergie, que la pente du potentiel joue un rôle crucial sur le contraste de cette résonance au travers du coefficient en transmission. L'exploitation des corrélations position-vitesse mises en jeu lors de la propagation du gaz induit une nette décroissance de la dispersion en vitesse locale. Ce type de méthode expérimentale pourrait être utilisée de manière à sonder des résonances en énergie de largeur inférieure au pico-Kelvin.

A Méthodes numériques

« *I have questions to all your answers.* »

W. Allen

Sommaire

A.1 Introduction **165**
A.2 Propagation d'une fonction d'onde dans le temps **165**
A.2.1 Algorithme du *Split-Step Fourier* 165
A.2.2 Domaine de validité du programme 167
A.2.3 Conditions aux limites 171
A.2.4 Résolution de la dynamique de l'équation de Schrödinger non-linéaire 173
A.3 Diffusion d'une onde plane **174**
A.3.1 Principe de la méthode 175
A.3.2 Comparaison avec quelques solutions analytiques 176

A.1 Introduction

Nous présentons dans ce chapitre quelques-uns des programmes qui ont été développés durant cette thèse. On peut grouper ces programmes en deux thématiques. La première concerne la résolution de l'équation de Schrödinger (linéaire et non-linéaire) dépendant du temps. La méthode présentée ici repose sur une décomposition d'un hamiltonien général que l'on détaillera. Une deuxième partie concerne un résolution itérative de l'équation de Schrödinger stationnaire.

A.2 Propagation d'une fonction d'onde dans le temps

Notre but est de simuler des gaz d'atomes ultra-froids dans des réseaux optiques et dans de larges régimes d'interaction inter-atomique, l'objectif étant de pouvoir réaliser ensuite des comparaisons directes avec les expériences menées au sein de l'équipe atomes froids du laboratoire collisions agrégats et réactivité. L'algorithme présenté ici permet de propager une fonction d'onde dans un potentiel général à une dimension.

A.2.1 Algorithme du *Split-Step Fourier*

Deux étapes seront nécessaires à la réalisation d'une simulation, à savoir : la définition d'une fonction d'onde initiale $\Psi(x,t_0) = \langle x|\psi(t_0)\rangle$, suivie d'un calcul de la fonction d'onde à un instant t en résolvant la dynamique de l'équation de Schrödinger linéaire et non linéaire, l'objectif étant toujours d'avoir une grande précision numérique à moindre coût. Dans ce cadre, le choix d'une méthode split-step Fourier s'est fait naturellement. En effet, c'est une méthode d'ordre 3 mettant en jeu des transformées de Fourier rapides (*Fast Fourier Tranform*) qui ont une complexité algorithmique seulement en $N \log N$ (pour un vecteur de taille N).

- **Utilisation du *split operator***

On définit un hamiltonien sous sa forme standard : $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$, tel que :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V} \right) \Psi(x,t). \tag{A.1}$$

L'intégration directe de l'équation conduit à la relation* :

$$\Psi(x,t) = U(t,t_0)\Psi(x,t_0) = \mathrm{e}^{-i(t-t_0)\hat{H}} \Psi(x,t_0). \tag{A.2}$$

Dans ce sens, si l'on considère une propagation de pas de temps Δt, cette dernière équation nous fournit l'information sur la fonction d'onde au temps $t + \Delta t$ à partir de la fonction d'onde au temps t, soit :

$$\Psi(x, t+\Delta t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(t+\Delta t-t)\hat{H}} \Psi(x,t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t\left(\frac{\hat{P}^2}{2m}+\hat{V}\right)} \Psi(x,t). \tag{A.3}$$

D'après le *théorème de Baker-Campbell-Hausdorff* et puisque : $[\hat{P}^2, \hat{V}] = 0$, on obtient la forme symétrique du *split operator* à l'ordre 3 à partir de l'équation (A.3) :

$$\Psi(x, t+\Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}\hat{T}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t \hat{V}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}\hat{T}\right) \Psi(x,t) + \mathcal{O}(\Delta t^3), \tag{A.4}$$

où le terme d'ordre 3 est donné par : $\mathcal{O}(\Delta t^3) = \frac{1}{24}\left[\hat{T} + 2\hat{V}, [\hat{T}, \hat{V}]\right] \Delta t^3$. Par la suite, on montrera qu'à cet ordre, l'algorithme produit des résultats dont la précision est satisfaisante pour des temps de calcul raisonnables. Il est néanmoins possible de développer à un ordre plus élevé de sorte à obtenir [1] :

$$\begin{aligned}
\Psi(x, t+\Delta t) = {} & \exp\left(-\gamma\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}\hat{T}\right) \exp\left(-\gamma\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{V}\right) \exp\left(-(1-\gamma)\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}\hat{T}\right) \\
& \times \exp\left(-(1-2\gamma)\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{V}\right) \exp\left(-(1-\gamma)\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}\hat{T}\right) \\
& \times \exp\left(-\gamma\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{V}\right) \exp\left(-\gamma\frac{i}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}\hat{T}\right) \Psi(x,t) + \mathcal{O}(\Delta t^5),
\end{aligned}$$

où $\gamma = 1/(2 - 2^{1/3})$ est une constante (solution d'un polynôme d'ordre 3).

Cet algorithme présente de nombreux avantages :

- l'opérateur de propagation étant unitaire, la conservation de la norme est immédiate,
- on peut considérer le cas d'un potentiel dépendant du temps $V_0(x,t)$ en redéfinissant le potentiel à chaque itération. En effet, même si l'équation (A.2) a été obtenue par l'intégration d'un hamiltonien stationnaire, la discrétisation en temps justifie le fait que l'on propage la fonction d'onde soumise à un potentiel non statique,
- il est possible de considérer le cas où le potentiel n'est pas linéaire. En effet, jusqu'à présent aucune hypothèse n'a été faite quant à la définition de $\hat{V}$.

Cette méthode garantit donc une robustesse de la norme qui est un avantage à comparer avec des schémas basés sur des différences finies comme l'algorithme de Crank-Nicholson. Il existe d'autre méthodes spectrales comme celle basée sur la décomposition de la fonction d'onde dans la base des polynômes de Tchebychev ou de Legendre, par exemple.

- **Algorithme**

Dans un premier temps, il faut définir la fonction d'onde à l'instant initial. Dans une première partie, en l'absence d'interaction, on considère un paquet d'ondes qui est la fonction propre du fondamental de

∗. A condition que l'hamiltonien soit indépendant du temps.

l'oscillateur harmonique à une dimension, que l'on multiplie par un terme de phase $\exp(ik_0x)$ qui contient l'information de l'impulsion initiale $p_0 = \hbar k_0$. Le schéma itératif entre deux pas de temps consécutifs se base sur une triple propagation de la fonction d'onde numérique Ψ : d'abord dans l'espace des k, puis dans l'espace des x et enfin, une dernière fois, dans l'espace des k (cf. Fig A.1). Ce calcul s'accompagne donc de transformations de Fourier discrètes. Le choix de la fonction d'onde, initiale ne nécessite pas de condition sur ses dérivées (comme cela peut être le cas pour certaines méthode de différences finies).

La première propagation libre dans l'espace des k, se fait à partir de l'ajout d'une phase dynamique à la fonction d'onde après une première transformation de Fourier.

$$\tilde{\Psi}^{(1)}(k, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i\hbar\Delta t}{4m}\Delta k^2\right)\tilde{\Psi}(k, t), \tag{A.5}$$

où $\Delta k = 2\pi/L$ est le pas minimal de la transformation de Fourier discrète (cf. plus bas). On note $\tilde{\Psi}$ la transformée de Fourier de la fonction d'onde Ψ. Ensuite, après une transformée inverse, on ajoute une phase liée à la propagation dans un potentiel :

$$\Psi^{(2)}(x, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i\Delta t}{\hbar}V(x)\right)\Psi^{(1)}(x, t + \Delta t). \tag{A.6}$$

Enfin, après une dernière transformée de Fourier, on propage la fonction d'onde dans l'espace des k de sorte que :

$$\tilde{\Psi}^{(3)}(k, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i\hbar\Delta t}{4m}\Delta k^2\right)\tilde{\Psi}^{(2)}(k, t + \Delta t). \tag{A.7}$$

Cet algorithme présente une itération dans le temps et a besoin de l'utilisation d'une FFT à chaque itération. Ainsi plusieurs discrétisations sont à définir. On verra par la suite comment doivent être définis ces pas de discrétisation.

A.2.2 Domaine de validité du programme

Le choix du nombre de points pour discrétiser l'espace et le temps est déterminé par le problème que l'on cherche à résoudre. Le critère essentiel, en ce qui concerne l'espace, est de bien définir à la fois le potentiel et la fonction d'onde initiale. Dans le cas du temps, la condition doit être déterminée en regard des domaines énergétiques à explorer durant la propagation.

- **Repliement du spectre**

La méthode de résolution de la dynamique de l'équation de Schrödinger présentée ici se fait à la fois dans l'espace réel et dans l'espace réciproque. La fonction $\tilde{\Psi}(k, t)$, calculée numériquement à partir d'une transformation de Fourier Rapide (FFT), est définie sur un intervalle allant de 0 jusqu'à $k_s = 2\pi/\delta x$ (où $\delta x = L/(n_x - 1)$ est le pas de discrétisation de la boîte dans laquelle se déroule le calcul). Cette fréquence est appelée fréquence de coupure et doit être supérieure à toutes les fréquences entrant en jeu dans la dynamique. L'utilisation d'une FFT induit un *repliement de l'espace* de Fourier autrement dit : $\tilde{\Psi}(k + Nk_s, t) = \tilde{\Psi}(k, t)$, pour tout $N \in \mathbb{N}$. Enfin, la taille finie de la boîte implique une fréquence spatiale minimale dans le spectre de $2\pi/L$. À chaque simulation, on fait donc implicitement l'hypothèse qu'aucune excitation dont la largeur est inférieure à celle-ci participe à la dynamique. Qui plus est, il faut toujours veiller à ce que cette fréquence soit suffisante pour échantillonner la fonction d'onde dans l'espace de Fourier.

En pratique, on peut donc *a priori* s'affranchir de ce problème en considérant une discrétisation telle que le pas spatial dx soit supérieur à la distance typique de variation du potentiel $V(x)$ et de la fonction d'onde initiale $\Psi(x, 0)$. Ce raisonnement est correct mais à condition de considérer un état stationnaire. Or, on cherche ici à réaliser la dynamique d'un paquet d'ondes, il faut donc prendre en compte le moment k_0 du paquet (voire $k_0(t)$ si celui-ci est accéléré durant sa propagation). Ainsi un

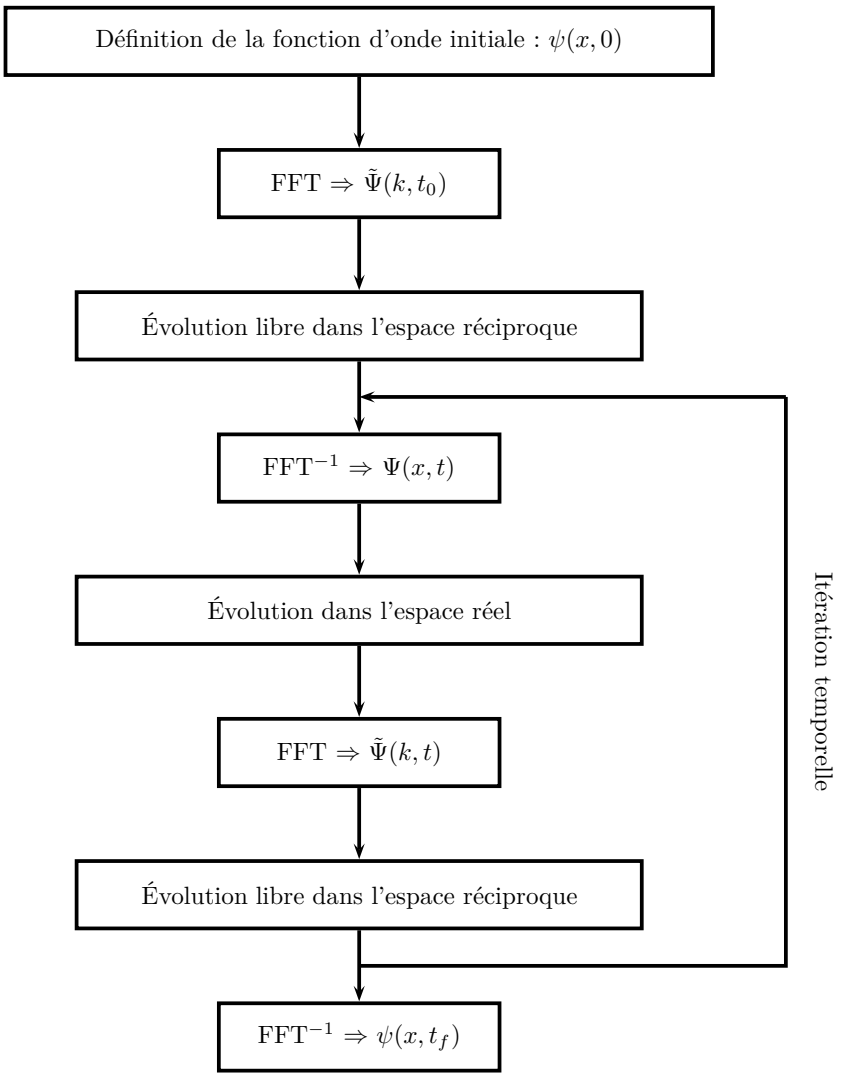


Figure A.1

Schéma de l'algorithme Split Fourier.

dernier *critère dynamique de discrétisation* de l'espace est : $k_0(t) < k_s, \forall t$. Si ce critère n'est pas satisfait alors le paquet d'ondes se retrouve « transporté »à une position opposée par rapport au centre de la boîte (cf. section concernant les conditions aux limites).

- **Résolution temporelle**

En ce qui concerne le temps, le choix est un peu plus subtil. Un article [2] montre en utilisant un raisonnement qualitatif basé sur des considérations spectrales que le pas de temps doit être tel que :

$$\Delta t < \frac{\pi\hbar}{3\Delta V}, \tag{A.8}$$

où ΔV est la hauteur (profondeur) maximale que prend le potentiel $V(x,t)$ durant la durée de la propagation. Ainsi, on doit choisir un nombre de points en temps en fonction de ce critère. Ce critère doit être étendu lorsque l'on considère le cas où le potentiel a une partie dépendant du temps et/ou dépendant de la fonction d'onde (comme c'est le cas dans le cas de l'équation de Schrödinger non linéaire). Aucun critère n'est connu à ce jour pour définir une limite supérieure pour le pas de temps dans ce cas. En pratique, il est nécessaire de prendre un pas de temps plusieurs ordres de grandeur en dessous de cette limite.

À noter que si l'on considère la propagation libre d'un paquet d'ondes *i.e.* $\Delta V = 0$, alors le pas de temps peut être pris arbitrairement grand : la dynamique peut se calculer en une seule récursion de l'algorithme. On est dans un cas analytique pouvant servir à tester la validité du programme.

- **Tests**

Un des premiers tests que l'on peut effectuer est donc celui de l'étalement d'un paquet d'ondes. L'étude dynamique se réalise dans un cas très simple qui est la dynamique d'un paquet d'ondes gaussien, état fondamental d'un oscillateur harmonique défini par la relation :

$$\Psi(x,0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-x_0)^2\right) \mathrm{e}^{-ik_0 x}. \tag{A.9}$$

L'évolution temporelle de cette fonction d'onde peut se résoudre analytiquement [3]. On pose $\sigma^2 = 4\hbar/m\omega$:

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{4}{\pi\sigma^2}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{\mathrm{e}^{i\phi}}{\left(\frac{4}{\sigma^4} + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{1/4}} \mathrm{e}^{ik_0 x} \exp\left\{-\frac{\left[x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right]^2}{\frac{2}{\sigma^2} + \frac{2i\hbar t}{m}}\right\}, \tag{A.10}$$

et on note : $\phi = -\theta - \frac{\hbar^2 k_0^2 t}{2m}$ avec $\tan 2\theta = \frac{\hbar\sigma t}{m}$. Soit, la densité de probabilité suivante :

$$|\Psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}} \exp\left(-\frac{2a^2\left(x - x_0 - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}}\right) \tag{A.11}$$

où : $a = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} = \sigma/\sqrt{2}$. Il est donc aisé d'implémenter cette relation afin de réaliser plusieurs comparaisons avec la fonction d'onde calculée à l'aide de la méthode split-step Fourier (Fig. A.2.a). Dans le but d'effectuer une comparaison quantitative, on calcule la fidélité suivante :

$$F = \sum_{n=1}^{N} |\langle\psi_{num}(t)|x_n\rangle\langle x_n|\psi_{théo}(t)\rangle| \tag{A.12}$$

On choisit ici des paramètres dont les ordres de grandeur sont typiques de ceux que l'on rencontre dans le domaines des gaz d'atome ultra-froids : $\Delta v = 2$ mm/s, $v = 10$ mm/s, $n_x = 2^{16}$ et $n_t = 16300$. Le calcul mené à $t = 80$ ms, donne une valeur de $F = 99.86$, ce qui est tout à fait satisfaisant. Calculer la fidélité, compte tenu de sa définition, présente l'avantage de prendre en compte la différence de phases.

On vérifie, en parallèle, la conservation de la norme. Le *split operator* étant composé de produits d'exponentielles complexes, il en découle la conservation théorique de la norme. On peut vérifier la non-variation de cette norme à chaque itération temporelle (Fig. A.2.b). Une étude fine montre une décroissance linéaire de cette norme au cours du temps que l'on peut interpréter comme le signe d'une « perte »numérique. L'ordre de grandeur de cette non-conservation étant inférieur à 10^{-12}, elle pourra être négligée. Dans un deuxième temps, vérifions que l'on ait bien un étalement du paquet d'ondes et que celui-ci soit bien en accord avec la théorie. Pour ce faire, on représente l'évolution temporelle suivant l'axe des abscisses et l'espace en ordonnée. Il y a une très bonne adéquation entre les données numériques et théoriques dans ce cas simple. Ceci conclut un premier test de l'algorithme.

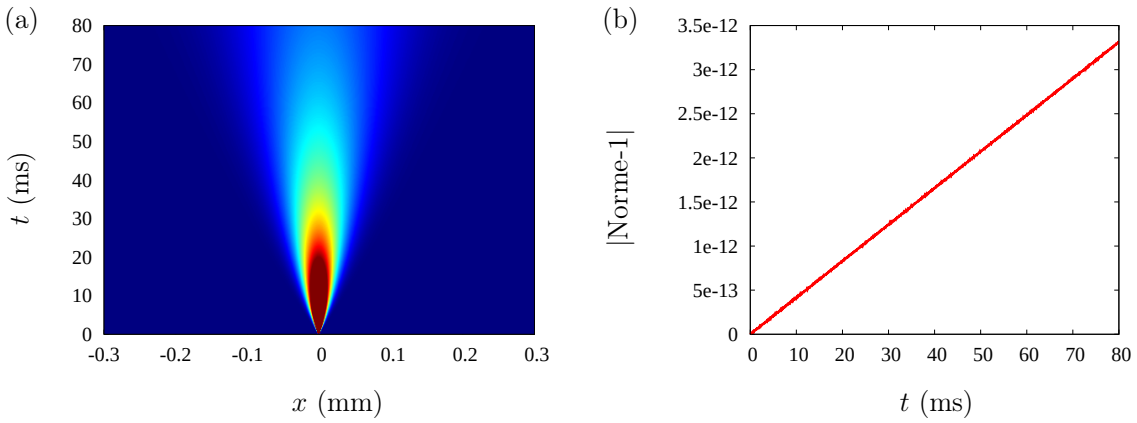


Figure A.2

(a) Étalement du paquet d'ondes gaussien $\Psi_0(x,t)$ dans l'espace libre, de dispersion en vitesse $\Delta v = 2$ mm/s et de vitesse moyenne nulle. (b) Calcul de la norme de la fonction d'onde en fonction du temps. Le graphique représente l'écart à sa valeur théorique de 1. Une interpolation linéaire de la pente de la droite nous indique que la perte numérique est de 4.1×10^{-14} à chaque étape de temps, sachant que l'incertitude numérique, qui est la norme à $t = 0$, est de 2×10^{-15}.

- **Calcul des écarts à la théorie**

J'ai pu constater que l'erreur est constante si l'on augmente d'un même facteur à la fois le temps de propagation T et le nombre de points en temps n_t, ou la largeur de la boîte L et le nombre de points en espace n_x ($L = 1$ mm et $T = 300$ ms). Ces calculs d'erreur ont été effectués dans le cas de la propagation d'une superposition d'états dans un oscillateur harmonique (cf. sous-section A.2.2). On choisit ce système physique car, contrairement au cas d'un réseau de profondeur finie, le potentiel ne pose pas de contrainte (Eq. A.8) vis-à-vis du Δt. L'espace est découpé en $n_x = 2^n - 1$ intervalles, du fait de la subroutine réalisant la FFT, qui n'accepte que des vecteurs ayant une puissance de 2 comme nombre de lignes.

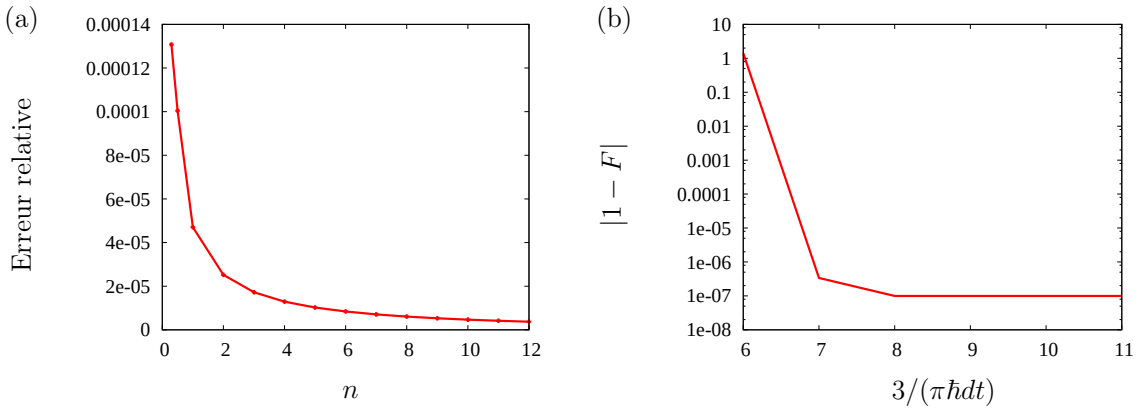


Figure A.3

(a) Variation de l'erreur en fonction de Δx, Dans le cas où : $n_t = 2000$, $L = 0.5$ mm et $T = 40$ ms. (b) Convergence de la fidélité pour des valeurs décroissantes de Δt. La valeur 1 correspond, dans ce système d'unité, à $\Delta t = 3.07 \times 10^{-2}$ ms. Ici $\Delta x = 6.10 \times 10^{-6}$ mm.

Les données récoltées (Fig. A.3.a) nous informent que, logiquement, l'erreur absolue :

$$\epsilon = \sum_{n=1}^{N} |\Psi_{num}(x,t) - \Psi_{théo}(x,t)|^2 \delta x,$$

moyennée sur tout l'espace et le temps, est décroissante avec Δx. Qui plus est, on observe que pour $n > 9$, malgré une diminution d'un facteur 2 du pas Δx, l'erreur reste la même à 10^{-14} près (Fig. A.3).

- **Temps de calcul**

Lorsque l'on effectue des calculs numériques, un des critères *in fine* qui induit le choix des paramètres de discrétisation, n'est pas l'erreur que l'on souhaite avoir, car celle-ci peut être aussi petite que l'on veut, mais le temps de calcul. Celui-ci croît avec le nombre de points que l'on a défini lors de la discrétisation. On réalise le récapitulatif de ces temps (Fig. A.4). Afin d'être d'une utilité pratique, ces calculs ont été réalisés par un ordinateur de bureau.

	$U_0/E_R = 1$	$U_0/E_R = 2$	$U_0/E_R = 3$	$U_0/E_R = 4$	$U_0/E_R = 5$	$U_0/E_R = 6$
2^8	3”	5”	6”	8”	9”	12”
2^9	6”	8”	12”	16”	18”	23”
2^{10}	7”	15”	22”	30”	35”	42”
2^{11}	17”	30”	45”	1’00”	1’16”	1’27”
2^{12}	30”	1’02”	1’31”	2’00”	2’32”	3’00’
2^{13}	1’03”	2’05”	3’09”	4’12”	5’15”	6’17”
2^{14}	2’07”	4’13”	6’16”	8’59”	10’24”	12’47”
2^{15}	4’30”	8’54”	13’20”	17’31”	21’54”	26’34”
2^{16}	9’35”	18’53”	27’59”	36’33”	48’28”	53’28”
2^{17}	21’11”	41’14”	60’06”	81’01”	102’10”	127’58”

Figure A.4

Temps de calcul en fonction du nombre de points en temps n_t = (ligne) et en espace n_x (colonne). Ces valeurs de $n_t = 3U_0/\pi\hbar T + 1$ (avec $T = 200$ ms) ont été choisies pour satisfaire exactement le critère théorique (Eq. A.8), dans le cas de potentiels de profondeurs maximales allant de 1 à 6 E_R.

La lecture de ce tableau montre que le critère qui est limitant du point de vue du temps de calcul est le pas de temps. En effet, l'élément de l'algorithme nécessitant le plus de ressources est le FFT. Mais cette dernière a une complexité en $n_x \log n_x$, qui est quasi-linéaire. En revanche, augmenter n_t consiste à augmenter le nombre de FFT. Le schéma présentant l'algorithme (Fig. A.1) montre que celui-ci est linéaire en temps et que le nombre de FFT durant la dynamique est donné par : $2 \times n_t + 1$. Finalement, le choix de ces paramètres doit se faire en réalisant un compromis entre une erreur numérique satisfaisante et un temps de calcul raisonnable. Ainsi, pour un grand nombre des simulations de thèse, ces paramètres furent de l'ordre $n_x = 2^{16}$ et $n_t = 20000$ points, soit un temps de calcul maximum de seulement un quart d'heure.

A.2.3 Conditions aux limites

Jusqu'à présent nous avons considéré des simulations dont la dynamique ne concernait qu'une petite partie de l'espace, car soit le paquet était confiné, soit le temps effectif de simulation était trop court pour une expansion importante. Le but de cet algorithme est d'être utilisé afin de simuler à temps long la diffusion d'un paquet d'ondes sur un potentiel localisé. Une grande partie de cette thèse constitue l'étude de la diffusion de paquets d'ondes sur des potentiels locaux. Il sera donc nécessaire de s'affranchir, dans

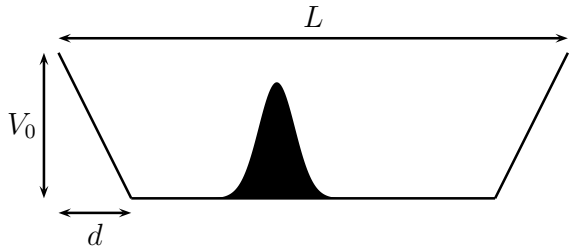


Figure A.5

*Représentation schématique du potentiel imaginaire (*Eq. *(A.13)). Les absorptions ont lieu pour $x = L - d$ et $x = d$.*

le cadre de ces études, des parties réfléchies et transmises à temps long. Ainsi, il se pose naturellement la question de la définition des conditions aux limites. Dans un premier temps, on étudiera les conditions aux limites propres à l'algorithme, puis on réalisera des bords absorbants à l'aide de l'ajout d'un potentiel effectif imaginaire.

- **Conditions aux limites « naturelles »**

Nous avons vu précédemment que l'utilisation d'une FFT lors de la propagation libre implique un repliement du spectre. Ainsi, lorsqu'un paquet d'ondes arrive aux bords, du fait de ce repliement de la fonction inverse de $\tilde{\Psi}(k,t)$, il y a une périodicité dans l'espace réel qui correspond à la taille de la boîte : $\Psi(x,t) = \Psi(x-L,t)$. On peut se servir de cette périodicité pour réaliser des propagations à temps long avec une petite taille de boîte par exemple, mais son utilisation pratique est limitée. En effet, dès lors que le potentiel $V(x)$ aura pour conséquence de séparer la fonction d'onde en deux, les conditions périodiques entraîneront la possibilité d'une interférence entre les deux bras. Afin de pallier ce problème, on pourrait choisir d'imposer à la fonction d'onde de s'annuler au bord telle que : $\Psi(x=0,t) = \Psi(x=L,t) = 0$ (conditions de Dirichlet). Or, imposer de telles conditions est similaire à définir un mur de potentiel infini aux bords conduisant à des interférences et à une réflexion partielle. Ainsi, afin de limiter ces réflexions, on utilise des bords absorbants.

- **Implémentation de bords absorbants**

Lors d'une expérience de diffusion (à une dimension) d'un paquet d'ondes non interagissant sur un potentiel localisé, deux voies de sorties sont possibles : une transmise et l'autre réfléchie. Ainsi il est nécessaire de conserver leur séparation spatiale au cours du temps. Pour ce faire, on utilise dans l'algorithme un artefact numérique absorbant la fonction d'onde aux bords de sorte à annihiler les effets liés à la périodisation. Ceci se réalise en ajoutant un potentiel imaginaire ayant la forme :

$$V_I(x) = \begin{cases} iV_{I0}\frac{d-x}{d} \text{ si : } 0 \leq x \leq d \\ iV_{I0}\frac{L-d-x}{d} \text{ si : } L-d \leq x \leq L \\ 0 \text{ sinon.} \end{cases} \tag{A.13}$$

On représente ce potentiel à la figure A.5. Le choix de sa largeur d et de sa hauteur $V_{I0} > 0$ doit être fait de sorte que l'absorption soit la plus efficace possible. On peut effectuer un test de l'efficacité de l'absorption en réalisant la diffusion d'un paquet d'ondes de vitesse moyenne donnée sur ce potentiel et en regardant la densité restante dans la boîte, après la diffusion.

La vitesse et la position initiale du paquet d'ondes étant fixées, on observe que, naturellement, le temps à partir duquel la norme totale commence à diminuer, est plus court lorsque d est grand. Les résultats de la figure A.6.a, montrent que la norme après diffusion est d'autant plus petite que la largeur est grande. De la même manière, lorsque l'on augmente la hauteur, on absorbe plus efficacement (Fig.

A.6.b). La difficulté est ici de trouver le bon compromis entre la largeur (donc la taille de boîte) et la hauteur (donc le pas de temps). Par ailleurs, on observe que lors de sa diffusion, une partie non négligeable de la fonction d'onde est réfléchie. Cet effet du potentiel imaginaire peut être minimisé en prenant des largeurs de potentiel plus grandes relativement à sa hauteur. En résumé, le domaine d'énergie cinétique E_c pour lequel ces bords absorbants sont efficaces [4], correspond à :

$$d\frac{\sqrt{E_c}}{\hbar\sqrt{8m}} < V_{I0} < E_c^{3/2} d(\hbar\sqrt{8m}). \tag{A.14}$$

La minoration de la hauteur définit la condition pour obtenir un bord absorbant efficace, tandis que la majoration garantit une faible réflexion.

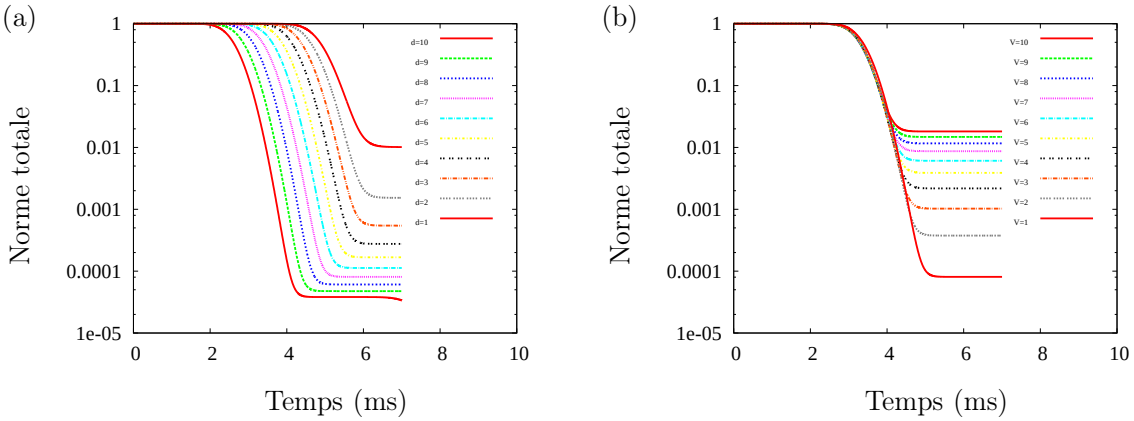


Figure A.6

Norme de la fonction d'onde (de vitesse initiale $v = 0.7v_R$ et de dispersion en vitesse $\Delta v = 1$ mm/s) au cours du temps en fonction des deux paramètres du potentiel imaginaire : (a) sa largeur d (pour $V = E_R$) et (b) sa hauteur V pour $d = 8$ μm.

A.2.4 Résolution de la dynamique de l'équation de Schrödinger non-linéaire

L'équation de Schrödinger non-linéaire dépendant du temps permet de modéliser de nombreux systèmes physiques comme, notamment, la dynamique de gaz d'atomes interagissant à basse température (cf. chapitre 4 et chapitre 5). Elle se différencie de l'équation linéaire par un terme dépendant du module carré de la fonction d'onde. Ainsi le potentiel peut s'écrire :

$$V(x,t) = V_0(x,t) + gN|\Psi(x,t)|^2.$$

Nous avons établi plus haut qu'un des avantages d'utiliser un schéma de split-step Fourier est de pouvoir traiter la dynamique même dans le cas où le potentiel dépend du temps. L'ajout d'un terme dépendant de la fonction d'onde à l'instant t ne modifie pas le schéma de l'algorithme. En revanche, il est nécessaire maintenant de définir un pas de temps satisfaisant une contrainte énergétique supplémentaire liée à la fonction d'onde. Le potentiel est désormais susceptible de prendre des valeurs arbitrairement grandes au cours de la propagation et ainsi un pas de temps variable semble plus adapté.

Avant de réaliser tout calcul dynamique il est nécessaire de commencer avec une fonction d'onde initiale dont les caractéristiques sont propres au système que l'on souhaite étudier. Dans le cas sans interaction, nous partons de l'état fondamental d'un oscillateur harmonique dont la solution est connue. Il est possible d'utiliser la schéma split-step Fourier en faisant une propagation en temps imaginaire : $\Delta t \to i\Delta t$, pour trouver l'état fondamental de ce système. L'équation (A.4) devient alors :

$$\Psi(x,t+i\Delta t) = \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}\hat{T}\right)\exp\left(-\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{V}\right)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\frac{\Delta t}{2}\hat{T}\right)\Psi(x,t) + \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

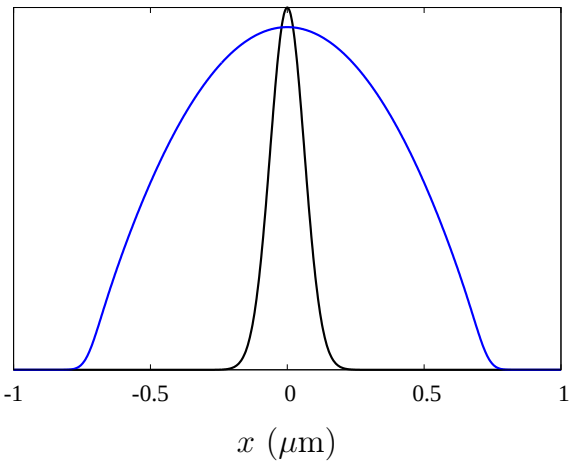


Figure A.7

Fonction d'onde initiale $\Psi(x,0)$ (fondamental d'un potentiel harmonique) (ligne noire), et fonction d'onde après propagation en temps imaginaire pour le même potentiel harmonique mais en présence d'interaction répulsive (ici $gN > 0$) (ligne bleue).

La propagation en temps imaginaire n'est plus conservative. Il est donc nécessaire de renormaliser la fonction d'onde à chaque pas de temps. La propagation en temps imaginaire permet de converger vers l'état fondamental de tout potentiel. En effet, si l'on considère les énergies liées $E_n < 0$, associées aux états liées $|\psi_n\rangle$ de du hamiltonien $\hat{H}$, alors toute fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$ peut s'écrire comme une combinaison linéaire de ces valeurs propres tel que :

$$|\psi(t)\rangle = c_0 \mathrm{e}^{iE_0 t/\hbar}|\psi_0\rangle + c_1 \mathrm{e}^{iE_1 t/\hbar}|\psi_1\rangle + c_2 \mathrm{e}^{iE_2 t/\hbar}|\psi_2\rangle + \ldots,$$

avec $c_n \in \mathbb{C}$ ($n \in \mathbb{N}$). Si $E_0 < E_1 < E_2 < \ldots$ alors, après une propagation en temps imaginaire, on a la convergence ($t \to \infty$) :

$$|\psi(it)\rangle \sim \mathrm{e}^{-E_0 t/\hbar}|\psi_0\rangle.$$

Seule la valeur propre la plus petite en énergie demeure. Ainsi, cette méthode permet de converger vers l'état fondamental de tout potentiel $\hat{V}$ en partant d'une fonction d'onde initiale arbitrairement choisie*. La figure A.7 représente la fonction d'onde initiale et finale que l'on peut obtenir dans le cas d'un potentiel harmonique.

A.3 Diffusion d'une onde plane

Afin de mettre en exergue des phénomènes de transmission liés non pas à des valeurs propre d'un hamiltonien mais à ses résonances, ou à des effets de tailles et de bords, il est possible de réaliser une expérience de diffusion. On cherche ici à avoir la meilleure résolution en énergie possible, c'est pourquoi on choisit de réaliser une nouvelle méthode mettant en jeu la diffusion d'onde plane monochromatique de vecteur d'onde k_0.

∗. En pratique, on peut partir de l'état propre du potentiel en l'absence d'interaction, mais ce choix n'influence pas en général le résultat final de la propagation en temps imaginaire.

A.3.1 Principe de la méthode

La résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire* :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi(x)=E\psi(x),$$

peut se faire en propageant dans l'espace des x la fonction d'onde $\psi(x)=A\exp(ik_0x)$ (où A est une constante de normalisation). On discrétise l'espace en $n_x=L/dx+1$ points de sorte à obtenir l'équation de Schrödinger discrétisée en différence finie :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi(x_j)+\psi(x_{j+2})-2\psi(x_{j+1})}{\Delta x^2}+V(x_{j+1})=E\psi(x_{j+1}). \tag{A.15}$$

Le principe de la méthode repose sur une intégration récursive partant de la fonction d'onde après diffusion peut s'écrire $\exp(ik_0x)$ où t est le coefficient complexe en transmission (Fig. A.8.a).

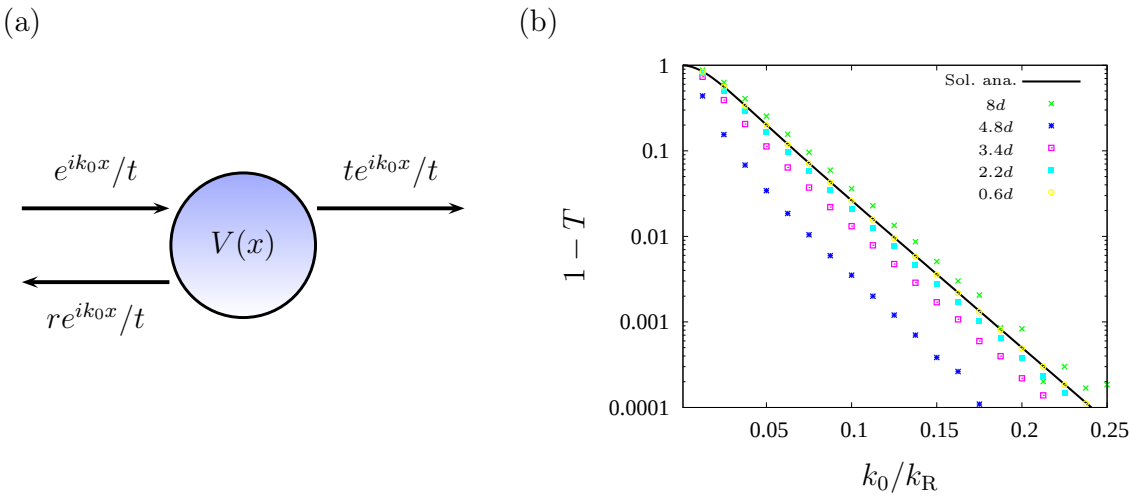


Figure A.8

(a) Représentation schématique de la diffusion d'une onde plane sur un potentiel quelconque. (b) Comparaison de la réflexion sur le potentiel (Eq. A.18) entre la solution analytique (Eq. A.19) et le calcul numérique pour différentes valeurs du pas spatial Δx.

Par soustraction, la fonction d'onde en amont du potentiel est alors $(e^{ik_0x}+re^{-ik_0x})/t$, où r est le coefficient complexe en réflexion satisfaisant $|r|^2+|t|^2=1$. Ainsi, connaissant la valeur de la fonction d'onde après diffusion à la position x_n et x_{n-1} respectivement $te^{ik_0x_n}/t$ et $te^{ik_0x_{n-1}}/t$ (Fig. ??), on peut calculer sa valeur à la position x_j en inversant la relation (Eq. A.15) :

$$\psi(x_j)=\frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x_{j+1})-E\right]\psi(x_{j+1})\Delta x^2+2\psi(x_{j+1})-\psi(x_{j+2}). \tag{A.16}$$

Ainsi, nous sommes en mesure de calculer la fonction d'onde à la position x_0, x_1 et x_2. L'astuce du calcul repose sur le fait que la dérivée au point x_1 est :

$$\begin{aligned}\psi'(x_1)&=[\psi(x_3)-\psi(x_0))]/(2\Delta x)\\&=\frac{ik_0}{t}(e^{ik_0x_1}+re^{-ik_0x_1}).\end{aligned}$$

∗. Il est possible d'étendre ce calcul à des paquets d'ondes en prenant la transmission pour différentes valeurs du moment k_0 et en pondérant par l'amplitude du paquet.

Une réécriture de cette équation donne le coefficient de réflexion :

$$|r|^2 = \left| \frac{2\Delta x\ k_0\psi(x_1) + \psi(x_0) - \psi(x_3)}{2\Delta x\ k_0\psi(x_1) - \psi(x_0) + \psi(x_3)} \right|^2 . \tag{A.17}$$

Ce calcul ne présuppose pas de condition particulière en ce qui concerne le potentiel. Malgré tout, il faut relever que, lorsque $t = 0$, il y a une divergence. En pratique, on doit isoler ce cas particulier lors du calcul de la fonction d'onde au point x_j. On résume cet algorithme à la figure A.9

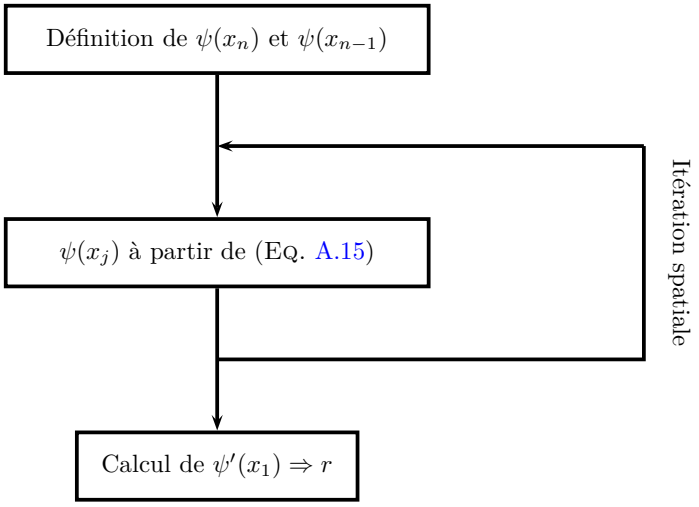


Figure A.9

Schéma de l'algorithme de calcul de la transmission d'une onde plane au travers d'un potentiel quelconque $V(x)$ dans le cadre de la résolution de l'équation de Schrödinger.

A.3.2 Comparaison avec quelques solutions analytiques

Pour tester la validité du programme, on peut effectuer une comparaison quantitative avec des solutions analytiques que l'on peut obtenir pour certains potentiels. Par exemple, dans le livre Landau et Lifshitz de Mécanique Quantique [5], on peut trouver le calcul exact de la transmission d'une onde plane au travers d'un potentiel de la forme :

$$V(x) = \frac{U_0}{\cosh^2(x/d)}, \tag{A.18}$$

avec $d > 0$ et on pose $U_0 > E_0 > 0$. On peut, dans ce cas, intégrer l'équation de Schrödinger pour trouver une transmission si $(U_0 < E_\mathrm{R})$:

$$T(k_0) = \frac{\sinh^2(\pi k_0/k_\mathrm{R})}{\sinh^2(\pi k_0/k_\mathrm{R}) + \cosh^2[0.5\pi\sqrt{4U_0/E_\mathrm{R} - 1}]}. \tag{A.19}$$

Ici, l'utilisation de l'énergie de recul E_R n'a pas de signification particulière, même si l'ordre de grandeur reste valable. Le seul paramètre numérique limitant dans cet algorithme est le pas spatial Δx. On procède alors à une comparaison pour différents pas spatiaux (Fig. A.8.b). La comparaison entre les valeurs analytiques et numériques montre pour certaines valeurs de Δx petites $(= 8d)$ une bonne correspondance.

Ceci est un leurre numérique. En effet, lorsque l'on diminue le pas, on se retrouve loin du résultat attendu. L'erreur relative change de signe lorsque l'on augmente le nombre de points. Il faut donc faire attention à ce que la convergence soit satisfaite. Le critère principal est de résoudre spatialement le potentiel* (*i.e.* $dx \ll d$ dans ce cas particulier). Le choix du pas en moment Δk peut être aussi un facteur limitant lorsque l'on souhaite résoudre par exemple, des résonances ultra fines en énergie.

∗. Lorsque l'on traite de potentiel périodique ce critère rejoint celui de Shannon.

- **Code Fortran 90 : calcul de transmission**

```
PROGRAM trans_onde_planes
IMPLICIT NONE
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! Definition des variables et des constantes
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
double precision :: hbar, m, pi
parameter (hbar=1.d0)
parameter (m=1.d0)

integer*8 :: cx
integer*8 :: ck
integer*8 :: cv
integer*8 :: nk
integer*8 :: nx
integer*8 :: nv

! Nombre de points des echantillionages
parameter (nx=2000)
parameter (nk=20)
parameter (nv=1)


double precision :: k,kmin,x,xpot,E0,L,dx,V0,Vmax,kmax,dk,d,x0
double complex :: i,psi,psi1,psi2,psid,ref
double precision :: V
i=(0.d0,1.d0)

!Largeur de la boite
L=40.d-6
xpot=L/2.d0

! Valeur min et max du moment k0
kmin=0.d0
kmax=0.25d0

!Parametre du potentiel
d=1d-6!(m)
Vmax=-1d0!(unite reseau)


!conversion dans les unites propres au reseau
kmax=kmax/(d/(2.d0*pi))
kmin=kmin/(d/(2.d0*pi))
dk=(kmax-kmin)/dble(nk)
dx=L/dble(nx-1)
Vmax=Vmax/(2.d0*(d/(2.d0*pi))**2.d0)



OPEN(1,file='transmission.txt')
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! Implementation de l'algorithme
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
  DO ck=1,nk

     ! Definition du pseudo moment et de la pseudo energie
     k=kmin+dble(ck)*dk
     E0=(hbar*k)**2.d0/(2.d0*m)

     !Initialisation de Psi
     psi2=zexp(i*k*L)
     psi1=zexp(i*k*(L-dx))

     DO cx=nx-2,1,-1
        x=dble(cx)*dx
        V=Vmax/(dcosh((x-xpot)/d))**2.d0
```

```
67        psi=(2.d0*m/hbar**2.d0)*(V-E)*psi1*dx**2.d0+2.d0*psi1-psi2
68
69        ! Condition pour eviter la divergence a transmission nulle
70        IF(cx>1)THEN
71          psi2=psi1
72          psi1=psi
73        ENDIF
74      ENDDO
75      psid=(psi2-psi)/(2.d0*dx)
76      ref=(psi1-psid/(i*k))/(psi1+psid/(i*k))
77
78    write(10,*) real(k*(d/(2.d0*pi))),real(1.d0-cdabs(ref)**2.d0)
79   ENDDO
80  CLOSE(1)
81 END PROGRAM trans_onde_planes
```

Bibliographie

[1] N. Balakrishnan, C. Kalyanaraman et N. Sathyamurthy, *Phys. Rep.* **280** 79 (1997).

[2] M. D. Feit, J. A. Fleck et A. Steiger, *J. of Comp. Phy.* **47** 412 (1982).

[3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë. *Mécanique quantique*. (Collection Enseignement des Sciences, Hermann, Paris, 1973).

[4] D. Neuhauser et M. Baer, *J. Chem. Phys.* **90** 4351 (1989).

[5] L. D. Landau et E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics, Vol. 3 Quantum Mechanics*, (Édition Mir, Moscou, 1958).

B Système à deux fréquences commensurables

« Citer les pensées des autres, c'est regretter de ne pas les avoir trouvées soi-même. »

S. Guitry

Sommaire

B.1 Spectre du réseau bichromatique **183**
B.1.1 Calcul perturbatif des solutions de l'équation de Whittaker-Hill 184
B.2 Stabilité de l'équation de Whittaker-Hill **186**
B.2.1 Calcul itératif de $\Delta(0)$ 187
B.2.2 Comparaisons numériques 188
B.3 Diagramme de bande **188**
B.3.1 Résolution dans l'espace des x 189
B.3.2 Résolution dans l'espace des k 190

Le réseau bichromatique monodimensionnel à fréquence double [1,2] s'est avéré être un système très intéressant dans le contexte des simulateurs quantiques à atomes froids. Il a été démontré qu'un contrôle en phase de ce double réseau permet d'observer l'effet tunnel de Klein [3] ou encore l'implémentation d'une lentille de Veselago à indice négatif [4]. Pour certaine valeur de profondeur et de phase, un tel système peut être considéré comme un assemblage périodique de dimères. Dans ce type de système, le groupe de I. Bloch a été en mesure d'observer la phase de Zak [5] (l'équivalent de la phase de Berry pour un réseau monodimensionnel).

La première section de cette annexe est destinée à présenter le calcul analytique perturbatif des solutions de l'équation de Mathieu faite au chapitre 2 et à développer une généralisation de cette théorie au cas à deux harmoniques. Puis, on détaillera les méthodes numériques permettant le calcul des domaines de stabilité des solutions de Floquet, que l'on comparera à leurs développements perturbatifs au troisième ordre. Ce formalisme n'étant applicable qu'au cas particulier où le rapport entre les deux fréquences spatiales sont commensurables d'un facteur 2, on présentera dans une seconde section deux méthodes permettant de résoudre numériquement le spectre pour un potentiel où les fréquences peuvent être prises de manière arbitraire.

B.1 Spectre du réseau bichromatique

Considérons une particule quantique de vitesse v et de masse m, en présence d'un potentiel périodique infini à deux fréquences spatiales dont le rapport est commensurable (d'un facteur 2). Ce système à une dimension est décrit par l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} - U_0\left[\sin^2\left(\frac{\pi x}{x}\right) + \epsilon\sin^2\left(\frac{2\pi x}{d}\right)\right]\psi(x) = \frac{mv^2}{2}\psi.$$

Cette équation peut se réécrire sous la forme d'un équation de Whittaker-Hill [6] :

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\tilde{x}^2} + [a + 2q(\cos(2\tilde{x}) + \epsilon\cos(4\tilde{x})]\psi = 0, \tag{B.1}$$

où l'on a posé :

$$a = 4(v/v_{\mathrm{R}})^2 + 2(1+\epsilon)q \text{ et } q = U_0/E_{\mathrm{R}}.$$

Comme la périodicité du réseau est donnée par la fréquence spatiale la plus petite, la valeur du vecteur d'onde de recul est toujours de $k_{\mathrm{R}} = 2\pi/d$.

B.1.1 Calcul perturbatif des solutions de l'équation de Whittaker-Hill

L'idée directrice de ce calcul est de réaliser un développement de a en fonction de n tel que les solutions de (B.1) soient de la forme $\cos nx$ ou $\sin nx$ [7]. Nous avons vu au chapitre (2) que les valeurs pour lesquelles on avait une ouverture des domaines de stabilité étaient les entiers tel que $a = n^2$ avec $n \in \mathcal{N}$. Le développement de a peut s'écrire sous la forme :

$$a = n^2 + \alpha_1 q + \alpha_2 q^2 + \alpha_3 q^3 + \cdots$$

lorsque $q \simeq 0$. Dans le cas particulier où $a = 1$ (correspondant au premier gap), on pose comme solution de l'équation générale [7] :

$$\psi(x) = \cos x + q c_1(x) + q^2 c_2(x) + q^3 c_3(x) + \cdots \tag{B.2}$$

Si l'on insère ψ dans (B.1), on obtient :

$$\begin{aligned} -\cos x + q c_1'' + q^2 c_2'' + q^3 c_3'' + \cdots = &-\cos x - q(c_1 + \alpha_1 \cos x) - q^2(c_2 + \alpha_1 c_1 + \alpha_2 \cos x) \\ &- q^3(c_3 + \alpha_1 c_2 + \alpha_2 c_1 + \alpha_3 \cos x) + \cdots - 2q(\cos 2x + \epsilon \cos 4x)\psi. \end{aligned}$$

Avec :

$$\begin{aligned} (2q\cos 2x)\psi &= q\cos x + q\cos 3x + 2q^2 c_1 \cos 2x + 2q^3 c_2 \cos 2x + \cdots \\ (2q\cos 4x)\psi &= q(\cos 2x + \cos 6x) - 2q^2 c_1 \cos 4x - 2q^3 c_2 \cos 4x + \cdots \end{aligned}$$

Lorsque l'on égalise les coefficients de chaque puissance de q on obtient :

$$\begin{aligned} -\cos x + \cos x &= 0 \\ c_1'' + c_1 + \alpha_1 \cos x + \cos x + \cos 3x + \epsilon(\cos 2x + \cos 6x) &= 0 \qquad \text{(B.3)} \\ c_2'' + c_2 + \alpha_1 c_1 + \alpha_2 \cos x + 2c_1 \cos 2x - \epsilon 2 c_1 \cos 4x &= 0. \qquad \text{(B.4)} \end{aligned}$$

L'équation (B.3) comporte un terme $(\alpha_1 + 1)\cos x$ qui s'intègre comme $(\alpha_1 + 1)\sin x$. Puisque ψ doit être périodique, ce terme doit s'annuler, d'où :

$$\alpha_1 = -1.$$

On a alors :

$$c_1'' + c_1 - \cos 3x - \epsilon(\cos 2x + \cos 6x) = 0.$$

De façon usuelle, on cherche, dans un premier temps, la solution de l'équation homogène $c_1'' + c_1 = 0$. Les racines, du polynôme caractéristique associé sont $\pm i$ donc :

$$c_{1_c}(x) = \lambda_1 \cos x + \lambda_2 \sin x, \text{ avec : } \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}.$$

L'équation (B.3) se décompose en 3 sous-équations différentielles :

1. $c_1'' + c_1 - \epsilon \cos 2x = 0$, dont on cherche les solutions sous la forme : $c_{1_p}^{(1)} = \lambda_3 \cos 2x + \lambda_4 \sin 2x$.
2. $c_1'' + c_1 - \cos 3x = 0$, dont on cherche les solutions sous la forme : $c_{1_p}^{(2)} = \lambda_5 \cos 3x + \lambda_6 \sin 3x$.
3. $c_1'' + c_1 - \epsilon \cos 6x = 0$, dont on cherche les solutions sous la forme : $c_{1_p}^{(3)} = \lambda_7 \cos 6x + \lambda_8 \sin 6x$.

On insère la solution particulière de la forme : $c_{1_p}^{(tot)} = c_{1_p}^{(1)} + c_{1_p}^{(2)} + c_{1_p}^{(3)}$, dans l'équation (B.3). Après simplification et identification, on trouve :

$$\lambda_3 = -\epsilon/3,\ \lambda_4 = -1/8,\ \lambda_5 = -\epsilon/35 \text{ et } \lambda_6 = \lambda_7 = \lambda_8 = 0.$$

Soit la solution générale de (B.3) * :

$$c_{p_1}(x) = -\frac{\epsilon}{3}\cos 2x - \frac{1}{8}\cos 3x - \frac{\epsilon}{35}\cos 6x. \tag{B.5}$$

En procédant de manière similaire, après insertion de c_{p_1} dans l'équation portant sur c_2, on peut déduire de l'équation (B.4) la forme :

$$c_2'' + c_2 + (\alpha_2 - 1/8 + \epsilon^2/16)\cos x + a\cos 2x + b\cos 3x + c\cos 4x + d\cos 5x + e\cos 6x + f\cos 7x + g\cos 8x + h\cos 10x - \epsilon/3 = 0, \tag{B.6}$$

avec :

$$a = \epsilon/3 + \epsilon^2/6 - \epsilon^3/70,\ b = 1/8,\ c = -38\epsilon/105,\ d = 1/8,$$
$$e = \epsilon/35 - \epsilon^3/6,\ f = \epsilon^2/16,\ g = -\epsilon/35 \text{ et } h = -\epsilon^3/70.$$

Pour les mêmes raisons que l'équation sur c_1, le terme en $\cos x$ doit s'annuler c'est-à-dire que :

$$\alpha_2 = -1/8 - \epsilon^2/16.$$

Une fois encore, on cherche des solutions particulières de la forme :

$$c_{2_p}^{(a\to h)}(x) = \lambda_1^{(a\to h)}\cos nx + \lambda_2^{(a\to h)}\sin nx. \tag{B.7}$$

Après avoir injecté et identifié, on trouve :

$$\lambda_1^{(a)} = -a/3,\ \lambda_1^{(b)} = -b/8,\ \lambda_1^{(c)} = -c/15,\ \lambda_1^{(d)} = -d/24,$$
$$\lambda_1^{(e)} = -e/35,\ \lambda_1^{(f)} = -f/48,\ \lambda_1^{(g)} = -g/63,\ \lambda_1^{(h)} = -h/99$$
$$\text{et } \lambda_2^{(a)} = \cdots = \lambda_2^{(h)} = 0.$$

Finalement, une solution particulière autour de $q = 0$ de l'équation de Whittaker-Hill s'écrit :

$$\begin{aligned}\psi_{\text{Paire}}(x) = &\cos x - q\left(\frac{\epsilon}{3}\cos 2x + \frac{1}{8}\cos 3x + \frac{\epsilon}{35}\cos 6x\right)\\ &+ q^2\left(\left[\frac{\epsilon}{3} + \frac{\epsilon^2}{18} - \frac{\epsilon^3}{210}\right]\cos 2x + \frac{1}{64}\cos 3x + \frac{38\epsilon}{1575}\cos 4x\right.\\ &\left.+ \left[\frac{\epsilon}{1225} + \frac{\epsilon^3}{210}\right]\cos 6x - \frac{\epsilon^2}{768}\cos 7x + \frac{\epsilon}{2205}\cos 8x + \frac{\epsilon^3}{6930}\cos 10x\right) + \mathcal{O}(q^3).\end{aligned}$$

Pour un nombre caractéristique :

$$\boxed{a \simeq 1 + q - q^2\left(\frac{1}{8} - \frac{\epsilon^2}{16}\right) + \mathcal{O}(q^3).} \tag{B.8}$$

Pour les solutions impaires, le traitement reste le même et, de façon similaire à (B.2), on pose le développement suivant :

$$\psi(x) = \sin x - qs_1(x) + q^2 s_2(x) + q^3 s_3(x) + \cdots \tag{B.9}$$

∗. On remarque que pour $\epsilon = 0$ on retrouve la solution de McLachlan pour l'équation de Mathieu ([7] p.13), au signe près provenant de la définition de l'équation différentielle.

La solution particulière impaire est :

$$\psi_{\text{Impaire}}(x) = \sin x + q\left[\left(\frac{1}{8} - \frac{\epsilon}{24}\right)\sin 3x + \frac{\epsilon}{24}\sin 5x\right] \tag{B.10}$$

$$+ q^2\left[\frac{2\epsilon}{15}\cos 4x + \frac{1}{64}\left(\sin 3x + \frac{1}{3}\sin 5x + \frac{\epsilon}{1152}\sin 7x\right)\right] + \mathcal{O}(q^3). \tag{B.11}$$

Pour un nombre caractéristique :

$$\boxed{b \simeq 1 - q + q^2\left(\frac{\epsilon}{24} - \frac{1}{8}\right) + \mathcal{O}(q^3)}. \tag{B.12}$$

De même que pour les solutions particulières, on retrouve pour $\epsilon = 0$, le résultat de McLachlan ([7] p.13).

B.2 Stabilité de l'équation de Whittaker-Hill

Nous avons vu lors du chapitre 2 que la méthode de Hill permettant de déterminer, en particulier, les domaines de stabilité de l'équation (B.1), repose sur le calcul d'un déterminant de Hill. On propose ici un calcul itératif de celui-ci.

- **Levée de dégénérescence**

Le phénomène de levée de dégénérescence des valeurs propres intermédiaires est tabulé dans le Handbook du NIST [8]. Celui-ci stipule que si $\nu \in \mathbb{R}$ (ou $\mathbb{C}$) est une constante, alors l'équation de Mathieu admet des solutions non triviales de la forme :

$$w(z + \pi) = \mathrm{e}^{i\pi\nu} w(z),$$

si, et seulement si, $\mathrm{e}^{i\pi\nu}$ est valeur propre de la matrice wronskienne :

$$W = \begin{vmatrix} w_I(a,q) & w_{II}(a,q) \\ w_I'(a,q) & w_{II}''(a,q) \end{vmatrix},$$

où w_I et w_{II} sont deux solutions *basiques* [8] de l'équation de Mathieu (cf. 2.19). Dans ce cas, pour un ν et un q donnés, les valeurs propres de cette matrice forment un ensemble infini de valeurs discrètes de a noté $\lambda_{\nu+2n}(q)$ $(n \in \mathbb{Z})$. Pour des valeurs non-entières, ces valeurs propres ont la propriété * :

$$\lambda_{\nu+2n}(0) = (\nu + 2n)^2. \tag{B.13}$$

Cette relation nous montre que chacune de ces valeurs propres d'ordre intermédiaire se situe entre deux valeurs propres d'ordre entier. En conclusion, lorsque l'on traite l'équation de Whittaker-Hill et non pas l'équation de Mathieu, l'ordre de ces valeurs propres $\lambda_{\nu+2n}$ passe de demi-entières à entières, et on voit apparaître une levée de dégénérescence aux valeurs de ν attendues (cf. Fig. B.1).

∗. On rappelle que les valeurs propres de l'équation de Whittaker-Hill notées ont aussi la propriété d'être dégénérées pour $q = 0$, telles que : $a_n(0) = b_n(0) = n^2$.

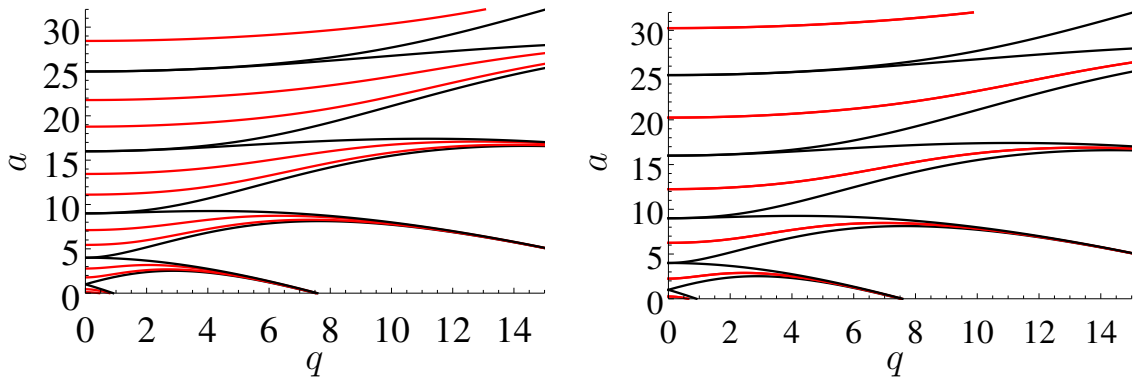


Figure B.1

Calcul des valeurs propres pour des valeurs entières (courbes noires) (Gauche) tiers-entières (courbes rouges) et (Droite) demi-entières (courbes rouges).

B.2.1 Calcul itératif de $\Delta(0)$

La méthode employée par Sträng [9] pour calculer ce déterminant se base essentiellement sur une astuce provenant des symétries de la matrice suivante (réécrite dans les notations de Sträng) :

$$\Delta(0) = \begin{vmatrix} 1 & \epsilon\xi_i^0 & \xi_i^0 & & & & & \\ \epsilon\xi_{i-1}^0 & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ \xi_{i-2}^0 & \ddots & & & & \ddots & & \\ & \ddots & & & & \ddots & \xi_{i-2}^0 & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \epsilon\xi_{i-1}^0 & \\ & & & & \xi_i^0 & \epsilon\xi_i^0 & 1 & \end{vmatrix} \tag{B.14}$$

Cette matrice est centrosymétrique. Il existe de nombreux articles relatifs aux propriétés du déterminant de ces matrices mais aucun, à ma connaissance, ne donne de relation d'itération pour calculer ce déterminant dans notre cas particulier. Malgré tout, en s'inspirant d'un article [10] faisant le calcul d'une relation d'itération dans le cas de matrice penta-diagonale circulaire, on peut extraire une relation de récurrence plus générale :

$$\begin{aligned} \Delta_i =& (1 - \epsilon\xi_{i-2}\xi_{i-4}/\xi_{i-3})\Delta_{i-1} \\ & - \xi_{i-2}(\xi_{i-1} - \epsilon\xi_{i-3}/\xi_{i-4})\Delta_{i-2} \\ & - \epsilon\xi_{i-2}\xi_{i-4}(1 - \epsilon^2\xi_{i-2})\Delta_{i-3} \\ & + \epsilon^2\xi_{i-2}^2\xi_{i-4}\xi_{i-5}(\xi_{i-3} - 1)\Delta_{i-4} \\ & + \epsilon^3\xi_{i-4}^2\xi_{i-5}\xi_{i-6}\Delta_{i-5} \end{aligned}$$

Ainsi, il est nécessaire de connaître l'expression des déterminants initiaux Δ_1, Δ_2, Δ_3, Δ_4 et Δ_5. Pour ce faire, on a simplement à les calculer à l'aide d'un logiciel de calcul formel comme Mathematica.

$$\begin{aligned} \Delta_0 &= 1 \\ \Delta_1 &= 1 + 2\epsilon\xi_1\xi_0 - \xi_1^2 \\ &\dots \end{aligned}$$

De la sorte, on obtient un algorithme de calcul du déterminant qui scale en $\mathcal{O}(n^2)$ au lieu de $\mathcal{O}(n!)$. En revanche, il faut noter que, de manière standard Δ_5 comporte plus de 30000 termes, on préférera

donc utiliser une méthode numérique, comme par exemple un décomposition LU, pour le calcul des déterminants Δ_4 et Δ_5.

Cette décomposition LU de la matrice en deux matrices triangulaires rend possible le calcul du déterminant en faisant le produit des éléments diagonaux après décomposition. Cette méthode permet de calculer rapidement le déterminant d'une matrice de taille n car on peut montrer que sa complexité est en n^2.

Une fois que la valeur de $\Delta(0)$ est connue, il est possible de calculer les zones de stabilité * en fonction des paramètres a et q. On représente à la figure (B.2.a) les résultats obtenus pour le calcul de l'exposant de Mathieu pour $\epsilon = 0$. L'accord entre les données issues de la récurrence et celle provenant de la résolution de l'équation de Schrödinger (cf. chap. 2) est parfaite.

B.2.2 Comparaisons numériques

On peut réaliser une comparaison directe entre le calcul des zones de stabilité de l'équation de Mathieu et le coefficient de transmission obtenu lors de la diffusion d'une onde plane sur un potentiel bichromatique à enveloppe carrée. Cependant, il faut avoir à l'esprit que le passage de la représentation (U_0, k) à la représentation (a, q) n'est pas bijective mais surjective. Seuls les couples (a, q) correspondant à des pseudo-énergies et à des pseudo-moments positifs peuvent être calculés. La droite d'équation $a = 2(1+\epsilon)q$ délimite la frontière entre ces valeurs permises et interdites. On observe un très bon accord entre le calcul basé sur la méthode de Hill et celui de la transmission d'un onde plane qui valide le modèle présenté ci-dessus (Fig. B.2 et B.3).

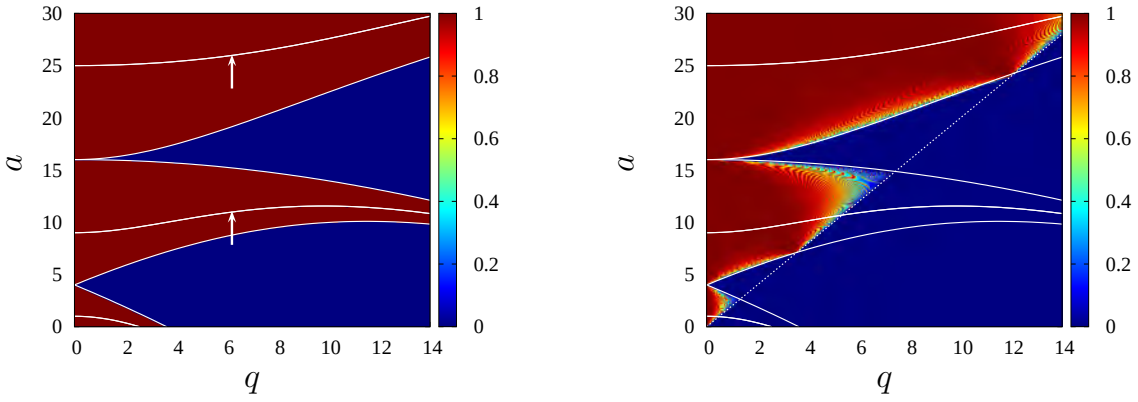


Figure B.2

(Gauche) Comparaison entre le calcul numérique de la stabilité de Whittaker-Hill et le calcul numérique des valeurs propres de l'opérateur ci-dessus (courbes blanches), pour $\epsilon = 0$. (Droite) Comparaison entre les mêmes valeurs propres et le calcul de la transmission au moyen d'ondes planes de $k = k_R\sqrt{a/4 - (1+\epsilon)q/2}$. La ligne blanche en pointillés représente la droite délimitant les valeurs de k réelles des valeurs imaginaires (pour lesquelles il ne peut y avoir d'onde plane).

B.3 Diagramme de bande

Dans cette section, on présente deux méthodes permettant de calculer le spectre pour le cas d'une particule dans un réseau bichromatique.

∗. Les zones de stabilité de l'exposant de Mathieu sont définies comme les zones pour lesquelles l'exposant a une partie imaginaire nulle.

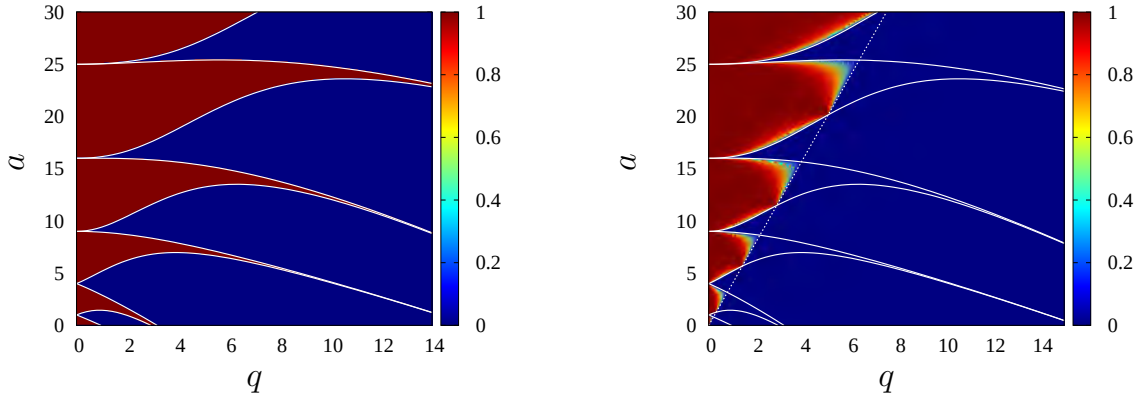


Figure B.3

Mêmes résultats que pour la figure B.2 mais pour $\epsilon = 0.5$. On peut observer pour q grand un léger décalage qui est dû à une sous-détermination numérique du potentiel. L'espace est discrétisé en $n_x = 100\ 000$ points.

B.3.1 Résolution dans l'espace des x

La première méthode numérique consiste à résoudre l'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_0\left(2+\cos(2\pi x/d)+\epsilon\cos(4\pi x/d)\right)\right]\psi(x) = \mathcal{E}\psi(x), \tag{B.15}$$

par l'utilisation du théorème de Bloch dans l'espace des x. L'avantage de cette méthode est qu'elle permet de calculer le spectre pour n'importe quel type de potentiel et en particulier un potentiel bi-périodique. Le critère à satisfaire est celui de Shannon, c'est-à-dire que la résolution spatiale doit être suffisante pour résoudre les deux fréquences. De plus, la taille de la boîte va jouer le rôle du facteur limitant la résolution en pseudo-moment tel que $\Delta k \geq 2\pi/L$.

Soit k_0 le vecteur d'onde associé à la particule, l'écriture de (B.15) sans dimension donne :

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tilde{x}^2} + \frac{V_0}{E_R}\left(2+\cos(2\pi\tilde{x}/d)+\epsilon\cos(4\pi\tilde{x}/d)\right)\right]\psi(\tilde{x}) = \frac{E}{E_R}\psi(\tilde{x}).$$

Une discrétisation de cette dernière équation conduit à :

$$-\frac{\psi_{i-1}-2\psi_1+\psi_{i+1}}{\Delta x^2} + \frac{V(\tilde{x}_i)}{E_R}\psi_i = \frac{E}{E_R}\psi_i, \tag{B.16}$$

avec $\Delta x = k_0 d/N$, $\tilde{x}_i = i\Delta x$, pour $i \in [\![1; N]\!]$. Comme on se situe dans le cas d'un réseau périodique infini, on est conduit à imposer des conditions aux limites périodiques :

$$\psi_0 = \psi_N \mathrm{e}^{-ikd} \text{ et } \psi_{N+1} = \psi_1 \mathrm{e}^{ikd}.$$

Ainsi, le système (B.16) s'écrit sous la forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} b_1 & a & & & a\mathrm{e}^{-ikd} \\ a & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & a & \\ a\mathrm{e}^{ikd} & & a & b_N & \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_N\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}\psi_1\\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_N\end{pmatrix}, \tag{B.17}$$

avec $a = -1/\Delta x^2$ et $b = 2/\Delta x^2 + V(\tilde{x}_i)/E_R$. Les termes $a\mathrm{e}^{\pm ikd}$ proviennent des conditions aux limites périodiques (de Born-von Karman). L'inconvénient de cette méthode numérique est que sa complexité

croît comme le carré du nombre de points en espace. Sachant que ce nombre doit être nécessairement grand lorsque les deux fréquences du réseau sont différentes, il sera préférable d'utiliser une autre méthode de diagonalisation, cette fois-ci dans l'espace réciproque.

B.3.2 Résolution dans l'espace des k

Une fois encore, partons de l'équation de Schrödinger mais dont l'hamiltonien s'écrit cette fois-ci dans l'espace des impulsions :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_0\left[1 + \epsilon - \cos(k_\mathrm{R}x + \phi) - \epsilon\cos(k_\mathrm{R}xP/Q)\right],$$

avec : $(P, Q) \in \mathbb{N}^2$ et $k_\mathrm{R} = 2\pi/d$. Le potentiel est ici de périodes d et Qd. On pose $k_Q = 2\pi/(Qd) = k_\mathrm{R}/Q$. Dans ce cas, la première zone de Brillouin est $k \in]-k_Q/2; k_Q/2]$. On impose des solutions périodiques de Floquet-Bloch, de période $2\pi Q$:

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{ikx}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{ik_Q nx}\varphi_k^{(n)}.$$

D'un autre côté :

$$\cos(k_Q Px)\psi(x) = \frac{\mathrm{e}^{ikx}}{2}\sum_n \mathrm{e}^{ik_q nx}(\varphi_k^{(n-P)} + \varphi_k^{(n+P)})$$

$$\cos(k_Q x)\psi(x) = \frac{\mathrm{e}^{ikx}}{2}\sum_n \mathrm{e}^{ik_Q nx}(\varphi_k^{(n-Q)}\mathrm{e}^{i\phi} + \varphi_k^{(n+Q)}\mathrm{e}^{-i\phi})$$

et

$$\psi''(x) = -\mathrm{e}^{ikx}\sum_n (k_Q n + k)^2\varphi_k^{(n)}.$$

Ainsi l'équation de stationnaire de Schrödinger s'écrit sous la forme matricielle :

$$\mathrm{e}^{ikx}\sum_n\left\{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(k_Q n + k)^2 + V_0\right]\varphi_k^{(n)} - \epsilon V_0\left(\varphi_k^{(n-P)} + \varphi_k^{(n+P)}\right) - V_0\left(\varphi_k^{(n-Q)}\mathrm{e}^{i\phi} + \varphi_k^{(n+Q)}\mathrm{e}^{-i\phi}\right)\right\} = E\psi, \tag{B.18}$$

pouvant être diagonalisée dans le but d'obtenir le diagramme de bande d'un potentiel bichromatique de fréquences commensurables.

Cette méthode présente l'avantage de demander moins de ressource numérique que la précédente. Le nombre de niveaux étant directement relié à la taille N de la matrice, il sera nécessaire de choisir cette taille supérieure au nombre de bandes désirées multiplié par Q. Ainsi, la limite de cette méthode se situe dans la limite où P/Q tend vers un nombre irrationnel (cas incommensurable), pour lequel la périodicité disparaît.

Bibliographie

[1] G. Ritt, C. Geckeler, T. Salger, G. Cennini et M. Weitz, *Phys. Rev. A* **74** 063622 (2006).

[2] T. Salger, C. Geckeler, S. Kling et M. Weitz, *Phys. Rev. Lett.* **99** 190405 (2007).

[3] T. Salger, S. Kling, C. Grossert et M. Weitz, *Phys. Rev. Lett.* **107** 240401 (2011).

[4] M. Leder, C. Grossert et M. Weitz, *Nature Comm.* **5** 3327 (2014).

[5] M. Atala, M. Aidelsburger, J. T. Barreiro, D. Abanin, T. Kitagawa, E. Demler et I. Bloch, *Nature Physics* **9** 795 (2013).

[6] K. Urwin et F. M. Arscott, *Proc. Roy. Soc. Edinburg*, **69** 28 (1970).

[7] N. W. McLachlan, *Theory and application of Mathieu fonctions* (Dover, 1964).

[8] F. Olver, D. Lozier, R. Boisvert et C. Clark, *NIST Handbook of mathematical fonction* (Cambridge, 2010).

[9] J. E. Sträng, *Acad. Roy. Belg. Bull. Cl. Sci.*, **6** 16 (2005).

[10] R. A. Sweet, *Comm. ACM*, **12** 330 (1968).

C Étude d'un potentiel fractal

« Sous le masque de la complexité, la simplicité se questionne. »

M. Keurentjes

Sommaire

C.1 Motivations 193
C.2 Le modèle 194
C.3 Méthode de Hill 195
C.3.1 Calcul perturbatif 197
C.3.2 Obtention du diagramme de stabilité 198
C.4 Conclusion 199

C.1 Motivations

Le concept de fractal a joué un rôle majeur dans l'étude de nombreux systèmes naturels comme les côtes littorales, les cratères lunaires et même les mondes végétal et animal [1]. Ces objets d'apparence infiniment complexes peuvent toujours être caractérisés par un mode de construction sous-jacent aboutissant à une dimension fractale non entière. Une particularité de ces objets fractals est d'être auto-similaires c'est-à-dire que leur apparence semble identique à toutes les échelles (cf. chapitre 3) ; la fonction de Weierstrass en est un exemple [2].

L'étude de la propagation d'ondes électromagnétiques au travers de milieux aux caractères fractals et auto-similaires (comme par exemple les ensembles de Cantor) a mené à de nombreux articles théoriques [3, 4]. Qui plus est, une des propriétés intéressantes de ces milieux est, qu'à l'instar des milieux désordonnés, ils présentent des régimes de localisation importante qui ont été démontrés théoriquement [5] et expérimentalement [6]. De nombreux articles traitent de la résolution de l'équation de Schrödinger avec des potentiels ayant les propriétés d'un ensemble de Cantor [7,8]. Leurs études se sont faites au moyen de matrices de transfert mais, ici, la méthode numérique employée consistera à résoudre itérativement l'équation de Schrödinger discrète.

Le système que l'on propose d'étudier est la propagation d'une onde de matière dans un potentiel fractal auto-similaire ayant les propriétés de la fonction de Weierstrass. Il a été démontré analytiquement que celle-ci avait une dimension de Hausdorff non entière [9]. Cette fonction présente l'avantage analytique d'être une somme de cosinus, ce qui permet d'utiliser largement le formalisme de l'équation de Hill. Ainsi, le spectre de l'opérateur sera directement accessible par le calcul de son déterminant de Hill.

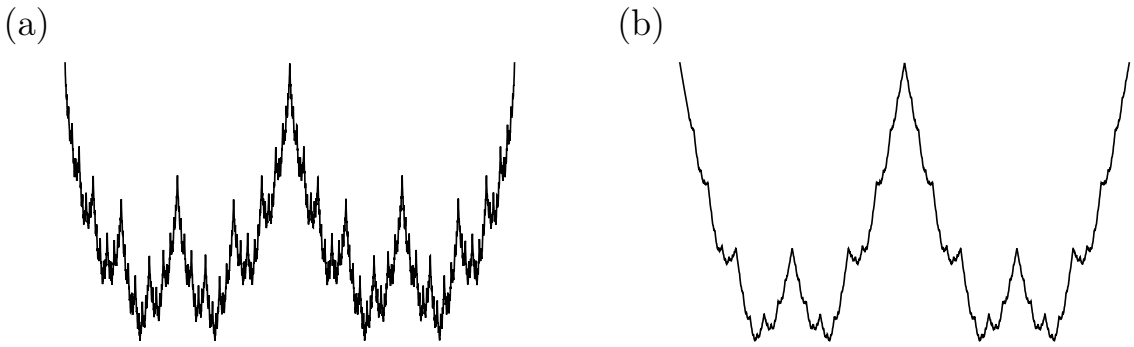


Figure C.1

Représentation graphique de la fonction de Weierstrass pour (a) $\alpha = 0.5$ et pour (b) $\alpha = 1$. Dans le premier cas, la fonction est fractale alors qu'elle ne l'est pas dans le deuxième cas.

C.2 Le modèle

Nous présentons, ici, un potentiel dont les caractéristiques reposent sur une fonction originellement définie pour ses propriétés pathologiques : la fonction de Weierstrass [10] :

$$W_{b,\alpha}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b^{-n\alpha} \cos(b^n x), \tag{C.1}$$

où $\alpha \in]0,1[$ et $b \in 1/(2\mathbb{N})$. Cette fonction, de période 2π, a été originellement introduite comme un exemple de fonction à la fois continue et non dérivable pour tout $x \in \mathbb{R}$. On peut facilement se convaincre que cette fonction est auto-similaire, *i.e.* $W_{b,\alpha}(bx) = bW_{b,\alpha}(x)$. Qui plus est, Hunt [9] a démontré récemment que le graphe de $W_{b,\alpha}$ (cf. Fig C.1) est fractal et de dimension de Hausdorff $d_H = 2 - \alpha$. Ainsi, il est possible de changer la dimension fractale en changeant simplement le facteur d'échelle entre chaque amplitude. Voyons de quelle façon il est possible de construire un potentiel partant de cette fonction, dans le cadre de l'équation de Schrödinger.

Sans perte de généralité, on choisit de prendre une valeur de $b = 2$ que l'on gardera constante par la suite. Comme un potentiel est défini à une constante près, une manière pratique de le définir est de fixer sa valeur maximale ou minimale à zéro. Dans ce cadre, la fonction de Weierstrass modifiée pour tenir compte de ces contraintes s'écrit :

$$\tilde{W}_{2,\alpha}(x) = \frac{1}{C_\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} 2^{-n\alpha} \cos(2^n x) - 1, \tag{C.2}$$

où $C_\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} b^{n\alpha} = 1/(2^{-\alpha} - 1)$ est une constante de normalisation. L'amplitude de la fonction n'est, par contre, pas normalisée à 1. On peut montrer que la fonction est bornée avec des valeurs comprises entre 0 et 2^α, ce qui définit son amplitude de variation.

Considérons l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = \frac{mv^2}{2}\psi(x), \tag{C.3}$$

pour une particule de masse m et de vitesse v. Le potentiel U est choisi de sorte que l'on ait une constante U_0, telle que : $U(x) = U_0 W_{2,\alpha}(x)$. Cette équation peut se réécrire sous la forme :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{U_0}{E_\mathrm{R} C_\alpha}\left[1 - \sum_{n=0}^{\infty} 2^{-n\alpha}\cos(2^n x)\right]\psi + \left(\frac{v}{v_\mathrm{R}}\right)^2 \psi = 0, \tag{C.4}$$

où l'on a défini les constantes $E_\mathrm{R} = \hbar^2 k_\mathrm{R}^2/(2m)$ et $v_\mathrm{R} = \hbar k/m$ avec $k_\mathrm{R} = 1$. Enfin, si l'on fait le changement d'échelle $x \to x/2$, on constate que cette équation différentielle n'est pas invariante par changement d'échelle :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left[a - 2q \sum_{n=0}^{\infty} 2^{-n\alpha} \cos(2^n x) \right] \psi = 0, \tag{C.5}$$

où on a posé

$$a = 4(v/v_\mathrm{R})^2 + 2q \text{ et } q = U_0/(E_\mathrm{R} C_\alpha). \tag{C.6}$$

La somme des coefficients $2^{-n\alpha}$ converge absolument. Cette équation peut être traitée comme une équation de Hill [11]. Dans le cas particulier où la somme est arrêtée à un seul terme, on retrouve l'équation de Mathieu [12] et lorsque l'on considère deux fréquences, on retrouve celle de Whittaker-Hill [13].

Plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour résoudre un tel problème. La théorie de Bloch permet d'extraire de la combinaison linéaire des vecteurs propres dans le cas de l'équation (C.4) une solution générale. On propose ici d'utiliser un protocole de résolution de cette équation différentielle qui est, à la fois, plus général et plus adapté pour l'étude de ce type d'équation : il s'agit de la méthode de Hill [11].

C.3 Méthode de Hill

On peut montrer [12] que les solutions de l'équation (C.5) ont la forme de Floquet :

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{\mu x} \phi(x) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} c_{2r} \mathrm{e}^{(\kappa+2ir)x}, \tag{C.7}$$

avec $\kappa \in \mathbb{C}$. Les c_{2r} ayant les propriétés de convergence suivantes :

$$\sum_{r\in\mathbb{Z}} |c_{2r}|^2 < \infty \text{ et } \lim_{r\to\pm\infty} |c_{2r}|^{1/|r|} = 0.$$

L'insertion de (C.7) dans l'équation (C.5) donne lieu à une infinité d'équations linéaires, couplées, portant sur les coefficients réels c_{2r} :

$$\sum_{r=-\infty}^{\infty} c_{2r} \left[(\kappa+2ir)^2 + a - 2q \sum_p \epsilon_p \left(\frac{\mathrm{e}^{iprx} + \mathrm{e}^{-iprx}}{2} \right) \right] \mathrm{e}^{(\kappa+2ir)x} = 0,$$

où l'on a introduit la notation $\epsilon_p = 2^{-p\alpha}$. La factorisation de tous les termes en puissance de r permet d'écrire, après factorisation des termes exponentiels, la somme :

$$q \sum_p \epsilon_p c_{2r-p} + [(\kappa+2ir)^2 + a] c_{2r} + q \sum_p \epsilon_p c_{2r+p} = 0,$$

qui, en multipliant par -1 et en divisant par $[(\kappa+2ir)^2 + a]$ donne :

$$-\frac{q}{(\kappa+2ir)^2+a} \sum_p \epsilon_p c_{2r-p} + c_{2r} - \frac{q}{(\kappa+2ir)^2+a} \sum_p \epsilon_p c_{2r+p} = 0, \tag{C.8}$$

à condition que $a \neq -(\kappa+2ir)^2$. De manière à simplifier les notations, on introduit le paramètre :

$$\gamma_{2r} = \frac{q}{(2ir+\kappa)^2 + a}. \tag{C.9}$$

Pour que les équations (C.8) soient solubles, il est nécessaire de remplir la condition :

$$\Delta(\kappa) = \begin{vmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & 1 & \epsilon_2\gamma_{-4} & \epsilon_4\gamma_{-4} & 0 & \epsilon_8\gamma_{-4} & \ddots \\ \ddots & \epsilon_2\gamma_{-2} & 1 & \epsilon_2\gamma_{-2} & \epsilon_4\gamma_{-2} & 0 & \ddots \\ \ddots & \epsilon_4\gamma_0 & \epsilon_2\gamma_0 & 1 & \epsilon_2\gamma_0 & \epsilon_4\gamma_0 & \ddots \\ \ddots & 0 & \epsilon_4\gamma_2 & \epsilon_2\gamma_2 & 1 & \epsilon_2\gamma_2 & \ddots \\ \ddots & \epsilon_8\gamma_4 & 0 & \epsilon_4\gamma_4 & \epsilon_2\gamma_4 & 1 & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{vmatrix} = 0. \tag{C.10}$$

À noter que l'on a la propriété $\gamma_{-n} = \gamma_n$. Ainsi, l'équation (C.10) est paire vis-à-vis de κ : $\Delta(-\kappa, a) = \Delta(\kappa, a)$. Comme Re$[\kappa]$ prend des valeurs entre $-\infty$ et ∞, on trouve une périodicité $\Delta(\kappa+1, a) = \Delta(\kappa, a)$ [12]. Ce comportement est analogue à un repliement dans la première zone de Brillouin. On cherche à déterminer la convergence de ce déterminant infini. L'algèbre linéaire nous informe qu'un determinant est absolument convergent :

1. si le produit des éléments diagonaux est absolument convergent,
2. si la somme des éléments non diagonaux est absolument convergente [12].

La première condition est triviale : $\prod_{r=-\infty}^{\infty} |1| = 1$. La seconde condition consiste à démontrer que la somme :

$$S = \sum_{r=-\infty}^{\infty} \left| \frac{\sum_p \epsilon_p}{(2ir+\kappa)^2 + a} \right| \simeq \frac{1}{2^\alpha - 1} \sum_{r=-\infty}^{\infty} \left| \frac{1}{(1 - i\kappa/2r)^2 - a/4r^2} \right|, \tag{C.11}$$

est convergente. Nous avons calculé précédemment la somme sur les ϵ_p, ce qui nous permet de d'évaluer la convergence de S même lorsque $p \to +\infty$, à condition que : $(2ir - \kappa) \neq \pm\sqrt{a}$ pour tout r. Puisque $|1/(1-i\kappa/2r)^2 - a/4r^2)| < |r|^{-\beta}$ pour $1 < \alpha < 2$ et que $\sum_{r=1}^{\infty} 1/r^\beta$ converge (Riemann), alors S converge absolument pour a et κ finis.

Ce déterminant converge donc partout sauf aux pôles de γ_{2r}, c'est-à-dire lorsque $(2ir - \kappa) \neq \pm\sqrt{a}$. La méthode repose sur la définition d'une fonction dont les pôles sont les mêmes que ceux du déterminant :

$$\delta(\kappa, a) = \frac{1}{\cos(\pi\kappa) - \cos(\pi\sqrt{a})}. \tag{C.12}$$

On représente cette fonction à la figure C.2. On suppose que $a \neq 4r^2$ de sorte que $\kappa = 0$ ne soit pas un pôle. On déduit de (C.12) que, si $C(\kappa)$ est une fonction choisie de manière appropriée, la fonction :

$$\Theta(\kappa, a) = \Delta(\kappa, a) - C(\kappa)\delta(\kappa, a), \tag{C.13}$$

n'est pas singulière.La fonction $C(\kappa, a)$ est choisie de sorte à ce qu'elle soit bornée à l'infini lorsque $\Delta(\kappa, a) = 1$ (car $\gamma \to 0$, ce qui implique que seule la diagonale principale demeure). Ainsi, on a la convergence $\Theta(\kappa \to i\infty, a) \to 1$ car $\delta(\kappa \to i\infty, a) = 0$. De plus, Θ n'a pas de pôle dans le plan complexe lorsque $\kappa = \sqrt{a}$, et comme il s'agit d'une fonction périodique paire, alors on en déduit qu'elle n'a pas de pôle lorsque $\kappa = \sqrt{a} - 2r$. Ainsi, comme $\Theta(\kappa, a)$ est une fonction périodique de κ, alors C est constante (fonction bornée holomorphe) d'après le théorème de Liouville et on a :

$$C = \frac{\Delta(\kappa, a) - 1}{\delta(\kappa, a)}. \tag{C.14}$$

Dès lors, dans le cas particulier où $\kappa = 0$, on a $\delta(0, a) = 1/(1 - \cos(2\pi\sqrt{a})$ et par suite : $C = (\Delta(0, a) - 1)(1 - \cos(\pi\sqrt{a})$. En injectant cette constante dans l'équation (C.14), on obtient, dans le cas où $\Delta(\kappa, a) = 0$, la solution analytique de l'*exposant de Floquet-Mathieu* :

$$\kappa(a) = \frac{1}{\pi} \arccos\left[1 - \Delta(0)(1 - \cos(2\pi\sqrt{a}))\right]. \tag{C.15}$$

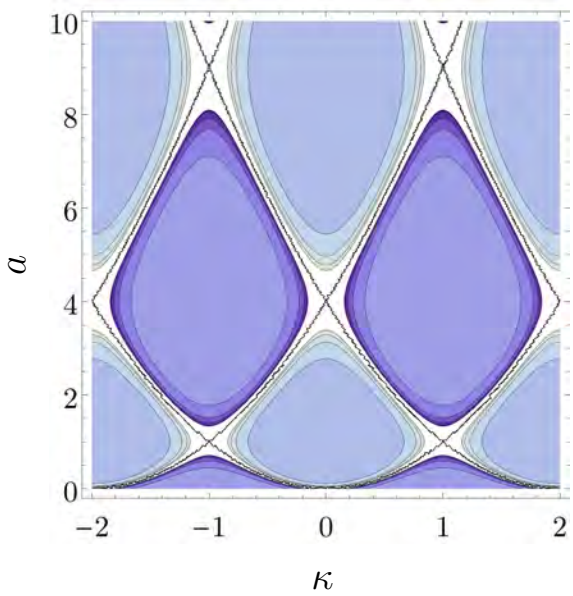


Figure C.2

Représentation graphique de la fonction (C.12) dans l'espace des paramètres (a,κ). Les courbes noires représentent les pôles de la fonction.

Où le déterminant de Hill pour $\kappa = 0$ prend la forme :

$$\Delta(0) = \begin{vmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & 1 & q\epsilon_2/(a-16) & q\epsilon_4/(a-16) & 0 & q\epsilon_8/(a-16) & \ddots \\ \ddots & q\epsilon_2/(a-4) & 1 & q\epsilon_2/(a-4) & q\epsilon_4/(a-4) & 0 & \ddots \\ \ddots & q\epsilon_4/a & q\epsilon_2/a & 1 & q\epsilon_2/a & q\epsilon_4/a & \ddots \\ \ddots & 0 & q\epsilon_4/(a-4) & q\epsilon_2/(a-4) & 1 & q\epsilon_2/(a-4) & \ddots \\ \ddots & q\epsilon_8/(a-16) & 0 & q\epsilon_4/(a-16) & q\epsilon_2/(a-16) & 1 & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{vmatrix} \tag{C.16}$$

C.3.1 Calcul perturbatif

On peut montrer que, perturbativement, c'est-à-dire pour $q \approx 0$, le déterminant (C.16) peut se développer suivant [12] :

$$\Delta(0) \simeq 1 + \frac{\pi \cot(\pi\sqrt{a}/2)}{4\sqrt{a}} \sum_p \frac{q\epsilon_p^2}{p^2 - a}. \tag{C.17}$$

La somme peut être réécrite en termes des puissances de 2, de sorte que l'on ait :

$$\sum_p \frac{\epsilon_p^2}{p^2 - a} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2^{-2\alpha(n-1)}}{2^{2(n-1)} - a}. \tag{C.18}$$

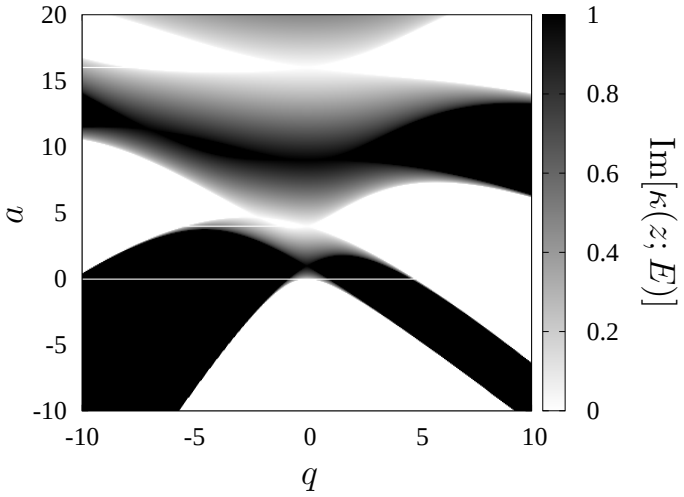


Figure C.3

Partie imaginaire de l'exposant de Mathieu κ en fonction des paramètres a et q, pour un exposant $\alpha = 0.5$, soit une dimension fractale du potentiel $D_{\mathrm{H}} = 1.5$.

Cette somme converge car $\alpha \in [0, 1]$ et a est fini. On peut, dans certains cas particuliers, calculer analytiquement sa valeur comme, par exemple pour $\alpha = 1$:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2^{-2(n-1)}}{2^{2(n-1)} - a} = -\frac{3\Psi_4\left(-\frac{\log(a)}{\log(4)}\right) + a\log(256) + 3\log(a) + \log(216)}{a^2 \log(64)}$$

où $\Psi_4(z)$ est la fonction poly-gamma.

C.3.2 Obtention du diagramme de stabilité

La méthode de Hill permet de dégager, à partir du déterminant (C.16) et de l'équation (C.15), les zones de stabilité de l'équation (C.4). Les zones de stabilité sont identifiées aux zones pour lesquelles la partie imaginaire de l'exposant de Mathieu κ est nulle, et les zones d'instabilité sont identifiées aux zones non nulles. Le développement perturbatif effectué plus haut n'est valide que lorsque q est petit. On propose ici de réaliser numériquement le calcul de l'exposant mais cette fois-ci, à partir du déterminant de la matrice (C.16). Comme cette matrice est de dimension infinie, il est nécessaire de la réduire. Nous avons discuté dans le cadre du chapitre portant sur les réseaux optiques (cf. chapitre 2), que la dimension N_M de la matrice est directement reliée au nombre de zones de stabilités (au nombre de bandes dans le vocabulaire de l'équation de Schrödinger), qui est égal à $2N_M + 1$. Plus la taille sera grande, plus le déterminant sera en mesure de résoudre des zones de a élevées. Ici vient se rajouter la contrainte du nombre de fréquences. Plus l'on prendra en compte d'harmoniques de la fonction de Weierstrass pour le calcul, plus il sera nécessaire d'avoir une taille de matrice importante.

De manière à discuter la distribution du spectre, on se place dans le cas d'un potentiel ayant un nombre d'harmoniques $N = 6$ (sachant que les ϵ_p décroissent exponentiellement et, par conséquent, n'ont pratiquement pas d'impact sur la distribution de κ). La figure C.3 résulte du calcul de la partie imaginaire de κ dans ce cas. On observe que la distribution n'est pas symétrique par rapport à l'axe des $q = 0$, contrairement au cas de l'équation de Mathieu discuté au chapitre 2. Ceci est une conséquence de l'ajout d'harmoniques plus élevées qui viennent briser la symétrie $q \to -q$. En parallèle, on peut remarquer qu'il se produit un croisement évité pour $q = -4$ et $q = -7$. L'apparition de ces croisements est

discutée dans [14,15]. L'interprétation qui est faite, par les auteurs, est que la création de ces « poches » d'instabilité proviennent d'un repliement et d'une projection du diagramme. On peut, par ailleurs, les observer dans le cadre de la diffusion d'une onde plane sur un potentiel carré de taille finie [16] dont les harmoniques de la série de Fourier sont, elles aussi, paires.

Cette méthode est commune à tous les potentiels périodiques dont le rapport des harmoniques est de 2. Dans le cas de la fonction de Weierstrass, ces harmoniques sont définies par des puissances de 2 par définition. Le calcul de l'exposant de Mathieu au moyen de la méthode de Hill ne repose sur aucune hypothèse concernant la valeur de α et, par conséquent, concernant la dimension fractale du potentiel (à condition que la somme des ϵ_p converge). Le retour à l'équation de Schrödinger peut se faire simplement en reprenant la transformation (C.6).

C.4 Conclusion

Le calcul du spectre de l'équation de Schrödinger stationnaire dans le cas d'un potentiel fractal est un problème important de physique car il se rencontre dans de nombreux systèmes de matière condensée. Les propriétés d'auto-similarité du système ne permettant pas de résoudre, ou du moins de simplifier le problème, il peut être difficile de calculer le spectre d'un tel opérateur de manière analytique. Les résultats originaux présentés dans cette annexe sont basés sur l'utilisation de la fonction de Weierstrass dont la dimension fractale peut être modifiée à l'aide d'un seul paramètre d'amplitude. Résoudre l'équation de Schrödinger, dans le cas de ce potentiel, revient à résoudre l'équation de Hill correspondante. Dans la limite où la profondeur du potentiel est petite devant l'énergie de recul, nous avons montré qu'un calcul perturbatif permet de résoudre le spectre, quelle que soit la dimension fractale. Dans le cas général, un calcul numérique du déterminant de Hill a conduit à l'observation d'une brisure de symétrie du spectre.

Il est possible d'étudier la propagation d'un paquet d'ondes dans ce type de potentiel fractal, l'équation stationnaire permettant d'interpréter (semi-classiquement) la dynamique d'un tel paquet. Il serait intéressant de comparer sa distribution à celle qu'il aurait dans un potentiel de type *speckle* autosimilaire, dont les harmoniques sont aléatoires mais, elles aussi, exponentiellement décroissantes.

Bibliographie

[1] B. B. Mandelbrot, *The fractal geometry of nature* (Henry Holt and Company, New-York, 1983).

[2] A. Okniński, *Chaos, Solitons and Fractals* **23** 731 (2005).

[3] K. Honda et Y. Otobe, *J. Phys A : Math. Gen* **39** L315 (2009).

[4] N. L. Chuprikov et O. V. Spiridonova, *J. Phys A : Math. Gen* **39** L559–L562 ().

[5] A. M. Garcia-Garcia et E. Cuevas, *Phys. Rev. E* **82** 033412 (2010).

[6] M. W. Takeda, S. Kirihara, Y. Miyamoto, K. Sakoda et K. Honda, *Phys. Rev. Lett.* **92** 9 (2004).

[7] J. A. Monsoriu, F. R. Villatoro, M. J. Marin, J. Pérez et L. Monreal, *Am. J. Phys* **9** 831 (2006).

[8] J. A. Monsoriu, F. R. Villatoro, M. J. Marin, J. F. Urchueguia et P. F. de Cordoba, *Eur. J. Phys.* **26** 603 (2005).

[9] B. R. Hunt, *Proc. Am. Math. Soc.* **3** 791 (1998).

[10] K. Weierstrass, *Abhandlungen aus der Functionenlehre.* (Springer, Berlin, 1886).

[11] W. Magnus et S. Winkler, *Hill's Equation*, (Wiley and sons, New York, 1966).

[12] N. W. McLachlan, *Theory and application of Mathieu functions*, (Dover, New-York, 1964).

[13] K. M. Urwin et F. M. Arscott, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh* **69** 28 (1970).

[14] H. Broer et M. Levi, *Arch. Rational Mech. Anal.* **131** 225 (1995).

[15] M. Levi, *SIAM Review* **30** 639 (1988).

[16] P. Cheiney, *Matter wave scattering on complex potentials* (Thèse, 2013).

Liste des publications

Realization of tunnel barriers for matter waves using spatial gaps

Pierrick Cheiney, François Damon, Gabriel Condon, Bertand Georgeot, David Guéry-Odelin
EuroPhysic Letters **103** 50006 (2013)

We experimentally demonstrate the trapping of a propagating Bose-Einstein Condensate in a Bragg cavity produced by an attractive optical lattice with a smooth envelope. As a consequence of the envelope, the band gaps become position-dependent and act as mirrors of finite and velocity-dependent reflectivity. We directly observe both the oscillations of the wave packet bouncing in the cavity provided by these spatial gaps and the tunneling out for narrow classes of velocity. Synchronization of different classes of velocity can be achieved by proper shaping of the envelope. This technique can generate single or multiple tunnel barriers for matter waves with a tunable transmission probability, equivalent to a standard barrier of submicron size.

Reduction of local velocity spreads by linear potentials

François Damon, François Vermersch, Juan Gonzalo Muga, David Guéry-Odelin
Physical Review A **89** 053626 (2014)

We study the spreading of the wave function of a Bose-Einstein condensate accelerated by a constant force both in the absence and in the presence of atom-atom interactions. We show that, despite the initial velocity dispersion, the local velocity dispersion defined at a given position downward can reach ultralow values and be used to probe very narrow energetic structures. We explain how one can define quantum mechanically and without ambiguities the different velocity moments at a given position by extension of their classical counterparts. We provide a common theoretical framework for interacting and non-interacting regimes based on the Wigner transform of the initial wave function that encapsulates the dynamics in a scaling parameter. In the absence of interaction, our approach is exact. Using a numerical simulation of the 1D Gross-Pitaevskii equation, we provide the range of validity of our scaling approach and find a very good agreement in the Thomas-Fermi regime. We apply this approach to the study of the scattering of a matter wave packet on a double barrier potential. We show that a Fabry-Perot resonance in such a cavity with an energy width below the pK range can be probed in this manner. We show that our approach can be readily transposed to a large class of many-body quantum systems that exhibit self-similar dynamics.

Band gap structures for matter waves

François Damon, Gabriel Condon, Pierrick Cheiney, Aéla Fortun, Bertrand Georgeot, Juliette Billy, David Guéry-Odelin
Phys. Rev. A **92** 033614 (2015).

Spatial gaps correspond to the projection in position space of the gaps of a periodic structure whose envelope varies spatially. They can be easily generated in cold atomic physics using finite-size optical lattice, and provide a new kind of tunnel barriers which can be used as a versatile tool for quantum devices. We present in detail different theoretical methods to quantitatively describe these systems, and show how they can be used to realize in one dimension matter wave Fabry-Perot cavities. We also provide experimental and numerical results that demonstrate the interest of spatial gaps structures for phase space engineering. We then generalize the concept of spatial gaps in two dimensions and show that this enables to design multiply connected cavities which generate a quantum dot structure for atoms or allow to construct curved wave guides for matter waves. At last, we demonstrate that modulating in time the amplitude of the periodic structure offers a wide variety of possible atom manipulations including the control of the scattering of an incoming wave packet, the loading of cavities delimited by spatial gaps, their coupling by multiphonon processes or the realization of a tunable source of atoms. This large range of possibilities offered by space and time engineering of optical lattices demonstrates the flexibility of such band gap structures for matter wave control, quantum simulators and atomtronics.

Liste des notations

Paramètres

Grandeurs	Symboles	Valeurs
Longueur d'onde du laser	$\lambda = 2\pi/k$	854 nm
Demi-angle entre les 2 faisceaux	θ	81°
Light-shift	ζ	-7.7×10^{-36} J.W^{-1}.m^{-2}
Période du réseau	d	650 nm
Waist	w	145 μm
Moment de recul	$k_{\mathrm{R}} = 2\pi/d$	4×10^{12} m^{-1}
Vitesse de recul	$v_{\mathrm{R}} = \hbar k_{\mathrm{R}}/m$	7.05 mm.s^{-1}
Énergie de recul	E_{R}	3.6×10^{-30} J ($\simeq 262\ k_B$.nK)

Constantes

Grandeurs	Symboles	Valeurs
Charge de l'électron	e	1.602176×10^{-19} C
Constante de Planck	h	$6,62606957 \times 10^{-34}$ J.s
Constante de Planck réduite	$\hbar$	1.05459×10^{-34} J.s
Constante de Boltzmann	k_{B}	1.3807×10^{-23} J.K^{-1}
Accélération de la gravité	γ	9.81 m.s^{-2}
Rayon de Bohr	a_{B}	0.529177×10^{-10} m
Masse de l'électron	m_e	$9,109 \times 10^{-31}$ kg
Masse du rubidium 87	m	1.45×10^{-25} kg

Variables et Fonctions

Grandeurs	Symboles	Unité
Champ magnétique	$\vec{B}$	T
Densité d'atome	n	m^{-1}
Déterminant de Hill	$\Delta(\kappa, a)$	
Déviation à la vitesse moyenne locale	$D_{v\|x}$	$\mathrm{m}^{1/2}.\mathrm{s}^{-1/2}$
Dimension de Hausdorff	d_H	
Dispersion globale en position	Δx	m
Dispersion globale en vitesse	Δv	$\mathrm{m.s}^{-1}$
Dispersion locale en vitesse	Δv_x	$\mathrm{m.s}^{-1}$
Distribution de Wigner	$W(q,p)$	J^{-1}
Exposant de Mathieu	κ	m
Finesse	$\mathcal{F}(E)$	
Flux de particule local	J_x	s^{-1}
Fonction de Bloch	$\psi_{n,k}$	$\mathrm{m}^{-1/2}$
Fonction de Wannier	$w_{n,k}$	$\mathrm{m}^{-1/2}$
Fonction de Weierstrass	$W_{\alpha,b}(x)$	
Fonction gamma de Euler	$\Gamma(z)$	
Hamiltonien	H	J
Impulsion	p	$\mathrm{kg.m.s}^{-1}$
Longeur de collision	a_0	m
Longeur de diffusion	a_{sc}	m
Moments en vitesse	$V_n(x)$	
Monochromaticité locale	$\mathcal{M}_x$	
Nombre de sites du réseau	$\mathcal{N}$	
Nombre de particules	N	
Paramètre d'interaction	χ	
Position de centre-de-masse	$\langle x \rangle$	m
Potentiel	U	J
Potentiel chimique	μ	J
Potentiel vecteur magnétique	$\vec{A}$	$T.m^{-1}$
Profondeur relative	q	
Pulsation propres de l'oscillateur harmonique	ω_0	$\mathrm{rad.s}^{-1}$
Pulsation cyclotron	ω_c	$\mathrm{rad.s}^{-1}$
Quantum de flux magnétique	ϕ_0	$\mathrm{J.s.C}^{-1}$
Rayon cyclotron	R_c	m
Rayon de Thomas-Fermi	R_{TF}	m
Résistance de Hall	R_{H}	Ω
Temps de montée du réseau	τ	s
Temps d'aller-retour semi-classique dans une cavité	τ_{sc}	s
Transmission WKB	$T(E)$	
Transmission semi-classique	$T_{\mathrm{FP}}(E)$	
Variance en vitesse locale	$\sigma_{v\|x}$	$\mathrm{m}^{1/2}.\mathrm{s}^{-1/2}$
Vitesse moyenne (de groupe)	$\langle v \rangle$	$\mathrm{m.s}^{-1}$
Vitesse moyenne locale	$\bar{v}_x$	$\mathrm{m.s}^{-1}$

Résumé

Ce manuscrit présente les travaux que j'ai effectués au Laboratoire de Physique Théorique durant ma thèse. Ils portent sur l'interaction d'ondes de matière avec des réseaux optiques modulables en temps et en espace. L'utilisation de ces réseaux a permis de contrôler de manière cohérente les propriétés dynamiques d'un gaz d'atomes ultra-froids. Cette étude théorique a été réalisée en collaboration avec le groupe Atomes Froids du Laboratoire LCAR. Les variations spatiales de l'enveloppe du réseau créent, localement, des gaps spatiaux créant une cavité de Bragg pour onde de matière, dont nous avons étudié en détail les propriétés et qui a fait l'objet d'une réalisation expérimentale impliquant la propagation d'un condensat de Bose-Einstein de rubidium 85 dans un guide d'onde. Nous avons également étudié la propagation d'un nuage d'atomes dans un réseau bichromatique qui permet de réaliser un simulateur quantique du modèle de Harper. Le spectre du hamiltonien de ce système a une dimension fractale pouvant être caractérisée numériquement. Nous avons montré, par ailleurs, qu'il est possible d'exploiter les interactions inter-atomiques répulsives d'un condensat de Bose-Einstein afin d'amplifier les corrélations position-vitesse lors de sa propagation dans un guide. Notre étude montre qu'une mesure des grandeurs dynamiques locales du nuage atomique permet de sonder expérimentalement les résonances d'un potentiel optique jusqu'à l'échelle du picoKelvin. Enfin, un nuage d'atomes en interaction attractive admet une solution d'équilibre : le soliton. Nous avons démontré, numériquement, que celui-ci peut être utilisé pour sonder des états liés d'un potentiel de taille finie, en peuplant ces états lors d'une expérience de diffusion comme, par exemple, des états de surface.

Abstract

This thesis presents the studies that I did at the Laboratoire de Physique Théorique. It concerns the interaction between matter waves and time and space depandant optical lattices. Using such lattices allows one to manipulate coherently the dynamical properties of ultra cold atoms. This theoretical study has been done in collaboration with the Cold Atoms group at the LCAR laboratory. The spatial variations of the lattice envelope locally create spatial gaps which create a Bragg cavity for matter waves. We have studied in detail their properties and the cavity has been realized experimentally by using a Rubidium 85 Bose-Einstein condensate in a wave guide. We have also studied the propagation of an atomic cloud in a bichromatic optical lattice which allows us to make a quantum simulator of the Harper model. The spectrum of the system Hamiltonian posseses a fractal dimension which can be numerically characterized. We have also shown that it is possible to use the repulsive interatomic interaction of a Bose-Einstein condensate in order to amplify the momentum-position correlation during propagation in a guide. Our study shows that a mesure of local dynamical quantities of the atomic cloud enables one to experimentally probe resonances of an optical potential down to the picoKelvin scale. At last, an atomic cloud with attractive interactions admit a stable solution, the soliton. We have numerically demonstrated that this soliton can be used to probe bound states of a potential by populating those states through a scattering experiment, for example surface states.