Promotion 2007 Année 3 Période 2 MAT560

Programmes d'approfondissement Mathématiques Mathématiques appliquées

Équation de Schrödinger non linéaire : des condensats de Bose Einstein aux supersolides

Amandine Aftalion, Jean Dalibard, Christophe Josserand

Édition 2010

Table des matières

1	L'équation de Schrodinger non linéaire			
	1.1	Une é	quation, plusieurs contextes	1
		1.1.1	Condensats de Bose-Einstein gazeux	2
		1.1.2	Modélisation de l'hélium liquide superfluide	3
		1.1.3	Modèle de supersolide	4
		1.1.4	Optique non-linéaire	4
		1.1.5	Mécanique des fluides	5
	1.2	Propri	iétés générales	5
		1.2.1	Adimensionnalisation	6
		1.2.2	Conditions aux bords	6
		1.2.3	Invariance	7
		1.2.4	Quantités conservées	7
		1.2.5	Solutions stationnaires	9
		1.2.6	Solutions stationnaires pour d'autres dynamiques	9
		1.2.7	Formulation hydrodynamique	10
		1.2.8	Longueur de cicatrisation	11
	1.3	Objec	tifs du cours	12
2	La f	fonctio	onnelle d'énergie	13
	2.1	La cor	ndensation de Bose-Einstein d'un gaz parfait	14
		2.1.1	Particules dans une boîte cubique	14
		2.1.2	Particules dans un piège harmonique	14
	2.2	Obser	vation expérimentale de la condensation	15
		2.2.1	La superfluidité de l'hélium	15
		2.2.2	Condensation de gaz atomiques	15
	2.3	Boson	s en interaction : approximation de champ moyen	17
		2.3.1	L'hamiltonien du problème	17
		2.3.2	Collisions à basse énergie	17
		2.3.3	L'approximation de Hartree	18
		2.3.4	Fonctionnelle d'énergie adimensionnée	19

3	Minimisation de fonctionnelles			21				
	3.1	Rappe	els sur les espaces L^p , H^1	22				
	3.2	Passag	ge de l'énergie à l'équation	23				
		3.2.1	Fonctionnelle sans contrainte	23				
		3.2.2	Fonctionnelle avec contrainte : multiplicateur de Lagrange	25				
	3.3	Existence du minimum						
		3.3.1	Convergence faible et régularité dans H^1	27				
		3.3.2	Cas modèle : le domaine borné	29				
		3.3.3	Cas de $\mathbb R$ avec un potentiel de piégeage	30				
4	Cor	Condensats, couches limites et solitons 3						
	4.1	Struct	ures spatiales des condensats de Bose-Einstein	31				
		4.1.1	Solution du condensat sans interaction	32				
		4.1.2	Quelques estimations en présence d'interactions	33				
		4.1.3	Régime d'interactions fortes : approximation de Thomas-Fermi	36				
		4.1.4	Au-delà de l'approximation de Thomas-Fermi : couche limite au	97				
	4.9		30 20					
	4.2	1 9 1	Solitons on optique pon linésire	- 39 - 41				
		4.2.1	Solitons dans l'hélium et les condensats	43				
5	Pro	Droppiátás du condensat						
0	51	1 Principo du maximum						
	5.1	Unicité du minimisour						
	5.3	Bornes supérieures bornes inférieures						
	5.4	Méthode de sur et sous solutions						
6	Dyı	ynamique 5						
	6.1	Spectr	e d'excitations	57				
		6.1.1	Linéarisation de NLS	57				
	6.0	6.1.2	Cas d'un système homogène et isotrope	58				
	6.2	Propri	létés de l'équation de Bogoliubov	60				
		6.2.1	Interactions répulsives : $G > 0$	60				
	6.0	6.2.2	Interactions attractives : $G < 0$	61				
	6.3	Lien a		62				
		6.3.1	Spectre d'excitation	62				
		6.3.2	Vitesse critique de Landau	62				
		6.3.3	Comparaison avec le spectre d'excitation de l'hélium superfluide	63				
7	Mo	Iodèle de supersolides65						
	7.1	Qu'est	-ce qu'un supersolide?	65				

	7.2 Potentiel non-local		iel non-local	66						
		7.2.1	Quelques éléments mathématiques	67						
		7.2.2	Spectre d'excitations	69						
		7.2.3	Minimum roton	70						
		7.2.4	Un modèle de solide quantique	70						
	7.3	Propri	étés mécaniques	73						
		7.3.1	Principe de la méthode d'homogénisation	73						
		7.3.2	Equations macroscopiques	73						
		7.3.3	Propagation d'onde dans les supersolides	74						
8	Fluide en rotation et vortex									
	8.1	Mise e	n rotation des condensats	77						
		8.1.1	Observation expérimentale	78						
		8.1.2	Description d'un condensat en rotation	78						
	8.2	Solutio	on avec 1 vortex	80						
	8.3 Solutions à plusieurs vortex		ons à plusieurs vortex	82						
		8.3.1	Existence du minimum	82						
		8.3.2	Echelles de longueur	83						
	8.4	Réseau	ı d'Abrikosov	86						
		8.4.1	Niveau de Landau fondamental	87						
		8.4.2	L'énergie du réseau	90						
		8.4.3	Réseau optimal	91						
Bibliographie										

Bibliographie

Chapitre 1

L'équation de Schrödinger non linéaire

L'équation de Schrödinger non-linéaire permet de décrire de nombreux systèmes physiques dans des domaines aussi divers que les fluides et solides quantiques, les écoulements compressibles, la propagation de la lumière dans les fibres optiques et la propagation d'ondes de surface sur des films liquides minces. La forme générale de cette équation en dimension d est :

$$i\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\Delta\psi(\boldsymbol{r},t) + G|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\psi(\boldsymbol{r},t) , \qquad (1.1)$$

où

$$\boldsymbol{r} = \sum_{i=1}^{d} x_i \boldsymbol{e}_i, \qquad ext{et} \qquad \Delta = \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \;.$$

Le paramètre G caractérise la non-linéarité du problème.

Dans le contexte des fluides et solides quantiques, l'équation de Schrödinger nonlinéaire est également appelée équation de Gross-Pitaevskiĭ (notée G-P dans la suite). Elle a été introduite en 1961 indépendamment par Gross et Pitaevskiĭ pour décrire de manière phénoménologique la dynamique de l'hélium superfluide. Il s'est révélé qu'elle donne également une excellente description des condensats de Bose-Einstein gazeux. Dans la littérature, on utilise la dénomination « équation de Gross-Pitaevskiĭ » dans le cadre des fluides quantiques et « équation de Schrödinger non-linéaire » dans tous les autres contextes. Nous adopterons ici cette seconde dénomination et nous utiliserons son abréviation anglaise NLS (pour *non linear Schrödinger equation*).

Dans ce premier chapitre, nous allons d'abord présenter quelques phénomènes physiques qui sont modélisés par cette équation. Nous discuterons ensuite ses propriétés générales.

1.1 Une équation, plusieurs contextes

L'équation de Schrödinger non-linéaire se retrouve dans de nombreux contextes physiques qu'on peut classer en deux catégories. Tout d'abord, l'équation permet de décrire directement le système physique moyennant quelques approximations et hypothèses; c'est le cas notamment pour les gaz quantiques comme les condensats de Bose-Einstein ou pour l'optique non-linéaire. Pour la seconde catégorie, l'équation de Schrödinger non-linéaire offre une modélisation pertinente et simplifiée d'un système physique bien plus complexe; c'est le cas par exemple pour la physique de l'hélium liquide et solide à basse température ou les écoulements fluides.

1.1.1 Condensats de Bose-Einstein gazeux

La condensation de Bose-Einstein d'un gaz atomique dilué a été observée expérimentalement en 1995, à partir de vapeurs d'atomes alcalins confinés dans un piége magnétique. L'assemblée d'atomes est amenée au seuil de condensation par refroidissement laser, suivi d'un refroidissement par évaporation, la température finale étant inférieure au microKelvin. L'équation de Gross-Pitaevskiĭ décrit de manière quantitative les propriétés de ces condensats de Bose-Einstein. À température nulle, on peut considérer en bonne approximation que toutes les particules occupent le même état quantique $\psi(\mathbf{r}, t)$, dont l'évolution est donnée par

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\boldsymbol{r},t) + V(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t) + Ng|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\psi(\boldsymbol{r},t) .$$
(1.2)

La fonction $\psi(\mathbf{r}, t)$ est à valeurs complexes et est appelée fonction d'onde du condensat. Le paramètre m représente la masse d'un atome, $V(\mathbf{r}, t)$ le potentiel extérieur qui confine le gaz (confinement magnétique ou optique, qui peut dépendre du temps) et N le nombre de particules dans le condensat. La constante de couplage g est reliée à la longueur de diffusion a qui caractérise l'interaction entre deux atomes à basse énergie : $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ (cf. chapitre 2). Notons que a (et donc g) peut être positive ou négative suivant l'espèce atomique utilisée. Pour les condensats réalisés expérimentalement, on a souvent a positif.

En première approximation, le potentiel V est souvent considéré harmonique :

$$V(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}m\sum_{i=1}^d \omega_i^2 x_i^2 ,$$

où les ω_i sont les fréquences de piégeage, qui peuvent éventuellement dépendre du temps. Comme le potentiel V tend vers l'infini quand $|\mathbf{r}| \to \infty$, la fonction ψ est choisie de carré sommable, avec la condition de normalisation usuelle en physique quantique :

$$\int_{\mathcal{D}} \psi(\boldsymbol{r}, t) \psi^*(\boldsymbol{r}, t) \mathrm{d}^d r = \int_{\mathcal{D}} |\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 \mathrm{d}^d r = 1 ,$$

où le domaine d'intégration \mathcal{D} correspond au domaine physique étudié en dimension d, \mathbb{R}^d en général. Avec cette convention, la densité du condensat est donnée par

$$ho(oldsymbol{r},t)=N|\psi(oldsymbol{r},t)|^2$$
 ,

et le terme non-linéaire de (1.2) $Ng|\psi|^2\psi = g\rho\psi$ s'interprète simplement : il correspond à l'évolution de la fonction d'onde ψ dans le potentiel de champ moyen $V_{\rm cm}(\mathbf{r}, t)$,

$$V_{\rm cm}(\boldsymbol{r},t) = g\,\rho(\boldsymbol{r},t)\;,\tag{1.3}$$

créé par l'ensemble des particules du gaz au point \boldsymbol{r} . La vitesse locale $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},t)$ est reliée au courant de particules par

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = rac{iN\hbar}{2m} \left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi \right) = \rho(\boldsymbol{r},t) \, \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},t) \; .$$

Une discussion plus détaillée de cette équation dans le contexte des condensats de Bose-Einstein sera présentée dans le chapitre 2.

1.1.2 Modélisation de l'hélium liquide superfluide

L'équation de Gross-Pitaevskiĭ a été proposée indépendamment par Gross et Pitaevskiĭ en 1961 pour modéliser les propriétés de l'hélium superfluide. En dessous de la température de transition T_{λ} , appelée le point λ , (environ 2.2 kelvins), l'hélium liquide présente la propriété de superfluidité, c'est-à-dire qu'il peut s'écouler sans frottement (expérimentalement, on observe l'annulation de la viscosité de l'hélium lors du passage au travers de tubes capillaires fins). Dans le cadre de la modélisation de l'hélium superfluide, l'équation de Gross-Pitaevskiĭ s'écrit sous la forme générale :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\boldsymbol{r},t) + \psi(\boldsymbol{r},t) \int_{\mathcal{D}} U(\boldsymbol{r}'-r) |\psi(\boldsymbol{r}',t)|^2 \mathrm{d}^3 r' , \qquad (1.4)$$

où $\psi(\mathbf{r}, t)$ est une fonction à valeurs complexes appelé ici fonction d'onde du superfluide, m la masse effective de l'atome d'hélium et $U(\mathbf{r})$ modélise le potentiel d'interaction entre deux atomes d'hélium dans le superfluide.

Bien que cette équation permette de modéliser de nombreuses propriétés d'un superfluide, on ne sait pas la démontrer à partir de la description quantique microscopique du liquide formé par les atomes d'hélium en interaction. En effet, la justification de l'équation de Gross-Pitaevskiĭ à partir de l'équation de Schrödinger pour N particules en interaction implique des hypothèses sur la faiblesse des interactions (cf. chapitre 2) qui ne sont pas satisfaites pour l'hélium liquide, alors qu'elles le sont pour les condensats gazeux. L'équation de G-P appliquée à l'hélium liquide doit donc être considérée comme une description phénoménologique, qui s'est avérée très fructueuse au fil des années.

On se place souvent dans l'approximation d'un potentiel d'interaction à courte portée, pour lequel on peut prendre $U(\mathbf{r}) = g\delta(\mathbf{r})$ ($\delta(\mathbf{r})$ étant la masse de Dirac en \mathbf{r}) et qui donne l'équation :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\boldsymbol{r},t) + g|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 \psi(\boldsymbol{r},t) . \qquad (1.5)$$

Cette équation est très voisine de l'équation (1.2) écrite pour les condensats gazeux. Notons toutefois deux différences. D'une part, le potentiel de piégeage est absent car on s'intéresse ici à un liquide de densité uniforme, occupant tout l'espace. D'autre part, puisque le nombre de particules N qui figurait dans (1.2) n'est plus un paramètre pertinent, on modifie légèrement la signification physique de $|\psi|^2$. Alors que pour le condensat gazeux, la densité de particules était donnée par $\rho = N|\psi|^2$, on pose pour l'hélium liquide

$$\rho(\boldsymbol{r},t) = |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 ,$$

ce qui conduit au terme de potentiel moyen $V_{\rm cm} = g\rho = g|\psi|^2$ dans (1.5), identique à celui apparaissant dans (1.3).

Comme pour les condensats gazeux, on déduit la vitesse \boldsymbol{v} du superfluide à partir du courant de probabilité

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = rac{i\hbar}{2m} \left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi \right) = \rho \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},t) \; .$$

1.1.3 Modèle de supersolide

Récemment, des propriétés de superfluidité ont été observées dans l'hélium solide pour des températures inférieures à 100 mK. Cette « supersolidité » se caractérise par un découplage de la masse du solide en rotation : tout se passe comme si une partie de l'hélium solide ne tournait pas lorsque l'on met le solide en rotation.

On peut obtenir un modèle de supersolide à partir de l'équation NLS (1.4) en prenant un potentiel à deux corps $U(\mathbf{r})$ de portée finie ou plus simplement un potentiel en créneau. En particulier, on ne se place pas dans l'approximation où le potentiel se ramène à une fonction de Dirac. Nous décrirons les propriétés des solutions de cette équation dans le chapitre 7.

1.1.4 Optique non-linéaire

La propagation d'une lumière intense dans une fibre optique ou dans certains matériaux conduit à des effets non-linéaires, c'est-à-dire à des effets qui vont au delà du traitement habituel par un indice de réfraction n_0 constant. On retrouve ces caractéristiques dans les diodes électroluminescentes ou dans les lasers miniatures à semi-conducteur qu'on utilise par exemple dans les lecteurs de disques compacts, les lecteurs de code-barres ou certains pointeurs lasers.

La propagation de l'onde lumineuse en présence d'effets non-linéaires se modélise en première approximation par :

$$i\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\Delta\psi(\boldsymbol{r},t) + f(|\psi|^2)\psi(\boldsymbol{r},t) , \qquad (1.6)$$

où $f(\cdot)$ est une fonction réelle caractérisant la nonlinéarité de l'interaction lumière-matière. La fonction d'onde ψ est reliée à la composante de Fourier lentement variable du champ électromagnétique de l'onde se propageant à une (ou autour d'une) fréquence donnée. Le terme de diffraction (le laplacien) peut provenir de la diffraction proprement dite des ondes et/ou de leur dispersion. La non-linéarité est due au fait que l'indice de réfraction dépend de l'intensité lumineuse. On retrouve l'équation de NLS précédente (1.1) dans le cas de l'effet Kerr, pour lequel on peut prendre une relation affine entre l'indice de réfraction n et l'intensité $I = |\psi|^2$ dans le domaine optique considéré : $n(I) = n_0 + \alpha I$. En optique nonlinéaire, la fonction d'onde n'est pas normalisée puisqu'elle est liée à l'intensité lumineuse. On note en fait \mathcal{I} , l'intensité totale du champ électromagnétique :

$$\mathcal{I} = \int_{\mathcal{D}} |\psi|^2 \mathrm{d}x \;. \tag{1.7}$$

La propagation de l'information dans les fibres optiques peut se faire grâce à des solutions particulières de l'équation qui se propagent le long de la fibre optique sans s'altérer : il s'agit de solitons que l'on décrira en détail dans le chapitre 6.

1.1.5 Mécanique des fluides

L'équation de Schrödinger non-linéaire apparaît également en mécanique des fluides. Comme pour l'optique non-linéaire, elle s'obtient comme l'équation d'enveloppe des ondes de surface en eau profonde. On décrit la surface de l'eau par la fonction h(x,t) comme un paquet d'ondes centrées autour du nombre d'onde k_0 :

$$h(x,t) = \Re(A(x,t)e^{i(k_0x-\omega_0t)})$$

Pour simplifier, on s'intéresse ici aux ondes suivant la direction x uniquement. A(x,t) est une fonction à valeurs complexes dont les variations spatiales sont à grande échelle par rapport à la longueur d'onde du paquet d'ondes $(k|A| \ll 1)$. La relation de dispersion des ondes de gravité à la surface de l'eau vérifie :

$$\omega_0 = \sqrt{gk_0}$$
 .

La dynamique de ces ondes dans la limite inviscide est décrite par la cinématique de l'interface et l'équation de Bernoulli (pour le potentiel de vitesse $\phi(x, y, t)$) calculée en tous points de l'interface [Hue] :

$$\frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial \phi}{\partial y} = -\frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} ,$$
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + gh = -\frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right) .$$

On peut appliquer une méthode dite multi-échelles pour développer ces équations pour un paquet d'ondes. Cette technique consiste à séparer des variables lentement variables en espace et en temps, des variations rapides associées au paquet d'ondes (de longueur d'onde $2\pi/k_0$ et pulsation $2\pi/\omega_0$). On obtient alors l'équation pour ces variables "lentes" X et T l'équation d'évolution de l'enveloppe [Hak] :

$$\frac{\partial A}{\partial T} = -i \frac{\omega_0}{8k_0^2} \frac{\partial^2 A}{\partial X^2} - i \frac{\omega_0 k_0^2}{2} A^2 A^* \ . \label{eq:delta_delt$$

On reconnaît bien alors l'équation de NLS pour l'évolution de l'amplitude complexe du paquet d'ondes.

1.2 Propriétés générales

L'équation de Schrödinger non-linéaire s'applique à divers domaines et prend des formes différentes suivant le potentiel d'interaction, la présence de potentiel extérieur ou le type de non-linéarité. Cependant, toutes ces équations partagent de nombreuses propriétés liées à la structure générale de l'équation. Nous illustrerons ces propriétés générales dans le cadre de l'équation (1.1) que nous réécrivons ci-dessous :

$$i\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\Delta\psi(\boldsymbol{r},t) + G|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\psi(\boldsymbol{r},t) . \qquad (1.8)$$

On distingue les deux cas :

- défocalisant pour G > 0 qui est la situation rencontrée pour l'hélium liquide ou la plupart des gaz atomiques d'alcalins, à l'exception notable du Lithium.
- focalisant pour G < 0 que l'on peut trouver notamment en optique non-linéaire.

1.2.1 Adimensionnalisation

Dans les exemples rencontrés ci-dessus, des coefficients apparaissaient devant les termes de dérivées temporelles ou spatiales. On peut facilement éliminer ces coefficients par un changement de variable approprié. Considérons par exemple l'équation décrivant l'hélium superfluide (1.5) avec la condition de normalisation

$$\int_D |\psi|^2 \mathrm{d}^d r = N$$

En posant

$$t' = \frac{t}{\hbar}$$
, $\mathbf{r}' = \frac{\sqrt{m}}{\hbar}\mathbf{r}$, $\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\sqrt{m}}{\hbar}\right)^{d/2}\psi'(\mathbf{r}', t')$, (1.9)

on voit que

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \psi'}{\partial t'} , \qquad \Delta \psi = \frac{m}{\hbar^2} \Delta \psi' , \qquad |\psi|^2 \mathrm{d}^d r = |\psi'|^2 \mathrm{d}^d r' ,$$

et on est ramené à une équation pour ψ' identique à (1.8) avec

$$G = g\left(\frac{\sqrt{m}}{\hbar}\right)^d$$
, $\int_{D'} |\psi'|^2 \mathrm{d}^d r' = N$.

Remarque 1.2.1 Notons qu'on peut également poser $\psi' = \sqrt{|g|} \psi$ au lieu de la relation indiquée dans (1.9). Ceci conduit à une équation du type de (1.8) avec un coefficient non linéaire $G = \pm 1$, ce qui est a priori plus simple. Toutefois il faut noter que ce changement conduit alors à une condition de normalisation de ψ' différente de celle de ψ . Nous utiliserons dans ce cours l'une ou l'autre des formulations.

1.2.2 Conditions aux bords

L'équation (1.8) est une équation aux dérivées partielles et il est important de bien spécifier les conditions aux bords ou conditions aux limites pour la fonction d'onde. Plusieurs types de conditions peuvent être imposées suivant la frontière considérée et le contexte physique :

- en général, on impose l'absence de flux de masse sur les bords des domaines considérés, ce qui se traduit par $\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = 0$, où \mathbf{n} est le vecteur normal à la frontière. Ceci peut s'imposer par une condition de Dirichlet $\psi = 0$ ou de Neuman $\nabla \psi \cdot \mathbf{n} = 0$ sur les frontières du domaine. Notons que ces deux conditions ne sont pas équivalentes puisque la condition de Dirichlet impose la densité nulle au bord du domaine alors que la condition de Neuman conduit à une vitesse normale nulle. Cette condition s'applique en particulier à la frontière d'un obstacle (par exemple une paroi solide pour un superfluide).
- − Dans le cadre des condensats gazeux où les atomes sont confinés par la présence du potentiel extérieur, il n'est pas besoin d'imposer une condition à l'infini, la condition de normalisation à l'unité de la fonction d'onde étant suffisante. En effet, cette condition et la présence du potentiel qui tend vers $+\infty$ quand $|\mathbf{r}| \rightarrow +\infty$ impliquent que la fonction d'onde tend vers 0 dans la limite $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$.
- Pour un domaine infini, il peut être plus pratique d'imposer des conditions de Dirichlet sur la densité et la vitesse : $\lim_{|\mathbf{r}|\to\infty} \rho = \rho_0$ et $\lim_{|\mathbf{r}|\to\infty} \mathbf{v} = \mathbf{V}_0$. Ces conditions sont souvent utilisées pour la modélisation d'un écoulement superfluide.
- Signalons enfin les conditions aux bords périodiques : $\psi(\mathbf{r} + L, t) = \psi(\mathbf{r}, t)$, utilisées notamment en optique non-linéaire.

1.2.3 Invariance

L'équation (1.8) présente plusieurs invariances qui sont liées à des quantités conservées par la dynamique. Ainsi, si $\psi(\mathbf{r}, t)$ est solution de (1.8), alors sont également solutions :

- $-\psi'(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r},t)e^{i\phi}$ avec ϕ nombre réel. C'est l'invariance de phase. Le terme de phase $e^{i\phi}$ se retrouve en facteur de tous les termes de NLS.
- $\psi'(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r}-b,t)$ où **b** est un vecteur quelconque. Invariance par translation.
- $-\psi'(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r}-V_0t,t)e^{-i(\frac{V_0^2t}{2}-\mathbf{V}_0\cdot\mathbf{r})}$ où V_0 est la vitesse de translation galiléenne. C'est l'invariance Galiléenne. Le terme de dérivée temporelle devient alors $i\partial_t\psi' = (i\partial_t\psi - i\mathbf{V}_0\cdot\nabla\psi + \frac{V_0^2}{2}\psi)e^{-i(\frac{V_0^2t}{2}-\mathbf{V}_0\cdot\mathbf{r})}$ et les termes supplémentaires sont compensés
- par le terme Laplacien $-\frac{1}{2}\Delta\psi' = -\frac{1}{2}(\Delta\psi + 2i\boldsymbol{V}_0\cdot\nabla\psi V_0^2\psi)e^{-i(\frac{V_0^2t}{2} \boldsymbol{V}_0\cdot\boldsymbol{r})}$. - $\psi'(\boldsymbol{r},t) = \lambda\psi(\lambda\boldsymbol{r},\lambda^2t)$ pour une condition de normalisation différente puisque $\int |\psi'|^2 =$
- $-\psi'(\mathbf{r},t) = \lambda\psi(\lambda\mathbf{r},\lambda^{-}t) \text{ pour une condition de normalisation différence puisque } \int |\psi|^2 = \lambda^{2-d} \int |\psi|^2, \text{ où } d \text{ est la dimension. C'est l'invariance par dilatation. On obtient} \\ \partial_t \psi' = \lambda^3 \partial_\tau \psi, \ \Delta \psi' = \lambda^3 \Delta \psi \text{ et } |\psi'|^2 \psi' = \lambda^3 |\psi|^2 \psi.$

1.2.4 Quantités conservées

L'équation NLS décrit une dynamique qui conserve au cours du temps deux quantités scalaires particulières :

Conservation de la masse

La masse ou le nombre de particules N dans le domaine \mathcal{D} est une quantité conservée. En effet, si on définit (en suivant la convention adoptée en section 1.1.2 pour l'interprétation de $|\psi|^2)$:

$$N = \int_{\mathcal{D}} |\psi|^2 \mathrm{d}^d r \; ,$$

et on obtient :

$$\begin{split} \frac{dN}{dt} &= \int_{\mathcal{D}} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* \right) \mathrm{d}^d r , \\ &= \int_{\mathcal{D}} i \left(\psi (-\frac{1}{2} \Delta \psi^* + \alpha |\psi|^2 \psi *) - (-\frac{1}{2} \Delta \psi + \alpha |\psi|^2 \psi) \psi^* \right) \mathrm{d}^d r , \\ &= \int_{\mathcal{D}} \frac{i}{2} \left(\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^* \right) \mathrm{d}^d r = -\int_{\mathcal{D}} \mathrm{div} \left(\frac{i}{2} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \right) \mathrm{d}^d r, \\ &= -\int_{\partial \mathcal{D}} \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} , \end{split}$$

où

$$\boldsymbol{j} = rac{i}{2}(\psi
abla \psi^* - \psi^*
abla \psi) \; .$$

En utilisant que soit $\psi = 0$, soit $\frac{\partial \psi}{\partial n} = 0$ sur le bord, on obtient que

$$\frac{dN}{dt} = 0$$

Si on considère la convention de normalisation unitaire de la fonction d'onde adoptée en section 1.1.1, la conservation de la masse correspond alors à la conservation de cette condition de normalisation.

Conservation de l'énergie

On définit également l'énergie

$$E(\psi) = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{D}} \left(|\nabla \psi|^2 + G |\psi|^4 \right) d^d r \,.$$

On montre alors de manière similaire que

$$\frac{dE}{dt} = 0 \; .$$

Dans la suite, il sera utile de décomposer l'énergie en un terme d'énergie cinétique E_{cin} et un terme d'énergie potentiel d'interaction E_{pot} :

$$E_{\rm cin} = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{D}} |\nabla \psi|^2 \mathrm{d}^d r , \text{ et } E_{\rm pot} = \frac{G}{2} \int_{\mathcal{D}} |\psi|^4 \mathrm{d}^d r$$

Remarque 1.2.2 En fait, on peut utiliser cette expression de l'énergie pour retrouver NLS dans le cadre du formalisme lagrangien. Plus précisément, si on considère le lagrangien

$$L(\psi) = \frac{i}{2} \int (\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi) \mathrm{d}^d r - E(\psi) ,$$

on peut retrouver l'équation (1.8) comme conséquence de l'équation de Lagrange exprimant la stationnarité de l'action $S = \int_{t_1}^{t_2} L \, dt$. Nous ne développerons pas ce point de vue ici, mais il peut s'avérer utile pour l'étude de problèmes dépendant du temps.

1.2.5 Solutions stationnaires

On appelle solution stationnaire de (1.8) une fonction $\psi(\mathbf{r}, t)$ qui s'écrit sous la forme

$$\psi(\mathbf{r},t) = \phi(\mathbf{r}) e^{-i\mu t}$$
,

où la fonction $\phi(\mathbf{r})$ vérifie

$$-\frac{1}{2}\Delta\phi + G|\phi|^2\phi = \mu\phi .$$
 (1.10)

Le coefficient μ s'interprète physiquement comme le potentiel chimique du système, c'està-dire l'énergie à fournir pour ajouter une particule au système. Mathématiquement, il peut être vu comme le multiplicateur de Lagrange associé à la condition de normalisation de la fonction d'onde lors de la minimisation de la fonctionnelle d'énergie

$$E(\phi) = \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \left(|\nabla \phi|^2 + G |\phi|^4 \right) \mathrm{d}^d r$$

L'état fondamental correspond au minimum global de cette énergie et il a la propriété d'être une fonction à valeur réelle à une invariance de phase près.

En absence de potentiel extérieur $V(\mathbf{r})$, il existe une solution stationnaire évidente $\phi(\mathbf{r}) = \phi_0$ (décrivant dans le cas de l'hélium une densité homogène $\rho_0 = |\phi_0|^2$ de superfluide) :

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sqrt{\rho_0} e^{-iG\rho_0 t} . \tag{1.11}$$

Remarque 1.2.3 Il est tentant de rapprocher l'équation (1.10) de l'équation de Schrödinger indépendante du temps $\hat{H}\phi = E \phi$ de la physique quantique. Toutefois, il importe de bien distinguer les deux problèmes. L'équation de Schrödinger indépendante du temps est l'équation aux valeurs propres pour l'hamiltonien, qui est un opérateur hermitien. Les valeurs propres E_j sont réelles et les fonctions propres $\phi_j(\mathbf{r})$ forment un ensemble orthogonal, à partir duquel on peut former une base hilbertienne (théorème spectral). L'équation (1.10) n'est pas une équation aux valeurs propres; c'est une équation non linéaire et deux solutions $\phi_1(\mathbf{r})$ et $\phi_2(\mathbf{r})$ différentes de cette équation, associées aux potentiels chimiques μ_1 et μ_2 , ne sont généralement pas orthogonales.

1.2.6 Solutions stationnaires pour d'autres dynamiques

L'étude mathématique des solutions d'équations du type (1.10) peut provenir d'autres contextes que ceux décrits par NLS, en particulier des solutions stationnaires d'équations du type réaction diffusion :

$$\partial_t u = \frac{1}{2} \Delta u + u(1 - u^2).$$
 (1.12)

La dynamique de (1.12) ne conserve pas l'énergie associée au problème mais au contraire la dissipe, ce qui conduit à des phénomènes très différents. Les équations de type (1.12) ont été introduites par Fisher (1937) et KPP (1938) pour des modèles d'invasion génétique et biologique, puis largement développés pour décrire la propagation d'espèces (bactéries, insectes, plantes), d'invasion de culture humaine ou de propagation de fronts en combustion [SK]. Une vaste littérature mathématique s'est alors intéressée au phénomène de déplacement du front séparant la zone où u est proche 0 de celle où u est proche de 1, en étudiant les déplacements d'onde u(x - ct).

D'autres questions plus récentes d'écologie considérent le cas de régions d'espaces plus ou moins favorables à une espèce donnée, en étendant (1.10) à

$$\frac{1}{2}\Delta u + u(\mu(x) - u^2) = 0$$
(1.13)

où $\mu(x)$ prend des valeurs μ_+ et μ_- dans des régions E_+ et E_- . Si $\mu_+ > \mu_-$, E_+ est plus favorable à l'espèce que E_- et la solution u permet d'étudier entre autres choses les conditions permettant la survie de l'espèce, ou au contraire conduisant à son extinction. En particulier, l'équation ci-dessus permet de montrer que la fragmentation environementale est défavorable à la conservation d'une espèce : le fait d'avoir de petites zones défavorables laisse moins de chances de survie qu'une seule grande zone, avec la même surface. Une application pratique est le cas où l'espèce est la forêt et les zones défavorables à la forêt sont les routes. Il vaut donc mieux une large route traversant la forêt plutôt que plusieurs petites routes ayant la même surface pour la préservation de la forêt. Mathématiquement, cela est relié à des problèmes aux valeurs propres et des questions proches de celles que nous aborderons plus loin.

1.2.7 Formulation hydrodynamique

A partir de l'interprétation en densité et courant de la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$, on peut écrire l'équation NLS en fonction des variables hydrodynamiques $\rho(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ définies par :

$$\rho(\boldsymbol{r},t) = |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 \text{ et } \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = \frac{i}{2} \left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi \right) = \rho(\boldsymbol{r},t) \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},t)$$

Si l'on suppose que la fonction d'onde ψ ne s'annule pas, on peut l'écrire sous la forme module-argument :

$$\psi = \sqrt{\rho} \, e^{-i\varphi} \; .$$

L'argument de la fonction d'onde φ , qu'on appelle également phase, correspond au potentiel de la vitesse ($\boldsymbol{v} = \nabla \varphi$). On obtient le couple d'équation :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v}) = 0 , \qquad (1.14)$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} + \frac{v^2}{2} + G\rho \ . \tag{1.15}$$

On reconnaît dans cette formulation l'équation de continuité (1.14) ainsi que l'équivalent de l'équation de Bernoulli pour un fluide (1.15). Dans cette équation, l'enthalpie volumique est égale à $G\rho$, mais surtout un terme supplémentaire à l'équation de Bernoulli est présent :

$$-\frac{1}{2}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}$$
 .

Ce terme est lié aux variations locales de la densité. Il est appelé terme de pression quantique. En effet, si l'on revient à l'équation NLS initiale écrite pour les condensats de Bose-Einstein ou l'hélium superfluide, ce terme disparaît dans la limite classique que l'on peut obtenir en faisant tendre formellement \hbar vers 0.

1.2.8 Longueur de cicatrisation

Le terme de pression quantique devient négligeable dans une approximation hydrodynamique pour laquelle on suppose la densité lentement variable en espace. Pour mieux comprendre cette approximation hydrodynamique, il est commode de revenir à l'équation NLS (1.5) établie pour l'hélium superfluide. L'équation de Bernoulli s'écrit alors :

$$\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} + \frac{1}{2} m v^2 + g\rho ,$$

où la vitesse est reliée à la phase de la fonction d'onde par :

$$oldsymbol{v} = rac{\hbar}{m}
abla arphi$$
 .

Si on considère alors un écoulement superfluide de densité ρ_0 , on peut définir une longueur caractéristique ξ :

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m\rho_0 g}} \ . \tag{1.16}$$

Cette longueur définit à quelle échelle spatiale la pression quantique est pertinente. En effet, si on note d l'échelle caractéristique de l'écoulement, le terme de pression quantique se comporte comme :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} \sim \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\rho_0}{d^2} \; ,$$

et il peut être négligé devant le terme non-linéaire $g\rho_0$ si $d \gg \xi$. Au contraire, si l'échelle caractéristique d est de l'ordre ou inférieure à ξ , la pression quantique joue un rôle important.

On appelle ξ la longueur de cicatrisation ; elle caractérise notamment les effets quantiques dans les écoulements superfluides. Cette longueur apparaît également si on considère une solution de NLS en présence d'un obstacle sur lequel on impose $\psi = 0$ et pour laquelle on a la condition sur la densité loin de l'obstacle :

$$\lim_{|\boldsymbol{r}|\to\infty} |\psi|^2 = \rho_0$$

Si les dimensions de l'obstacle sont grandes devant la longueur de cicatrisation, on peut se placer dans l'approximation 1D d'un mur occupant le demi-espace $x \leq 0$ avec la condition :

$$\lim_{x \to \infty} |\psi|^2 = \rho_0 \; .$$

La solution de NLS stationnaire dans l'état fondamental $\psi(x,t) = \phi(x)e^{-i\frac{\mu t}{\hbar}}$ où $\phi(x)$ est une fonction réelle, vérifie alors :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}x^2} + g\phi(x)^3 - \mu\phi(x) = 0 \; .$$

La limite quand $x \to \infty$ de la fonction impose $\mu = g\rho_0$ et on peut chercher la solution sous la forme :

$$\phi(x) = \sqrt{\rho_0} f(\frac{x}{\xi}) \; .$$



FIG. 1.1 – Solution $\phi(x) = \sqrt{\rho_0} f(\frac{x}{\xi})$ de la solution stationnaire de NLS pour laquelle $\psi(0) = 0$ et $|\psi|^2 \to \rho_0$ au loin.

La fonction f satisfait l'équation différentielle et les conditions aux limites :

$$-f''(u) + (f(u)^2 - 1)f(u) = 0, \quad f(0) = 0 \text{ et } \lim_{u \to \infty} f(u) = 1.$$

dont la solution est $f(u) = \tanh(u/\sqrt{2})$ et qui donne la solution du problème :

$$\phi(x) = \sqrt{\rho_0} \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi}\right) ,$$

que l'on a tracé sur la figure 1.1. ξ apparaît ici comme la longueur caractéristique sur laquelle la fonction d'onde est perturbée au voisinage d'un obstacle, ce qui explique le terme longueur de « cicatrisation ».

1.3 Objectifs du cours

Comme nous venons de le voir, l'équation de Schrödinger non-linéaire s'applique à de nombreux contextes physiques et permet de modéliser des phénomènes aussi divers que l'optique non-linéaire, les ondes de surface ou la superfluidité. Cette équation possède de nombreuses propriétés mathématiques remarquables. Dans ce cours, nous allons étudier cette équation en montrant notamment l'imbrication permanente des propriétés mathématiques avec le comportement des systèmes physiques concernés. Nous développerons en particulier le cas des fluides quantiques : superfluides, supersolides, et condensats de Bose-Einstein, pour lesquels nous décrirons quelques expériences récentes portant notamment sur l'observation de tourbillons quantiques.

Nous nous intéresserons tout particulièrement à l'état fondamental du système, qui fournit déjà de nombreuses questions en calcul des variations, analyse asymptotique en fonction d'un petit paramètre, existence et unicité de solutions, analyse spectrale, théorie des fonctions holomorphes. Nous introduirons des outils pour décrire les structures périodiques apparaissant dans les expériences, et tout particulièrement les singularités ou tourbillons.

Aborder les propriétés dynamiques de l'équation est en général très complexe, et nous le ferons uniquement dans quelques cas spécifiques : propagation de petites perturbations par rapport à l'état fondamental et étude d'ondes progressives particulières, les solitons.

Chapitre 2

La fonctionnelle d'énergie pour un condensat de Bose-Einstein

L'étude des propriétés de la matière à basse température est à l'origine de découvertes spectaculaires, comme la supraconductivité de nombreux matériaux et la superfluidité de certains liquides. L'origine de ce comportement inhabituel de la matière est quantique. Elle provient du *principe de Pauli*, qui établit un lien entre le spin des particules en jeu (demientier ou entier) et leur comportement collectif (fermions ou bosons). L'état global d'un système de fermions identiques doit être antisymétrique par échange de deux particules, ce qui interdit de mettre deux fermions dans le même état individuel. En revanche, l'état global pour des bosons doit être symétrique par échange de deux particules, ce qui favorise des situations où un même état individuel est occupé par beaucoup de bosons.

Le principe de Pauli s'applique bien sûr à toute température T, mais ses conséquences ne sont appréciables que si T est suffisamment basse. Pour illustrer ce point, considérons un gaz d'atomes de masse m avec une densité spatiale n. A température ordinaire, la longueur d'onde thermique $\lambda_T = h/(2\pi m k_{\rm B}T)^{1/2}$, qui donne la taille moyenne du paquet d'ondes associé à chaque particule, reste petite devant la distance moyenne $\ell = n^{-1/3}$ entre deux particules voisines; les conséquences physiques de la symétrisation ou de l'antisymétrisation de l'état global des particules sont négligeables, les phénomènes quantiques restent masqués, et le gaz peut être décrit en bonne approximation par la physique statistique classique. En revanche, quand on refroidit le gaz, la longueur d'onde λ_T augmente et peut devenir de l'ordre de ℓ . La nature statistique des particules (bosons ou fermions) devient alors essentielle et l'état d'équilibre du système diffère fortement de celui attendu classiquement.

Nous allons nous intéresser ici au cas d'une assemblée de particules bosoniques, pour lesquelles une transition de phase induite par le principe de symétrisation se produit en dessous d'une certaine température. Cette transition, appelée *condensation de Bose-Einstein*, correspond à l'accumulation d'une fraction macroscopique des particules dans un seul état individuel, en général l'état fondamental du « récipient » contenant les particules. Cet état à forte occupation est un *condensat de Bose-Einstein* et une grande partie de ce cours lui sera consacrée. Dans ce chapitre, nous commencerons par rappeler brièvement les propriétés attendues en absence d'interactions entre particules, c'est-à-dire pour un *gaz parfait*. Nous décrirons ensuite la mise en évidence expérimentale du phénomène de condensation et nous terminerons par l'étude du système en présence d'interactions, ce qui nous conduira à la fonctionnelle d'énergie utilisée dans la suite de ce cours.

2.1 La condensation de Bose-Einstein d'un gaz parfait

2.1.1 Particules dans une boîte cubique

Nous considérons ici une assemblée de N particules identiques de spin nul, placées dans une boîte cubique de côté L. Une base d'états propres de l'hamiltonien à une particule est constituée des ondes planes

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{L^{3/2}}, \quad \mathrm{d'énergie} \ E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} ,$$
(2.1)

où on a choisi ici des conditions aux limites périodiques : $L\mathbf{k}/(2\pi) \in Z^3$. Il est bien connu (voir par exemple [Geo]) que le gaz parfait de bosons présente une transition de phase quand on considère la limite thermodynamique $N \to \infty$, $L \to \infty$, en gardant la densité spatiale $n = N/L^3$ constante. Cette transition se produit quand la *densité dans l'espace* des phases $n\lambda_T^3$ atteint la valeur critique $\zeta(3/2) \simeq 2.612$, où ζ est la fonction de Riemann :

- Pour $n\lambda_T^3 < \zeta(3/2)$, la distribution des particules sur les différents états ψ_k est régulière, et la population n_k de chaque état ψ_k est nulle à la limite thermodynamique.
- Pour $n\lambda_T^3 > \zeta(3/2)$, une singularité apparaît pour l'occupation de l'état fondamental correspondant à $\mathbf{k} = 0$. La densité spatiale n_0 de particules dans l'état fondamental ψ_0 varie selon la loi $n_0 = n \left(1 (T/T_c)^{3/2}\right)$, où la température critique T_c est celle pour laquelle $n\lambda_T^3 = 2.612$.

Dans la suite du cours, nous nous intéresserons principalement à l'état d'énergie minimale du système, c'est-à-dire l'état atteint à température nulle. Dans le cas du gaz sans interaction considéré ici, cet état correspond à $n_0 = n$ et est donc remarquablement simple : toutes les particules occupent le même état

$$\psi_0(\mathbf{r}) = 1/L^{3/2} , \qquad (2.2)$$

correspondant à une amplitude de probabilité uniforme sur toute l'extension de la boîte.

2.1.2 Particules dans un piège harmonique

Les expériences sur les gaz atomiques ne sont en général pas menées dans des boîtes cubiques, mais dans des pièges harmoniques créés à l'aide de champs magnétiques ou de faisceaux laser. Considérons l'exemple simple d'un piège isotrope de pulsation ω : $V(\mathbf{r}) = m\omega^2 r^2/2$. Une base d'états propres de l'hamiltonien à une particule est constituée par les produits de fonctions de Hermite

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(\mathbf{r}) = \chi_{n_x}(x)\,\chi_{n_y}(y)\,\chi_{n_z}(z), \quad \text{d'énergie} \ E_{n_x,n_y,n_z} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + 3/2) \ , \ (2.3)$$

où les n_i sont des entiers positifs ou nuls. Rappelons que chaque fonction de Hermite $\chi_j(x)$ est le produit d'un polynôme de Hermite de degré j par la gaussienne $\exp(-x^2/2d^2)$,

avec $d = (\hbar/m\omega)^{1/2}$. La limite thermodynamique de ce système est obtenue en prenant $N \to \infty, \omega \to 0$, tout en gardant $N\omega^3$ constant. Comme pour le cas de la boîte, on trouve qu'une transition de phase se produit à la température critique T_c donnée par $N(\hbar\omega)^3 = \zeta(3) (k_B T_c)^3$. Pour $T < T_c$, une fraction macroscopique des particules s'accumule dans l'état fondamental du piège

$$\psi_{0,0,0}(\mathbf{r}) = \frac{\exp(-r^2/2d^2)}{(\pi d^2)^{3/4}} .$$
(2.4)

À température nulle, toutes les particules occupent cet état.

2.2 Observation expérimentale de la condensation

2.2.1 La superfluidité de l'hélium

« C'est une belle théorie, mais contient-elle une vérité? » C'est par ces mots qu'Einstein décrira sa prédiction de la condensation dans une lettre à Ehrenfest. Cette défiance demeura générale pendant les années qui suivirent. Il fallut attendre 1937, la découverte de la superfluidité de l'hélium liquide, pour que la prédiction d'Einstein soit reconsidérée avec intérêt : London remarqua que la température de la transition superfluide, $T_{\lambda} = 2.2$ K, est étonnamment proche de la température de condensation de Bose-Einstein d'un gaz parfait de même densité que l'hélium liquide, $T_c = 3.2$ K, et il eut l'intuition que les deux phénomènes devaient être liés.

Cette remarque de London est à la base des modèles théoriques modernes de l'hélium liquide : l'hélium est un ensemble de particules de spin nul et il est légitime de lui appliquer les principes de la statistique de Bose-Einstein. Néanmoins, on sait aussi que le rapport entre condensation de Bose-Einstein et superfluidité n'est pas immédiat. La superfluidité trouve son origine dans l'interaction entre particules (cf paragraphe 6.3), alors que le modèle d'Einstein traite d'un gaz parfait. Plus quantitativement, les expériences de diffusion de neutrons révèlent que le condensat dans l'hélium liquide ne contient pas plus de 10 % des atomes, même à température nulle, alors qu'il devrait pouvoir accueillir la totalité des atomes pour un gaz parfait.

2.2.2 Condensation de gaz atomiques

La recherche de systèmes plus proches du modèle initial d'Einstein est devenue très active au cours des vingt dernières années. Le développement des techniques de piégeage et de refroidissement d'atomes par des faisceaux lumineux ou des champs magnétiques statiques a permis de faire sauter les verrous qui avaient auparavant bloqué cette recherche. En 1995, le groupe de E. Cornell et C. Wieman (Boulder, USA) a réussi à observer un condensat d'atomes de rubidium, suivi de peu par le groupe de W. Ketterle (MIT, USA) qui travaillait avec des atomes de sodium.

Quels sont les outils nécessaires pour un tel succès? On souhaite se rapprocher de l'hypothèse de base d'Einstein, c'est-à-dire utiliser un gaz très dilué et pas un liquide, comme c'est le cas pour l'hélium. Le prix à payer se lit sur l'équation $n\lambda_T^3 \sim 2.612$. Quand on diminue la densité spatiale n, la température de transition s'abaisse également. Ces



FIG. 2.1 – Refroidissement d'un gaz de rubidium dans un piège harmonique. Image de gauche : le gaz est encore chaud $(T \gg T_c)$ et bien décrit par la statistique de Boltzmann. Image centrale : $T \sim T_c$, le condensat commence à apparaître au centre du piège. Image de droite : $T \ll T_c$: l'assemblée atomique est en bonne approximation dans son état fondamental. En raison des interactions entre atomes, la détermination de cet état fondamental passe par la résolution de l'équation de Gross-Pitaevskii. Cette figure a été obtenue en 1995 au JILA (Boulder, USA) dans l'équipe d'E. Cornell et C. Wieman.

nouveaux condensats atomiques se forment pour une densité voisine de 10^{19} atomes/m³ (au lieu de 10^{27} atomes/m³ pour l'hélium liquide) et la température de condensation est dans le domaine du microkelvin, ou en deçà.

Cette contrainte en température vient imposer un point commun à toutes les expériences : le confinement du gaz atomique ne peut pas se faire par des parois matérielles, car la totalité des atomes se collerait immédiatement aux parois pour ne plus en bouger. Le gaz est piégé grâce à un champ magnétique inhomogène ou un faisceau laser focalisé au centre d'une enceinte où règne un vide très poussé. Le refroidissement des atomes piégés se fait par évaporation : on élimine les atomes les plus énergétiques et les atomes restants atteignent un nouvel état d'équilibre, à une température plus basse. En pratique, on part d'environ un milliard d'atomes pour finir avec un million seulement, la température passant de 1 milliKelvin à 1 microKelvin. L'observation des condensats gazeux se fait en les éclairant par une brève impulsion lumineuse résonnante. L'assemblée atomique absorbe l'onde lumineuse, et on fait l'image de l'ombre ainsi créée sur un capteur CCD. Trois exemples sont donnés en figure 2.1, ces photos étant prises à différents stades de l'évaporation.

Pour la suite de ce cours, la photo de droite sur la figure 2.1 est particulièrement intéressante. On y voit une assemblée de $N \gg 1$ atomes confinés dans un piège, cette assemblée étant dans son état fondamental. Si les atomes formaient un gaz parfait, cet état fondamental serait obtenu en plaçant chaque atome dans l'état (2.4). Mais cette hypothèse de gaz parfait, si elle est correcte pour prédire le point de condensation car le gaz y est encore très dilué (image centrale de la figure 2.1), n'est plus valable pour évaluer l'état fondamental; la densité y est en effet élevée puisque les N atomes tendent à tous s'accumuler au fond du puits de potentiel, dans une petite région de taille d. Notre travail va donc être la détermination (approchée) de l'état fondamental d'une assemblée de Nparticules en interaction.

2.3 Bosons en interaction : approximation de champ moyen

2.3.1 L'hamiltonien du problème

Considérons une assemblée de N particules identiques piégées dans un potentiel $V(\mathbf{r})$. Nous supposerons que ces particules interagissent¹ entre elles par l'intermédiaire d'un potentiel à deux corps $w(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. L'hamiltonien complet du système s'écrit donc :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{\boldsymbol{p}}_{i}^{2}}{2m} + V(\hat{\boldsymbol{r}}_{i}) + \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j \neq i} w(\hat{\boldsymbol{r}}_{i} - \hat{\boldsymbol{r}}_{j}) , \qquad (2.5)$$

où l'opérateur impulsion \hat{p}_i pour la *i*-ème particule est égal à $-i\hbar\nabla_{r_i}$.

2.3.2 Collisions à basse énergie

Le potentiel interatomique $w(\mathbf{r})$ est en général compliqué : il comporte une partie attractive à longue distance, correspondant aux forces de Van der Waals, et une partie répulsive à courte distance, qui empêche les nuages électroniques de deux atomes de s'interpénétrer. Le problème à deux corps pour ce potentiel $w(\mathbf{r})$ conduit à une multitude d'états liés, correspondant à la formation de molécules di-atomiques. Ceci reflète que le véritable état fondamental d'une assemblée d'atomes de sodium ou de rubidium est un bloc solide, pas un gaz. L'état gazeux qui nous intéresse et qu'on voit sur la figure 2.1 est en fait un état métastable.

Pour accéder aux propriétés de cet état gazeux métastable, nous allons remplacer dans (2.5) le vrai potentiel w par un potentiel effectif w_{eff} qui conduira aux mêmes propriétés de collisions élastiques que w, mais qui ne comportera aucun état lié. Ainsi l'état gazeux recherché sera le vrai état fondamental de \hat{H} . Mais comment s'assurer que les deux potentiels w et w_{eff} correspondent aux mêmes propriétés vis à vis des collisions élastiques ? C'est relativement simple car les collisions qui se produisent dans ces gaz atomiques très froids sont de basse énergie. Plus précisément, la longueur d'onde des atomes λ_T est grande devant la portée du potentiel interatomique w. Deux atomes subissant une collision élastique l'un sur l'autre ne peuvent donc pas être sensibles² à la forme détaillée de w. En particulier, on peut montrer ([BasDal], chapitre 18) que les collisions sont isotropes dans ce régime. Si deux atomes subissent une collision avec le vecteur d'onde relatif k, la fonction d'onde asymptotique des deux atomes s'écrit

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \sim e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - a \frac{e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}}{r}, \quad \text{avec } \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2 , \qquad (2.6)$$

ce développement étant valable quand r est grand devant la portée du potentiel w. Les deux termes de (2.6) sont respectivement l'onde plane $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ correspondant à l'état incident

¹La preuve rigoureuse de l'existence d'un condensat dans un système de bosons en interaction n'a été donnée que récemment dans [Lie].

 $^{^{2}}$ tout comme on ne peut pas voir des détails nanométriques avec un microscope travaillant dans le domaine des longueurs d'onde micrométriques.

avant collision, et l'onde sphérique divergente e^{ikr}/r correspondant au résultat d'une collision isotrope. La seule grandeur caractérisant la collision est donc le paramètre a, appelé *longueur de diffusion*. Notons que cette quantité peut être aussi bien négative que positive. Deux potentiels w et w_{eff} correspondant à la même longueur de diffusion conduiront aux mêmes propriétés collisionnelles, et donc au même état de plus basse énergie pour la phase gazeuse de nos N atomes confinés dans le puits de potentiel.

L'option la plus simple pour $w_{\rm eff}$ est le potentiel de contact

$$w_{\rm eff}(\boldsymbol{r}) = g\,\delta(\boldsymbol{r}) \;, \tag{2.7}$$

où δ est la distribution de Dirac. Le choix

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} , \qquad (2.8)$$

conduit à une longueur de diffusion a, ce qui permet de substituer w_{eff} à w dans (2.5).

Note. Le potentiel de contact (2.7) est toujours utilisable à une dimension, mais peut conduire dans certaines situations à des ambiguïtés mathématiques à trois dimensions. Un choix rigoureusement correct pour w_{eff} à trois dimensions est le pseudo-potentiel \tilde{w}_{eff} défini par ([BasDal], chapitre 18, exercice 3).

$$\tilde{w}_{\text{eff}}\,\psi(\boldsymbol{r}) = g\,\delta(\boldsymbol{r})\frac{\partial}{\partial r}(r\psi(r))\;. \tag{2.9}$$

La substitution de (2.7) par (2.9) n'aura aucune conséquence dans ce cours.

2.3.3 L'approximation de Hartree

Nous nous intéressons maintenant à l'état fondamental de l'hamiltonien (2.5), après avoir remplacé w par le potentiel w_{eff} donné en (2.7). On sait que l'état fondamental de Hest la fonction $\Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$ qui minimise la fonctionnelle $\int \Psi^*(\hat{H}\Psi)$, où l'intégrale porte sur les 3N coordonnées. Si nous attaquions « à froid » cette minimisation sur l'ensemble des fonctions à 3N variables, nos chances de succès seraient nulles car le problème serait beaucoup trop compliqué³. Fort heureusement, nous pouvons nous laisser guider par la physique du gaz parfait. Dans ce cas, on sait que l'état fondamental est obtenu en mettant tous les atomes dans le même état (en l'occurrence l'état fondamental du problème à une particule). Par analogie, nous allons effectuer notre minimisation en nous restreignant à une classe particulière de fonctions Ψ qui sont telles que les N particules sont toutes dans le même état :

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N) = \psi(\boldsymbol{r}_1)\ldots\psi(\boldsymbol{r}_N) . \qquad (2.10)$$

Cette restriction est appelée *approximation de Hartree*. Les fonctions correspondantes satisfont par construction au principe de symétrisation pour des bosons.

La fonction à une particule $\psi(\mathbf{r})$ constitue notre paramètre variationnel et elle est donc inconnue à ce stade. Notre seule contrainte est qu'elle doit être normalisée puisque le carré de son module représente une densité de probabilité :

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 \, \mathrm{d}^3 r = 1 \; . \tag{2.11}$$

 $^{^{3}\}mathrm{Le}$ problème à N corps n'est généralement pas soluble exactement.

La fonctionnelle d'énergie à minimiser s'obtient en reportant l'expression (2.10) dans $\int \Psi^*(\hat{H}\Psi)$. On trouve N contributions identiques provenant du terme d'énergie cinétique et du terme dû au potentiel extérieur, et N(N-1) contributions identiques du terme d'interaction entre particules :

$$\int \Psi^{*}(\hat{H}\Psi) = N\left(\int \frac{\hbar^{2}}{2m} |\nabla\psi(\mathbf{r})|^{2} d^{3}r + \int V(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^{2} d^{3}r\right) \\ + \frac{N(N-1)}{2} \iint |\psi(\mathbf{r})|^{2} |\psi(\mathbf{r}')|^{2} w_{\text{eff}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') d^{3}r d^{3}r' . \quad (2.12)$$

En remplaçant w_{eff} par son expression (2.7), nous arrivons finalement à $\int \Psi^*(\hat{H}\Psi) = N\mathcal{E}(\psi)$ avec

$$\mathcal{E}(\psi) = \int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\boldsymbol{r})|^2 \,\mathrm{d}^3 r + \int V(\boldsymbol{r}) \,|\psi(\boldsymbol{r})|^2 \,\mathrm{d}^3 r + \frac{Ng}{2} \int |\psi(\boldsymbol{r})|^4 \,\mathrm{d}^3 r \,, \qquad (2.13)$$

où on a remplacé N - 1 par N, ce qui est valide puisque $N \gg 1$ pour tous les problèmes que nous considérerons.

2.3.4 Fonctionnelle d'énergie adimensionnée

Pour faciliter l'étude mathématique de la fonctionnelle d'énergie, il est commode de se ramener à des variables sans dimensions. Supposons qu'on utilise un potentiel de confinement harmonique et isotrope de pulsation $\omega : V(\mathbf{r}) = m\omega^2 r^2/2$. Le traitement quantique du mouvement d'une particule dans cet oscillateur, rappelé en §2.1.2, nous fournit l'échelle de longueur naturelle $d = (\hbar/m\omega)^{1/2}$ et l'échelle d'énergie $\varepsilon = \hbar\omega$. Si nous exprimons les longueurs et les énergies en ces unités, nous arrivons à :

$$\mathcal{E}(\psi) = \frac{1}{2} \int |\nabla \psi(\mathbf{r})|^2 \, \mathrm{d}^3 r + \frac{1}{2} \int r^2 |\psi(\mathbf{r})|^2 \, \mathrm{d}^3 r + \frac{G}{2} \int |\psi(\mathbf{r})|^4 \, \mathrm{d}^3 r \,, \qquad (2.14)$$

où la fonction ψ vérifie la condition de normalisation (2.11) et où nous avons introduit le nombre sans dimension

$$G = 4\pi Na/d , \qquad (2.15)$$

qui est le seul paramètre mathématiquement pertinent du problème. La fonctionnelle d'énergie (2.15) représente la quantité que nous allons chercher à minimiser dans le chapitre suivant.

Nous nous sommes intéressés ici à la justification de l'équation de NLS dans le cas indépendant du temps, cette équation fournissant l'état fondamental d'un système de N bosons dans le cadre de l'approximation de Hartree. Cette approximation peut se généraliser au cas dépendant du temps et elle conduit au résultat (1.2), qui donne accès à l'évolution temporelle approchée d'un système de N bosons en interaction. Nous ne démontrerons pas ici cette forme dépendant du temps et nous renvoyons le lecteur intéressé à [CT].

Chapitre 3

Approche mathématique de la minimisation de fonctionnelles

Un état qui représente un point d'équilibre d'un système correspond au minimum d'une fonctionnelle d'énergie. En particulier, dans le cas d'un condensat de Bose-Einstein, nous venons de voir que la fonction d'onde à valeur complexe $\psi(\mathbf{r})$ minimise

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |\nabla \psi(\boldsymbol{r})|^2 + V(\boldsymbol{r}) |\psi(\boldsymbol{r})|^2 + \frac{G}{2} |\psi(\boldsymbol{r})|^4 \, \mathrm{d}^3 r \, , \, \text{sous} \, \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \, \mathrm{d}^3 r = 1 \, , \, \, (3.1)$$

où V est le potentiel de piégeage du condensat, en général

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$$
.

Le but de ce chapitre est de prouver, déjà en dimension 1, pour une fonction réelle u(x), $x \in \mathbb{R}$, l'existence d'un minimiseur de

$$J(u) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} |u'(x)|^2 + V(x)|u(x)|^2 + \frac{1}{2}G|u(x)|^4 dx , \text{ sous } \int_{\mathbb{R}} |u(x)|^2 dx = 1 , \qquad (3.2)$$

dans les espaces appropriés. Nous souhaitons également montrer que le minimiseur est solution de l'équation

$$-\frac{1}{2}u'' + V(x)u + G|u|^2 u = \lambda u , \qquad (3.3)$$

pour un certain λ réel. En fait, nos preuves se généralisent très facilement si u est à valeur complexe.

Nous allons introduire les outils mathématiques qui permettent de

- montrer que le minimiseur d'une fonctionnelle est solution d'une équation dite équation d'Euler-Lagrange,
- donner des conditions pour lesquelles l'infimum est atteint.

C'est ce que l'on appelle l'approche variationnelle ou calcul des variations.

Les questions que nous abordons nécessitent des outils d'analyse non linéaire. Pour aller plus loin, un lecteur curieux pourra consulter les ouvrages de H. Brezis [Bre] ou O. Kavian [Kav]. Ils étendent les outils d'analyse linéaire introduits dans le cours d'analyse numérique et optimisation [All].

3.1 Rappels sur les espaces L^p , H^1

On rappelle ici quelques propriétés dont nous aurons besoin pour définir les espaces de minimisation. On pourra se référer à [Bre] pour plus de détails.

Soit \mathcal{D} un ouvert de \mathbb{R}^N et p un entier avec $1 \leq p < \infty$. On définit

$$L^p(\mathcal{D}) = \{ u : \mathcal{D} \to \mathbb{R}, u \text{ mesurable et } \int_{\mathcal{D}} |u(\boldsymbol{r})|^p d^N r < \infty \} .$$

Cet espace muni de la norme

$$||u||_p = \left(\int_{\mathcal{D}} |u(\boldsymbol{r})|^p \mathrm{d}^N r\right)^{1/p} ,$$

est un espace vectoriel normé complet. (On rappelle qu'un espace est dit complet si toute suite de Cauchy, c'est-à-dire vérifiant

$$\forall \epsilon > 0, \exists N \in \mathbb{N}, \forall n, p \in \mathbb{N}, n, p \ge N \Rightarrow ||u_n - u_p|| \le \epsilon$$

est convergente.) On rappelle d'autre part que $C_c(\mathcal{D})$, l'ensemble des fonctions continues à support compact (i.e. nulles en dehors d'une boule), est dense dans $L^p(\mathcal{D})$ pour $1 \leq p < \infty$. On notera $C_c^1(\mathcal{D})$, l'ensemble des fonctions de classe C^1 à support compact.

On rappelle que p.p. signifie presque partout, soit sur un ensemble dont le complementaire est de mesure nulle. Pour $p = \infty$, on définit

$$L^{\infty}(\mathcal{D}) = \{ u : \mathcal{D} \to \mathbb{R}, u \text{ mesurable}, \exists C \text{ t.q. } |u(\mathbf{r})| \leq C \text{ p.p. } \mathcal{D} \}$$

et $||u||_{\infty} = \inf\{C, \text{ t.q. } |u(\mathbf{r})| \leq C \text{ p.p. } \mathcal{D} \}$.

C'est aussi un espace vectoriel normé complet.

L'espace de Sobolev $W^{1,p}(\mathcal{D})$ est défini par

$$W^{1,p}(\mathcal{D}) = \{ u \in L^p(\mathcal{D}), \text{ t.q. } \exists \boldsymbol{g} \in L^p(\mathcal{D}) \text{ avec } \forall \phi \in C_c^1(\mathcal{D})$$
$$\int_{\mathcal{D}} u(\boldsymbol{r}) \nabla \phi(\boldsymbol{r}) \, \mathrm{d}^N r = -\int_{\mathcal{D}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{r}) \phi(\boldsymbol{r}) \, \mathrm{d}^N r \}$$
(3.4)

On définit alors la différentielle (ou dérivée en dimension 1) au sens faible de u notée ∇u par $\nabla u := \mathbf{g}$. Cette définition est cohérente avec la différentielle classique de u si u est C^1 , grâce à une intégration par partie et le fait que ϕ est nulle au bord.

Cet espace est un espace vectoriel normé complet pour la norme

$$||u||_{W^{1,p}} = \left(\int_{\mathcal{D}} |u(\boldsymbol{r})|^p \, \mathrm{d}^N r + \int_{\mathcal{D}} |\nabla u(\boldsymbol{r})|^p \, \mathrm{d}^N r\right)^{1/p}$$

Pour p = 2, on pose $H^1(\mathcal{D}) = W^{1,2}(\mathcal{D})$. Dans ce cas, la norme provient du produit scalaire

$$(u, v) = \int_{\mathcal{D}} u(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}^{N} r + \int_{\mathcal{D}} \nabla u(\mathbf{r}) \cdot \nabla v(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}^{N} r$$

L'espace H^1 est alors un espace de Hilbert, en particulier il possède une base dénombrable dense. Il peut aussi être défini comme l'adhérence des fonctions C^1 pour la norme H^1 .

3.2 Minimisation de fonctionnelle : passage de l'énergie à l'équation

Le but de cette section est de montrer que si u est un minimiseur de (3.2), alors u vérifie (3.3). Il va s'agir de savoir dériver la fonctionnelle J au voisinage d'un point de minimum. Ceci nécessite des idées identiques à ce qui se passe pour les fonctions réelles de variable réelle. Il s'agit juste d'adapter les notions.

On rappelle la définition de la différentiabilité que l'on va appliquer à une fonctionnelle d'énergie J (voir [Cia], chapitre 7 ou [Kav]).

Définition 3.2.1 Soit X un ouvert d'un espace vectoriel normé et $J : X \to \mathbb{R}$. On dit que J est différentiable en u si et seulement si il existe une application linéaire $L, L : X \to \mathbb{R}$ telle que

$$\lim_{\|h\| \to 0} \frac{J(u+h) - J(u) - L \cdot h}{\|h\|} = 0$$

On notera J'(u) := L la dérivée ou différentielle de J en u.

3.2.1 Fonctionnelle sans contrainte

Théorème 3.2.2 Soit X un ouvert d'un espace vectoriel normé et $J : X \to \mathbb{R}$. Si J est différentiable en u et si J admet un minimum en u, c'est-à-dire $\forall v \in X$, $J(u) \leq J(v)$, alors J'(u) = 0.

L'équation J'(u) = 0 est aussi appelée équation d'Euler. Ceci est donc la généralisation à une fonctionnelle des propriétés bien connues pour les fonctions.

Démonstration. Soit $v \in X$ fixé et ϕ une fonction de variable réelle définie au voisinage de 0 par $\phi(t) = J(u + tv)$. La condition de minimum en u implique que $\phi'(0) = 0$, soit $J'(u) \cdot v = 0$. Donc J'(u) = 0 puisque v est arbitraire.

On remarque dans cette preuve qu'il est indispensable que X soit ouvert. En effet, par exemple, si J(u) = u et X = [0, 1], le résultat est faux.

Dans la suite, on pensera à u comme variant dans un espace de fonctions et à J(u) comme étant une fonctionnelle d'énergie. Nous allons donner quelques exemple de calcul de l'équation d'Euler.

Exemple 3.2.3 $J(u) = \frac{1}{2} \int_0^1 u^2(s) \, ds \ et \ X = L^2(]0, 1[) \ muni \ de \ la \ norme \ L^2.$

Il est évident que J est différentiable sur X comme composée de la fonction carrée et de la norme. Ceci donne une manière de calculer la différentielle. On peut également la calculer par le développement limité de J(u + tv) qui, dans ce cas, est particulièrement simple :

$$J(u+tv) = J(u) + t \int_0^1 u(s)v(s) \, \mathrm{d}s + \frac{t^2}{2} \int_0^1 v^2(s) \, \mathrm{d}s \; .$$

Alors $J'(u) \cdot v = \int_0^1 u(s)v(s) \, ds$. On peut identifier J'(u) à la fonction u, en définissant $u \cdot v := \int_0^1 u(s)v(s) \, ds$. Cela revient à identifier une application linéaire sur L^2 , qui est donc

dans le dual de L^2 , à un élément de L^2 , grâce au théorème de Riesz. Dans cet exemple, il est évident que le minimum de J est atteint pour u = 0 qui est d'ailleurs l'unique solution de J'(u) = 0.

Exemple 3.2.4 $J(u) = \frac{1}{2} \int_0^1 u'^2(t) dt$ et $X = H^1(]0, 1[)$ muni de la norme H^1 .

J est bien différentiable sur X et un calcul similaire au cas précédent conduit à

$$J'(u) \cdot v = \int_0^1 u'(t)v'(t) \, \mathrm{d}t \, dt$$

Si u est solution de J'(u) = 0, alors en fait u n'est pas seulement H^1 , mais est plus régulière. En effet cette équation et la définition de la dérivée au sens faible (3.4) impliquent que $u' \in H^1(]0, 1[)$ et u'' = 0. De plus, une intégration par parties contre des fonctions $v \in C^1$ conduit à

$$0 = J'(u) \cdot v = \int_0^1 u'(t)v'(t) \, \mathrm{d}t = -\int_0^1 u''(t)v(t) \, \mathrm{d}t + [u'(t)v(t)]_0^1 = [u'(t)v(t)]_0^1 \, .$$

Dans la mesure où ceci est vrai pour tout v, cela implique que u'(0) = u'(1) = 0.

Nous avons donc trouvé que le minimiseur de la fonctionnelle doit vérifier u'' = 0 et u'(0) = u'(1) = 0, c'est donc une fonction constante. C'est l'équation d'Euler qui nous a permis de dire que u' est une fonction régulière.

Notons que dans la mesure où u' est dans H^1 , nous verrons plus loin que c'est en fait une fonction continue et cela a un sens de la définir en tout point et non pas seulement presque partout.

Remarque 3.2.5 La propriété que nous venons de voir sur les conditions de bord est générale : si l'espace de minimisation ne comprend pas de conditions de bord, alors le minimiseur vérifie ce que l'on appelle les conditions de Neumann, soit u' = 0 sur le bord. Si en revanche on part d'un problème de minimisation avec conditions de bord (par exemple u(0) = u(1) = 0) alors toutes les fonctions test doivent vérifier ces conditions et dans l'intégration par parties, il ne reste pas de terme.

Exemple 3.2.6 Cas non linéaire :

$$J(u) = \frac{1}{2} \int_0^1 |u'(s)|^2 \, \mathrm{d}s + \frac{1}{4} \int_0^1 (1 - |u(s)|^2)^2 \, \mathrm{d}s \,, \tag{3.5}$$

et $X = H^1(]0, 1[)$ muni de la norme H^1 .

La fonctionnelle J est bien différentiable car nous verrons plus bas que H^1 s'injecte de façon continue dans L^{∞} et donc dans L^4 . Calculons l'équation d'Euler-Lagrange et pour cela le développement limité de J(u + tv):

$$J(u+tv) = J(u) + t \int_0^1 u'(s)v'(s) \, \mathrm{d}s - t \int_0^1 (1-u^2(s))u(s)v(s) \, \mathrm{d}s + O(t^2) \, .$$

On voit, de même que dans l'exemple précédent, que si u est un minimiseur, c'est-à-dire si J'(u) = 0, alors en fait u'' est définie au sens faible et

$$u'' + u(1 - u^2) = 0$$
, dans $]0, 1[, u'(0) = u'(1) = 0$

C'est un premier exemple de l'équation de Schrödinger non linéaire en dimension 1.

Exemple 3.2.7 Dimension supérieure : Soit \mathcal{D} ouvert de \mathbb{R}^N , $X = H^1(\mathcal{D})$ et $J(u) = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{D}} |\nabla u(\boldsymbol{r})|^2 d^N r + \frac{1}{4} \int_{\mathcal{D}} (1 - |u(\boldsymbol{r})|^2)^2 d^N r$.

Un calcul similaire donne

$$J'(u) \cdot v = \int_{\mathcal{D}} \nabla u(\boldsymbol{r}) \cdot \nabla v(\boldsymbol{r}) \, \mathrm{d}r - \int_{\mathcal{D}} (1 - u^2(\boldsymbol{r})) u(\boldsymbol{r}) v(\boldsymbol{r}) \, \mathrm{d}r$$

La propriété d'intégration par parties implique que

$$\Delta u + u(1 - u^2) = 0$$
 dans \mathcal{D} et $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ sur $\partial \mathcal{D}$.

Ceci est laissé en exercice.

Exemple 3.2.8 Cas complexe : on peut aussi considérer des fonctions à valeurs complexes dans (3.5).

Il faut alors remplacer la multiplication par le produit scalaire $u \cdot v = uv^*$, où v^* est le complexe conjugué. Le calcul de J(u + tv) donne

$$J(u+tv) = J(u) + t \int_0^1 u'(s) \cdot v'(s) \, \mathrm{d}s - t \int_0^1 (1 - |u(s)|^2) u(s) \cdot v(s) \, \mathrm{d}s + O(t^2) \, .$$

Ceci conduit à l'équation complexe qui est laissée en exercice :

$$u'' + u(1 - |u|^2) = 0$$
.

Notons que J'(u) peut être aussi vue comme $\frac{\partial J}{\partial u^*}$.

3.2.2 Fonctionnelle avec contrainte : multiplicateur de Lagrange

On s'intéresse maintenant à un espace de minimisation qui n'est pas ouvert, par exemple l'ensemble des u de]0,1[dans \mathbb{R} telles que $\int_0^1 |u(s)|^2 ds = 1$ et on souhaite déterminer l'équation vérifiée par le minimiseur.

Théorème 3.2.9 Soit X un ouvert d'un espace vectoriel normé, ϕ une fonction C^1 de X dans \mathbb{R} et J de X dans \mathbb{R} dérivable. Si J admet en u un minimum relatif par rapport à l'ensemble $U = \{v : X \to \mathbb{R}, t.q. \phi(v) = 0\}$ et si $\phi'(u)$ est non nul, alors il existe $\lambda \in \mathbb{R}$ tel que $J'(u) = \lambda \phi'(u)$.

Le nombre λ est appelé multiplicateur de Lagrange et l'équation $J'(u) = \lambda \phi'(u)$ équation d'Euler-Lagrange. Nous ne ferons pas ici la démonstration de ce théorème qui repose sur le théorème des fonctions implicites et renvoyons par exemple à [Cia] ou [Kav].

Exemple 3.2.10 Minimisation de $J(u) = \frac{1}{2} \int_0^1 |u'(s)|^2 ds$ sous $\phi(u) = \int_0^1 |u(s)|^2 ds - 1 = 0$, dans $X = H^1(]0, 1[)$. Nous avons vu que J'(u) = -u'' et $\phi'(u) = 2u$. L'équation d'Euler-Lagrange est donc $-u'' = 2\lambda u$.

En multipliant par u l'équation et en intégrant, on voit que $\lambda = J(u)$. En fait pour cet exemple, le calcul de toutes les solutions de l'équation d'Euler-Lagrange est explicite : il conduit à $u(x) = A \sin(k\pi x)$ avec k entier et A arbitraire, puisqu'on doit avoir u'(0) =u'(1) = 0. On a alors $\lambda = k^2 \pi^2/2$, et le minimum est atteint pour k = 1.

Exemple 3.2.11 Cas non linéaire : Minimisation de

$$J(u) = \int_0^1 \left(\frac{1}{2}|u'(s)|^2 + \frac{1}{2}V(s)|u(s)|^2 + \frac{1}{4}\int_0^1 |u(s)|^4\right) \mathrm{d}s \ , \ sous \ \int_0^1 |u(s)|^2 \ \mathrm{d}s = 1 \ . \tag{3.6}$$

L'équation d'Euler-Lagrange est alors

$$-u''(x) + V(x)u(x) + u^{3}(x) = 2\lambda u(x) .$$

En multipliant par u l'équation et en intégrant, on voit que $\lambda = J(u) + \frac{1}{4} \int_0^1 |u(s)|^4 ds$. Remarquons que si V = 0, (3.6) et (3.5) conduisent à la même équation.

On peut aussi généraliser les exemples précédents à la dimension supérieure et au cas complexe.

3.3 Existence du minimum

Nous avons vu dans la partie précédente une condition nécessaire satisfaite par le minimiseur de l'énergie : il est solution de l'équation d'Euler-Lagrange correspondante. Mais l'infimum d'une fonctionnelle d'énergie n'est pas toujours atteint : soit parce que l'espace de minimisation n'est pas assez grand et le minimiseur potentiel u n'est pas dans l'espace de minimisation, soit parce qu'il y a des suites minimisantes mais qu'elles ne convergent pas. Il faut donc disposer de critères de compacité permettant de faire converger les suites minimisantes.

Dans cette partie, on s'intéresse plus particulièrement à l'existence d'un minimiseur de la fonctionnelle

$$J(u) = \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{2} |u'(x)|^2 + V(x) |u(x)|^2 + \frac{1}{2} G |u(x)|^4 \right) dx , \text{ sous } \int_{\mathbb{R}} |u(x)|^2 dx = 1 .$$
 (3.7)

Cette fonctionnelle est définie dans l'espace

$$B = \{ u \in H^1(\mathbb{R}) \cap L^4(\mathbb{R}), \text{ t.q. } \int_{\mathbb{R}} V(x) |u(x)|^2 \mathrm{d}x < \infty \}$$

Remarquons qu'une autre convention peut être de minimiser J sur tout H^1 en posant $J(u) = +\infty$ si $u \in H^1(\mathbb{R}) \setminus B$.

Commençons par regarder le cas V = 0. Dans ce cas, la borne inférieure de J est 0 mais l'infimum n'est pas atteint : en effet on peut construire une suite minimisante

 $u_n(x) = (1/\sqrt{n})u(x/n)$ où u est une fonction fixe régulière de norme L^2 égale à un. Cette suite converge uniformément vers 0, mais ne converge pas vers 0 dans L^2 puisque $||u_n||_{L^2} = 1$. Par contre $J(u_n)$ tend vers 0. On voit donc que 0 est bien la borne inférieure de l'énergie mais n'est pas dans l'espace de minimisation puisque sa norme L^2 n'est pas 1. Cela correspond au fait que cette énergie n'est pas confinante : les atomes partent à l'infini.

Ces questions d'existence sont d'ordre mathématique et pourront être admises dans une première lecture. En effet, les énergies qui n'admettent pas de minimum ne correspondent pas à un état physique du problème.

On va d'abord considérer le cas où V = 0 mais où la fonctionnelle est définie sur]0, 1[, puis le cas de \mathbb{R} avec un potentiel V confinant, qui est mathématiquement un peu plus délicat.

3.3.1 Convergence faible et régularité dans H^1

Les résultats énoncés dans cette partie seront à considérer comme des outils techniques. En aucun cas les preuves des résultats ne sont à connaître. On se réfèrera à [Bre] ou [Kav] pour plus de détails.

On désigne par E un espace de Hilbert qui sera L^2 ou H^1 (c'est-à-dire que la norme dérive d'un produit scalaire). On rappelle qu'une suite u_n converge dans E vers u ou converge fortement si $||u_n - u||_E$ tend vers 0. Il y a une autre notion de convergence dite faible :

Définition 3.3.1 On dit que u_n converge faiblement vers u dans E et on note $u_n \rightarrow u$, si et seulement si

$$\forall v \in E, \quad \langle u_n, v \rangle \to \langle u, v \rangle .$$

Cette définition permet aussi de définir la convergence faible dans les L^p , 1 , où <math>v est alors pris dans le dual de E. On rappelle que le dual de L^p pour $1 est <math>L^{p'}$ avec 1/p + 1/p' = 1.

La convergence faible possède les propriétés suivantes pour lesquelles on renvoie à [Bre], chapitre III :

Proposition 3.3.2 – Si u_n converge fortement vers u, alors u_n converge faiblement vers u.

- Si u_n converge faiblement vers u, alors $||u_n||_E$ est bornée et $||u||_E \leq \liminf_{n \to \infty} ||u_n||_E$.
- Si u_n converge faiblement vers u dans E et v_n converge fortement vers v dans E, alors $\langle u_n, v_n \rangle$ converge vers $\langle u, v \rangle$.
- Si u_n converge faiblement vers u dans E et si $||u_n||_E$ converge vers $||u||_E$, alors u_n converge fortement vers u.

La propriété fondamentale que nous allons utiliser est un critère de compacité faible :

Théorème 3.3.3 Soit E un espace de Hilbert séparable (par exemple L^2 ou H^1). De toute suite bornée dans E, on peut extraire une sous suite qui converge faiblement.

Remarquons que si E est compact de dimension finie, la propriété de compacité est que de toute suite bornée dans E, on peut extraire une sous suite qui converge. Le fait d'être

dans un Hilbert permet de conférer cette propriété pour la convergence faible. La preuve se fait grâce à l'existence d'une base hilbertienne (due à la séparabilité). Le résultat de ce théorème est fondamental pour montrer l'existence d'un minimiseur d'une énergie.

Nous allons prouver maintenant un résultat de régularité qui dit que les fonctions de H^1 sont en fait plus régulières. Ceci se généralise en dimension supérieure : ce sont les injections de Sobolev (voir [Bre]).

Proposition 3.3.4 Soit I un intervalle ouvert de \mathbb{R} . L'injection de $H^1(I)$ dans $L^{\infty}(I)$ est continue, c'est-à-dire

$$\exists C, \ \forall u \in H^1(I), \|u\|_{L^{\infty}(I)} \le C \|u\|_{H^1(I)} .$$
(3.8)

De plus, si I est borné, cette injection est compacte, c'est-à-dire que de toute suite bornée dans $H^1(I)$, on peut extraire une sous-suite qui converge dans $L^{\infty}(I)$.

On remarque que le théorème précédent disait que de toute suite bornée dans H^1 , on peut extraire une sous suite qui converge faiblement. Cette proposition permet de dire que, quitte à réextraire une suite, la convergence est en fait uniforme.

Le résultat de cette proposition sera utilisé à de nombreuses reprises. La preuve, elle, est juste indiquée par souci de cohérence mais n'est pas à connaître. On se réfèrera à [Bre] chapitre VIII, Th.VIII.7 pour plus de détails. La preuve va utiliser le théorème suivant :

Théorème 3.3.5 (Théorème d'Ascoli) Soit \overline{I} un compact et soit (u_n) une suite bornée de $C(\overline{I})$. Si (u_n) est uniformément équicontinue, c'est-à-dire

$$\forall \epsilon, \exists \delta, \forall n, \forall x, y \in I, |x - y| < \delta \Rightarrow |u_n(x) - u_n(y)| < \epsilon ,$$

alors u_n possède une sous suite convergente.

Démonstration. (Proposition 3.3.4) *Etape 1* : $I = \mathbb{R}$ et $u \in C_c^1(\mathbb{R})$. Alors on a

$$u^{2}(x) = 2 \int_{-\infty}^{x} u(t)u'(t) \, \mathrm{d}t \le 2 \left(\int_{\mathbb{R}} u'(t)^{2} \mathrm{d}t \right)^{1/2} \left(\int_{\mathbb{R}} u(t)^{2} \, \mathrm{d}t \right)^{1/2}$$
$$\le \left(\int_{\mathbb{R}} u'(t)^{2} \, \mathrm{d}t \right) + \left(\int_{\mathbb{R}} u(t)^{2} \, \mathrm{d}t \right) \, .$$

Ceci démontre

$$\|u\|_{L^{\infty}(\mathbb{R})} \le \|u\|_{H^{1}(\mathbb{R})} . \tag{3.9}$$

Si $u \in H^1(\mathbb{R})$, il existe une suite u_n de fonctions C_c^1 telle que u_n converge vers u dans H^1 . En appliquant (3.9), on voit que u_n est de Cauchy dans L^{∞} , donc converge dans L^{∞} vers u qui vérifie (3.9).

Etape 2 : Si I =]0, 1[, on va construire un opérateur de prolongement à tout \mathbb{R} . On définit η , par $\eta = 1$ sur (1/4, 3/4), $\eta = 0$ sur $(-\infty, 0)$ et sur $(1, \infty)$ et on raccorde de façon C^{∞} . Alors, on a $u = \eta u + (1 - \eta)u$. On prolonge ηu par 0 à l'extérieur de I et on peut appliquer la première étape à ηu et on a $\|\eta u\|_{L^{\infty}} \leq \|\eta u\|_{H^{1}} \leq C \|u\|_{H^{1}(I)}$.

3.3. EXISTENCE DU MINIMUM

Pour $(1 - \eta)u$, on prolonge cette fonction par symétrie (3/4, 1) sur (1, 5/4), et par symétrie de (0, 1/4) sur (-1/4, 0), puis par 0 ailleurs. On applique la première étape à cette fonction prolongée et on déduit $||(1-\eta)u||_{L^{\infty}} \leq ||(1-\eta)u||_{H^1} \leq C ||u||_{H^1(I)}$. L'équation $u = \eta u + (1 - \eta)u$ permet de conclure.

Nous avons donc prouvé la première partie de la proposition. Pour la suite,

Etape 3 : Soit u_n une suite bornée dans $H^1(I) : ||u_n||_{H^1} \leq C$. Cela implique que $||u_n||_{L^{\infty}} \leq C'$. On a

$$|u_n(x) - u_n(y)| = \left| \int_x^y u'_n(t) \, \mathrm{d}t \right| \le \left(\int_x^y u'_n(t)^2 \, \mathrm{d}t \right)^{1/2} \left(\int_x^y \, \mathrm{d}t \right)^{1/2} ,$$

$$\le ||u_n||_{H^1} |x - y|^{1/2} \le C |x - y|^{1/2} .$$
(3.10)

Il résulte du théorème d'Ascoli (Théorème 3.3.5), puisque la suite u_n est uniformément bornée dans L^{∞} , qu'elle admet une sous suite convergente dans $C(\bar{I})$.

3.3.2 Cas modèle : le domaine borné

Proposition 3.3.6 Il existe un minimiseur dans $H^1(]a, b[) \cap L^4(]a, b[)$ de

$$E_{a,b}(u) = \int_{a}^{b} \frac{1}{2} |u'(x)|^{2} + \frac{G}{2} |u(x)|^{4} dx \text{ avec } \int_{a}^{b} |u(x)|^{2} dx = 1.$$
 (3.11)

Démonstration. Puisque $E_{a,b}(u) \ge 0$, il existe une borne inférieure $e_{a,b}$ et une suite minimisante, c'est-à-dire une suite $u_n(x)$ telle que

$$\forall n \in \mathbb{N}, \ \|u_n\|_{L^2} = 1 \ , \ \text{et} \ e_{a,b} \le E_{a,b}(u_n) \le e_{a,b} + \frac{1}{n} \ .$$
 (3.12)

D'après (3.12), u_n est bornée dans H^1 donc on peut appliquer le théorème 3.3.3 et on peut en extraire une suite $u_{\phi(n)}$ qui converge faiblement vers un certain u. D'autre part, d'après la proposition 3.3.4, ou d'après (3.10) et le théorème d'Ascoli, on peut réextraire de $u_{\phi(n)}$ une sous suite (toujours notée $u_{\phi(n)}$) qui converge uniformément vers u, et donc en particulier dans L^2 et L^4 . La convergence L^2 implique que $||u||_{L^2} = 1$. La convergence faible et la semi continuité inférieure de la norme (Proposition 3.3.2) impliquent que

$$E_{a,b}(u) \le \liminf_{n \to \infty} E_{a,b}(u_{\phi(n)}) = e_{a,b} .$$

$$(3.13)$$

De plus, u est une fonction test admissible si bien que $e_{a,b} = E_{a,b}(u)$. La borne inférieure est bien un minimum.

Dans ce cas très simple, il se trouve que le minimiseur est une fonction constante $u = 1/\sqrt{b-a}$, comme nous le verrons plus loin. Néanmoins, la preuve de cette proposition est très générale.

La propriété clé de cette preuve est le fait que l'injection de H^1 de L^2 est compacte et donc que la norme L^2 converge fortement. Sinon, on aurait seulement de la semi-continuté inférieure sur la norme L^2 et le minimiseur pourrait être 0 comme dans l'exemple sur \mathbb{R} au début de la section. Notons également qu'une fois (3.13) obtenue, il faut vérifier que la limite u est bien dans l'espace de minimisation. Si on avait pris comme espace de minimisation un espace trop petit, par exemple C^1 au lieu de H^1 , il se pourrait que la limite ne soit pas dans l'espace.

Remarque 3.3.7 Le fait que la fonction soit à valeurs réelles ou complexes ne change pas la preuve.

3.3.3 Cas de \mathbb{R} avec un potentiel de piégeage

Proposition 3.3.8 Si $V(x) = \frac{1}{2}x^2$, le minimum de (3.7) dans

$$B^1(\mathbb{R}) = \{ u \in H^1(\mathbb{R}) \cap L^4(\mathbb{R}), \ t.q. \ xu \in L^2(\mathbb{R}) \} .$$

est atteint.

La différence par rapport au cas précédent est que l'injection dans tout \mathbb{R} de H^1 dans L^2 n'est pas compacte. Mais le potentiel confinant va remplacer la compacité.

Démonstration. Soit *e* la borne inférieure de (3.7) et u_n une suite minimisante. Elle est donc bornée dans H^1 et on peut donc en extraire une sous-suite $u_{\phi(n)}$ qui converge faiblement vers un certain *u* dans H^1 . Nous avons besoin de prouver que la norme L^2 de u_n converge fortement. En fait nous allons prouver que si une suite u_n converge faiblement dans L^2 et si la norme L^2 de xu_n est uniformément bornée alors une sous suite $u_{\psi(n)}$ converge fortement dans L^2 , soit

$$\forall \epsilon > 0, \ \exists N \in \mathbb{N} \text{ t.q. } \forall n \ge N, \|u_{\psi(n)} - u\|_{L^2} < 3\epsilon .$$

$$(3.14)$$

Puisque $||xu_n||_{L^2} \leq C$, ϵ étant fixé, on choisit R tel que $C/R \leq \epsilon$. Alors

$$||u_n||_{L^2(\mathbb{R}\setminus B_R)} \le \frac{||xu_n||_{L^2(\mathbb{R}\setminus B_R)}}{R} \le \frac{C}{R} \le \epsilon .$$

Ceci est vrai également pour u. Maintenant, R étant fixé, l'injection de $H^1(B_R)$ dans $L^2(B_R)$ étant compacte, on peut trouver N et ψ tels que $||u_{\psi(n)} - u||_{L^2(B_R)} \leq \epsilon$ pour $n \geq N$. Nous avons prouvé (3.14) puisque

$$||u_{\psi(n)} - u||_{L^2} \le ||u_{\psi(n)} - u||_{L^2(B_R)} + ||u_{\psi(n)}||_{L^2(\mathbb{R}\setminus B_R)} + ||u||_{L^2(\mathbb{R}\setminus B_R)} < 3\epsilon$$

Nous avons donc que la suite $u_{\phi(n)}$ qui converge faiblement vers un certain u dans H^1 converge également fortement dans L^2 (quitte à réextraire une suite) et donc $||u||_{L^2} = 1$. La fin de la preuve est comme dans le cas d'un borné : la convergence faible et la semi continuité inférieure de la norme impliquent que

$$J(u) \leq \liminf_{n \to \infty} J(u_{\phi(n)}) = e$$
.

De plus, u est une fonction test admissible de H^1 si bien qu'en fait e = J(u). La borne inférieure est bien un minimum atteint en u.

Remarque 3.3.9 La preuve reste vraie si la fonction est à valeurs complexes et on admet le résultat pour la suite. Il est à noter qu'alors le multiplicateur de Lagrange est a priori à valeur complexe. On montre qu'il est réel en multipliant l'équation par u^{*} et intégrant.
Chapitre 4

Condensats, couches limites et solitons

Nous allons chercher à caractériser les états fondamentaux et/ou les solutions stationnaires de l'équation NLS dans plusieurs situations. Ces solutions permettent d'estimer le rôle des différentes contributions linéaires ou non-linéaires de l'équation. En particulier, on remarquera que les propriétés de ces structures sont fortement dépendantes du signe de g et peuvent même dépendre de la dimension de l'espace dans lequel on étudie l'équation.

4.1 Structures spatiales des condensats de Bose-Einstein

Pour obtenir un condensat de Bose-Einstein, on impose un potentiel extérieur afin de confiner les atomes et atteindre ainsi la densité nécessaire pour la condensation. Nous allons étudier ici la forme de ces condensats dans l'état fondamental et pour un potentiel de piégeage harmonique qui correspond à la situation rencontrée dans les expériences :

$$V(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}m\sum_{i=0}^d \omega_i^2 x_i^2 \; .$$

L'état fondamental d'un condensat de Bose-Einstein minimise la fonctionnelle d'énergie obtenue au chapitre 2 :

$$E = \int_{\Omega} \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 + V |\psi|^2 + \frac{Ng}{2} |\psi|^4 \right) \mathrm{d}^d r , \qquad (4.1)$$

avec, en dimension 3,

$$g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}a$$

Comme nous l'avons vu au chapitre 1, section 1.2.5, on peut écrire la fonction d'onde de l'état fondamental $\psi(\mathbf{r},t) = \phi(\mathbf{r})e^{-i\mu t/\hbar}$ où la fonction $\phi(\mathbf{r})$ est à valeur réelle et satisfait l'équation :

$$\mu\phi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi + V(\boldsymbol{r})\phi + gN|\phi|^2\phi , \qquad (4.2)$$

soumise à la condition de normalisation :

$$\int |\phi(\boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}^d r = 1$$

Le potentiel chimique μ correspond alors au paramètre de Lagrange assurant la normalisation de la solution.

On peut distinguer trois contributions dans l'expression de l'énergie (4.1) de ce système :

$$E = E_{\rm c} + E_{\rm piege} + E_{\rm pot}$$
.

Soit le terme d'énergie cinétique :

$$E_{\rm c} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\Omega} |\nabla \phi|^2 \mathrm{d}^d r \; ,$$

le terme d'énergie de piégeage :

$$E_{\text{piege}} = \int_{\Omega} V |\phi|^2 \mathrm{d}^d r \; ,$$

la contribution des interactions :

$$E_{\rm pot} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} g N |\phi|^4 \mathrm{d}^d r \; ,$$

Nous allons nous intéresser ici à la structure spatiale du condensat. Nous estimerons dans un premier temps les ordres de grandeur des différents termes de l'énergie à l'aide d'une famille de fonctions pertinentes dans la limite $g \to 0$.

Par souci de clarté, nous illustrerons ces résultats généraux dans le cas d'un piégeage harmonique isotrope et en dimension 3 d'espace $(d = 3 \text{ et } \omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega)$:

$$V(\boldsymbol{r},t) = V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \; .$$

Dans ce cas, la fonction d'onde de l'état fondamental est également à symétrie sphérique et nous chercherons la fonction $\phi(r)$. Il est important de noter que les résultats que nous allons obtenir dépendent de la dimension d'espace considérée : par exemple, les variations du rayon du condensat ou du potentiel chimique de la solution en fonction du nombre total de particules N varient suivant la dimension.

4.1.1 Solution du condensat sans interaction

Le cas du condensat sans interaction (g = 0) est intéressant car on retrouve alors l'équation de Schrödinger linéaire en présence d'un potentiel harmonique. Cette équation admet une solution analytique simple à symétrie sphérique, qui est l'état fondamental de l'oscillateur harmonique :

$$\psi^{\sigma}(r) = \frac{e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}}{\pi^{3/4}\sigma^{3/2}} , \qquad (4.3)$$

avec

$$\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$
 et $\mu = \frac{3}{2}\hbar\omega$

où $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ est la longueur caractéristique du piège harmonique que l'on obtient en comparant l'énergie cinétique d'un particule dans ce piège $(\hbar\omega)$ avec le potentiel de piégeage $(m\omega^2 x^2)$.

Dans le cas où g est non nul, il est tentant de considérer que la solution du condensat est proche d'une solution gaussienne (4.3) où la largeur de la gaussienne σ peut varier. Pour cela, nous allons estimer les différentes contributions à l'énergie du condensat à l'aide de cette famille de fonctions tests indexées par σ . On s'attend à ce que ces fonctions soient particulièrement pertinentes dans la limite des interactions faibles ($g \to 0$ à préciser ultérieurement) et permettent également de préciser différents régimes de condensats.

4.1.2 Quelques estimations en présence d'interactions

Nous nous plaçons dans le cas $g \neq 0$ et nous allons estimer les différentes contributions à l'énergie du condensat pour les fonctions tests ψ^{σ} :

$$E(\sigma) = \frac{3\hbar^2 N}{4m\sigma^2} + \frac{3}{4}m\omega^2 N\sigma^2 + \frac{N^2 g}{4pi\sqrt{2\pi}m\sigma^3}$$

On rappelle qu'on a :

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$$

En faisant apparaître l'énergie et la longueur caractéristiques de l'oscillateur harmonique $\hbar\omega$ et $(\hbar/(m\omega))^{1/2}$, on peut écrire :

$$E(\sigma') = N\hbar\omega \left(\frac{3}{4}(\frac{1}{\sigma'^2} + \sigma'^2) + \frac{\chi}{2\sigma'^3}\right) ,$$

avec

$$\sigma' = \frac{\sigma}{\sqrt{\hbar/(m\omega)}}$$

et le paramètre χ qui caractérise l'influence du potentiel d'interaction non-linéaire :

$$\chi = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{Na}{\sqrt{\hbar/(m\omega)}}$$

.

La limite de faibles interactions dans le condensat correspond à $\chi \ll 1$.

L'expression de l'énergie permet de déterminer, dans le sous-espace des fonction ψ^{σ} , les valeurs de σ' qui minimisent l'énergie $E(\sigma)$. Ainsi pour g = 0, soit $\chi = 0$, on retrouve bien que $\sigma' = 1$ est la valeur qui minimise la fonction. La minimisation de l'énergie pour χ non nul donne une relation implicite entre χ et la valeur du paramètre σ'_0 qui minimise l'énergie :

$$\frac{dE(\sigma')}{d\sigma'} = 0 \quad \rightarrow (\sigma'_0)^5 = \sigma'_0 + \chi \; .$$



FIG. 4.1 – Illustration de la méthode graphique pour déterminer les solutions $\frac{dE(\sigma')}{d\sigma'} = 0$. On recherche l'intersection entre le polynome $y = x^5$ et la droite $y = x + \chi$. Pour $\chi \ge 0$ il n'y a qu'une seule intersection, a) pour $\chi = 0.01$; b) pour $\chi = 10$.

L'étude des extrema de l'énergie peut se faire à l'aide d'une méthode graphique : on cherche alors l'intersection entre la courbe $y = x^5$ et la droite $y = x + \chi$ pour différentes valeurs de χ . Pour déterminer si un de ces extrema correspond à un minimum ou un maximum de l'énergie, il faut également étudier le comportement de l'énergie, ce qui revient à regarder la fonction :

$$f_{\chi}(x) = \frac{3}{4}(\frac{1}{x^2} + x^2) + \frac{\chi}{2x^3}$$
.

On distingue dans un premier temps deux cas suivant le signe de a.

Cas a > 0: Comme le montre la figure 4.1, il existe une solution unique, qui est un minimum de l'énergie (cela se voit immédiatement à partir du comportement de l'énergie en $\sigma' \to 0$ et $\sigma' \to \infty$) On peut analyser le comportement de ce minimum dans les deux limites :

$$\sigma_0' \sim 1 + \frac{\chi}{4} \ , \ \ \text{pour} \ \ \chi \to 0 \ ,$$

et:

$$\sigma_0' \sim \chi^{1/5} \propto N^{1/5}$$
, pour $\chi \to \infty$

Dans cette dernière limite, on peut remarquer également que la contribution de l'énergie cinétique devient négligeable devant celle du potentiel harmonique :

$$\frac{E_{\rm c}}{E_{\rm pot}} = \frac{1}{\sigma'^4} \sim \frac{1}{\chi^{4/5}} \ .$$

Dans cette limite, l'analyse suggère donc que l'extension radiale du condensat R (caractérisée par la largeur de la gaussienne σ_0) vérifie la relation :

$$R \propto N^{1/5}$$

Cas a < 0:

Suivant les valeurs de χ , on peut avoir deux solutions, une solution ou aucune solution. En effet, lorsque χ est suffisamment proche de zero, c'est à dire $0 > \chi > \chi_c$, il y a deux racines à l'équation $\frac{dE(\sigma')}{d\sigma'} = 0$ comme le montre la figure 4.2.



FIG. 4.2 – a) Solution graphique de l'équation $\frac{dE(\sigma')}{d\sigma'} = 0$ pour $\chi = -0.2$. b) La courbe $f_{\chi}(x)$ pour $\chi = -0.2$ montre que la première racine est instable et la seconde métastable.



FIG. 4.3 – a) Solution graphique de l'équation $\frac{dE(\sigma')}{d\sigma'} = 0$ pour la racine double $\chi = \chi_c$. b) La courbe $f_{\chi_c}(x)$ montre que l'énergie n'a plus de minimum local pour $\sigma' \neq 0$.

Comme l'indique la figure 4.2, la racine la plus petite correspond à un maximum d'énergie, la plus grande à un minimum. Cette seconde racine correspond bien à un état stable du condensat. Notons cependant que cet état ne correspond pas au minimum absolu de la fonctionnelle de l'énergie, qui est obtenu pour $\sigma' \to 0$. Cette situation décrit un collapse du condensat pour lequel toute la masse est concentrée au centre du potentiel. Le minimum local d'énergie correspondant à la deuxième racine est appelé état métastable puisqu'il ne minimise pas l'énergie pour toutes les valeurs de σ' positives. Physiquement, lorsque cet état métastable est créé, cela se traduit par une durée de vie finie de cet état avant le collapse du condensat.

Les deux racines (une instable, l'autre métastable) de l'équation $\frac{dE(\sigma')}{d\sigma'} = 0$ se rapprochent l'une de l'autre au fur et à mesure que χ augmente en valeur absolue, et se confondent pour la valeur critique χ_c qui est obtenue en calculant la racine double du problème :

$$\chi_c = -\frac{4}{5^{5/4}}$$
 .

Pour cette valeur de χ , il existe un seul état d'équilibre qui est instable, comme l'indique la figure 4.3 et le condensat collapse ($\sigma' \rightarrow 0$). En deçà, ($\chi < \chi_c$), il n'y a plus de solution à l'équation d'équilibre et le seul minimum d'énergie correspond au collapse du condensat, voir figure 4.4. Ce scénario où deux extrema d'une énergie, l'un correspondant à un état stable, l'autre instable du problème, se confondent puis disparaissent lorsque le paramètre de contrôle (χ ici) franchit une valeur critique est bien connu en théorie des systèmes dynamiques et s'appelle une bifurcation nœud-col.



FIG. 4.4 – a) Pour $\chi = -1 < \chi_c$ il n'y a plus aucune intersection entre le polynôme d'ordre 5 et la droite. b) La courbe $f_{-1}(x)$ montre que l'énergie est une fonction croissante qui est minimale dans la limite $\sigma' \to 0$.

4.1.3 Régime d'interactions fortes : approximation de Thomas-Fermi

Le cas $\chi \gg 1$ est le plus rencontré expérimentalement. Il s'agit en effet de la situation habituelle dans laquelle le nombre de particules est très grand, $N \gg 1$. Comme l'illustre l'analyse précédente sur le sous-espace des familles ψ^{σ} , le terme d'énergie cinétique peut alors être considéré comme très faible devant l'énergie de piégeage. On peut donc chercher la solution de l'équation (4.2) dans le cadre de l'approximation dite de Thomas-Fermi, pour laquelle le terme cinétique est négligé :

$$\mu\phi = V(r)\phi + Ng\phi^3$$

qui donne la solution :

$$\phi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\mu - V(r)}{Ng}\right)^{\frac{1}{2}} , \qquad (4.4)$$

pour $\mu > V(r)$ et $\psi(\mathbf{r}) = 0$ sinon.

De cette solution (4.4), on déduit immédiatement que le condensat a la forme d'une boule pour un potentiel harmonique isotrope (un ellipsoïde pour un potentiel harmonique en général) de rayon R vérifiant :

$$\mu = \frac{1}{2}m\omega^2 R^2 \; .$$

La valeur du potentiel chimique μ s'obtient en écrivant la condition de normalisation de ϕ :

$$1 = \int \phi(\mathbf{r})^2 \mathrm{d}^d r = \frac{4\pi}{Ng} \int_0^R r^2 (\mu - \frac{1}{2}m\omega^2 r^2) \mathrm{d}r = \frac{4\pi}{Ng} (\mu \frac{R^3}{3} - \frac{1}{10}m\omega^2 R^5) = \frac{16\sqrt{2}\pi\mu^{5/2}}{15Ng(m\omega^2)^{3/2}} ,$$

ce qui donne la relation entre μ et N :

$$\mu = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\frac{15Nmg}{4\pi\hbar^2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)^{2/5} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(15Na\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)^{2/5} = \frac{1}{2}\hbar\omega\chi'^{2/5} ,$$

où on a défini pour plus de clarté $\chi' = 15\sqrt{\frac{\pi}{2}}\chi$. Finalement, on obtient la relation entre le rayon du condensat et le nombre de particules :

$$R = \left(\frac{15Ng}{4\pi m\omega^2}\right)^{1/5} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\chi'^{1/5} \ .$$

On obtient la dépendance suivante entre le rayon du condensat et le nombre de particules du condensat :

$$R \propto N^{1/5} , \qquad (4.5)$$

et la relation pour le potentiel chimique :

$$\mu \propto N^{2/5}$$

Remarque 4.1.1 Rappelons que ces relations sont calculées à trois dimensions. Des relations analogues sont obtenues en dimension une et deux, et seront laissées en exercice ; à 1D :

$$R = \left(\frac{3Ng}{m\omega^2}\right)^{1/3}$$
, et $\mu = \left(\frac{9}{8}m\omega^2 N^2 g^2\right)^{1/3}$;

à 2D :

$$R = \left(\frac{4Ng}{\pi m\omega^2}\right)^{1/4} , \text{ et } \mu = \left(\frac{m\omega^2 Ng}{\pi}\right)^{1/2}$$

4.1.4 Au-delà de l'approximation de Thomas-Fermi : couche limite au bord du condensat

L'approximation de Thomas-Fermi n'est correcte que dans les régions où le terme cinétique peut être négligé devant les autres termes dans l'équation (4.2). On peut tester la validité de cette approximation en comparant le terme $\hbar^2 (\nabla \phi)^2 / (2m)$ avec le terme non-linéaire de l'énergie (4.1) dans la région où la fonction d'onde est non-nulle :

$$\frac{\hbar^2 (\nabla \phi)^2}{2mNg\phi^4} = \frac{\hbar^2 V'(r)^2}{8m(\mu - V(r))^3} = \chi'^{-4/5} \frac{\frac{r^2}{R^2}}{(1 - \frac{r^2}{R^2})^3}$$

On voit que dans la limite $\chi \gg 1$ l'approximation n'est plus valable au bord du condensat : en effet lorsque $r \sim R$, le dénominateur devient très petit. Ceci se traduit par une correction à la solution de TF qui prend en compte le terme cinétique et qui sera importante dans une petite région autour de r = R dans la limite $\chi \to \infty$. Le traitement de cette couche limite se fait en développant l'équation complète (4.2) dans la zone $r \sim R$ et en raccordant la solution trouvée dans cette région avec la solution de Thomas-Fermi valide en dehors de cette zone. Cette méthode de développement asymptotique raccordée est très utile en mécanique des fluides où elle permet par exemple de calculer les écoulements autour d'ailes d'avion. La description générale de cette méthode peut être trouvée dans [Hue] et nous proposons ici une présentation simplifiée qui permet de bien comprendre la méthode de résolution. Dans un premier temps, on peut estimer l'épaisseur δR de la couche limite en considérant la zone comprise entre $R - \delta R$ et R dans laquelle le rapport calculé précédemment est plus grand que 1. On le trouve en cherchant la solution de l'équation :

$$\frac{\hbar^2 (\nabla \phi)^2}{2mNg \phi^4} = \frac{\chi'^{-4/5}}{8(\frac{\delta R}{R})^3} = 1 \ ,$$

ce qui donne :

$$\delta R = \frac{R}{2\chi'^{4/15}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{1}{R}\right)^{1/3}$$

L'épaisseur de la couche limite décroît donc comme la racine cubique de l'inverse du rayon du condensat. On peut retrouver ce résultat en cherchant l'équation de la couche limite à l'ordre dominant. Pour cela, nous allons « zoomer » sur la zone de la couche limite, en faisant le changement de variable :

$$s = \frac{r - R}{\delta} \; .$$

Les hypothèses de couche limite impliquent que dans la limite $\chi \to \infty$, $\delta/R \to 0$. On note $\tilde{\phi}(s) = \phi(r)$. L'équation (4.2) devient alors à l'ordre dominant :

$$-\frac{\hbar^2}{2m\delta^2}\frac{d^2\tilde{\phi}}{ds^2} + m\omega^2 R\delta s\tilde{\phi} + Ng\tilde{\phi}^3 = 0$$

Des termes ont été négligés dans cette équation : on pourrait montrer qu'ils sont bien négligeables devant les termes conservés dans la limite $\chi \to \infty$. Pour résoudre l'équation pertinente dans la couche limite, il faut prendre δ tel que les deux premiers termes soient du même ordre. On retrouve alors le résultat précédent :

$$\delta = \left(\frac{\hbar^2}{2m^2\omega^2 R}\right)^{1/3}$$

De plus, on obtient l'amplitude caractéristique de $\tilde{\phi}$:

$$\tilde{\phi} \sim \sqrt{\frac{m\omega^2 R\delta}{Ng}} = \frac{1}{\sqrt{8\pi Na\delta^2}} \; . \label{eq:phi_star}$$

En faisant le changement de variable pour la fonction d'onde :

$$\tilde{\phi}(s) = \frac{f(s)}{\sqrt{8\pi N a \delta^2}} \; ,$$

on trouve l'équation du condensat proche du bord :

$$f'' - (s + f^2)f = 0$$
.

Ceci est une équation de Painlevé¹. Il faut résoudre cette équation avec des conditions aux limites obtenues en raccordant la solution avec la solution de Thomas-Fermi valide hors de la couche limite, ce qui donne :

$$\lim_{s\to\infty} f(s) = 0$$
, et $\lim_{s\to-\infty} f(s) \sim \sqrt{-s}$.

Remarquons que la seconde limite se comprend comme le comportement de la solution à l'ordre dominant. On peut trouver le comportement de notre solution dans la limite $s \to \infty$. Dans cette limite, le terme non-linéaire est négligeable ($f^2 \ll s$ puisque f tend vers 0) et on doit résoudre :

$$f'' - sf = 0$$
 avec $\lim_{s \to \infty} f(s) = 0$

Cette équation s'appelle l'équation d'Airy qui admet comme solution tendant vers 0 à l'infini, la fonction d'Airy qui se comporte suivant :

$$\lim_{s \to \infty} f(s) \sim \frac{A}{2s^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}s^{3/2}}$$

Notons que f est définie à une constante multiplicative A près, et que cette constante est déterminée par le raccordement de la fonction d'Airy à l'approximation de Thomas-Fermi.

Dans la limite opposée $s \to -\infty$ on retrouve l'approximation de Thomas-Fermi où on peut négliger le Laplacien et on trouve le bon comportement asymptotique :

$$\lim_{s \to -\infty} f(s) \sim \sqrt{-s} \; .$$

La figure 4.5 montre cette solution autour de r = R et la compare avec les comportements asymptotiques recherchés.

4.2 Solitons

Il existe une famille particulière de solutions de l'équation NLS : les solitons. Il s'agit de solutions localisées spatialement et qui se déplacent sans se déformer, en général à vitesse constante. Leur manifestation physique et expérimentale se traduit justement par la formation d'une « onde localisée » qui se propage dans une direction sur de très longues distances. Un exemple bien connu de soliton peut être observé lors du phénomène du mascaret qui correspond à la remontée de l'onde de marée le long d'un fleuve. Historiquement, la première observation et description d'un soliton, en 1934, est due à John Scott Russel,

¹Indiquons qu'une solution d'une équation différentielle ordinaire dans le plan complexe a une singularité en un point si elle n'est pas développable en série entière au voisinage de ce point. Cette singularité est un pôle si le développement en série de Laurent a un nombre fini de termes à puissance négative. Une singularité est dite **éliminable** si elle dépend de la solution choisie et non de singularités de l'équation. Par exemple, les solutions de 2y' = 1/y sont les fonctions $\sqrt{x-c}$. Le point c est alors une singularité éliminable. Les équations différentielles ordinaires **linéaires** n'ont pas de singularité éliminable : leurs seules singularités sont aux points singuliers de l'équation. Pour les équations non linéaires, cette propriété serait trop contraignante. Paul Painlevé a étudié les équations différentielles non linéaires dont les seules singularités éliminables sont des pôles. Il a établi que parmi toutes celles dont les solutions ne pouvaient pas s'exprimer en terme de fonctions spéciales déjà connues, il n'en restait que 6. L'équation que nous étudions est la 2ème équation de Painlevé.



FIG. 4.5 – Solution de l'équation de Painlevé dans la couche limite (courbe noire). La courbe rouge montre la solution de Thomas-Fermi valable dans le condensat et la courbe bleue la fonction d'Airy valable loin du condensat

ingénieur hydrodynamicien, qui suivit à cheval sur plusieurs miles le long d'un canal, une « grande onde solitaire formée lors de l'arrêt brusque d'une péniche dans le canal ».

On trouve des solitons dans de nombreux contextes de propagation d'ondes : leur existence résulte d'un équilibre entre la dispersion des ondes et les nonlinéarités. Les solitons sont donc des objets mathématiques intrinsèquement non-linéaires. Leur étude s'est accélérée notamment avec l'essor des télécommunications. En effet, les équations de propagation du champ électromagnétique dans les fibres optiques obéissent à une équation de Schrödinger nonlinéaire (focalisante en général) qui admet des solution solitons. Ces solitons permettent de transmettre des données sous forme binaire (0 ou 1 suivant la présence ou non du soliton) avec une grande fiabilité. Même si le signal est altéré par la présence de dissipation et/ou d'inhomogénéités dans les fibres optiques, qui se traduisent par des termes supplémentaires dans NLS, la propagation des solitons est suffisamment robuste pour que la présence ou non d'un soliton puisse être déterminée avec précision. Actuellement, certains systèmes de transmission par fibre optique fonctionnent en régénérant régulièrement le signal grâce à ce caractère binaire des solitons. En 1991, on a pu ainsi propager un signal à base de solitons sur plus de 14000 km de fibre optique!

Un lecteur intéressé par une introduction plus complète à la physique des solitons et des ondes solitaires pourra consulter le livre [DauPey]. D'un point de vue mathématique, solitons et ondes solitaires sont des objets différents bien que leur distinction précise ne soit pas toujours faite. Une onde solitaire est une solution localisée qui se propage sans se déformer mais qui se déstabilise en présence d'autres ondes solitaires. Un soliton est également une solution localisée de l'équation qui se propage sans se déformer. Mais, lorsque plusieurs solitons interagissent entre eux (par exemple en considérant une superposition de deux solitons se rapprochant l'un de l'autre), ils ressortent non déformés de leur interaction (on retrouve donc dans la limite asymptotique des temps longs les deux mêmes solitons qui s'éloignent l'un de l'autre). Cette propriété remarquable est à l'origine du nom soliton, qui est donc onde solitaire dont le comportement se rapproche d'une particule.

Nous nous intéresserons ici à deux familles de solitons présents dans l'équation NLS :

- dans le cadre de l'optique non-linéaire où l'équation est focalisante (g < 0). Les solitons correspondent alors à des pics d'intensité et on les appelle solitons brillants (bright solitons).
- dans le cadre de l'hélium superfluide et des condensats de Bose-Einstein. L'équation NLS est défocalisante (g > 0) et les solitons correspondent à des zones de basse densité. On les appelle solitons gris ou noirs (grey solitons ou black solitons).

4.2.1 Solitons en optique non-linéaire

En optique non-linéaire, la propagation de l'enveloppe du champ électro-magnétique le long d'une fibre optique s'écrit en variable adimensionnelle, à l'aide de l'équation NLS 1D,

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + G|\psi|^2\psi = 0 \; ,$$

où le terme non-linéaire provient de la dépendance de l'indice de réfraction du milieu avec l'intensité de l'onde électromagnétique.

Cherchons d'abord l'état fondamental sous la forme d'une solution localisée dans l'espace. On prend à nouveau $\psi(x,t) = \phi(x)e^{i\mu t}$ avec ϕ fonction réelle telle que $\lim_{|x|\to\infty} \phi(x) = 0$. On obtient l'équation :

$$\frac{1}{2}\phi'' - (\mu - G\phi^2)\phi = 0$$

En multipliant par ϕ' , l'équation s'intègre et devient :

$$\phi'^2 = 2\mu\phi^2 - G\phi^4$$
.

Le changement de variable :

$$\phi = \sqrt{\frac{2\mu}{G}} \frac{1}{u} \; ,$$

conduit à l'équation pour u(x) :

$$\frac{u'}{\sqrt{u^2 - 1}} = \sqrt{2\mu} \; .$$

On reconnait la dérivée de la fonction Argcosh et on obtient la solution :

$$\phi(x) = \frac{\sqrt{\frac{2\mu}{G}}}{\operatorname{ch}(\sqrt{2\mu}x)}$$

On relie alors le potentiel chimique μ à l'intensité totale \mathcal{I} du soliton (1.7) :

$$\mathcal{I} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^2 \mathrm{d}x = \frac{4\mu}{G}$$

Finalement le soliton s'écrit en fonction de \mathcal{I} :

$$\phi = \frac{\sqrt{\frac{\mathcal{I}}{2}}}{\operatorname{ch}(\sqrt{\frac{G\mathcal{I}}{2}}x)} \ . \tag{4.6}$$



FIG. 4.6 – Densité ϕ^2 des solitons optiques (4.6) pour des valeurs de $\mathcal{I} = 0.1, 0.5, 1$ et 3.

Cette famille de solitons correspond donc à des pics de densités localisés. C'est pourquoi on appelle ces solutions des solitons clairs ou brillants (bright solitons). Remarquons que la largeur du pic de densité est inversement proportionnelle à la racine de l'amplitude du pic comme le montre la figure 4.6. La structure du soliton résulte de l'équilibre entre la dispersion (le terme de dérivée seconde) et la nonlinéarité.

On peut déduire de cette famille de fonctions, des solitons qui se déplacent à vitesse constante U en utilisant l'invariance galiléenne de l'équation NLS. On trouve :

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{\frac{\mathcal{I}}{2}}}{\operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{G\mathcal{I}}{2}}(x-Ut)\right)} e^{i\left(Ux + \left(\frac{G\mathcal{I}}{4} - \frac{U^2}{2}\right)t\right)}$$

Ces solitons présentent la propriété remarquable d'interagir entre eux sans se déformer un peu à la manière des collisions entre particules. Cette analogie a permis de développer des modèles simples de particules à l'aide de solitons. Pour comprendre l'interaction entre deux solitons, remarquons tout d'abord qu'on n'obtient pas aisément une solution de l'équation comportant deux solitons seulement : en effet, l'équation NLS étant non-linéaire, la somme de deux solutions solitons ne donne pas en général une solution avec deux solitons bien distincts. Cependant, on conçoit aisément que si les deux solitons sont très éloignés l'un de l'autre, la solution s'écrira de façon approchée comme la somme de deux solutions solitons. Une situation dans laquelle deux solitons interagissent peut donc se décrire ainsi : dans la limite où le temps $t \to -\infty$ on a deux solitons, l'un venant de $x \to -\infty$ avec la vitesse U_1 , l'autre venant de $x \to +\infty$ avec la vitesse négative $-U_2$. Les deux solitons vont se croiser et interagir. On observe que dans la limite $t \to +\infty$, on retrouve les deux solutions solitons se déplaçant respectivement vers + et $-\infty$. Seul la phase globale de chaque soliton a varié lors de leur collision. Ceci distingue mathématiquement les solitons des ondes solitaires. Cette propriété est fondamentale et cruciale technologiquement : en effet, elle permet de transporter l'information de manière fiable le long des fibres optiques.

4.2.2 Solitons dans l'hélium et les condensats

Un autre type de soliton existe dans le cadre de l'hélium superfluide et des condensats gazeux en interaction répulsive. Une référence expérimentale est [KSFT]. En supposant le superfluide à pression constante et dans un récipient de grande dimension devant la longueur de cicatrisation, on peut considérer une densité superfluide constante et un courant de particules nul à l'infini. On modélisera le superfluide avec l'équation NLS défocalisante que l'on écrira dans une version adimensionnée avec la condition homogène à l'infini $\lim_{|\mathbf{r}|\to\infty} |\psi(\mathbf{r},t)| = 1$:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\Delta\psi + G|\psi|^2\psi$$
 .

Au delà de la solution homogène $\psi = e^{-iGt}$, on peut chercher une solution qui se déplace à vitesse constante $\sqrt{G\chi}$:

$$\psi = \phi(\boldsymbol{r} - \sqrt{G}\chi t\boldsymbol{n})e^{i\mu t} ,$$

où \boldsymbol{n} est le vecteur unitaire de direction de propagation du soliton. Nous prendrons, dans un premier temps, une solution invariante dans les directions transverses à la direction de propagation (que l'on prendra suivant l'axe des x). L'équation satisfaite alors par $\phi(x - \sqrt{G\chi t})$ est :

$$-\mu\phi - i\chi\sqrt{G}\phi' = -\frac{1}{2}\phi'' + G|\phi|^2\phi$$
 .

Les conditions à l'infini donnent $\mu = -G$. Si on écrit

$$u_{\chi}(x - \sqrt{G}\chi t) = \frac{\phi_{\chi}(x - \sqrt{G}\chi t) - i\chi}{\nu} ,$$

et qu'on cherche des solutions avec u réelle, alors on arrive à un système couplé de deux équations différentielles pour u:

$$-u' + \sqrt{G\nu}(u^2 + \frac{\chi^2 - 1}{\nu}) = 0 , \text{ et } -\frac{1}{2}u'' + G\nu^2 u(u^2 + \frac{\chi^2 - 1}{\nu}) = 0$$

La première équation s'intègre en $u(s) = \nu \tanh(\sqrt{G\nu s})$. En injectant dans la seconde, on voit que

$$\nu^2 + \chi^2 = 1 . \tag{4.7}$$

et donc

$$\phi_{\chi}(x - \sqrt{G\chi}t) = \nu \tanh(\sqrt{G\nu}(x - \sqrt{G\chi}t)) + i\chi$$
.

La partie réelle passe de la valeur $-\nu$ en $x \to -\infty$ à $+\nu$ en $+\infty$, comme le montre la figure 4.7, alors que la partie imaginaire reste constante.

De plus, ν et χ sont des réels compris entre -1 et 1 d'après la relation (4.7). Ainsi, la vitesse de déplacement du soliton est toujours plus petite que \sqrt{G} . Nous verrons dans le chapitre 6 que \sqrt{G} est la vitesse du son dans ce modèle si bien que les solitons sont des structures subsoniques. La densité illustre bien la structure de ces solitons :



FIG. 4.7 – Partie réelle d'un soliton dans l'équation NLS défocalisante, avec G = 1 et $\nu = \chi = 1/\sqrt{2}$.



FIG. 4.8 – Densité et argument du soliton pour G = 1 et $\nu = \chi = 1/\sqrt{2}$.

$$\rho(s) = |\psi|^2 = 1 - \frac{\nu^2}{\operatorname{ch}^2(\sqrt{G}\nu s)}$$

Il s'agit d'un "creux" de densité de profondeur ν^2 et de largeur $1/(\sqrt{G}\nu)$ qui se déplace à vitesse constante $\sqrt{G}\xi$. L'argument de la fonction d'onde varie rapidement au passage du soliton et on observe un saut entre l'amont et l'aval du soliton de $-2 \arctan(\nu/\chi)$, comme l'indique la figure 4.8.

On peut calculer le déficit de masse (ou de particules) du soliton en calculant :

$$\delta N = \int_{-\infty}^{\infty} (1 - |\phi|^2) \mathrm{d}s = \frac{2\nu}{\sqrt{G}}$$

La quantité de mouvement associée à cette solution s'écrit :

$$j = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i}{2} \left(\phi \frac{d\phi^*}{ds} - \phi^* \frac{d\phi}{ds}\right) ds = -2\nu\chi = -\delta N\sqrt{G}\chi ,$$

ce qui indique que le soliton peut-être interprété comme un objet de masse (ou de particules) $-\delta N$ qui se déplace à la vitesse $\sqrt{G\chi}$.

Le soliton résulte à nouveau de l'équilibre entre la dispersion et la nonlinéarité dans NLS. La relation entre ν et χ indique que la vitesse du soliton diminue avec l'amplitude du creux de densité. Le changement de signe relatif entre la nonlinéarité et la dispersion explique pourquoi les solitons sont des pics dans le cas focalisant et des creux dans le cas défocalisant.

Ces structures sont appelés en général solitons gris ou solitons sombres (grey, dark solitons en anglais) en référence au creux de densité.

Remarque 4.2.1 Le cas $\nu = 1$ est appelé soliton noir et correspond à une solution particulière qui ne bouge pas, avec un saut de phase égal à π et qui s'annule en x = 0:

$$\phi_b = \tanh(\sqrt{G}x) \; .$$

En dimension spatiale plus élevée, on peut considérer deux extensions aux solitons de NLS :

-des solutions de NLS obtenus en considérant les solitons invariants par translation suivant les autres variables d'espace. Il s'agit donc d'une ligne soliton à 2D, d'un plan à 3D, qui se déplace à vitesse constante. Ces solutions sont instables et la ligne (le plan) de soliton se "casse" en petites structures.

-la solution soliton noir ϕ_b permet d'illustrer une solution particulière de NLS en dimension plus élevée. Plaçons nous en dimension deux par souci de simplicité et imaginons une fonction construite à partir du soliton noir et qu'on note en coordonnées polaires (r, θ) :

$$\phi_v(r,\theta) = \phi_b(r)e^{i\theta}.$$

Pour tout axe passant par l'origine r = 0, cette fonction a la forme du soliton noir à une phase $e^{i\theta}$ près. Cette fonction décrit un écoulement tourbillonaire : le champ de vitesse est orthoradial (parallèle à e_{θ}) en tout point et la circulation de la vitesse vaut 2π . Cette fonction est en fait très proche de la solution particulière de NLS d'écoulement tourbillonnaire. On peut en effet montrer qu'il existe une solution stable de NLS 2D sous la forme $\phi = f(r)e^{i\theta}$. Cette solution exacte de NLS est appelée vortex. En général les vortex ne sont pas considérés comme des solitons (les variations de leur phase n'est pas localisée) mais plutôt comme des défauts topologiques à cause de leur circulation quantifiée. On remarquera cependant un lien indéniable entre le vortex et le soliton noir qu'on peut interpréter comme la trace 1D d'un vortex. On décrira plus en détail la formation et les propriétés de ces solutions dans le chapitre 8.

Chapitre 5

Etude mathématique des propriétés de l'état fondamental du condensat

Le but de ce chapitre est de prouver des propriétés mathématiques des minimiseurs de l'énergie

$$J(u) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} |u'(x)|^2 + V(x)|u(x)|^2 + \frac{G}{2} |u(x)|^4 \, \mathrm{d}x \, \mathrm{sous} \, \int_{\mathbb{R}} |u(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1 \,, \qquad (5.1)$$

où G est un paramètre, ainsi que des solutions de l'équation d'Euler-Lagrange associée,

$$-\frac{1}{2}u'' + V(x)u + G|u|^2 u = \lambda_0 u , \qquad (5.2)$$

sans passer par une résolution explicite du problème. Une propriété clé que nous allons démontrer est l'unicité du minimiseur. Les autres propriétés s'appuient sur la taille du paramètre G, petit ou grand. On fera le lien avec certains calculs du chapitre précédent. Plusieurs méthodes sont possibles.

- méthodes variationnelles : construction de bornes supérieures de l'énergie par des fonctions test v. Si u est un minimiseur, alors $J(u) := \min J$ donc

$$J(u) := \min J \le J(v) \quad \forall v \; .$$

Il s'agit de bien choisir v. Puis on vérifie que cette borne supérieure donne également une borne inférieure appropriée et que le minimum de l'énergie converge vers la fonction test espérée. Les physiciens font souvent appel à des simulations numériques qui permettent de déterminer un excellente borne supérieure. La difficulté mathématique est de montrer que cette borne supérieure est optimale, c'est-à-dire qu'elle fournit au premier ordre d'approximation également une borne inférieure.

- utilisation de l'équation d'Euler-Lagrange pour en déduire des propriétés de régularité de la solution, construction de sur ou sous solution, c'est à dire de fonctions test qui vont être plus petites ou plus grandes que la solution, et qui permettent de l'approcher.

Dans le chapitre 3, nous avons montré l'existence de solutions pour (5.2) en montrant l'existence d'un minimum de la fonctionnelle d'énergie. Mais il est également intéressant d'étudier les propriétés des solutions de (5.2), sans passer par la structure variationnelle mais en utilisant uniquement les propriétés de l'équation. Nous allons introduire dans ce chapitre des techniques directes de preuve d'existence de solutions réelles C^2 sur]0,1[de

$$-u'' = f(x, u) \text{ sur }]0, 1[, \quad u(0) = u(1) = 0, \qquad (5.3)$$

où f est une fonction C^1 . Le seul théorème général d'existence est le théorème de Cauchy Lipschitz :

Théorème 5.0.2 Si f(x, u) est une fonction continue et localement Lipschitzienne par rapport à la deuxième variable, alors, pour tout réel α , il existe une unique solution de -u'' = f(x, u) définie au voisinage de zéro, telle que u(0) = 0, $u'(0) = \alpha$.

Le théorème de Cauchy-Lipschitz ne permet pas de conclure car si on part de u(0) = 0, $u'(0) = \alpha$ et qu'on fait varier α , on ne sait pas s'il va exister un α tel que u(1) = 0.

Il se peut en fait que le problème (5.3) dans toute sa généralité n'ait pas de solution, ou au contraire qu'il en ait plusieurs. On va décrire ici une méthode constructive pour obtenir une solution, dont l'idée s'appuie sur une propriété de point fixe. On commence par présenter le point clé des démonstrations qui repose sur le principe du maximum. Insistons sur le fait que les fonctions doivent être réelles pour pouvoir les comparer par le principe du maximum. Cette propriété ne concernera pas seulement les solutions positives, qui sont les seules solutions obtenues en minimisant une énergie.

Une référence de ce chapitre est le livre de Smoller [Smo].

5.1 Principe du maximum

L'idée de base de ce que nous allons présenter ici repose sur les propriétés des fonctions convexes, c'est-à-dire vérifiant $u'' \ge 0$: une fonction convexe sur un intervalle de \mathbb{R} est soit croissante sur tout l'intervalle, soit décroissante sur tout l'intervalle, soit décroissante puis croissante. En aucun cas, elle ne peut avoir de maximum local. En particulier, elle est toujours plus petite à l'intérieur d'un intervalle que sur le bord. Ces propriétés sont en fait très générales et s'étendent à beaucoup d'autres fonctions que les fonctions convexes : par exemple si u vérifie $u'' - c(x)u \ge 0$, avec $c(x) \ge 0$, ou bien en dimension supérieure si $\Delta u - c(x)u \ge 0$ avec $c(x) \ge 0$. Cela s'appelle le principe du maximum. Il en existe beaucoup de variantes.

Proposition 5.1.1 Soit I un intervalle borné de \mathbb{R} , c(x) une fonction continue positive ou nulle, et supposons que u est une fonction C^2 sur I telle que $u'' - c(x)u \ge 0$, et $\lim_{x\to\partial I} u(x) \le 0$. Alors $\forall x \in I$, $u(x) \le 0$.

Démonstration. Supposons que u a un maximum local strictement positif. Ce maximum est nécessairement atteint dans I en un point x_0 . On a donc

$$u(x_0) > 0, \ u'(x_0) = 0 \text{ et } u''(x_0) \le 0.$$
 (5.4)

Supposons d'abord que c(x) = 0. On définit $v(x) = u(x) + \epsilon e^{\gamma x}$. On a alors v'' > 0. De plus, pour ϵ assez petit, v a un maximum local strictement positif, donc (5.4) est vrai pour v. Ceci est impossible en raison du signe de v''.

Dans le cas général, on définit I_0 le plus grand intervalle sur lequel u est positve, alors comme $u \leq 0$ sur le bord de I, on a que u = 0 sur le bord de I_0 . De plus $u'' \geq c(x)u(x) \geq 0$ sur I_0 . Ceci est impossible par l'étape précédente.

Ceci est le principe du maximum faible. Une autre version du principe du maximum, dit fort, est la suivante

Proposition 5.1.2 Soit I un intervalle de \mathbb{R} , c(x) une fonction continue positive ou nulle, et supposons que u est une fonction C^2 négative ou nulle sur I telle que $u''-c(x)u \ge 0$. Alors si u s'annule dans I, u est en fait identiquement nulle.

Démonstration. Comme x_0 est un point de maximum, alors $u'(x_0) = 0$. Soit g(x) = u'' - c(x)u. La fonction u vérifie l'équation différentielle u'' - c(x)u = g(x), avec $u(x_0) = u'(x_0) = 0$. Le théorème de Cauchy Lipschitz permet de conclure que u est nulle.

Remarque 5.1.3 Ces deux propositions sont également vraies en dimension quelconque avec u'' remplacée par Δu .

5.2 Unicité du minimiseur

Proposition 5.2.1 Supposons qu'il existe un minimiseur à valeurs complexes de

$$J(u) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} |u'(x)|^2 + V(x)|u(x)|^2 + \frac{G}{2} |u(x)|^4 \, \mathrm{d}x \, sous \, \int_{\mathbb{R}} |u(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1 \,.$$
(5.5)

Alors u est de la forme u_0e^{ic} où $c \in \mathbb{R}$ est une constante indépendante de x et u_0 est la fonction réelle positive minimisant J. De plus, il existe un unique couple (u_0, λ_0) tels que u_0 est de norme 1 et est solution réelle positive de

$$-\frac{1}{2}u'' + V(x)u + Gu^3 = \lambda_0 u . (5.6)$$

Remarque 5.2.2 Parmi tous les couples (u, λ_0) possibles solutions de (5.6), avec u_0 réelle, il y en a un seul tel que la solution u_0 est positive. En revanche, il existe d'autres valeurs λ_k pour lequelles la solution change de signe k fois. Les solitons noirs décrits dans le chapitre 4.2 correspondent aux solutions qui changent de signe une fois.

Cette proposition ne donne pas de condition sur V(x) car elle suppose juste l'existence du minimiseur. Nous avons prouvé cette existence dans le cas $V(x) = x^2$. En fait, $\lim_{x\to\infty} V(x) = \infty$ suffit.

Cette proposition montre par contre que le minimiseur est à valeur réelles et est unique, à multiplication par un nombre complexe de module 1 près.

Remarque 5.2.3 La preuve est aussi vraie si \mathbb{R} est remplacé par un intervalle]a, b[et V = 0, ce qui prouve l'unicité de la solution positive dans le cas de la Proposition 3.3.6. Comme la fonction constante est solution, il n'y en a pas d'autre.

Démonstration. Si u est un minimiseur de J dans H^1 alors |u| est aussi dans H^1 et $|\nabla u|^2 \ge |\nabla |u||^2$. On a alors $J(|u|) \le J(u)$, donc |u| est aussi un minimiseur et est solution de l'équation d'Euler-Lagrange (5.6) puisque |u| est une fonction réelle. Ceci implique par le principe du maximum fort (ou dans ce cas par le théorème de Cauchy-Lipschitz) que |u| ne s'annule pas. En effet, u ne peut être identiquement nulle puisque sa norme L^2 est 1. On peut donc relever u: il existe $\phi(x)$ tel que $u = |u|e^{i\phi(x)}$. Comme J(|u|) = J(u), on trouve que $\int |u|^2 |\nabla \phi|^2 = 0$ et donc ϕ est constante.

Nous allons maintenant montrer qu'il y a un seul minimiseur réel de J, et un seul couple (u_0, λ_0) solution de (5.6). Cette preuve est très générale et se retouve dans d'autres contextes. Soient (u_0, λ_0) et (u_1, λ_1) deux solutions de (5.6) telles que $\lambda_0 \geq \lambda_1$ et soit $v = u_1/u_0$. On rappelle que u_0 ne s'annule pas donc v est bien définie. On remarque que

$$\int_{\mathbb{R}} u_0^2 (v-1)^2 = 2 \int_{\mathbb{R}} (u_1^2 - u_0 u_1) = 2 \int_{\mathbb{R}} u_0^2 v(v-1) ,$$

puisque u_0 et u_1 sont de norme égale. On calcule l'équation vérifiée par v et on trouve que

$$-(u_0^2 v')' + g v u_0^4 (v^2 - 1) = (\lambda_1 - \lambda_0) u_0^2 v$$

On multiplie cette équation par (v-1) et on intègre. On en déduit que

$$\int_{\mathbb{R}} \left(u_0^2 ((v-1)')^2 + u_0^4 v(v+1)(v-1)^2 + \frac{1}{2} (\lambda_0 - \lambda_1) u_0^2 (v-1)^2 \right) = 0 \; .$$

Comme tous les termes de cette égalité sont positifs, nous en déduisons qu'ils sont tous nuls et donc $v \equiv 1$, $\lambda_0 = \lambda_1$, soit l'unicité annoncée.

On peut remarquer que l'unicité des fonctions réelles peut également être prouvée par des arguments de convexité de la fonctionnelle. En effet la fonctionnelle n'est pas convexe en u à cause de la contrainte de norme L^2 , mais est convexe en u^2 (il faut le vérifier sur le terme de gradient et ceci sera laissé en exercice).

5.3 Bornes supérieures, bornes inférieures

On s'intéresse au comportement du minimum de

$$J(u) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} |u'(x)|^2 + V(x)|u(x)|^2 + \frac{G}{2} |u(x)|^4 \, \mathrm{d}x \, \mathrm{sous} \, \int_{\mathbb{R}} |u(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1 \,, \qquad (5.7)$$

en fonction de la valeur de G. On va étudier le cas spécifique $V(x) = \frac{1}{2}x^2$.

Cas G = 0 (équation de Schrödinger linéaire)

Dans le cas G = 0, le problème est alors linéaire. Nous retrouvons l'oscillateur harmonique étudié dans [BasDal]. Le minimiseur de J est alors l'unique solution positive dans \mathbb{R} de

$$-u'' + x^2 u = 2\lambda u av{5.8}$$

où λ est le multiplicateur de Lagrange. Comme l'équation est linéaire, on a aussi que $\lambda = J(u)$. Les nombres réels λ pour lesquels il existe des solutions non nulles de (5.8) forment une suite qui tend vers l'infini, appelés valeurs propres de l'opérateur

$$H = -\frac{d^2}{\mathrm{d}x^2} + x^2$$

Elles valent

$$\lambda_n = (2n-1), n \in \mathbb{N}, \ n \ge 1$$

La plus petite valeur propre est $\lambda_1 = 1$, et la fonction propre associée, c'est-à-dire la solution de (5.8) correspondant à λ_1 est

$$\phi_1(x) = c_1 \exp(-x^2/2)$$
.

On pourra aussi se référer à [All], sur les quotients de Rayleigh et à [BasDal] sur l'oscillateur harmonique. Soit

$$L^+ = -\frac{d}{\mathrm{d}x} + x$$
, et $L^- = \frac{d}{\mathrm{d}x} + x$,

alors $H = L^+L^- + 1$. De plus, on a la propriété $\langle Hu, u \rangle_{L^2} = ||L^-u||_{L^2} + ||u||_{L^2}$ qui implique en particulier $\langle Hu, u \rangle_{L^2} \ge ||u||_{L^2}$.

Notons que toute fonction de L^2 solution au sens des distributions de $L^+u=0$ est nulle. Toute solution au sens des distributions de $L^-u=0$ égale à $c\phi_1$. La *n*ième fonction propre ϕ_n est donnée par $c_n(L^+)^n\phi_1$. On le montre grâce à la propriété $L^+(H+2) = HL^+$. On prouve alors que $\phi_n(x) = P_n(x) \exp(-x^2/2)$ où P_n est un polynôme de degré n-1. Ce sont les polynômes de Hermite.

D'autre part, on a la propriété que H est symétrique, donc pour tous les u et v dans L^2 ,

$$< Hu, v >_{L^2} = < u, Hv >_{L^2}$$

On en déduit donc que les ϕ_n sont orthogonales. Elles forment une base hilbertienne orthonormale de L^2 .

Cas G petit

Dès que G n'est pas nul, on va chercher à construire des bornes supérieures et inférieures. Un candidat naturel de borne supérieure est la fonction ϕ_1 que nous venons de voir. Elle est intéressante quand G est petit :

Proposition 5.3.1

Soit $m(G) := \inf_{\|u\|_{L^2}=1} J(u)$ et soit (λ_1, ϕ_1) la 1ère valeur propre et fonction propre de $-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$, avec $\|\phi_1\|_{L^2} = 1$. Alors, quand G tend vers 0,

$$m(G) = \lambda_1 + \frac{G}{2} \int |\phi_1|^4 + O(G^{3/2})$$

D'autre part, si u_{min} est un minimiseur de J, il existe c et C tels que $||u_{min} - c\phi_1||_{L^2} \leq C\sqrt{G}$ quand G tend vers 0.

La preuve est une généralisation de la théorie des perturbations au 1er ordre. Démonstration. Nous utilisons ϕ_1 comme borne supérieure et trouvons

$$\lambda_1 \le m(G) \le \lambda_1 + \frac{G}{2} \int_{\mathbb{R}} |\phi_1(x)|^4 \, \mathrm{d}x \,. \tag{5.9}$$

Toute la question est donc de prouver la borne inférieure, en particulier que le terme en $G \int_{\mathbb{R}} |\phi_1|^4 dx$ donne le bon développement. Soit u_{min} un minimiseur de J. Nous le projetons orthogonalement par rapport au produit scalaire L^2 sur ϕ_1 , c'est à dire : $u_{min} = \alpha \phi_1 + u_{\perp}$, avec $\int_{\mathbb{R}} \phi_1 u_{\perp} = 0$. Le calcul de la norme L^2 donne

$$1 - |\alpha|^2 = ||u_{\perp}||^2 . \tag{5.10}$$

De plus d'après la propriété d'orthogonalité et de valeurs propres,

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} |u'_{\perp}|^2 + V(x) |u_{\perp}|^2 \, \mathrm{d}x \ge \lambda_2 \int_{\mathbb{R}} |u_{\perp}|^2 \, \mathrm{d}x \, .$$

On en déduit que

$$\begin{split} \lambda_1 + \frac{G}{2} \int_{\mathbb{R}} |\phi_1(x)|^4 \, \mathrm{d}x &\geq m(G) = J(\alpha \phi_1 + u_\perp) \\ &= \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} |u'_\perp|^2 + V(x) |u_\perp|^2 \, \mathrm{d}x + \alpha^2 \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} |\phi'_1|^2 + V(x) |\phi_1|^2 \, \mathrm{d}x + \frac{G}{2} \int_{\mathbb{R}} |u_{min}(x)|^4 \, \mathrm{d}x \\ &\geq \lambda_2 ||u_\perp||^2 + \lambda_1 \alpha^2 + \frac{G}{2} \int_{\mathbb{R}} |u_{min}(x)|^4 \, \mathrm{d}x \\ &= \lambda_1 + (\lambda_2 - \lambda_1) ||u_\perp||^2 + \frac{G}{2} \int_{\mathbb{R}} |u_{min}(x)|^4 \, \mathrm{d}x. \end{split}$$
(5.11)

Remarquons que dans la 2ème ligne, il n'y a pas de termes croisés en $\psi_1 u_{\perp}$, grâce à une intégration par parties, au fait que ψ_1 est fonction propre de H, ϕ_1 et u_{\perp} sont orthogonales. On trouve donc

$$1 - |\alpha|^2 = ||u^{\perp}||^2 \le G \frac{\int_{\mathbb{R}} |\phi_1(x)|^4 \,\mathrm{d}x}{\lambda_2 - \lambda_1}$$

Ceci implique l'existence d'un nombre complexe de module 1 c tel que

$$||u_{min} - c\phi_1||_{L^2}^2 \le G \frac{\int_{\mathbb{R}} |\phi_1(x)|^4 \,\mathrm{d}x}{\lambda_2 - \lambda_1} \,. \tag{5.12}$$

Nous développons $|u_{min}|^4$ de la manière suivante :

$$|u_{min}|^{4} = |c\phi_{1} + u_{min} - c\phi_{1}|^{4} \geq |\phi_{1}|^{4} + 2|\phi_{1}|^{2}|u_{min} - c\phi_{1}|^{2} - 4|\phi_{1}|^{3}|u_{min} - c\phi_{1}| .$$
(5.13)

Nous en déduisons

$$|u_{min}|^4 \ge |\phi_1|^4 - 4|\phi_1|^3|u_{min} - c\phi_1| .$$
(5.14)

Nous avons alors

$$m(G) \geq \lambda_1 + \frac{G}{2} \int_{\mathbb{R}} |u_{min}(x)|^4 \, \mathrm{d}x \\ \geq \lambda_1 + \frac{G}{2} \int_{\mathbb{R}} |\phi_1(x)|^4 \, \mathrm{d}x - 2G||u_{min} - c\phi_1||_2 ||\phi_1||_6^3 \,.$$
(5.15)

La norme $||\phi_1||_6$ est contrôlée uniformément. De (5.12), on tire la borne inférieure de la proposition. \blacksquare

Cas G grand

Dans cette partie, nous prouvons un résultat de type Thomas Fermi en lien avec ce qui a été vu dans le chapitre 4.1.

Proposition 5.3.2

Soit $m(G) := \inf_{||u||_{L^2}=1} J(u)$ et soit p(x) le minimum dans les fonctions positives intégrables de

$$F(q) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} x^2 q(x) + \frac{1}{2} q^2(x) \, \mathrm{d}x \, , \, sous \, \int_{\mathbb{R}} q(x) \, \mathrm{d}x = 1 \, . \tag{5.16}$$

Alors, quand G tend vers l'infini,

$$m(G) \sim G^{2/3} F(p).$$
 (5.17)

Démonstration. Etant donnée une fonction v de H^1 de norme L^2 égale à 1, la fonction $u(x) = \sqrt{\alpha}v(\alpha x)$ reste de norme L^2 égale à 1. On a

$$J(u) = \frac{1}{\alpha^2} \mathcal{G}(v) , \text{ avec } \mathcal{G}(v) = \int_{\mathbb{R}} \frac{\alpha^4}{2} {v'}^2(x) + \frac{1}{2} x^2 v^2(x) + \frac{1}{2} G \alpha^3 v^4(x) \, \mathrm{d}x .$$

Pour que les deux derniers termes soient du même ordre, on choisit $G\alpha^3 = 1$. On a donc

$$J(u) = G^{2/3}\mathcal{G}(v) , \text{ avec } \mathcal{G}(v) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2G^{4/3}} v'^2(x) + \frac{1}{2}x^2v^2(x) + \frac{1}{2}v^4(x) \, \mathrm{d}x .$$
 (5.18)

On rappelle que p(x) est le minimum de F(q) donné par (5.16). L'équation d'Euler-Lagrange implique que

$$\frac{1}{2}x^2 + p = \lambda$$

Alors $p(x) = (\lambda - x^2/2)_+$, c'est à dire égale à cette fonction si $x^2 < 2\lambda$ et nulle sinon. Le calcul de la norme implique que $\lambda = (3/2\sqrt{2})^{2/3}$. On remarque tout de suite que $\mathcal{G}(v) \geq F(v^2) \geq F(p)$. On a donc $m(G) \geq G^{2/3}F(p)$, soit la borne inférieure de (5.17). On aimerait utiliser \sqrt{p} pour construire une fonction test de $\mathcal{G}(v)$. Le problème est que, comme p s'annule de manière linéaire en x = R, \sqrt{p} n'est pas dans H^1 , donc n'est pas une fonction test admissible. Il faut donc régulariser cette fonction pour l'utiliser comme fonction test.

On définit la fonction $\gamma(s)$ par

$$\gamma(s) = \sqrt{s} \text{ si } s \ge G^{-1/3} \quad \gamma(s) = G^{1/6} s \text{ si } s \le G^{-1/3}$$

On utilise comme fonction test $\gamma(p)$, qui est proche de \sqrt{p} , quand G est grand, mais qui est dans H^1 . Un changement de variable en s = p(x) permet de verifier que $J(\gamma(p)) = G^{2/3}(F(p) + C\frac{\ln G}{G^{4/3}})$, ce qui donne la borne supérieure.

On verra en exercice comment montrer que u le minimiseur de J est proche de \sqrt{p} en calculant J(u + (v - u)), où v est la fonction test proche de p construite ci-dessus. En effet

$$J(u + (v - u)) = J(u) + \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} ((v - u)')^2 + \frac{1}{2} x^2 (v - u)^2 + \frac{G}{2} ((v - u)^4 + 4u(v - u)^3 + 6u^2 (v - u)^2) dx.$$

Les bornes supérieures et inférieures permettent de déduire que $J(v) - J(u) \le c \ln G/G^{2/3}$.

5.4 Méthode de sur et sous solutions

Définition 5.4.1 On dit que \bar{u} est sur-solution de (5.3) si $-\bar{u}'' \ge f(x,\bar{u})$ et $\bar{u}(0) \ge 0$, $\bar{u}(1) \ge 0$.

 $On \ dit \ que \ \underline{u} \ est \ \text{sous-solution} \ de \ (5.3) \ si \ -\underline{u}'' \leq f(x,\underline{u}) \ et \ \underline{u}(0) \leq 0, \ \underline{u}(1) \leq 0.$

Remarque 5.4.2 La notion de sur et sous solutions ne nécessite pas de fonctions C^2 : il peut s'agir de fonctions simplement C^1 par morceaux et la dérivée u'' est alors définie au sens faible c'est à dire $\forall \phi \in C_c^1]0, 1[, \int_0^1 u' \phi' = \int_0^1 f(x, u) \phi.$ Si \bar{u}_1 et \bar{u}_2 sont deux sur-solutions, alors min (\bar{u}_1, \bar{u}_2) est sur-solution.

Remarque 5.4.3 Si \underline{u}_1 et \underline{u}_2 sont deux sous-solutions, alors $\max(\underline{u}_1, \underline{u}_2)$ est sous-solution.

Théorème 5.4.4 Supposons qu'il existe \bar{u} sur-solution de (5.3) et \underline{u} sous-solution de (5.3) telles que $\underline{u} \leq \bar{u}$. Alors il existe u solution de (5.3) telle que $\underline{u} \leq u \leq \bar{u}$.

Notons que les solutions obtenues de cette manière sont des solutions stables, c'est-àdire sont des minima locaux de l'énergie. Le preuve, comme on va le voir repose sur une méthode itérative dans l'esprit des théorèmes de point fixe.

Il peut y avoir des cas où les sur-solutions sont plus petites que les sous-solutions et ce théorème ne permet pas alors de conclure.

Exemple 5.4.5 Prenons l'équation $-u'' = \lambda u(1 - u^2)$, u(0) = 0, u(1) = 0. Il y a une solution évidente qui est u = 0. On peut vérifier que u = 1 est sur-solution, et que $u(x) = \epsilon \sin(\pi x)$ est sous-solution pour ϵ petit si $\lambda > \pi^2$. On en déduit donc l'existence d'une solution strictement positive, plus petite que 1.

Démonstration. Comme \underline{u} et \overline{u} sont continues sur]0, 1[, elles atteignent leur maximum et leur minimum, ce qui fournit un intervalle borné (inf \underline{u} , max \overline{u}). On réécrit l'équation sous la forme

$$-u'' + ku = f(x, u) + ku , \text{ avec } k \ge -\inf_{x \in]0,1[, u \in (\inf \underline{u}, \max \overline{u})} \frac{\partial f}{\partial u}(x, u) ,$$

si bien que f(x, u) + ku est croissante en u pour $u \in (\inf \underline{u}, \max \overline{u})$. On va construire une suite u_i par $u_0 = \underline{u}$ et

$$-u_j'' + ku_j = g(x, u_{j-1}) := ku_{j-1} + f(x, u_{j-1}) , \quad u_j(0) = 0, \ u_j(1) = 0 .$$
 (5.19)

On rappelle qu'une équation linéaire à coefficients constants de ce type se résout par la méthode de variation des constantes :

$$u_j(x) = \lambda_j \sinh(\sqrt{k}x) - \frac{1}{\sqrt{k}} \int_0^x \left(ku_{j-1}(x) + f(t, u_{j-1}(x))\right) \sinh(\sqrt{k}(x-t)) \, \mathrm{d}t \,\,, \quad (5.20)$$

avec λ_j tel que $u_j(1) = 0$.

On va montrer que la suite u_j converge vers un point fixe, qui est donc solution de l'équation de départ. Comme \underline{u} est sous-solution de (5.3), on a $-\underline{u}'' + k\underline{u} \leq g(x,\underline{u})$, donc en particulier

$$-(u_1 - u_0)'' + k(u_1 - u_0) \ge 0, \quad (u_1 - u_0)(0) \ge 0, \ (u_1 - u_0)(1) \ge 0.$$

Le principe du maximum implique que $(u_1 - u_0)(x) \ge 0$ sur tout l'intervalle]0, 1[. Supposons maintenant que $u_{j-1} - u_{j-2} \ge 0$. Comme g est croissante en u, cela implique que $g(u_{j-1}) \ge g(u_{j-2})$, donc

$$-(u_j - u_{j-1})'' + k(u_j - u_{j-1}) \ge 0, \quad (u_j - u_{j-1})(0) \ge 0, \ (u_j - u_{j-1})(1) \ge 0.$$

Le principe du maximum implique que $(u_j - u_{j-1})(x) \ge 0$ sur tout l'intervalle]0, 1[. Nous avons donc prouvé que la suite u_j est croissante.

La propriété de principe du maximum implique également que $\forall j, u_j \leq \bar{u}$ puisque $g(x, \bar{u}) \leq -\bar{u}'' + k\bar{u}$.

La suite $u_j(x)$ est une suite croissante bornée par max \bar{u} . Elle converge donc simplement vers un certain u(x). De la formule (5.20), du fait que u_j est uniformément bornée et du théorème de convergence dominée, on en déduit que la limite u est C^2 et vérifie

$$u(x) = \lambda \sinh(\sqrt{k}x) - \frac{1}{\sqrt{k}} \int_0^x \left(ku(x) + f(t, u(x))\right) \sinh(\sqrt{k}(x-t)) dt ,$$

donc en particulier u est solution C^2 de (5.3) avec λ tel que u(1) = 0.

On a donc construit une solution sur]0,1[. On remarque que, pour notre équation modèle, $-u'' = \lambda u(1-u^2)$, $u(\pm R) = 0$ a une sous-solution en $\epsilon \sin(\pi x/R)$ dès que $R > \pi$. Comme 1 est sur-solution, on en déduit l'existence d'une solution u_R . On remarque que u_R prolongée par 0 est sous solution du problème sur (-R', R') dès que R' > R et donc $u_{R'} \ge u_R$.

Remarque 5.4.6 Toutes ces techniques s'étendent en dimension plus grande que 1 si on remplace u'' par Δu et]0,1[par un domaine borné régulier \mathcal{D} . En effet, le principe du maximum fonctionne de la même manière, et dès que l'on trouve une sur et une sous solution, le problème

$$-\Delta u + ku = g(x) \ dans \ \mathcal{D}, \quad u = 0 \ sur \ \partial \mathcal{D}$$

est soluble dans $W^{2,p}$ pour tout p fini et la solution est en fait dans $C^{1,\alpha}$ par les théorèmes de régularité elliptique.

Remarque 5.4.7 L'utilité de ce théorème peut être d'une part numérique pour approcher numériquement une solution de l'équation cherchée. D'autre part, l'intérêt est analytique. Dans le cas de (5.2), on sait que la solution est unique. Donc si on construit une fonction test qui vérifie l'inéquation variationnelle, par exemple \leq , on sait que la solution va être inférieure à cette fonction test.

Remarque 5.4.8 La minimisation d'une fonctionnelle d'énergie nous donne l'existence de l'état fondamental qui est une solution positive. La technique que nous venons de voir dans cette section est particulièrement utile pour montrer l'existence de solutions qui changent de signe, qui elles, ne minimisent pas une énergie. Par exemple, pour $u'' + u(1 - |u|^2) = 0$ avec u(-R) = -1 et u(R) = 1, on a que -1 est sous-solution stricte, 1 est sur-solution stricte, donc il existe une solution qui change de signe. Si R tend vers l'infini, cette solution approche le soliton noir en tanh x que nous avons déjà rencontré. Cette méthode s'adapte très bien en dimension supérieure.

Chapitre 6

Structures dynamiques dans NLS

On caractérise de nombreuses propriétés de superfluides ou de condensats de Bose-Einstein grâce à l'état fondamental qu'on détermine en minimisant l'énergie du système pour une condition de normalisation donnée. La description de la dynamique de ces systèmes requiert l'étude de l'équation NLS dépendant explicitement du temps pour laquelle on ne peut invoquer aucune minimisation. Traiter la dynamique de NLS se révèle en général très difficile et on a souvent recours à des calculs numériques permettant d'étudier l'évolution temporelle du système. Nous avons vu au chapitre 4 l'existence de solitons qui sont des solutions dynamiques particulières de NLS. Il existe deux autres situations dans lesquelles les propriétés dynamiques de NLS peuvent s'analyser relativement simplement : la propagation de petites perturbations par rapport à l'état fondamental que l'on obtient par linéarisation de NLS autour de cet état d'une part ; la dynamique des vortex présents dans ces systèmes d'autre part. Dans ce chapitre, nous décrirons la dynamique de petites perturbations d'une solution stationnaire de NLS.

6.1 Spectre d'excitations

6.1.1 Linéarisation de NLS

La linéarisation de NLS autour d'une solution est importante car elle permet de connaître les propriétés dynamiques des perturbations autour de cette solution. Cela permet notamment de savoir si la solution concernée est stable dynamiquement ou si des ondes se propagent le long de cette solution. Nous considérerons pour l'instant la linéarisation autour d'une solution stationnaire de NLS adimensionnée $\psi_0(\mathbf{r},t) = \phi_0(\mathbf{r})e^{-i\mu t}$, satisfaisant

$$\mu\phi_0 = -\frac{1}{2}\Delta\phi_0 + G|\phi_0|^2\phi_0 + V(x)\phi_0 ,$$

avec la condition de normalisation suivante :

$$\int |\phi_0|^2 \mathrm{d}^d r = 1 \; .$$

On cherche maintenant à décrire la dynamique d'une solution de NLS très proche de ψ_0 . On suppose donc qu'on peut écrire cette solution sous la forme :

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi_0(\mathbf{r}) + \delta\psi(\mathbf{r},t) = (\phi_0(\mathbf{r}) + \delta\phi(\mathbf{r},t)) e^{-i\mu t}$$

avec l'hypothèse que $\delta \psi(\mathbf{r}, t)$ est une petite perturbation de la solution stationnaire :

$$|\delta\psi| \ll |\psi_0|$$
 soit $|\delta\phi| \ll |\phi_0|$.

La perturbation $\delta \phi$ de la fonction d'onde est solution de l'équation de NLS linéarisée autour de ϕ_0 :

$$i\frac{\partial\delta\phi}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2}\Delta + V(x) - \mu\right)\delta\phi + 2G|\phi_0|^2\delta\phi + G\phi_0^2\delta\phi^* , \qquad (6.1)$$

que l'on obtient en ne conservant que les termes du premier ordre en $\delta\phi$. A cette équation s'ajoute la condition de normalisation :

$$\int \left(\phi_0 \delta \phi^* + \phi_0^* \delta \phi\right) \mathrm{d}^d r = 0$$

Il est intéressant de remarquer que ces équations de NLS et de normalisation linéarisées ne sont en fait pas linéaires dans l'espace complexe (si $\delta\phi$ est solution, $\alpha\delta\phi$ n'est pas en général solution avec α complexe) à cause du couplage entre $\delta\phi$ et $\delta\phi^*$. Ceci n'est pas en soi un problème et indique qu'il faut résoudre deux équations réelles couplées, une pour la partie réelle et l'autre pour la partie imaginaire de l'équation. Une manière équivalente et souvent utilisée consiste à considérer $\delta\phi$ et son complexe conjugué $\delta\phi^*$ comme deux variables indépendantes. Une manière de prendre en compte cette propriété consiste à poursuivre le calcul en conservant les deux équations couplées pour les variables $\delta\phi$ et $\delta\phi^*$:

$$i\frac{\partial\delta\phi}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2}\Delta + V(x) - \mu\right)\delta\phi + 2G|\phi_0|^2\delta\phi + G\phi_0^2\delta\phi^* ,$$

$$i\frac{\partial\delta\phi^*}{\partial t} = -\left(-\frac{1}{2}\Delta + V(x) - \mu\right)\delta\phi^* - 2G|\phi_0|^2\delta\phi^* - G\phi_0^2\delta\phi .$$
(6.2)

L'évolution temporelle de $\delta\phi$ et $\delta\phi^*$ s'obtiendrait facilement si on savait diagonaliser l'opérateur linéaire (membres de droite du système (6.2)), qui est indépendant du temps. Cette diagonalisation n'est en général pas aisée. Nous allons traiter ici une situation particulière qui permet de la calculer.

6.1.2 Cas d'un système homogène et isotrope

Considérons le cas d'un superfluide ou d'un condensat dans une boîte cubique de côté L avec une densité moyenne de particules ρ_0 , soit $1 = \rho_0 L^3$ et en l'absence de potentiel extérieur (V(x) = 0). On suppose qu'on peut prendre des conditions aux bords périodiques sur le domaine. La solution ψ_0 qui minimise l'énergie vérifie donc :

$$\phi_0 = \sqrt{\rho_0} \; ,$$

avec :

$$\mu = G \rho_0$$
 .

Le système linéaire (6.2) s'écrit alors :

$$\begin{pmatrix} i\dot{\delta\phi} \\ i\dot{\delta\phi^*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\Delta + G\rho_0 & G\rho_0 \\ -G\rho_0 & \frac{1}{2}\Delta - G\rho_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\phi \\ \delta\phi^* \end{pmatrix} ,$$
 (6.3)

où on note $\dot{\delta\phi} = \frac{\partial \delta\phi}{\partial t}$. L'invariance par translation de l'opérateur permet de chercher les solutions de ce système sous la forme de modes de Fourier :

$$\delta \phi = e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} U_k(t) ,$$

$$\delta \phi^* = e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} V_k(t) ,$$

où \boldsymbol{k} est le vecteur d'onde de longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$. On obtient alors :

$$\begin{pmatrix} i\dot{U}_k\\i\dot{V}_k \end{pmatrix} = \mathcal{L}_k \begin{pmatrix} U_k\\V_k \end{pmatrix} , \qquad (6.4)$$

avec la matrice \mathcal{L}_k :

$$\mathcal{L}_{k} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}k^{2} + G\rho_{0} & G\rho_{0} \\ -G\rho_{0} & \frac{1}{2}k^{2} - G\rho_{0} \end{pmatrix} .$$

Cette matrice est diagonalisable et les valeurs propres ω_k vérifient l'équation de Bogoliubov :

$$\omega_k^2 = G\rho_0 k^2 + \frac{1}{4}k^4 \; .$$

Pour chaque vecteur \boldsymbol{k} , on obtient donc deux valeurs propres (réelles ou imaginaires pures) notées :

$$\omega_k^{\pm} = \pm \sqrt{G\rho_0 k^2 + \frac{1}{4}k^4}.$$
(6.5)

et une base formée par les deux vecteur propres (u_k^{\pm}, v_k^{\pm}) . Le vecteur propre (u_k^{+}, v_k^{+}) associé à la valeur propre $\sqrt{G\rho_0 k^2 + \frac{1}{4}k^4}$ vérifie :

$$u_k^+ + v_k^+ = \left(\frac{k^2}{k^2 + 4G\rho_0}\right)^{1/4} ,$$

$$u_k^+ - v_k^+ = \left(\frac{k^2 + 4G\rho_0}{k^2}\right)^{1/4} ,$$

où on a la condition de normalisation :

$$|u_k|^2 - |v_k|^2 = 1$$
.

Le vecteur propre associé à $-\sqrt{G\rho_0k^2+\frac{1}{4}k^4}$ s'en déduit par :

$$(u_k^-, v_k^-) = ((v_k^+)^*, (u_k^+)^*)$$
.

L'évolution temporelle des composantes de Fourier $(U_k(t), V_k(t))$ s'obtient naturellement de la diagonalisation de la matrice \mathcal{L}_k . On écrit la décomposition du vecteur $(U_k(t), V_k(t))$ dans la base (u_k^{\pm}, v_k^{\pm}) :

$$\begin{pmatrix} U_k(t) \\ V_k(t) \end{pmatrix} = a^+(t) \begin{pmatrix} u_k^+ \\ v_k^+ \end{pmatrix} + a^-(t) \begin{pmatrix} u_k^- \\ v_k^- \end{pmatrix} ,$$

qui donne l'équation d'évolution temporelle pour les coefficients $a^{\pm}(t)$:

$$\frac{da^{\pm}}{dt} = \mp i\omega_k a^{\pm}$$

dont on déduit l'évolution temporelle du mode de Fourier k:

$$\begin{pmatrix} U_k(t) \\ V_k(t) \end{pmatrix} = a_k^+(0)e^{-i\omega_k t} \begin{pmatrix} u_k^+ \\ v_k^+ \end{pmatrix} + a_k^-(0)e^{i\omega_k t} \begin{pmatrix} u_k^- \\ v_k^- \end{pmatrix} .$$

Ainsi, à chaque mode propre (u_k^{\pm}, v_k^{\pm}) est associé le facteur d'évolution temporelle $e^{\mp i\omega_k t}$.

Ceci permet d'établir la condition de stabilité du condensat : en effet, la solution ψ_0 est dynamiquement stable si $\delta \psi$ reste toujours petit devant ψ_0 . On en déduit donc le critère :

$$Im(\omega_k) = 0$$

Remarque 6.1.1 Pour trouver la solution générale des perturbations autour de la solution ψ_0 , il suffit d'imposer maintenant que $\delta \phi$ et $\delta \phi^*$ sont des complexes conjugués :

$$\begin{aligned} \delta\psi &= \sum_{k} a_{k}^{+}(0)u_{k}^{+}e^{i(k\cdot r - \omega_{k}t)} + a_{k}^{-}(0)u_{k}^{-}e^{i(k\cdot r + \omega_{k}t)} \\ &= \sum_{k} a_{k}^{+}(0)^{*}(v_{k}^{+})^{*}e^{-i(k\cdot r - \omega_{k}t)} + a_{k}^{-}(0)^{*}(v_{k}^{-})^{*}e^{-i(k\cdot r + \omega_{k}t)} \end{aligned}$$

Ce qui donne la relation :

$$a_k^- = (a_{-k}^+)^*$$
.

6.2 Propriétés de l'équation de Bogoliubov

Il est pratique à nouveau de séparer notre discussion suivant le signe du coefficient du potentiel d'interaction G.

6.2.1 Interactions répulsives : G > 0

Dans ce cas, l'équation de Bogoliubov (6.5) admet deux racines réelles :

$$\omega_k = \pm \sqrt{G\rho_0 k^2 + \frac{1}{4}k^4} . (6.6)$$

Les perturbations s'expriment alors comme une somme d'ondes dispersives de la forme :

$$e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\pm\omega_kt)}$$

On peut calculer la vitesse de phase v_{ϕ} et la vitesse de groupe v_q de ces ondes :

$$v_{\phi} = \frac{\omega_k}{k}$$
, et $v_g = \frac{d\omega_k}{dk}$

Les deux limites $k \to 0$ et $k \to \infty$ se révèlent particulièrement instructives. Dans la limite des grandes longueurs d'ondes $(k \to 0)$, on trouve :

$$\omega_k \sim \sqrt{G\rho} k$$
.

On se trouve dans la limite hydrodynamique où la longueur d'onde est grande devant la longueur de cicatrisation, qui vaut $\xi_0 = 1/\sqrt{G\rho_0}$ en variable adimensionnée. Il s'agit de la limite d'ondes "sonores" dans laquelle les vitesses de phase et de groupe ne dépendent plus du nombre d'onde et sont égales. La vitesse du son c_s vaut :

$$c_s = \sqrt{G\rho_0}$$
 .

Cette partie du spectre est appelée le spectre de phonons. Dans l'autre limite $k \to \infty$ on trouve :

$$\omega_k \sim \frac{k^2}{2}$$

Dans cette limite, on retrouve le spectre associé à une particule libre ($\hbar \omega = \hbar^2 k^2/2m$ en unités réelles) décrite par l'équation de Scrödinger linéaire en l'absence d'interactions. Le spectre correspond à des ondes dispersives, avec :

$$v_{\phi} = \frac{k}{2}$$
 et $v_g = k = 2v_{\phi}$

La séparation entre ces deux régimes se situe à des nombres d'ondes tels que :

$$G\rho_0 k^2 \sim k^4$$
,

ce qui correspond à :

$$k \cdot \xi_0 \sim 1$$

où on retrouve la longueur de cicatrisation ξ_0 qui sépare les deux régimes.

6.2.2 Interactions attractives : G < 0

Le cas d'un potentiel d'interaction attractif G < 0 est radicalement différent puisque la valeur propre ω_k est imaginaire pure pour certaines valeurs de k, ce qui signifie que le condensat est instable puisque les perturbations à ces nombres d'ondes croissent exponentiellement avec le temps. Plus précisément, on trouve d'après (6.5) :

$$\omega_k = \pm ik\sqrt{-G\rho_0 - \frac{k^2}{4}} , \quad \text{pour} \quad k < 2\sqrt{-G\rho_0} ,$$

 et

$$\omega_k = \pm k \sqrt{\frac{k^2}{4} + G\rho_0}$$
, pour $k > 2\sqrt{-G\rho_0}$

Ainsi un condensat de densité ρ_0 est instable vis à vis de perturbations de longueurs d'ondes supérieures à λ_c :

$$\lambda_c = \frac{\pi}{\sqrt{-G\rho_0}}$$

6.3 Lien avec la superfluidité

6.3.1 Spectre d'excitation

Pour G > 0 nous allons voir que les perturbations linéaires que nous venons d'établir ont une structure similaire à celle d'une particule. Pour cela, nous allons établir la relation entre la quantité de mouvement et l'énergie pour les modes propres de l'équation de dispersion. Nous calculons cette relation en prenant un mode particulier de nombre d'onde \boldsymbol{k} :

$$\delta\psi = a_k u_k^+ e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + a_k^* u_{-k}^- e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} = a_k u_k^+ e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + a_k^* v_k^+ e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} .$$

La densité de quantité de mouvement p_k associé à cette onde vaut en moyenne :

$$\frac{i}{2} \left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi \right) = |a_k|^2 \mathbf{k} (|u_k^+|^2 - |v_k^+|^2) = |a_k|^2 \mathbf{k} .$$

La densité moyenne d'énergie de ce mode donne :

$$\frac{1}{2}\left(|\nabla\psi|^2 + G(|\psi|^2 - \rho_0)^2\right) = \frac{1}{2}\left(k^2((u_k^+)^2 + (v_k^+)^2) + 2G\rho_0(u_k^+ + v_k^+)^2\right) = \omega_k |a_k|^2$$

On peut donc associer à ces ondes les densités de quantité de mouvement et d'énergie en unités réelles :

$$\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{k}} = \hbar \boldsymbol{k}$$
 et $E_k = \hbar \omega_k$.

On appelle également cette relation de dispersion entre ω_k et k le spectre d'excitations, en faisant l'analogie onde-particule traditionnelle en mécanique quantique entre ces ondes et une excitation du superfluide. En particulier, dans la limite hydrodynamique $k\xi_0 \ll 1$ les excitations sont appelées phonons.

6.3.2 Vitesse critique de Landau

La linéarité du spectre d'excitation pour les faibles k lorsque les interactions sont répulsives permet d'expliquer la propriété de superfluidité que satisfont les condensats de Bose-Einstein et l'hélium. Pour cela nous considérons une particule solide de masse M en mouvement à la vitesse V dans un fluide décrit par NLS. L'interaction de cette particule avec le condensat se traduit par l'échange d'une énergie ϵ_p et d'une quantité de mouvement p. Les équations de conservation de l'énergie et de la quatité de mouvement conduisent aux relations suivantes pour la vitesse finale V' de la particule :

$$\frac{1}{2}MV^2 = \frac{1}{2}MV'^2 + \epsilon_p ,$$
$$M\mathbf{V} = M\mathbf{V}' + \mathbf{p} .$$

On obtient V' = V - p/M ce qui donne pour l'équation sur l'énergie cinétique :

$$\frac{1}{2}MV^2 = \frac{1}{2}M(\boldsymbol{V} - \frac{\boldsymbol{p}}{M})^2 + \epsilon_p \,,$$

d'où la relation entre ϵ_p et p:

$$\epsilon_p = \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{p} - \frac{p^2}{2M} = V p \cos\theta - \frac{p^2}{2M},$$

où θ est l'angle entre la vitesse V et p. Pour que l'interaction entre cette particule de masse M et le condensat soit possible, il faut pouvoir créer une excitation dans le condensat. Il faut donc que l'énergie ϵ_p soit égale à celle d'une excitation du condensat associée à la quantité de mouvement $p : \epsilon_p = c_s p$. Cela se traduit par la condition nécessaire :

$$Max(Vp\,\cos\theta) = Vp > \omega_p > c_s p$$

soit

 $V > c_s$

Une particule de vitesse plus petite que la vitesse du son des phonons ne peut pas échanger de quantité de mouvement ni d'énergie avec le condensat environnant. Elle ne peut donc pas être freinée par le condensat et pour cette particule, la viscosité du fluide est nulle : c'est la propriété de superfluidité. Cette démonstration est similaire à l'explication donnée par Lev Landau an 1941 de la superfluidité.

Remarque 6.3.1 Cet argument est valable pour NLS qui décrit le condensat à température nulle. La vitesse critique dépend fortement de la température, notamment parce que la densité du condensat en dépend.

On note une analogie forte entre la superfluidité et les écoulements supersoniques. Toutefois, lorsque la vitesse critique est dépassée, on observe la formation de vortex dans NLS alors qu'une onde de choc se forme dans les fluides classiques. Remarquons également que la présence des interactions G > 0 est cruciale pour la superfluidité. En effet, si G = 0 le spectre phonon disparaît, la vitesse du son est nulle. Un condensat de Bose-Einstein sans interaction n'est donc pas superfluide.

6.3.3 Comparaison avec le spectre d'excitation de l'hélium superfluide

Si la relation de dispersion de NLS représente bien le spectre d'excitations des condensats de Bose-Einstein, elle ne décrit pas correctement le spectre de l'hélium superfluide, qui



FIG. 6.1 – a)Spectre de NLS (6.6) avec $G\rho_0 = 5$. La figure b) indique l'allure du spectre obtenu pour l'hélium superfluide.

présente un minimum autour d'un nombre d'onde k_0 fini (qui correspond à une longueur d'onde de 2, 4 Angstrom en unité réelle), comme l'illustre la figure (6.3.3).

Ce minimum, appelé minimum « roton » par Lev Landau lors de son explication de la superfluidité, a joué un rôle important dans l'histoire de la superfluidité de l'hélium. En effet, on a attribué initialement ce minimum roton à des perturbations de circulation quantifiée non nulle (reliée aux vortex), les rotons, qui s'interpréteraient alors comme des modes résonants avec les vortex. Nous montrerons dans le chapitre suivant comment ce minimum roton peut être obtenu simplement en prenant en compte formellement dans une hypothèse de champ moyen un potentiel d'interaction plus réaliste entre les particules d'hélium. Ce minimum s'interprète alors comme la trace dans les perturbations de la structure cristalline de l'hélium solide.

Chapitre 7

Modèle de supersolides

7.1 Qu'est-ce qu'un supersolide?

Depuis la découverte de la supraconductivité du courant électrique en 1911, puis de la superfluidité de l'hélium en 1937, la question de l'existence de propriétés superfluides dans les solides s'est posée au physicien : il s'agit de la supersolidité. La réalisation des condensats de Bose-Einstein à partir de 1995 a permis d'obtenir une nouvelle famille de superfluides, dans les gaz atomiques et l'intérêt pour la recherche de la supersolidité s'en est trouvée alors accrue. En 2004, Eunsong Kim et Moses Chan de l'université d'état de Pennsylvanie, ont observé dans l'hélium solide des propriétés superfluides indiquant la présence possible d'un état supersolide (un des rares exemples de résultat prédit par la théorie avant son observation expérimentale!). Si les mesures de superfluidité ont été confirmées depuis dans plusieurs systèmes expérimetaux, leur interprétation reste encore très controversée. En particulier, malgré ces résultats très encourageants, on ne peut encore affirmer que la superfluidité observée dans l'hélium solide correspond à un état supersolide.

Le supersolide est un bel exemple d'oxymore (un solide « super »-fluide), son existence et sa manifestation ont fait l'objet d'intenses débats dans la communauté scientifique bien avant les expériences de 2004. En effet, si la superfluidité dans l'hélium se traduit notamment par la présence d'écoulements sans effets dissipatifs (au travers de tubes capillaires par exemple), il n'est pas aisé de bien comprendre comment l'existence d'un ordre quantique à longue portée interagit avec l'ordre cristallin du solide qui forme une structure à l'échelle atomique. Par analogie avec la superfluidité, on pourrait donc s'attendre à observer un courant de matière sans dissipation d'énergie au travers du supersolide soumis à une différence de pression. Cette expérience se révèle difficile à réaliser, notamment dans le contrôle des contraintes imposées au solide. C'est donc une autre expérience qui a permis à Kim et Chan d'observer une manifestation de superfluidité dans l'hélium solide. Elle consiste à étudier la fréquence propre d'oscillation d'un pendule de torsion (représenté sur la figure 7.1) rempli d'hélium solide en dessous de quelques dixièmes de degré Kelvin.

L'expérience doit être réalisée pour de très faibles amplitudes d'oscillation (de l'ordre du micro-mètre). Une diminution de la période des oscillations est observée en dessous de 0.1K, qui s'interprète comme un découplage d'une fraction de l'hélium solide du mouvement de rotation du pendule. Tout se passe comme si, en dessous de 0,1 Kelvin, une fraction du solide ne tournait pas lors de la mise en rotation de l'ensemble! Cet effet



FIG. 7.1 – Pendule de torsion utilisé par E. Kim et M. Chan. La mesure de la fréquence propre de cet oscillateur a permis d'observer la supersolidité dans l'hélium solide à très basse température (crédit photo M. Chan).

spectaculaire est appelé moment d'inertie non-classique et est une des conséquences bien connues des propriétés superfluides. Ceci sera étudié plus en détail dans le chapitre 8. La fraction « supersolide », définie comme la fraction de solide dont le mouvement est découplé de l'ensemble, est mesurée de l'ordre de quelques pour cent avec une grande variabilité suivant la qualité du cristal solide et le mode préparatoire de l'hélium solide. Pour comparaison, dans le cas de l'hélium superfluide, tout le liquide se découple du mouvement de rotation dans la limite de très basse température et la fraction superfluide est donc très proche de 1.

La présentation détaillée de la théorie de la supersolidité dépasse le cadre de ce cours et elle reste encore un sujet de recherches actives et controversées. Dans ce chapitre, nous allons discuter et présenter comment un modèle de supersolide peut être obtenu par l'équation de Gross-Pitaevskii.

7.2 Potentiel non-local

Nous avons jusqu'à présent étudié l'équation G-P dans le cas où le potentiel d'interaction pouvait être considéré dans la limite diluée. Comme nous l'avons vu, la relation de dispersion obtenue ne permet pas alors de retrouver le spectre des excitations de l'hélium superfluide, en particulier la présence d'un minimum roton. Dans le cas de l'hélium superfluide, on peut déduire une description plus réaliste des interactions entre les atomes
d'hélium en prenant un potentiel $U(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ non local, c'est-à-dire qui ne puisse pas se réduire à l'approximation $g\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$. Considérons l'équation générale de G-P :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \psi \int_{\mathcal{D}} U(\mathbf{r}'-\mathbf{r})|\psi(\mathbf{r}',t)|^2 \mathrm{d}^d r', \qquad (7.1)$$

où le potentiel d'interaction à deux corps $U(\cdot)$ modélise les interactions entre deux atomes d'hélium. Cette équation de l'hélium superfluide se fait dans l'approximation dite de champ moyen (cf. chapitre 2, eq. (2.12)). On modélise souvent l'interaction entre deux atomes par le potentiel de Lennard-Jones $U_{\rm LJ}$ qui est isotrope et s'écrit :

$$U_{\rm LJ}(\mathbf{r}) = 4E_0 \left[\left(\frac{r_0}{r}\right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r}\right)^6 \right]$$

Le terme à la puissance 6, attractif, correspond à l'interaction de Van der Waals, alors que le terme à la puissance 12, répulsif est empirique et modélise la répulsion des atomes à courte portée. Nous considérerons dans la suite un potentiel d'interaction simplifié, dit de sphère molle, pour modéliser l'interaction à deux corps :

$$U(\mathbf{r}) = U_0 \theta(a - |\mathbf{r}|) . \tag{7.2}$$

On note ici $\theta(\cdot)$ la fonction de Heavyside. Ce potentiel est donc à support compact et constant par morceaux :

 $- U(\boldsymbol{r}) = U_0 \text{ si } |\boldsymbol{r}| < a$ - $U(\boldsymbol{r}) = 0 \text{ si } |\boldsymbol{r}| > a.$

La longueur *a* est appelé la portée du potentiel et U_0 est son intensité. Cette équation de G-P est également liée à une fonctionnelle d'énergie (voir également eq. (2.12)) :

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_{\mathcal{D}} \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\boldsymbol{r})|^2 \, \mathrm{d}^d r + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{D}} |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \int_{\mathcal{D}} U(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}) |\psi(\boldsymbol{r}')|^2 \mathrm{d}^d r' \mathrm{d}^d r \;. \tag{7.3}$$

Comme pour l'équation G-P avec le potentiel en Dirac, l'équation (7.1) admet une famille de solutions homogènes dans l'espace, de densité ρ_0 :

$$\psi_0(\boldsymbol{r},t) = \sqrt{\rho_0} e^{-i \frac{E_0 t}{\hbar}}$$

avec :

$$E_0 = \rho_0 \hat{U}(0) = \rho_0 \int U(\boldsymbol{r}') \mathrm{d}^d r' \; ,$$

et $\hat{U}(0) = 2aU_0$ à 1D, $\pi a^2 U_0$ et $\frac{4}{3}\pi a^3 U_0$ à 2 et 3 dimensions respectivement.

7.2.1 Quelques éléments mathématiques

On définit

$$G = \frac{\Lambda \hat{U}(0)}{U_0 a^d} \; , \qquad$$



FIG. 7.2 – Les ensembles A_i en 2D.

où d est la dimension, soit $G = 2\Lambda$ en dimension 1, $G = \pi\Lambda$ en dimension 2 et $G = 4\Lambda/3$ en dimension 3. On rescale les distances par a et on voit que (7.3) se ramène à l'énergie sans dimension définie sur \mathcal{D} , le domaine occupé par le supersolide :

$$\int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} |\nabla \psi(\boldsymbol{r})|^2 \, \mathrm{d}^d r + \frac{G}{2} \int_{\mathcal{D} \times \mathcal{D}} U(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}) |\psi(\boldsymbol{r}')|^2 |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \, \mathrm{d}^d r \, \mathrm{d}^d r' , \qquad (7.4)$$

avec $\tilde{U}(|\mathbf{r}|) = \theta(1 - |\mathbf{r}|)$, où $\theta(.)$ est la fonction de Heaviside et $\int |\psi|^2 = V$ où V est le volume de \mathcal{D} .

Pour G petit, on peut montrer mathématiquement que le minimum de l'énergie (7.4) est donné par $|\psi| = 1$. En revanche, pour G grand, la solution n'est pas simple mais on peut néanmoins récupérer des propriétés de l'état cristallin. Etant donnée la forme du potentiel U, l'état fondamental du système est relié au problème d'empilement des sphères ou sphere packing que nous définissons par le plus grand nombre de points à distance mutuelle plus grande que 1, qui sont contenus dans un domaine \mathcal{D} :

$$n(\mathcal{D}) := \max\{k : \exists \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_k \in \mathcal{D} \text{ tels que } |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j| \ge 1 \quad \forall i \neq j\}$$

A partir de $n(\mathcal{D})$ et des points \mathbf{r}_i , on peut faire grossir les points pour définir des ensembles A_i à distance 1 les uns des autres. Cela détermine le support d'une fonction ψ qui est un état fondamental du 2ème terme de (7.4). Si \mathcal{D} est grand, alors le nombre $n(\mathcal{D})$ devient grand et la localisation optimale des points s'approche d'un empilement périodique : un réseau triangulaire en 2d et un réseau régulier en 3d, cubique faces centrées ou hexagonal compact. La figure 7.2 illustre la géométrie des A_i en dimension 2.

Parmi tous les ensemble A_i possibles définis autour des r_i , on choisit une classe par-

ticulière, celle qui minimise

$$\inf_{A_i, \text{ dist}(A_i, A_j) > 1} \left\{ \sum_{i=1}^{n(\mathcal{D})} \lambda_1(A_i) \right\} , \qquad (7.5)$$

où λ_1 est l'état fondamental de $-\Delta$ dans A_i avec condition de bord nulle, autrement dit,

$$\lambda_1(A_i) = \inf_{\int_{A_i} |u|^2 = 1, \ u = 0 \ \text{sur } \partial A_i} \int_{A_i} |\nabla u|^2 \ .$$

Ceci nous donne une famille d'ensembles A_i qui se positionnent de manière quasi périodique et qui permet de caractériser l'état fondamental de (7.4) quand G est grand : une telle fonction est exponentiellement petite en dehors des A_i et presque égale à l'état fondamental de $-\Delta$ dans A_i . Cela vient du fait que quand G est grand, les deux termes dans (7.4) sont d'ordre différents et l'état fondamental est proche d'une fonction qui minimisent les 2 termes séparément, la minimisation du 2ème terme étant exactement le sphere packing.

On laissera en exercice le calcul des solutions en dimension 1, qui est explicite pour tout G.

7.2.2 Spectre d'excitations

La détermination de la relation de dispersion (le spectre des excitations) des perturbations de la solution homogène permet d'expliciter comment G-P peut décrire un solide quantique et d'avoir une autre approche de l'émergence d'une structure quasi périodique.

En reprenant la méthode développée au chapitre précédent, on obtient la relation de dispersion autour de la solution ψ_0 pour des ondes de nombre d'onde k et de pulsation ω_k :

$$\hbar^2 \omega_k^2 = \frac{\hbar^4 k^4}{4m^2} + \frac{\rho_0 \hbar^2}{m} k^2 \hat{U}(\boldsymbol{k}) , \qquad (7.6)$$

où $U(\mathbf{k})$ est la transformée de Fourier du potentiel d'interaction :

$$\hat{U}(\boldsymbol{k}) = \hat{U}(k) = \int U(\boldsymbol{r}') e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'} \mathrm{d}r' \ .$$

On trouve alors pour le potentiel de sphère molle les différentes formes de la transformée de Fourier suivant la dimension d'espace :

$$\hat{U}(\mathbf{k}) = 2 \frac{U_0 \sin(ka)}{k} \quad (d = 1) ,$$
$$\hat{U}(\mathbf{k}) = 2\pi a U_0 \frac{J_1(ka)}{k} \quad (d = 2) ,$$
$$\hat{U}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi U_0}{k^3} (\sin(ka) - ka \cos(ka)) \quad (d = 3)$$

avec $J_1(\cdot)$ la fonction de Bessel de première espèce. On peut écrire en toute dimension $\hat{U}(\mathbf{k}) = \hat{U}(0)f(ka)$. Le signe de $\hat{U}(\mathbf{k})$ n'est pas constant, il existe des valeurs de ka pour

lesquels $\hat{U}(\mathbf{k})$ est négatif, ce qui va se révéler crucial pour l'étude de stabilité. Introduisons le nombre sans dimension

$$\Lambda = \frac{m\rho_0 a^2}{\hbar^2} \hat{U}(0) \; .$$

La relation de dispersion s'écrit alors sous forme adimensionnée :

$$\left(\frac{ma^2\omega_k}{\hbar}\right)^2 = \frac{(ka)^4}{4} + \Lambda(ka)^2 f(ka) \; .$$

7.2.3 Minimum roton

Les fonctions $f(\cdot)$ admettant un minimum négatif, la relation de dispersion peut être maintenant non monotone pour des valeurs assez grandes de Λ , comme le montre la figure 7.3 tracée dans le cas tridimensionnel.



FIG. 7.3 – Relation de dispersion $ma^2\omega_k/\hbar$ en fonction de ka dans le cas d'un potentiel de sphères molles à 3 dimensions, pour une valeur du potentiel d'interaction $\Lambda = 10$.

On observe que cette relation de dispersion a un minimum autour de ka = 5. La présence de ce minimum et la forme de cette relation de dispersion est en bon accord avec le spectre d'excitations mesuré dans l'hélium superfluide.

7.2.4 Un modèle de solide quantique

La présence de ce minimum roton et sa dépendance suivant le paramètre Λ expliquent comment G-P peut décrire une structure cristalline. En effet, on observe que la fréquence du minimum roton diminue lorsque Λ augmente et que le spectre d'excitation peut alors toucher l'axe des abscisses pour un nombre d'onde particulier $k_{\rm cr}$ pour une valeur critique du paramètre $\Lambda_{\rm cr}$ (voir figure 7.4). Au delà, une partie du spectre autour de ce nombre d'onde critique a des valeurs propres imaginaires et la solution homogène superfluide est donc instable. On peut supposer qu'un supersolide peut se former en ce point. Ceci donne une interprétation toute autre du minimum roton que celle initialement proposé d'un mode de rotation. En effet, il apparaît comme réminiscent de la structure cristalline de l'hélium solide et correspond ainsi aux modes résonants avec la structure de l'hélium solide. Une interprétation imagée du minimum roton suggère de le voir comme un « fantôme » de l'hélium solide.

Les valeurs $\Lambda_{\rm cr}$ et $k_{\rm cr}$ sont obtenues par la recherche de la racine double de l'équation $\omega_k^2 = 0$. Si on note $y = ma^2 \omega_k / \hbar$ et $x = k \cdot a$, la relation de dispersion s'écrit formellement :

$$y^2 = g(x, \Lambda) = \frac{x^4}{4} + \Lambda x^2 f(x)$$

et à la transition, on doit vérifier :

$$g(x_{\rm cr}, \Lambda_{\rm cr}) = 0$$
 et $g'(x_{\rm cr}, \Lambda_{\rm cr}) = 0$,

ce qui donne comme relation implicite pour $x_{\rm cr}$ et $\Lambda_{\rm cr}$:

$$x_{\rm cr} f'(x_{\rm cr}) = 2f(x_{\rm cr})$$
 et $\Lambda_{\rm cr} = -\frac{x_{\rm cr}^2}{4f(x_{\rm cr})}$



FIG. 7.4 – Evolution de la relation de dispersion à une dimension, lorsque le paramètre Λ augmente.



FIG. 7.5 – Densité $|\psi|^2$ obtenue à 2D à partir d'une solution homogène instable par minimisation de l'hamiltonien. La solution converge vers une solution stationnaire qui forme un réseau hexagonal.



FIG. 7.6 – Densité 3D obtenue par simulation numérique. On montre deux orientations différentes qui illustrent bien la structure cristalline du solide. Le cristal présenté ici est à symétrie hexagonale compacte.

L'instabilité linéaire conduit à la croissance de structures périodiques de longueur caractéristique $2\pi/k_r$ comme le montre une simulation numérique ayant comme condition initiale la solution homogène. Si un petit bruit est ajouté au calcul, la simulation numérique converge vers une structure de pics périodiques comme l'illustrent les figures 7.5 et 7.6. En fait, l'instabilité linéaire de la dynamique indique que la solution homogène n'est plus l'état fondamental du système et n'est même plus un minimum local de l'énergie. Le minimum est atteint pour une structure périodique, le cristal de pics de la fonction d'onde.

Cette fonction d'onde décrit donc un solide quantique formé d'un réseau cristallin de pics de densité. Remarquons que dans ce modèle de solide quantique, rien n'oblige ni n'assure que le nombre d'atomes par pic de densité de la solution soit un nombre entier ! Remarquons également que cette transition de phase liquide-solide de l'état fondamental se fait lorsque Λ augmente, ce qui correspond, pour toutes les autres variables constantes à une augmentation de la densité moyenne ρ_0 . Or, augmenter ρ_0 est équivalent à augmenter la pression et la phase solide est donc formée aux hautes pressions comme attendu physiquement.

Une solution cristalline peut même exister pour des valeurs de $\Lambda < \Lambda_{cr}$ pour lesquelles la solution homogène est toujours stable. C'est le cas pour le modèle à 2D et 3D, mais pas à 1D. Une des solutions est alors métastable, c'est-à-dire que son énergie est supérieure à l'énergie de la phase homogène et la transition est donc du premier ordre (elle est du second ordre à 1D).

Le solide quantique décrit par ce modèle se comporte comme un supersolide, c'est-àdire qu'il se comporte comme un solide élastique classique (module d'Young, modes d'excitations...) mais possède également un moment d'inertie non-classique! Le modèle utilisé étant avant tout un modèle de superfluide, on peut s'attendre à y observer la superfluidité. En revanche, il est bien plus surprenant d'obtenir pour le cristal les caractéristiques d'un solide classique comme nous allons le voir avec la description macroscopique de ses propriétés mécaniques.

7.3 Propriétés mécaniques

Pour établir les propriétés mécaniques de ce modèle de solide quantique, il nous faut déduire du modèle microscopique un modèle macroscopique dans lequel la structure cristalline du solide est en quelque sorte moyennée. En effet, la fonction d'onde ψ du supersolide est très rapidement variable à cause de la structure cristalline qui correspond à des pics de la fonction d'onde. Pour obtenir une description mécanique du supersolide, il nous faut nous abstraire de cette structure cristalline sous-jacente afin d'extraire les variations à plus grande échelle du solide. C'est ce que permet la méthode d'homogénisation, qui a été développée notamment pour obtenir une déduction cohérente des écoulements dans les milieux poreux. On a pu ainsi retrouver par cette méthode la loi de Darcy. Nous nous contenterons ici de donner les principes généraux de cette méthode mathématique. Un lecteur intéressé par cette méthode pourra consulter le livre [BLP].

7.3.1 Principe de la méthode d'homogénisation

Le principe général de la méthode d'homogénisation est de trouver des équation pour les quantités moyennées ou macroscopiques à partir des équations du système. Nous allons établir ces équations macroscopiques pour un système proche de l'état fondamental et nous obtiendrons ainsi les équations macroscopiques des perturbations à grande échelle du cristal. Cela signifie que les longueurs d'ondes typiques des perturbations sont bien plus grandes que la distance inter-pics de l'état fondamental. Dans notre cas, les quantités macroscopiques seront la densité moyenne (en moyennant donc les pics de densité) $n(\mathbf{r}, t)$, la phase moyenne $\Phi(\mathbf{r}, t)$ et le vecteur déplacement du solide $u(\mathbf{r}, t)$. Cela revient formellement à décomposer la solution de NLS sous la forme ($\psi = \rho e^{i\phi}$) :

$$\rho = \rho_0(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{u}, n(\boldsymbol{r}, t)) + \tilde{\rho}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{u}, n, t) + \dots ,$$

$$\phi = -\mu t + \Phi(\boldsymbol{r}, t) + \tilde{\phi}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{u}, n, t) + \dots , \qquad (7.7)$$

où $\rho_0(\mathbf{r}, n(\mathbf{r}, t))$ est un état fondamental de (7.3) pour une densité moyenne $n(\mathbf{r}, t)$ et μ le multiplicateur de Lagrange associé. On associe à cette décomposition les hypothèses suivantes :

- il s'agit d'un développement en perturbation, assez proche dans un premier temps que celui qui a conduit au calcul de la relation de dispersion pour un milieu homogène. On conservera uniquement les termes au premier ordre de perturbation.
- $-n(\mathbf{r},t), \Phi(\mathbf{r},t)$ et $u(\mathbf{r},t)$ sont des fonctions lentement variables en espace (par rapport à la maille du solide, qui est d'ordre a) et en temps (par rapport à la fréquence μ)
- les fonctions ϕ et $\tilde{\rho}$ sont des fonctions rapidement variables et périodiques sur chaque maille du solide.

7.3.2 Equations macroscopiques

Le principe d'homogénisation consiste à introduire dans (7.1) le développement (7.7) et à obtenir les équations d'évolution des variables macroscopiques $n(\mathbf{r}, t)$, $\Phi(\mathbf{r}, t)$ et $u(\mathbf{r}, t)$ en intégrant les fonctions rapidement variables au sein de chaque maille du solide. Ceci conduit, en faisant l'hypothèse d'isotropie du système, à

$$\partial_t n + \partial_i \left(\varrho^{ss} \frac{\hbar}{m} \partial_i \Phi + (n - \varrho^{ss}) \dot{u}_i \right) = 0 ,$$

$$m \partial_t \left[(n - \varrho^{ss}) \left(\dot{u}_i - \frac{\hbar}{m} \partial_i \Phi \right) \right] + \hbar \partial_k \left[(n - \varrho^{ss}) \left(\dot{u}_i - \frac{\hbar}{m} \partial_i \Phi \right) \partial_k \Phi \right] = \partial_k \left(\lambda_{iklm} u_{lm} \right) ,$$

$$\hbar \partial_t \Phi + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla \Phi \right)^2 + \mathcal{E}'(n) = 0 ,$$

en notant le tenseur de déformation $u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\partial_i u_k + \partial_k u_i \right)$ et

$$\dot{u}_i = \partial_t u_i + \frac{\hbar}{m} \partial_k \Phi \partial_k u_i \; .$$

Ici, ρ^{ss} , λ_{iklm} et $\mathcal{E}'(n)$ sont des fonctions explicites de l'état fondamental du supersolide à densité moyenne n. En particulier $\mathcal{E}(n)$ est l'énergie du fondamental. La fonction ρ^{ss} et le tenseur d'ordre quatre λ_{iklm} s'obtiennent à l'aide des équations d'Euler-Lagrange du système complet. Le détail de leur calcul est assez complexe et n'est pas explicité ici. ρ^{ss} correspond à la densité superfluide de ce solide quantique : cette quantité est responsable du moment d'inertie non-classique et indique la proportion de matière dont le mouvement est découplé de la rotation solide. Si ρ^{ss} est différent de zéro, on a un supersolide. On appelle de manière équivalente ρ^{ss} la densité supersolide. Le terme $\partial_k (\lambda_{iklm} u_{lm})$ décrit les propriétés élastiques comme pour un solide classique [LeTa]. Dans l'hypothèse où l'on peut considérer le solide comme un solide classique, ce qui est pertinent pour des longueurs caractéristiques bien plus grande que le réseau du cristal, on trouve :

$$\partial_k \left(\lambda_{iklm} u_{lm} \right) = \lambda \partial_i u_{kk} + 2\mu_s \partial_k u_{ik} ,$$

avec $\lambda = K - \frac{2}{3}\mu_s$ et où K et μ_s sont la compressibilié et le module de cisaillement de l'hélium solide.

L'interprétation détaillée de ce système d'équations dépasse à nouveau le cadre de ce cours et nous nous contenterons de dresser ici une liste de remarques importantes :

- le système d'équations décrit la dynamique des perturbations autour de l'état fondamental du solide quantique. On observe que les propriétés élastiques et superfluides sont couplées entre elles.
- quelques termes non-linéaires ont été enlevés dans cette approche, termes qu'il est légitime de négliger dans la limite de perturbations de faible amplitude.
- l'hypothèse d'isotropie du système est raisonnable, même si la structure du cristal (hexagonal à 2D et cubique à 3D) ne satisfait pas cette symétrie. La prise en compte de l'anisotropie du système se traduirait notamment par une description tensorielle de la densité supersolide ϱ^{ss} .

7.3.3 Propagation d'onde dans les supersolides

L'étude de la propagation de perturbations de faible amplitude autour de l'état fondamental libre de contrainte permet de bien illustrer les propriétés élastiques du solide ainsi que le couplage intrinsèque superfluidité-élasticité de ce modèle. Cet état fondamental est décrit par n_0 constant, et $\Phi_0 = -\mathcal{E}'(n_0)t/\hbar$ et une transformation solide nulle $\boldsymbol{u} = 0$. Nous chercherons les perturbations de faible amplitude autour de cette solution d'équilibre sous la forme d'ondes progressives :

$$n = n_0 + n_1 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}$$
, $\Phi = \Phi_0 + \Phi_1 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}$, et $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_1 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}$

On obtient le système linéaire d'équations au premier ordre :

$$-i\omega n_1 - \varrho^{ss} \frac{\hbar}{m} k^2 \Phi_1 + (n_0 - \varrho^{ss})\omega(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{u}_1) = 0 ,$$

$$-m\omega(n_0 - \varrho^{ss})(\omega \boldsymbol{u}_1 + \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{k} \Phi_1) = -(\lambda + \mu_s)(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{u}_1)\boldsymbol{k} - \mu_s k^2 \boldsymbol{u}_1 ,$$

$$-i\hbar\omega \Phi_1 + \mathcal{E}''(n_0)n_1 = 0 .$$

On distingue deux types d'ondes suivant les propriétés du champ de déplacement.

Ondes de cisaillement

Les ondes de cisaillement sont caractérisées par la propriété div $(\boldsymbol{u}) = u_{ii} = \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{u}_1 = 0$. La dynamique du champ de déplacement se découple alors des champs de densité et de phase. On peut donc chercher une onde de cisaillement pur avec $\Phi_1 = 0$ et $\boldsymbol{u}_1 = 0$:

$$m\omega^2(n_0-arrho^{ss})oldsymbol{u}_1=\mu_sk^2oldsymbol{u}_1$$

qui donne la relation de dispersion des ondes de cisaillement $\omega = v_s k$ avec la vitesse

$$c_s = \sqrt{\frac{\mu_s}{m(n_0 - \varrho^{ss})}}$$

Elle correspond à la formule classique pour un solide élastique, tenant compte de la correction de la densité due à la densité supersolide.

Ondes de compression

En revanche, les ondes de compression, telles que div $(\boldsymbol{u}) \neq 0$ ont une structure plus complexe et elles lient explicitement les déformations du solide avec la phase quantique Φ . On prend $\boldsymbol{u}_1 = u_1 \boldsymbol{k}$ et on obtient le système linéaire :

$$\begin{pmatrix} -i\omega & -\frac{\hbar}{m}\varrho^{ss}k^2 & \omega(n_0-\varrho^{ss})k^2 \\ 0 & -\hbar\omega(n_0-\varrho^{ss}) & (K+\frac{4}{3}\mu_s)k^2 - m\omega^2(n_0-\varrho^{ss}) \\ \mathcal{E}''(n_0) & -i\hbar\omega & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 \\ \Phi_1 \\ u_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Le déterminant de cette matrice donne la relation de dispersion de ces ondes. On remarque que ce déterminant correspond à un polynôme homogène de degré quatre en k et ω . On cherche alors les solutions sous forme de modes sonores de vitesse de propagation v: $\omega = vk$ et on obtient l'équation caractéristique pour la vitesse de propagation v:

$$\frac{n_0 - \varrho^{ss}}{n_0} v^4 - \left(c_K^2 + \frac{n_0 - \varrho^{ss}}{n_0} c_s^2\right) v^2 + \frac{\varrho^{ss}}{n_0} c_K^2 c_s^2 = 0 ,$$

où l'on a introduit c_K la vitesse des ondes élastiques longitudinales :

$$c_K^2 = \frac{K + 4\mu_s/3}{mn_0}$$

et c_s la vitesse des ondes superfluides équivalentes :

$$c_s^2 = \frac{n_0 \mathcal{E}''(n_0)}{m} ,$$

Il est intéressant de calculer ce déterminant dans deux limites physiques pertinentes :

– la limite superfluide $\rho^{ss} \to n_0$ pour laquelle la relation de dispersion se ramène à $\omega^2 = n_0 \mathcal{E}''(n_0) k^2/m$, qui correspond au spectre de phonons obtenu pour le modèle NLS avec la vitesse de propagation :

$$v = c_s = \sqrt{\frac{n_0 \mathcal{E}''(n_0)}{m}}$$

– La limite de solide classique $\rho^{ss} \ll n_0$: dans ce cas, on trouve deux modes de propagation correspondant aux vitesse :

$$v_1^2 = c_K^2 + c_s^2$$

 et

$$v_2^2 = \frac{c_K^2 c_s^2}{c_K^2 + c_s^2} \frac{\varrho^{ss}}{n_0}$$

Cette seconde vitesse s'annule lors de la transition supersolide-solide ($\varrho^{ss} = 0$) et ce mode de couplage solide-supersolide disparaît. Cette transition s'obtient dans le modèle dans la limite $\Lambda \to \infty$.

Chapitre 8

Fluide en rotation et vortex

La possibilité de mettre en rotation les fluides quantiques change de manière spectaculaire la nature de l'état fondamental ψ de l'énergie de Gross-Pitaevskii. Ces solutions peuvent contenir des vortex, c'est-à-dire (pour un problème à deux dimensions) des points où ψ s'annule et autour desquels la phase de ψ tourne d'un nombre entier de fois 2π . Dans ce chapitre, nous décrivons d'abord la procédure expérimentale pour observer ces vortex et la modélisation d'un condensat en rotation en terme de fonctionnelle d'énergie. Nous détaillons ensuite les minimiseurs correspondants, qui sont à valeurs complexes. Nous terminons par la structure des solutions contenant un grand nombre de vortex, qui s'arrangent en un réseau régulier appelé *réseau d'Abrikosov*.

8.1 Mise en rotation des condensats

La rotation d'un fluide quantique est très différente de celle observée classiquement. Prenons un fluide classique, un verre d'eau par exemple, et plaçons-le sur un plateau tournant à la vitesse angulaire Ω autour de l'axe vertical de vecteur unitaire \boldsymbol{e}_z . Le champ de vitesses à l'équilibre correspond à la rotation rigide $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{\Omega} \wedge \boldsymbol{r}$, avec $\boldsymbol{\Omega} = \Omega \boldsymbol{e}_z$; la vorticité $\nabla \wedge \boldsymbol{v}$ de ce champ vaut $2\boldsymbol{\Omega}$. Une conséquence de ce champ de vitesse est observable sur la surface du liquide, qui prend une forme parabolique. Pour un fluide quantique décrit par l'équation de Gross-Pitaevskii, la fonction d'onde est un nombre complexe que nous pouvons écrire $\psi = \sqrt{\rho}e^{i\phi}$ tant que ψ ne s'annule pas. La formulation hydrodynamique vue en § 1.2.7 nous a conduit au champ de vitesse $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}) = (\hbar/m)\nabla\phi(\boldsymbol{r})$, dont le rotationnel est nul. Cela signifie-t-il qu'un fluide quantique va rester immobile si on met le récipient qui le contient en rotation ? La réponse est négative, le fluide va tourner, mais son champ de vitesse sera très différent du champ de rotation classique. La mise en rotation va donc imposer à ψ de s'annuler : lignes en dimension 3 ou points en dimension 2, appelés vortex ou tourbillons. La circulation de $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r})$ autour d'un zéro de ψ

$$\frac{m}{2\pi\hbar}\oint \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

est alors entière, correspondant au nombre de tours de la fonction ψ autour du zéro.



FIG. 8.1 – Mise en rotation d'un condensat de Bose-Einstein par un potentiel anisotrope (photos LKB-ENS).

8.1.1 Observation expérimentale

On considère une assemblée d'atomes confinés dans un potentiel harmonique isotrope $V(\mathbf{r}) = m\omega^2 r^2/2$. Pour mettre ce gaz en rotation autour de l'axe Oz, on ajoute à V le potentiel anisotrope dépendant du temps

$$V'(\mathbf{r},t) = \frac{\epsilon}{2}m\omega^2(X_t^2 - Y_t^2) , \qquad (8.1)$$

où X_t et Y_t sont donnés par

$$X_t = x\cos(\Omega t) + y\sin(\Omega t) \qquad Y_t = -x\sin(\Omega t) + y\cos(\Omega t) . \tag{8.2}$$

Ce potentiel anisotrope dans le plan xy peut être créé par un faisceau laser elliptique, dont on fait tourner les axes au moyen de modulateurs acousto-optiques. Il peut également être d'origine magnétique et créé par des bobines de formes judicieusement choisies et transportant des courants électriques dépendant du temps. Le paramètre ϵ est généralement choisi petit devant 1, ce qui signifie que le potentiel tournant V' est petit devant le potentiel de confinement V.

La procédure expérimentale pour étudier ce problème commence par la préparation d'un condensat de Bose-Einstein en absence de V'. On applique ensuite V' pendant une durée ajustable avant de prendre une image du gaz. On observe que l'application de V' se traduit d'abord par une phase de turbulence qui dure quelques centaines de millisecondes (figure 8.1). Le gaz atteint ensuite un état stationnaire qui comporte un certain nombre de trous de densité qui sont des vortex. Le nombre de vortex observables augmente avec la fréquence de rotation Ω (figure 8.2). Quand le nombre de vortex est grand, ils forment un réseau triangulaire régulier. Ce réseau est appelé aussi réseau d'Abrikosov en raison de la similarité avec les phénomènes observés dans les supraconducteurs de type II, décrits par des modèles de champ moyen analogues, dits modèles de Ginzburg-Landau [Abr, SJST]. Nous verrons plus loin une justification mathématique de cette géométrie.

8.1.2 Description d'un condensat en rotation

Deux points de vue sont possibles pour décrire l'apparition de vortex dans ces gaz en rotation, selon qu'on considère que l'agitateur tournant reste présent ou non à l'instant où l'on veut évaluer l'état stationnaire du gaz.



FIG. 8.2 – Etat stationnaire d'un condensat en rotation, pour des valeurs croissantes de la fréquence de rotation Ω (photos LKB-ENS).

Passage dans le référentiel tournant. Nous supposons ici que l'agitateur tournant est présent à l'instant auquel on veut déterminer l'état stationnaire du gaz. Dans le référentiel du laboratoire, l'hamiltonien $\hat{H}_{lab}(t)$ décrivant le gaz piégé contient le potentiel $V'(\mathbf{r}, t)$ et dépend du temps. Pour se ramener à un problème indépendant du temps, dont l'hamiltonien admet un état fondamental, passons dans le référentiel tournant à la vitesse angulaire Ω autour de l'axe Oz. L'hamiltonien dans ce référentiel vaut¹

$$\hat{H}_{\rm rt} = \hat{H}_{\rm lab}(0) - \Omega \hat{\mathcal{L}}_z , \qquad (8.3)$$

où $\hat{\mathcal{L}}_z$ est la composante du moment cinétique des N particules selon l'axe de rotation :

$$\hat{\mathcal{L}}_z = \sum_{i=1}^N \hat{L}_{z,i} = \sum_{i=1}^N \hat{x}_i \hat{p}_{y,i} - \hat{y}_i \hat{p}_{x,i} .$$
(8.4)

Rappelons que la composante selon z de l'opérateur moment cinétique orbital d'une particule est $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$, dont l'action sur une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ s'écrit : $\hat{L}_z\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x)\psi(\mathbf{r})$.

Pour rechercher l'état fondamental du système, on peut alors procéder comme au chapitre 1, en remplaçant l'hamiltonien à N particules (2.5) par (8.3). L'approximation de Hartree conduit alors à une fonctionnelle d'énergie similaire à (2.13), mais à laquelle on doit ajouter $-\Omega \int \psi^*(\hat{L}_z \psi)$, et dans laquelle le potentiel V_{tot} combine les effets du piège et de l'agitateur :

$$V_{\text{tot}}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + V'(\mathbf{r}, 0) = \frac{m\omega^2}{2} \left[(1+\epsilon)x^2 + (1-\epsilon)y^2 + z^2 \right] .$$
 (8.5)

Évolution à moment cinétique constant. Une fois que le gaz mis en rotation par l'agitateur tournant a atteint son état stationnaire (figure 8.2), on peut éteindre cet agitateur. Si $\epsilon \ll 1$, cette extinction n'a généralement pas de conséquences observables. À cet instant, le gaz possède un moment cinétique non nul le long de l'axe Oz et ce moment cinétique restera constant au cours de l'évolution ultérieure puisque le potentiel auquel sont soumis les atomes est à symétrie cylindrique autour de cet axe.

Comme l'agitateur est désormais absent à l'instant qui nous intéresse, la recherche de l'état stationnaire du gaz peut se faire dans le référentiel du laboratoire, en minimisant la fonctionnelle d'énergie (2.13) dans laquelle nous prendrons $V(\mathbf{r}) = m\omega^2 r^2/2$ (c'est-à-dire $\epsilon = 0$ dans (8.5)). Le problème semble donc similaire à celui étudié dans les chapitres

¹voir par exemple L. Landau et E. Lifshitz, *Mécanique*, §39, Éditions Mir (Moscou).

précédents, mais il y a en fait une différence essentielle : cette minimisation doit se faire en prenant en compte le moment cinétique moyen non nul du gaz, qui est conservé au cours de l'évolution. Pour tenir compte de cette contrainte, on utilise la méthode des multiplicateurs de Lagrange : on ajoute à (2.13) le terme $-\Omega \int \psi^*(\hat{L}_z \psi)$, Ω jouant alors le rôle de multiplicateur de Lagrange associé au moment cinétique.

Pour résumer, les deux points de vue physiques conduisent à des fonctionnelles d'énergie très voisines :

$$\mathcal{E}(\psi) = \int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 \,\mathrm{d}^3 r + \int V_{\text{tot}} \,|\psi|^2 \,\mathrm{d}^3 r + \frac{Ng}{2} \int |\psi|^4 \,\mathrm{d}^3 r - \Omega \int \psi^* \left(\hat{L}_z \psi\right) \,\mathrm{d}^3 r \,, \quad (8.6)$$

la seule différence étant la présence ou non du terme proportionnel à ϵ dans l'expression (8.5) du potentiel V_{tot} ressenti par les atomes.

Avant d'aborder l'étude mathématique de cette fonctionnelle, procédons à une dernière simplification. Les phénomènes qui vont nous intéresser ici sont reliés à la position des vortex dans le plan xy. En revanche, nous n'aurons pas la place d'aborder le problème (pourtant intéressant) de la forme d'une ligne de vortex le long de l'axe de rotation Oz. Nous allons donc supposer pour simplifier que la dimension selon z est gelée, c'est-à-dire qu'on a appliqué un potentiel $m\omega_z^2 z^2/2$ avec $\omega_z \gg \omega$ selon cet axe. Si le quantum d'énergie $\hbar\omega_z$ est grand devant le potentiel chimique μ , on peut chercher les minimiseurs de (8.6) sous la forme

$$\psi(x, y, z) = \phi(x, y) \chi_0(z)$$
, avec $\chi_0(z) = \frac{e^{-z^2/(2\ell_z^2)}}{(\pi \ell_z)^{1/4}}$, $\ell_z = (\hbar/(m\omega_z))^{1/2}$,

la fonction $\chi_0(z)$ représentant l'état fondamental du mouvement selon z pour une particule de masse m. La fonctionnelle d'énergie s'écrit alors en fonction de $\phi(x, y)$:

$$\mathcal{E}(\phi) = \int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\phi|^2 \,\mathrm{d}^2r + \int V_{2d}(r) \,|\phi|^2 \,\mathrm{d}^2r + \frac{N\tilde{g}}{2} \int |\phi|^4 \,\mathrm{d}^2r - \Omega \int \phi^*\left(\hat{L}_z\phi\right) \,\mathrm{d}^2r \,, \quad (8.7)$$

avec $\tilde{g} = g/(\ell_z \sqrt{2\pi})$ et $V_{2d}(r) = m\omega^2 r^2/2$. L'équation d'Euler-Lagrange correspondant à (8.7) est

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi + V_{2d}\phi + N\tilde{g}|\phi|^2\phi - i\mathbf{\Omega}\wedge\mathbf{r}\cdot\nabla\phi = \mu\phi.$$
(8.8)

et notre but est maintenant de comprendre mathématiquement comment on peut arriver à des minima de l'énergie qui présentent des points d'annulation autour desquels il y a une circulation.

8.2 Solution avec 1 vortex

La première étape de notre compréhension mathématique consiste à étudier les solutions de (8.8) de la forme

$$\phi(x,y) = f(r)e^{iq\theta} , \qquad (8.9)$$

où $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, f est une fonction réelle qui s'annule à l'origine, $q \in \mathbb{N}$ et θ est l'angle polaire. Ces solutions sont la formulation type d'un vortex : une annulation de la fonction d'onde avec une singularité de phase à l'origine, puisque la phase tourne de $q2\pi$. Ces

solutions dites à vortex sont parfois également appelées solitons topologiques. En effet, un soliton est une fonction 1D qui passe de $-\pi$ à π . En revanche, on peut relier continument un soliton à la solution constante égale à 1, ce qui n'est pas le cas d'un vortex. On renvoit à [MaSu] pour des informations sur les solitons topologiques et des structures topologiques plus compliquées que les vortex.

Etant donné que $\Omega \wedge r$ est suivant e_{θ} , cela implique que

$$\boldsymbol{\Omega} \wedge \boldsymbol{r} \cdot
abla \phi = q \Omega f$$
 .

D'autre part, le calcul du laplacien en coordonnées polaires conduit à

$$\Delta\left(f(r)e^{iq\theta}\right) = f'' + \frac{f'}{r} - q^2\frac{f}{r^2} \ .$$

A partir de (8.8), en supposant que $\hbar = m = N = g = \mu = 1$, et en négligeant pour l'instant la contribution de V_{tot} (hypothèse de condensat homogène), on est conduit à l'équation modèle décrivant un vortex de degré q:

$$f'' + \frac{f'}{r} - q^2 \frac{f}{r^2} + f(1 - f^2) = 0 .$$
(8.10)

On cherche des solutions positives définies sur tout \mathbb{R}^+ , et en particulier en 0. Une première idée serait de résoudre l'équation différentielle avec f(0) = 0 et en faisant varier f'(0). Mais les coefficients de l'équation sont singuliers à l'origine. Donc le théorème de Cauchy Lipschitz ne s'applique pas et on ne sait pas s'il existe localement une unique solution au voisinage de zéro et numériquement une telle résolution est très instable. En revanche, on peut montrer que toutes les solutions sont développables en série entière au voisinage de 0 et se comportent comme r^q :

Proposition 8.2.1 Toute solution réelle de (8.10) sur un intervalle (0, R) est au voisinage de 0 la somme d'une série entière de la forme

$$f_a(r) = r^q (a + \sum_{k=1}^{\infty} P_k(a) r^{2k})$$

 $a \in \mathbb{R}$. Parmi les a, il existe une valeur séparatrice A au sens :

- si a > A, f_a croît de 0 à l'infini. quand r va de 0 à une valeur finie.
- $f_A(r)$ croît de 0 à 1 quand r va de 0 à l'infini
- si 0 < a < A, f_a reste comprise entre -1 et 1 et oscille indéfiniment.

Cette proposition indique donc qu'il existe une seule valeur de f'(0) pour laquelle nous avons une solution sur tout \mathbb{R} , mais le résultat ne découle pas directement de théorèmes classiques. La preuve de cette proposition fait l'objet de l'article [HeHe]. Nous ne la détaillerons pas ici.

Notons que la solution pour a = A correspond à la solution vortex de degré q, ou circulation q. Pour la suite, on remarquera qu'une autre formulation en coordonnées complexes de cette fonction est

$$f(|z|)\frac{z^q}{|z|^q}$$
 avec $z = x + iy$,

puisque $e^{i\theta} = z/|z|$. On signale que seule la solution avec q = 1 est stable : les solutions dites à vortex multiple (q > 1) sont instables et il est plus favorable énergétiquement d'avoir q vortex de degré 1 plutôt qu'un vortex de degré q.

8.3 Solutions à plusieurs vortex

A partir de la solution à 1 vortex que nous venons de construire, nous souhaitons mieux comprendre les minimiseurs de (8.7). En supposant $\hbar = m = \omega = 1$ et $\epsilon = 0$, et en notant à nouveau ψ notre fonction d'onde, on s'intéresse donc à la minimisation de

$$E(\psi) = \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{2} |\nabla \psi|^2 + \frac{1}{2} r^2 |\psi|^2 + \frac{G}{2} |\psi|^4 + \frac{i}{2} \mathbf{\Omega} \wedge \mathbf{r} \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) , \qquad (8.11)$$

où $G = N\tilde{g}$, $\Omega = \Omega e_z$, et sous la contrainte $\int_{\mathbb{R}^2} |\psi|^2 = 1$. On remarque tout de suite que si ψ est à valeur réelle, $\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* = 0$. En revanche, si ψ est à valeur complexe, et $\psi = \sqrt{\rho}e^{i\phi}$, alors $i(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) = -\rho\nabla\phi$. Si Ω est non nul, le fait d'avoir ψ à valeur complexe peut donc faire baisser l'énergie.

8.3.1 Existence du minimum

Nous n'allons pas prouver en détail cette existence, mais juste donner quelques indications sur les phénomènes. On peut tout d'abord remarquer que

$$|\nabla \psi - i\mathbf{\Omega} \wedge \boldsymbol{r}\psi|^2 = |\nabla \psi|^2 + \Omega^2 r^2 |\psi|^2 + i\mathbf{\Omega} \wedge \boldsymbol{r} \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) ,$$

si bien qu'on peut réécrire l'énergie sous la forme

$$E(\psi) = \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{2} |\nabla \psi - i\mathbf{\Omega} \wedge \mathbf{r}\psi|^2 + \frac{1}{2} (1 - \Omega^2) r^2 |\psi|^2 + \frac{G}{2} |\psi|^4 .$$
 (8.12)

On voit alors que la valeur $\Omega = 1$ est séparatrice au sens :

- si Ω < 1, cette énergie est positive, donc en particulier bornée inférieurement. Cela suffit pour appliquer les techniques du chapitre 3 et prouver l'existence d'un minimiseur de l'énergie qui est solution de l'équation d'Euler-Lagrange correspondante. Nous n'entrerons pas plus dans les détails.
- − si $\Omega \ge 1$, cette énergie n'est pas bornée inférieurement. On verra ci dessous que l'on peut construire des suites minimisantes dont l'énergie tend vers −∞. Cela correspond au fait que la rotation devient plus forte que la force de piégeage et les atomes partent à l'infini.

Proposition 8.3.1 Si $\Omega > 1$, le minimum de l'énergie (8.11) sous la contrainte $\int_{\mathbb{R}^2} |\psi|^2 = 1$ est égal à $-\infty$.

Démonstration. On cherche à montrer que si $\Omega > 1$, il existe des suites minimisantes dont l'énergie tend vers $-\infty$. On cherche des fonctions test sous la forme $\psi = f(r)e^{iq\theta}$ avec f(0) = 0 et $\int_{\mathbb{R}^2} f^2 = 1$. L'énergie s'écrit alors

$$E(f(r)e^{iq\theta}) = \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{2} f'^2 + \frac{1}{2} q^2 \frac{f^2}{r^2} - \Omega q f^2 + \frac{1}{2} r^2 f^2 + \frac{G}{2} f^4$$

Le choix optimal de q est tel que

$$q \int_{\mathbb{R}^2} \frac{f^2}{r^2} = \Omega \int_{\mathbb{R}^2} f^2 = \Omega$$

8.3. SOLUTIONS À PLUSIEURS VORTEX

On choisit donc $q=\Omega/(\int_{\mathbb{R}^2}\frac{f^2}{r^2})$ et on est ramené à minimiser

$$\mathcal{E}(f) = \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{2} f'^2 - \frac{1}{2} \Omega \frac{1}{\int_{\mathbb{R}^2} \frac{f^2}{r^2}} + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^2} r^2 f^2 + \frac{G}{2} \int_{\mathbb{R}^2} f^4 .$$
(8.13)

On fait le changement d'échelle $f(r) = \alpha h(\alpha r)$ qui préserve la norme L^2 , où α est un réel non nul à déterminer. On trouve que

$$\mathcal{E}(f) = \mathcal{G}_{\alpha}(h) := \int_{\mathbb{R}^2} \frac{\alpha^2}{2} {h'}^2 - \frac{1}{2} \Omega \frac{1}{\alpha^2 \int_{\mathbb{R}^2} \frac{h^2}{r^2}} + \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{2\alpha^2} r^2 h^2 + \alpha^2 \int_{\mathbb{R}^2} \frac{G}{2} h^4 \ . \tag{8.14}$$

Si on trouve une fonction h telle que

$$\left(\int_{\mathbb{R}^2} r^2 h^2\right) \left(\int_{\mathbb{R}^2} \frac{h^2}{r^2}\right) < \Omega^2 , \qquad (8.15)$$

alors en faisant tendre α vers 0 dans (8.14), on obtient des suites minimisantes dont l'énergie tend vers $-\infty$.

Il s'agit dont maintenant de savoir si (8.15) peut être satisfaite. On remarque que par Cauchy Schwarz, on a toujours

$$1 = \int_{\mathbb{R}^2} h^2 \le \left(\int_{\mathbb{R}^2} r^2 h^2 \right)^{1/2} \left(\int_{\mathbb{R}^2} \frac{h^2}{r^2} \right)^{1/2}$$

Donc si $\Omega \leq 1$, il est impossible de vérifier (8.15).

En revanche, si $\Omega > 1$, on choisit *h* une fonction constante entre 1 et *a*, égale à $1/\sqrt{\pi(a^2-1)}$ et nulle ailleurs. On a alors

$$\left(\int_{\mathbb{R}^2} r^2 h^2\right) \left(\int_{\mathbb{R}^2} \frac{h^2}{r^2}\right) = (1+a^2) \frac{\ln a}{a^2-1}$$

et ceci tend vers 1 quand a tend vers 1. Donc si $\Omega > 1$, on peut trouver h vérifiant (8.15). Cette fonction n'est pas continue mais on peut la régulariser pour obtenir une fonction H^1 qui vérifie encore (8.15). On fait ensuite tendre a vers 1, α vers 0 et la régularisation ensemble de telle manière que $\alpha^2/(a^2 - 1)$ tende vers 0 et le terme correspondant à la norme L^4 dans (8.14) tend vers 0 aussi, ce qui produit une fonction test admissible.

On s'intéresse dans la suite au cas $\Omega < 1$. Pour ces problèmes, il n'y a pas d'unicité du minimiseur.

Notons que si le potentiel de piégeage n'était pas harmonique, mais à croissance plus forte que r^2 , l'énergie aurait un minimiseur pour tout Ω .

8.3.2 Echelles de longueur

Plusieurs échelles apparaissent dans le problème en fonction de la taille des paramètres G (petit ou grand) et Ω (proche de 0 ou de 1) :

- taille caractéristique des vortex, qui est de l'ordre de la longueur de cicatrisation ξ introduite dans (1.16), de l'ordre de $1/\sqrt{G}$.
- taille du condensat

– distance entre vortex.

La preuve mathématique du fait que le minimiseur a des vortex quand Ω dépasse une valeur critique est quelque chose de difficile. Nous renvoyons le lecteur intéressé à [Aft, BBH] pour des lectures complémentaires.

Deux limites asymptotiques peuvent être étudiées mathématiquement :

- -G grand
- Ω tend vers 1.

G grand

Dans le cas où G est grand, des calculs similaires à ceux effectués dans 5.3, conduisent, si $\Omega = 0$ à un rayon du condensat R de l'ordre de $G^{1/4}$ et au fait que le minimum est proche d'une parabole inversée

$$\frac{1}{R}p\left(\frac{r}{R}\right) \text{ avec } p(r) = \frac{1}{2}(\lambda - r^2)_+, \ \lambda = 2^{3/2}\sqrt{\pi} \ . \tag{8.16}$$

On peut envisager de construire une fonction test avec plusieurs vortex du type

$$\prod_{i=1}^{n} \frac{z-a_i}{|z-a_i|} f\left(\frac{|z-Ra_i|}{R\xi}\right) p\left(\frac{|z|}{R}\right) ,$$

où R est la taille du condensat et ξ la taille caractéristique d'un vortex, de l'ordre de $1/\sqrt{G}$. Comme $R\xi$ est petit, et G est grand, on trouve alors un développement asymptotique de l'énergie qui se décompose en

- l'énergie de la parabole inversée p, d'ordre \sqrt{G}
- l'énergie des vortex, chacun ayant une énergie d'ordre

$$\frac{1}{G}\ln G - \frac{1}{\sqrt{G}}\Omega ,$$

ce qui conduit à la vitesse critique à partir de laquelle il est plus intéressant d'avoir des vortex, qui est proportionnelle à $\ln G/\sqrt{G}$. On trouve également que le meilleur profil est quand f est solution de (8.10).

l'énergie des vortex qui conduit à

$$-\sum_{i \neq j} \ln |a_i - a_j| + \sum_i |a_i|^2 .$$
(8.17)

Cete interaction effective entre vortex est formellement identique à celle d'un gaz de Coulomb en interaction. La position a_i des vortex est déterminée par la minimisation de cette interaction. La minimisation numérique de ce problème conduit à un réseau ordonné : des points placés presque sur un réseau triangulaire, quand leur nombre est grand. Ceci est relié à des problèmes de polynômes orthogonaux et aux points de Fekete [ST], chapitre 3.

La construction de la borne inférieure est la partie mathématiquement difficile.

Notons que l'étude de la dynamique des vortex, leur mouvement relatif et leur interaction reposent souvent sur la dynamique créée par (8.17).

Points de Fekete

La question de trouver les n points a_i , $1 \le i \le n$, qui minimisent

$$-\sum_{i\neq j} \ln |a_i - a_j| + \sum_i |a_i|^2$$
,

est reliée au problème des points de Fekete qui consiste à trouver des points a_j dans un domaine K qui maximisent

$$\prod_{i \neq j} |a_i - a_j|^2$$

Si K est l'intervalle]0,1[, ce sont les racines des polynômes dits de Tchebyshev. Si K est le cercle unité, les points sont les racines *n*ièmes de l'unité. On peut montrer que la mesure

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \delta_{a_i}$$

converge quand n tend vers l'infini vers la mesure portée par le bord de K.

Si au lieu de prescrire les points dans un domaine K, on met un potentiel confinant, cela maintient les points dans un domaine borné. On s'intéresse alors à la maximisation de

$$\prod_{i \neq j} |a_i - a_j|^2 e^{-n \sum_i V(a_i)}$$

Si V est le potentiel harmonique, on est ramené exactement au problème (8.17) et on voit apparaître numériquement que les points se positionnent sur un réseau triangulaire quand n est grand. On pourrait imaginer que ces points soient des racines de polynômes dont les coefficients ont des propriétés remarquables mais tout ceci est ouvert.

Ω proche de 1

Quand la rotation est rapide, les vortex deviennent d'une taille comparable à leur distance mutuelle. Leur nombre augmente et ils se positionnent sur un réseau. Il faut alors introduire d'autres techniques mathématiques, notamment à partir de la fonction Theta de Jacobi pour comprendre cette structure périodique. On cherche alors des fonctions test du type

$$u(z)p\left(\frac{|z|}{R}\right)$$
,

où u va être périodique sur un réseau de taille d'ordre 1 et p est une parabole inversée de rayon caractéristique R de telle manière qu'elle minimise

$$\int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{2} (1 - \Omega^2) r^2 |\psi|^2 + \frac{G}{4} |\psi|^4 .$$
(8.18)

On voit alors que R^2 est d'ordre $1/\sqrt{1-\Omega^2}$. En fait on va imposer à notre fonction test d'être dans l'état fondamental de l'opérateur

$$\int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{2} |\nabla \psi - i\mathbf{\Omega} \wedge \boldsymbol{r}\psi|^2 , \qquad (8.19)$$

ce qui produit des fonctions holomorphes, à une multiplication par une gaussienne près. La séparation des échelles d'énergie va imposer à la fonction périodique u de minimiser sa norme L^4 à norme L^2 constante. C'est ce que nous allons essayer de comprendre dans la section suivante, et en particulier de voir comment un réseau triangulaire apparaît dans le problème.

8.4 Réseau d'Abrikosov

Il nous faut maintenant introduire la notion de réseau. Soit $R \in \mathbb{R}^*_+$, et $\tau = \tau_1 + i\tau_2 \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. On appelle $K_{\tau,R}$ le parallélogramme unité sur le réseau

$$\mathcal{L}_{\tau,R} = R(\mathbb{Z} \oplus \tau \mathbb{Z}) \; .$$

En fait, plusieurs valeurs de τ peuvent donner le même réseau géométrique, en tenant compte des isométries. Afin de décrire tous les réseaux, on peut donc restreindre les



FIG. 8.3 – Action du groupe modulaire sur le demi-plan de Poincaré.

valeurs de τ : il y a une bijection entre les réseaux de \mathbb{C} tels que 1 est leur plus petite période et le demi-plan de Poincaré ($\tau_2 \geq 0$) quotienté par l'action du groupe modulaire et défini par :

$$\tau_2 > 0, \quad |\tau| \ge 1, \quad -1/2 \le \tau_1 < 1/2 ,$$
(8.20)

avec

$$\tau_1 \le 0, \quad \text{si} \quad |\tau| = 1 \quad . \tag{8.21}$$

Ceci est représenté sur la figure 8.4. En d'autres termes, il suffit de prendre τ vérifiant (8.20)-(8.21) pour obtenir par une combinaison d'isométries $z \to 1/z$ et $z \to z + 1$ l'ensemble des réseaux.

Nous définissons la fonction Theta associée au réseau $\mathbb{Z} \oplus \tau \mathbb{Z}$, par

$$\Theta_{\tau}(v) = \frac{1}{i} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-1)^n e^{i\pi\tau(n+1/2)^2} e^{(2n+1)\pi iv}, \quad v \in \mathbb{C} .$$
(8.22)

Une référence est [Cha]. La fonction Theta s'annule exactement une fois sur une cellule de $\mathbb{Z} \oplus \tau \mathbb{Z}$ et vérifie

$$\Theta_{\tau}(v) = -\Theta_{\tau}(-v), \quad \Theta_{\tau}(v+1) = -\Theta_{\tau}(v), \quad \Theta_{\tau}(v+\tau) = -e^{-i\pi\tau}e^{-2\pi i v}\Theta_{\tau}(v). \quad (8.23)$$

On vérifie que certaines quantités intégrales associées à la fonction Theta ont une invariance modulaire en utilisant de plus la propriété :

$$\sqrt{\frac{\tau}{i}}\Theta(v,\tau) = ie^{-\frac{\pi i v^2}{\tau}}\Theta(\frac{v}{\tau},-\frac{1}{\tau}) , \qquad (8.24)$$

combinée avec l'invariance par rapport à $\tau \to \tau + 1$.

On veut définir un espace de fonction dont le module est périodique sur le réseau, qui s'annulent exactement une fois par cellule et qui correspondent à l'état fondamental de notre opérateur de rotation.

Cela impose d'une part une quantification sur la taille de la cellule, soit que $|K_{\tau,R}|/(2\pi)$ est entier, et d'autre part des conditions de bord quasi-périodiques. En fait dans la suite, nous supposerons

$$R^2 \tau_2 = 2\pi. \tag{8.25}$$

Soit

$$A_0 = \frac{1}{2}(-y, x) , \text{ dans } K_{\tau,R} \text{ et } \nabla_{A_0} = \nabla - iA_0.$$
(8.26)

On a bien que $A_0 = e_z \wedge r$ et donc ∇_{A_0} fournit bien l'opérateur (8.19) que nous cherchons. On définit l'espace

$$E_{\tau,R} = \{ u \in H^1(K_{\tau,R}, \mathbb{C}), u(z+R) = e^{\frac{i\pi y}{R\tau_2}} u(z), \ u(z+R\tau) = e^{\frac{i\pi}{R\tau_2}(\tau_1 y - \tau_2 x)} u(z) \} .$$
(8.27)

Ces conditions de bord sont périodiques au sens que les quantités physiques |u| et $|\nabla_{A_0}u|$ sont périodiques. En revanche u n'est pas exactement périodique. En fait, u et $\nabla_{A_0}u$ au point $(z+nR+mR\tau)$ sont équivalents de jauge à u et $\nabla_{A_0}u$. On peut vérifier que le degré total de $u \in E_{\tau,R}$ sur une cellule est égal à 1 à cause de (8.25).

Nous allons étudier l'opérateur $-\nabla_{A_0}^2$ sur l'espace $E_{\tau,R}$ et allons voir que cela nous conduit à poser un problème de minimisation sur des fonctions Θ . La section suivante peut être sautée en première lecture, en admettant que le problème (8.18) peut être ramené à la minimisation de la norme L^4 pour des fonctions du type

$$u(z) = e^{-|z|^2/4} e^{z^2/4 - i\pi z/R} \Theta_{\tau}(\frac{z - z_1}{R}) , \qquad (8.28)$$

de norme L^2 égale à 1.

8.4.1 Niveau de Landau fondamental

Proposition 8.4.1 L'opérateur $-\nabla_{A_0}^2$ est auto-adjoint et positif sur l'espace $E_{\tau,R}$. Sa plus petite valeur propre est égale à 1, et l'espace propre associé, appelé $L_{\tau,R}$, est de dimension 1 engendré par la fonction (8.28) où R vérifie (8.25) et z_1 vérifie

$$z_1 = R \frac{1+ au}{2} \mod \mathcal{L}_{ au,R}.$$

La seconde valeur propre de $-\nabla^2_{A_0}$ est plus grande que 3.

Cet espace est aussi appelé niveau de Landau fondamental. La preuve de ce résultat est donné par souci de cohérence, mais peut être sauté en première lecture.

Notons que u vérifie

$$|u(z+R)| = |u(z)| \text{ et } |u(z+R\tau)| = |u(z)|.$$
(8.29)

Démonstration. Nous introduisons l'operateur

$$\mathcal{D}_{A_0} = \partial_1 + i\partial_2 + \frac{1}{2}(x + iy) = 2\partial_{\bar{z}} + \frac{z}{2}$$
(8.30)

en notation complexe, où $\partial_{\bar{z}} = \frac{1}{2}(\partial_x + i\partial_y)$. Cet opérateur correspond à l'opérateur de création en seconde quantification et est naturellement associé à $-\nabla^2_{A_0}$. L'adjoint de \mathcal{D}_{A_0} par rapport au produit scalaire de L^2 est $\mathcal{D}^*_{A_0} = -2\partial_z + \frac{1}{2}\bar{z}$. On trouve que

$$\mathcal{D}_{A_0}\mathcal{D}_{A_0}^* = -4\partial_{z\bar{z}} - z\partial_z + \bar{z}\partial_{\bar{z}} + \frac{1}{4}|z|^2 + 1, \mathcal{D}_{A_0}^*\mathcal{D}_{A_0} = -4\partial_{z\bar{z}} - z\partial_z + \bar{z}\partial_{\bar{z}} + \frac{1}{4}|z|^2 - 1,$$

et on en déduit les relations canoniques :

$$\mathcal{D}_{A_0}\mathcal{D}^*_{A_0} + \mathcal{D}^*_{A_0}\mathcal{D}_{A_0} = -2\Delta + \frac{1}{2}|z|^2 - 2(iy\partial_y + ix\partial_y) = -2\nabla^2_{A_0},\tag{8.31}$$

$$\mathcal{D}_{A_0}\mathcal{D}_{A_0}^* - \mathcal{D}_{A_0}^*\mathcal{D}_{A_0} = 2I.$$
(8.32)

En particulier, $-\nabla_{A_0}^2 = \mathcal{D}_{A_0}^* \mathcal{D}_{A_0} + I$. On vérifie que les conditions périodiques (8.27) assurent que $\nabla_{A_0} u$ est vraiment périodique par rapport à $\mathcal{L}_{\tau,R}$. Après une integration par parties, on trouve

$$\int_{K_{\tau,R}} |\nabla_{A_0} u|^2 = \int_{K_{\tau,R}} |\mathcal{D}_{A_0} u|^2 + |u|^2.$$
(8.33)

On en déduit que la plus petite valeur propre de $-\nabla^2_{A_0}$ dans $E_{\tau,R}$, caractérisée par le quotient de Rayleigh

$$\min_{u \in E_{\tau,R}} \frac{\int_{K_{\tau,R}} |\nabla_{A_0} u|^2}{\int_{K_{\tau,R}} |u|^2}$$

est égale à 1 et l'espace propre $L_{\tau,R}$ correspond aux solutions de $\mathcal{D}_{A_0}u = 0$ dans $E_{\tau,R}$. En particulier, en revenant à (8.30), on voit que ce sont des fonctions de la forme $u = f(z)e^{-|z|^2/4}$ avec f holomorphe.

Soit $u \in L^{\perp}_{\tau,R} = (Ker\mathcal{D}_{A_0})^{\perp}$ (où l'orthogonal est pris dans L^2 de $E_{\tau,R}$). Nous admettons que u appartient à la fermeture de l'image de $\mathcal{D}^*_{A_0}$. Nous pouvons supposer que $u = \mathcal{D}^*_{A_0}v$. Dans(8.33), on remplace $\mathcal{D}_{A_0}u$ par $\mathcal{D}_{A_0}\mathcal{D}^*_{A_0}v$ et utilisons (8.32) pour trouver que

$$\begin{aligned} \langle -\nabla_{A_0}^2 u, u \rangle &= \langle (I + \mathcal{D}_{A_0}^* \mathcal{D}_{A_0}) u, u \rangle = \|u\|^2 + \langle 2v + \mathcal{D}_{A_0}^* \mathcal{D}_{A_0} v, \mathcal{D}_{A_0} u \rangle \\ &= \|u\|^2 + 2 \langle \mathcal{D}_{A_0}^* v, u \rangle + \langle \mathcal{D}_{A_0}^* \mathcal{D}_{A_0} v, \mathcal{D}_{A_0} \mathcal{D}_{A_0}^* v \rangle \\ &= 3\|u\|^2 + \langle \mathcal{D}_{A_0}^* \mathcal{D}_{A_0} v, (2I + \mathcal{D}_{A_0}^* \mathcal{D}_{A_0}) v \rangle = 3\|u\|^2 + 2\|\mathcal{D}_{A_0} v\|^2 + \|\mathcal{D}_{A_0}^* \mathcal{D}_{A_0} v\|^2. \end{aligned}$$

Nous en déduisons que pour $u \in L_{\tau,R}^{\perp}$,

$$\langle -\nabla_{A_0}^2 u, u \rangle \ge 3 \|u\|^2,$$

et cela prouve la fin de la proposition.

Caracterisons l'espace $L_{\tau,R}$. Nous avons vu qu'il est fait des fonctions $u = f(z)e^{-|z|^2/4}$ avec f holomorphe, vérifiant les conditions de bord (8.27), ce qui implique en particulier que |u| est périodique. Puisque f est holomorphe, elle a un nombre fini de zéro dans $K_{\tau,R}$. Soit N_0

8.4. RÉSEAU D'ABRIKOSOV

ce nombre et z_k les zéros. Nous allons prouver (8.28). C'est une conséquence du théorème de factorisation d'Hadamard : comme f et la fonction $\prod_{k=1}^{N_0} \Theta_{\tau}(\frac{z-z_k}{R})$ ont les mêmes zéros, leur quotient est une fonction analytique qui ne s'annule pas dans $K_{\tau,R}$. On peut donc trouver une fonction analytique ϕ telle que

$$f(z) = e^{\phi(z)} \prod_{k=1}^{N_0} \Theta_{\tau}(\frac{z - z_k}{R}).$$

La $\mathcal{L}_{\tau,R}$ -périodicité de $|u(z)| = e^{-\frac{|z|^2}{4}} |f(z)|$ implique la borne supérieure

$$\forall z \in \mathbb{C}, \ e^{Re(\phi(z)) - \frac{|z|^2}{4}} \left| \prod_{k=1}^{N_0} \Theta_\tau(\frac{z - z_k}{R}) \right| \le C_1.$$

Donc, quand la cellule élémentaire Q est choisie telle que $\mathcal{L}_{\tau,R} \cap \partial Q = \emptyset$, il existe une constante C > 0 telle que $\forall z \in \partial Q + \mathcal{L}_{\tau,R}$, $Re(\phi(z)) \leq C |z|^2 + \ln(CC_1)$. Comme $Re(\phi(z))$ est une fonction harmonique, le principe du maximum implique $\forall z \in \mathbb{C}$, $Re(\phi(z)) \leq C'(|z|^2 + 1)$ pour une constante C' > 0. Le théorème de factorisation d'Hadamard implique alors que ϕ est un polynôme harmonique de degré 2, tel qu'il existe $(\delta, \eta, \beta) \in \mathbb{C}^3$ tels que

$$f(z) = e^{\delta + \eta z + \beta z^2} \prod_{k=1}^{N_0} \Theta_\tau(\frac{z - z_k}{R}).$$

Les conditions (8.27) et les propriétés sur la fonction Theta (8.23) impliquent que

$$e^{\eta R + \beta R^2 - R^2/4} e^{2\beta R z - Rx/2} (-1)^{N_0} = e^{\frac{i\pi y}{R\tau_2}} (-1)^{N_0} e^{\eta R \tau + R^2 \tau^2/4 - R^2 |\tau|^2/4 + R\tau z/2 - Rx\tau_1/2 - Ry\tau_2 - i\pi\tau N_0 - 2i\pi N_0 z/R + 2i\pi \sum_k z_k/R} = e^{\frac{i\pi}{R\tau_2}(\tau_1 y - \tau_2 x)} e^{\frac{i\pi y}{R\tau_2}(\tau_1 y - \tau_2 x)} e^{\frac{i\pi y}{R\tau_2}(\tau_2 x - \tau_2 x)} e^{\frac{i\pi y$$

La première équation donne

$$\beta = \frac{1}{4}, \quad R^2 \tau_2 = 2\pi, \quad \eta = -i(\frac{\pi}{R} + \frac{2k\pi}{R})$$
(8.34)

pour un entier k, et la seconde

$$N_0 = 1, \quad \eta = -i\frac{\pi}{R},$$
 (8.35)

 et

$$z_1 = R \frac{1+\tau}{2} \mod \mathcal{L}_{\tau,R}.$$
(8.36)

Cela implique (8.28).

Remarquons que si on laisse une condition de quantification plus générale soit

$$R^2 \tau_2 = 2\pi N \tag{8.37}$$

alors l'espace propre est de dimension N et formé de fonctions avec N zéros :

Proposition 8.4.2 L'opérateur $-\nabla^2_{A_0}$ est auto-adjoint et positif sur l'espace

$$E_{\tau,R} = \{ u \in H^1(K_{\tau,R}, \mathbb{C}), u(z+R) = e^{\frac{i\pi Ny}{R\tau_2}} u(z), \ u(z+R\tau) = e^{\frac{i\pi N}{R\tau_2}(\tau_1 y - \tau_2 x)} u(z) \}$$
(8.38)

Sa plus petite valeur propre est égale à 1, et l'espace propre associé, appelé $L_{\tau,R}$, est de dimension $N = \frac{|K_{\tau,R}|}{2\pi}$ et est décrit par les fonctions

$$u(z) = \lambda e^{-|z|^2/4} e^{z^2/4 - i\pi N z/R} \prod_{k=1}^N \Theta_\tau(\frac{z - z_k}{R})$$
(8.39)

où λ est un nombre complexe, z_k sont N points dans $K_{\tau,R}$, vérifiant

$$\sum_{k=1}^{N} z_k = RN \frac{1+\tau}{2} \mod \mathcal{L}_{\tau,R}.$$

La seconde valeur propre de $-\nabla^2_{A_0}$ est plus grande que 3.

La fin de la preuve est remplacée par :

$$e^{\eta R + \beta R^2 - R^2/4} e^{2\beta R z - Rx/2} (-1)^{N_0} = e^{\frac{i\pi Ny}{R\tau_2}} (-1)^{N_0} e^{\eta R\tau + R^2 \tau^2/4 - R^2 |\tau|^2/4 + R\tau z/2 - Rx\tau_1/2 - Ry\tau_2 - i\pi\tau N_0 - 2i\pi N_0 z/R + 2i\pi \sum_k z_k/R} = e^{\frac{i\pi N}{R\tau_2}(\tau_1 y - \tau_2 x)} e^{\frac{i\pi N}{R\tau_2}(\tau_2 x - \tau_2 x)} e^{\frac{i\pi$$

La première équation donne

$$\beta = \frac{1}{4}, \quad R^2 \tau_2 = 2\pi N, \quad \eta = -i(\frac{\pi N}{R} + \frac{2k\pi}{R})$$
(8.40)

pour un entier k, et la seconde

$$N_0 = N, \quad \eta = -i\frac{\pi N}{R},\tag{8.41}$$

 \mathbf{et}

$$\sum_{k=1}^{N} z_k = RN \frac{1+\tau}{2} \mod \mathcal{L}_{\tau,R}.$$
(8.42)

Cela implique (8.39).

8.4.2 L'énergie du réseau

Dans cette partie, nous supposons admis que le problème de départ se ramène à minimiser $\int |u|^4$ pour des fonctions de norme L^2 égale à 1 et de la forme (8.28). Nous allons prouver la propriété suivante :

Proposition 8.4.3 Quel que soit $\tau \in \mathbb{C}$ tel que $\tau_2 > 0$, pour la fonction u_{τ} donnée par

$$u_{\tau}(z) = e^{\frac{z^2}{4}} \Theta\left(\frac{\sqrt{\tau_2}}{\sqrt{2\pi}}z, \tau\right) e^{-\frac{|z|^2}{4}},$$

l'énergie $\gamma(\tau) = \frac{f|u_{\tau}|^4}{(f|u_{\tau}|^2)^2}$ a une expression explicite :

$$\gamma(\tau) = \sum_{k,\ell\in\mathbb{Z}} e^{-\frac{\pi}{\tau_2}|k\tau-\ell|^2}.$$
(8.43)

Démonstration. Soit $Z = \sqrt{\frac{\tau_2}{2\pi}} z$ et

$$f_{\tau}(z) = e^{\frac{\pi Z^2}{2\tau_2}} \Theta(Z, \tau), \quad u_{\tau}(z) = e^{\frac{\pi}{2\tau_2}(Z^2 - |Z|^2)} \Theta(Z, \tau).$$

De plus, en utilisant la définition (8.22) de la fonction Θ ,

$$|\Theta(Z,\tau)|^{2} = \sum_{n,n' \in \mathbb{Z}} (-1)^{n+n'} e^{i\pi \left(\tau(n+\frac{1}{2})^{2} - \overline{\tau}(n'+\frac{1}{2})^{2}\right)} e^{i\pi \left((2n+1)Z - (2n'+1)\overline{Z}\right)}$$

Nous définissons $Z = x + y\tau$, où $x, y \in \mathbb{R}$, et calculons :

$$|\Theta(Z,\tau)|^2 = \sum_{n,n'\in\mathbb{Z}} (-1)^{n+n'} e^{i\pi\left(\tau(n+\frac{1}{2}+y)^2 - \overline{\tau}(n'+\frac{1}{2}+y)^2\right)} e^{2i\pi x(n-n')} e^{-i\pi(\tau-\overline{\tau})y^2} .$$

Nous avons également $|u_{\tau}(z)|^2 = \left| e^{\frac{\pi}{2\tau_2} (Z^2 - |Z|^2)} \right|^2 |\Theta(Z, \tau)|^2 = e^{-2\pi\tau_2 y^2} |\Theta(Z, \tau)|^2$. D'où,

$$|u_{\tau}(z)|^{2} = \sum_{n,n' \in \mathbb{Z}} (-1)^{n+n'} e^{i\pi \left(\tau(n+\frac{1}{2}+y)^{2} - \overline{\tau}(n'+\frac{1}{2}+y)^{2}\right)} e^{2i\pi x(n-n')}.$$

Nous savons que $|u_{\tau}|^2$ vérifie (8.29), si bien que l'expression ci-dessus est périodique de période 1 en x et y. On calcule les coefficients de Fourier de cette fonction périodique en calculant sa transfomée de Fourier :

$$\int_{\mathbb{C}} e^{-iy.\eta} e^{i\pi \left[\tau(n+1/2+y)^2 - \overline{\tau}(n'+1/2+y)^2\right]} \, \mathrm{d}y = \frac{1}{\sqrt{2\tau_2}} e^{-\frac{\pi}{2\tau_2} \left|(n-n')\tau - \frac{\eta}{2\pi}\right|^2 + i\frac{\eta}{2}(n-n')} e^{i\eta n'} e^{i\frac{\eta}{2}}.$$

Le changement d'indices k = n - n' et la formule de Poisson

$$\sum_{n'\in\mathbb{Z}} e^{i\eta n'} = 2\pi \sum_{\ell\in\mathbb{Z}} \delta(\eta - 2\pi\ell) \; ,$$

conduisent à

$$|u_{\tau}(z)|^{2} = \frac{1}{\sqrt{2\tau_{2}}} \sum_{k,\ell \in \mathbb{Z}} (-1)^{k\ell+k+\ell} e^{-\frac{\pi}{2\tau_{2}}|k\tau-\ell|^{2}} e^{2i\pi(kx+\ell y)} .$$
(8.44)

La série de Fourier (8.44) a une intégrale de cellule égale à

$$\int_{Q} |u_{\tau}(z)|^{2} L(dz) = 2\pi \int_{[0,1]^{2}} \frac{1}{\sqrt{2\tau_{2}}} dx dy = \frac{2\pi}{\sqrt{2\tau_{2}}}$$

D'où,

$$\int |u_{\tau}|^2 = \frac{2\pi}{2\pi\sqrt{2\tau_2}} = \frac{1}{\sqrt{2\tau_2}} \,,$$

et la norme L^4 de u se déduit de (8.44) par l'identité de Parseval :

$$\int |u_{\tau}|^{4} = \frac{1}{2\pi} \frac{2\pi}{2\tau_{2}} \sum_{k,\ell \in \mathbb{Z}} e^{-\frac{\pi}{\tau_{2}}|k\tau-\ell|^{2}} = \frac{1}{2\tau_{2}} \sum_{k,\ell \in \mathbb{Z}} e^{-\frac{\pi}{\tau_{2}}|k\tau-\ell|^{2}},$$

qui conduit au résultat.

8.4.3 Réseau optimal

Proposition 8.4.4 La fonction $\gamma(\tau) = \sum_{k,\ell \in \mathbb{Z}} e^{-\frac{\pi}{\tau_2}|k\tau-\ell|^2}$ possède l'invariance modulaire $\gamma(\tau+1) = \gamma(\tau), \ \gamma(\frac{-1}{\tau}) = \gamma(\tau), \ et \ la \ symétrie \ \gamma(-\overline{\tau}) = \gamma(\tau).$ Elle a exactement 2 points critiques à l'intersection du domaine fondamental (8.20)-(8.21) avec $\{\tau_I \leq 1.65\}$. Le point critique en $\tau = i$ (réseau carré) est un point selle avec la valeur critique $\gamma(i) \sim 1.1803$ et le point critique en $\tau = j = e^{2i\pi/3}$ est l'unique minimiseur (à symétrie modulaire près) avec $b = \gamma(e^{2i\pi/3}) \sim 1.1596$.

Remarque 8.4.5 Les valeurs $\gamma(i)$ et $\gamma(e^{2i\pi/3})$ peuvent être exprimées en terme de fonction Gamma : $\gamma(i) = \frac{\Gamma(1/4)^2}{2\pi^{3/2}}$ et $b = \gamma(e^{2i\pi/3}) = \frac{3\Gamma(1/3)^3}{2^{7/3}\pi^2}$.

Démonstration. L'invariance modulaire de $\gamma(\tau)$ est une conséquence de sa définition (8.43) et des propriétés de la fonction, mais peuvent aussi se vérifier directement sur l'expression de la série. Cela permet de se restreindre au domaine fondamental (8.20)-(8.21). La formule de Poisson et un changement de variables conduisent à

$$\gamma(\tau) = \frac{1}{\tau_2} \sum_{k',\ell' \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-\frac{\pi}{\tau_2}(y^2 + x^2)} e^{2i\pi k' \frac{x}{\tau_I}} e^{2i\pi \ell'(x\tau_R - y)} \, \mathrm{d}x \mathrm{d}y.$$

Dans la mesure où la fonction γ est réelle, la partie réelle de $\partial_{\tau}\gamma(\tau)$ est égale à

$$\partial_{\tau_1} \gamma(\tau) = \frac{1}{\tau_2} \sum_{k',\ell' \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-\frac{\pi}{\tau_2} (y^2 + x^2)} (2i\pi\ell' x) e^{2i\pi\ell' (x\tau_2/\tau_2 - y)} e^{2i\pi k' \frac{x}{\tau_2}} \, \mathrm{d}y \mathrm{d}x$$

En utilisant la formule de Poisson pour la somme sur k', et une intégration Gaussienne, nous trouvons que $\partial_{\tau_1} \gamma(\tau) = 0$ est équivalent à

$$\sum_{k,\ell'>0} e^{-\pi\tau_2(k^2+\ell'^2)} k\ell' \sin\left(2\pi k\ell'\tau_1\right) = 0.$$
(8.45)

L'estimation de la décroissance des termes exponentiels donne que les points critiques qui sont dans $\{\mathcal{I}m \tau \geq 0.31\}$, (qui contient le domaine fondamental (8.20)-(8.21)), sont en fait dans $\{\tau_1 \in \{-1/2, 0\}\}$. Puis nous trouvons

$$\frac{d}{dt}\log(\gamma(it))\Big|_{t=\tau_2} = \frac{1}{2\tau_2\Theta_3(0,i\tau_2)} (1+2\sum_{k\geq 1}e^{-\pi\tau_2k^2}(1-4\pi\tau_2k^2)) , \qquad (8.46)$$

qui est une conséquence de $\gamma(it) = \Theta_3(0, it)\Theta_3(0, \frac{i}{t})$ et $\Theta_3(0, \frac{i}{t}) = \sqrt{t}\Theta_3(0, it)$ pour $\Theta_3(0, it) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-\pi t n^2}$. La monotonie de $e^{-x}(1 - 4x)$ sur $[5/4, +\infty)$ implique que la dérivée (8.46) croît sur $\tau_2 \ge 1$. Sur l'arc de cercle $\mathcal{AC}_0 = \{|\tau| = 1, -\frac{1}{2} \le \tau_1 \le \frac{1}{2}\}$, les symétries de $\gamma(\tau)$ impliquent que la dérivée radiale est nulle. Donc la dérivée (8.46) est positive sur la demi-droite $\{\mathbb{R}e \tau = 0\} \cap \{\tau_2 > 1\}$. Le long de l'arc de cercle \mathcal{AC}_0 , la fonction γ est monotone entre $\tau = j$ et $\tau = i$. Le point $\tau = i$ est donc un point selle.

En appliquant la transformation $z \to \frac{-1}{z+1}$, la demi-droite $\{\tau_1 = -1/2, \tau_2 \ge 1/2\}$ est envoyée sur l'arc de cercle \mathcal{AC}_1 passant par les points $-1 + i, j = \frac{1}{2}(-1 + \sqrt{3}i)$ et 0 centré en -1 de rayon 1. Sur $\{\tau \in \mathcal{AC}_1, \tau_2 \ge 0.31\}$ comme $\mathbb{R}e \partial_\tau \gamma(\tau)$ s'annule seulement sur $\tau_1 = -1/2$, cela implique qu'il n'y a pas d'autre point critique que j dans $\{\tau_1 = -1/2, 1/2 \le \tau_2 \le 1.65\}$. La borne inférieure $\gamma(\tau) \ge 1 + 2e^{-\frac{\pi}{\tau_2}}$ implique que j est l'unique minimum dans $\{-1/2 \le \tau_1 < 1/2, |\tau| \ge 1\}$.

Ces calculs sur la fonction theta remontent à Abrikosov [Abr]. En fait historiquement, Abrikosov avait prédit un réseau carré [SJST]. Le fait que le minimum de $\gamma(\tau)$ est atteint par le réseau hexagonal a été vérifié numériquement par [KRA] aprés une réduction du problème à la ligne $\tau_R = -1/2, \tau_I \in]0, 1[$ qui est équivalent à notre réduction sur l'arc de cercle.

Le problème que nous avons présenté a également des liens avec des questions de quantification géométrique du tore qui apparaissent dans l'étude du chaos quantique [NoVo]. En fait notre expression $\gamma(\tau)$ est le carré de la norme d'une fonction de Hussimi sur le tore étudiée par [NoVo] et le fait que le réseau hexagonal est optimal est prouvé dans [NoVo], appendice A.

Bibliographie

- [Abr] A. Abrikosov, Nobel lecture : Type-II superconductors and the vortex lattice, Rev. Mod. Phys. 76, 975 - 979 (2004).
- [Aft] A. Aftalion, Vortices in Bose-Einstein condensates, Birkhauser, 2006.
- [All] G. Allaire, cours d'analyse numérique et optimisation, école Polytechnique.
- [BasDal] J.-L. Basdevant et J. Dalibard, Cours de mécanique quantique, école Polytechnique. .
- [BBH] F. Bethuel, H. Brezis, F. Helein, Ginzburg-Landau vortices, Birkhauser 1994.
- [BLP] A. Bensoussan, J.L. Lions, and G. Papanicolaou, Asymptotic Analysis in Periodic Structures, North-Holland Amsterdam (1978); E. Sánchez-Palencia, Non-Homogeneous Media and Vibration Theory, Lecture Notes in Phys. 127, Springer-Verlag, Berlin.
- [Bre] H. Brezis, Analyse fonctionnelle, Masson.
- [Boa] R.P. Boas Jr, *Entire Functions*, Academic Press, New York, (1954).
- [Bog] N. Bogolubov, On the theory of superfluidity, Journal of Physics 11, 23 (1947).
- [Cas] Y. Castin, Bose Einstein condensates in atomic gases : simple theoretical results, in *Coherent atomic matter waves*, Lectures notes of Les Houches summer school, edited by R. Kaiser, C. Westbrook and F. David, EDP Sciences and Springer-Verlag (2001).
- [Cha] K. Chandrasekharan, *Elliptic Functions*, Grundlehren der mathematischen Wissenschaften 281, Springer, (1985).
- [Cia] P.G.Ciarlet, Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation, Dunod.
- [CT] C.Cohen-Tannoudji, cours au collège de France, 1998, http://www.phys.ens.fr/cours/college-de-france/1998-99/8-12-98/8-12-98.pdf
- [CTABD] C. Cohen-Tannoudji, A. Aspect, E. Brunet, J. Dalibard, Einstein aujourd'hui, EDP sciences, CNRS editions.
- [DGPS] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, et S. Stringari, Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases, Rev. Mod. Phys. 71, 463 (1999).
- [Geo] A. Georges, M. Mézard, cours de physique statistique, école Polytechnique.
- [Hak] V. Hakim, Asymptotic techniques in nonlinear problems, in *Hydrodynamics and nonlinear instabilities*, edited by C. Godrèche and P. Manneville, Coll. Aléa Saclay.
- [HeHe] R.M.Hervé, M.Hervé, Etude qualitative des solutions réelles d'une équation différentielle liée à l'équation de Ginzburg-Landau, Annales de l'institut Henri Poincaré (C) Analyse non linéaire, 11 no. 4 (1994), p. 427-440.

- [Hue] P. Huerre, cours de Mécanique des Fluides, école Polytechnique.
- [Kav] O. Kavian, Introduction à la théorie des Points Critiques et applications aux problèmes elliptiques, Springer-Verlag 1993.
- [KSFT] L. Khaykovich, F. Schreck, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, L. D. Carr, Y. Castin, C. Salomon, Formation of a Matter-Wave Bright Soliton, Science 296, (2002), 1290.
- [Kha] I.M. Khalatnikov, Introduction to the theory of superfluidity, Perseus publishing (1989).
- [KRA] W.H. Kleiner, L.M. Roth and S.H Autler. Bulk Solutions of Ginzburg-Landau Equations for type II Superconductors : Upper Critical Field Region. Phys. Rev. 133(5A) (1964), pp 1226–1227.
- [LeTa] P. Le Tallec, cours de Mécanique des milieux continus, école Polytechnique.
- [Lie] E.H. Lieb et R Seiringer, Phys. Rev. Lett. 88, 170409 (2002) : Proof of Bose-Einstein Condensation for Dilute Trapped Gases.
- [LSSY] E. H. Lieb, R. Seiringer, J. P. Solovej, J. Yngvason, The Mathematics of the Bose Gas and its Condensation (Oberwolfach Seminars), Birkhauser, Basel 2005.
- [MaSu] N.Manton, P.Sutcliffe, Topological solitons, Cambridge University Press, 2004.
- [NoVo] S. Nonnenmacher, A. Voros, Chaotic Eigenfunctions in Phase Space, J. Stat. Phys. 92, 431-518 (1998).
- [PiSt] Lev. P. Pitaevskii , S. Stringari, Bose Einstein condensation, Oxford University Press, 2004.
- [PeSm] C. J. Pethick, H. Smith, Bose Einstein condensation in dilute gases, Cambridge University Press, 2004.
- [DauPey] M. Peyrard et T. Dauxois, Physique des Solitons, Collections "Savoirs Actuels, EDP Sciences-CNRS Editions (2004).
- [Pis] L.M. Pismen, Vortices in nonlinear fields, Oxford Science Publications, 1999.
- [ST] E.B. Saff, V. Totik, Logarithmic Potentials with External Fields, Grundlehren der matematischen Wissenschanfen, vol. 316, Springer, Berlin, 1997.
- [SJST] D. Saint-James, G. Sarma et E.J. Thomas : Type II Superconductivity : International Series of Monograph in Natural Philosophy, Vol. 17 Pergamon Press, 1969.
- [SK] N. Shigesada et K. Kawasaki, Biological Invasions, Theory and Practice, Oxford Series in Ecology and Evolution, OUP, 1997.
- [Smo] J. Smoller, Shock Waves and Reaction-diffusion equations, vol. 258, Springer-Verlag, 1983.
- [Sulem] C. Sulem and P.-L. Sulem, The Nonlinear Schrödinger Equation : Self-focusing and Wave Collapse, Appl. Math. Sciences, Volume 139, 1999, Springer.