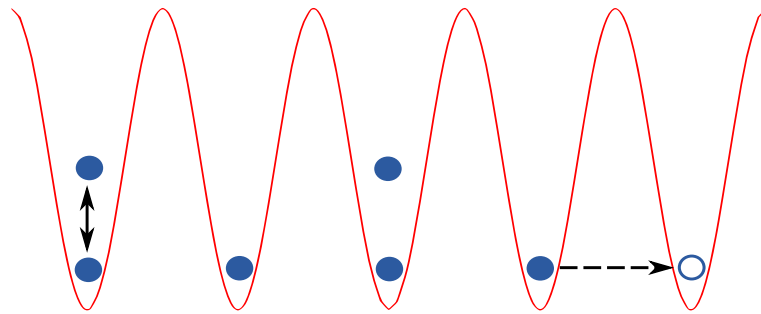

ADIABATICITÉ DANS LES GAZ D'ATOMES FROIDS

Etienne Thibierge

Stage réalisé
du 4 avril au 29 juillet 2011
au Laboratoire de Physique de l'ENS Lyon
sous la direction de Tommaso Roscilde



Résumé

Ce travail s'intéresse à la physique des gaz de bosons ultra-froids piégés dans des réseaux optiques, et en particulier à l'extension du concept d'adiabaticité à la mécanique quantique. Nous y étudions numériquement le modèle de Bose-Hubbard par la théorie de champ moyen de Gutzwiller, et en particulier sa dynamique. Nous montrons l'existence de quantités conservées au cours d'évolutions quelconques, et cherchons à y décrire une augmentation d'entropie, avant de comparer l'état évolué à un état d'équilibre thermique. Enfin, les résultats de nos calculs sont comparés à des résultats expérimentaux publiés récemment.

Remerciements

D'abord et avant tout, je remercie Tommaso Roscilde de m'avoir fait confiance en me proposant ce sujet, puis de m'avoir consacré du temps, de longues discussions et de multiples explications.

Merci au groupe de théorie de la matière condensée du Laboratoire de Physique de l'ENS pour leur bon accueil, en particulier Pascal Degiovanni.

Merci également à Louis-Paul, Charles et Quentin pour la bonne ambiance de notre bureau.

Enfin, je remercie Mickaël, Xavier, Antoine, Loren, David et Jérémie pour leurs mails, leurs conseils d'experts en Matlab et en L^AT_EX, et même leur relecture du présent rapport.

Table des matières

1	Introduction	4
2	Modèle et méthode d'étude	5
2.1	Modèle de Bose–Hubbard	5
2.2	Théorie de champ moyen de Gutzwiller	6
2.3	Diagramme de phase à température nulle	8
3	Dynamique	9
3.1	Principe et objectifs de l'étude dynamique	9
3.2	Quantités conservées	10
3.3	Premiers résultats	11
3.4	Comment décrire une augmentation d'entropie?	12
4	Comparaison à un équilibre thermique	14
4.1	Intérêt et contraintes	14
4.2	Grandeurs d'équilibre	14
4.3	Fidélité	16
5	Comparaison à des résultats expérimentaux	18
5.1	Présentation de l'expérience	18
5.2	Calcul des couplages	19
5.3	Propriétés d'équilibre	22
5.4	Propriétés d'évolution temporelle	22
6	Conclusion	23
	Annexe A : Conservation du nombre moyen d'atomes d'un état pur	24
	Annexe B : Transformation d'Holstein–Primakoff	25

1 Introduction

Contexte général

Les atomes froids piégés dans un réseau optique sont apparus ces dernières années comme le système quantique avec le plus haut degré de contrôle sur tous les aspects du problème à N corps [1]. Il est en effet possible de changer à loisir les propriétés microscopiques du système (c'est à dire le hamiltonien!) : on peut choisir la statistique des particules (bosonique ou fermionique), leur masse effective, la force et la nature (attractive ou répulsive) des interactions, la géométrie du réseau etc. Grâce à ces propriétés remarquables, les atomes froids permettent d'explorer des régimes complètement inconnus de la matière condensée traditionnelle, et de les caractériser avec des observables inaccessibles jusqu'à présent.

En particulier, ils permettent la réalisation expérimentale de modèles sur réseau fortement corrélés, comme le paradigme du modèle de Hubbard, qui décrit des particules passant d'un site à l'autre par effet tunnel et interagissant deux à deux lorsqu'elles se trouvent sur le même site. Les atomes froids permettent non seulement l'étude des propriétés d'équilibre de ces systèmes, mais aussi celle des phénomènes dépendant du temps grâce au très bon contrôle en temps réel des paramètres du hamiltonien. De plus, les systèmes d'atomes froids peuvent être considérés comme *fermés* sur de longues échelles de temps, i.e. ils ne sont pas couplés à un bain thermique qui conduirait à de la dissipation, de la décohérence et de la relaxation. Cela ouvre la possibilité de manipuler de façon *cohérente* des systèmes quantiques à N corps, et de réaliser des états hors-équilibre non conventionnels. Un des objectifs les plus ambitieux dans la physique des atomes froids est alors la réalisation d'un *simulateur quantique* pour des modèles fondamentaux en matière condensée.

Le revers de la médaille est qu'en l'absence de couplage à un bain extérieur certains paramètres du système sont difficiles à contrôler et à mesurer. En particulier, la température n'est pas fixée et seule l'entropie peut être maintenue constante. Mais pour que les prédictions d'un tel simulateur quantique puissent aider à la compréhension des phénomènes en matière condensée, il est nécessaire de pouvoir décrire le comportement desdits modèles en fonction de la température et non de l'entropie. La question du lien entre la température, l'entropie, et les caractéristiques des évolutions imposées au système, ou en un mot leur *adiabaticité*, se pose alors de façon évidente.

Présentation du projet

Dans ce projet proposé par Tommaso Roscilde, nous nous intéresserons aux effets hors-équilibre et à l'adiabaticité du processus de mise en place d'un réseau optique dans un condensat de Bose–Einstein, décrit par un modèle de Bose–Hubbard à une bande dont les couplages évoluent au cours du temps.

La plupart des études théoriques existantes s'intéressent à l'évolution d'un système partant de l'état fondamental d'un certain hamiltonien, et qui reste ainsi dans un état pur pour le reste de l'évolution. Ici, nous allons plutôt chercher à calculer l'évolution d'un état mélange, i.e. le système part d'un état d'équilibre thermique, caractérisé par une matrice densité qui évolue ensuite selon un hamiltonien dépendant du temps. Nous allons utiliser une approximation de champ moyen, dite de Gutzwiller, qui traite de façon exacte la physique sur chaque site, mais néglige l'intrication entre sites. Cette approche a été utilisée avec succès pour décrire l'évolution d'états purs [2, 3] ou d'états mélange [4].

L'ensemble du travail sera quasi-exclusivement numérique, et aura conduit au développement de plusieurs codes écrits sous Matlab.

Organisation du rapport

Dans la partie 2, nous montrerons comment le hamiltonien de Bose–Hubbard peut être utilisé pour décrire la physique d'un gaz quantique de bosons froids, avant de présenter la théorie de champ moyen de Gutzwiller que nous utiliserons tout au long de ce travail. Nous obtiendrons le diagramme de phase à température nulle du modèle, permettant de comparer la théorie de champ moyen à des résultats exacts.

La partie 3 présentera les enjeux et les premiers résultats de l'étude de la dynamique du modèle de Bose–Hubbard en champ moyen. En particulier, nous établirons qu'il existe des quantités conservées.

Nous poursuivrons partie 4 en comparant l'état obtenu au terme de l'évolution à un état d'équilibre thermique effectif. Nous commencerons par expliciter les contraintes que cet état d'équilibre doit vérifier, et détaillerons le calcul de la température et du potentiel chimique effectifs du système. Nous introduirons par la suite la fidélité, en tant qu'outil puissant de comparaison entre l'état évolué et l'état d'équilibre.

Pour finir, dans la partie 5 nous comparerons les résultats obtenus numériquement aux résultats expérimentaux obtenus récemment par le groupe de Markus Greiner [5], et discuterons les similitudes et différences avec nos résultats numériques.

2 Modèle et méthode d'étude

2.1 Modèle de Bose–Hubbard

Le but de cette première section est d'expliquer pourquoi un gaz d'atomes bosoniques ultra-froids placé dans un champ laser peut être décrit par le hamiltonien sur réseau qu'est le hamiltonien de Bose–Hubbard.

2.1.1 Hamiltonien à N corps

Par effet Stark AC, des atomes placés dans un champ électrique dépendant du temps et désaccordé par rapport aux transitions internes ressentent un potentiel effectif proportionnel à l'intensité du champ. En utilisant les champs électriques créés par des lasers, on peut alors créer de multiples formes de potentiel $V(\mathbf{r})$ [6]. En particulier en plaçant deux lasers contre-propageants dans chacune des trois directions de l'espace, on peut engendrer un potentiel périodique de la forme suivante :

$$V(\mathbf{r}) = V_0^x \cos^2(k_x x) + V_0^y \cos^2(k_y y) + V_0^z \cos^2(k_z z) \quad (2.1)$$

On suppose de plus que les interactions entre atomes sont des interactions à deux corps, de contact, décrites par la longueur de diffusion en onde s dans la première approximation de Born, a_s . Le potentiel d'interaction s'écrit alors :

$$U_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_s \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.2)$$

Ici m est la masse des atomes et δ la distribution de Dirac.

Le point de départ du calcul est alors le hamiltonien à N corps pour des bosons interagissants par contact. En notant $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ l'opérateur de champ bosonique au point \mathbf{r} , il s'écrit :

$$\hat{\mathcal{H}} = \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

2.1.2 Dérivation du hamiltonien de Bose–Hubbard

Le potentiel $V(\mathbf{r})$ défini Eq. (2.1) étant périodique, on peut l'étudier avec les outils de la physique des solides traditionnelle. En particulier on peut exprimer ses états propres sous forme de fonctions de Bloch, puis par transformée de Fourier calculer ses fonctions de Wannier $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ [7]. Les fonctions de Wannier sont des fonctions localisées sur les sites i du réseau, et elles définissent une base de orthonormée des états de la bande d'énergie considérée. Nous détaillerons ceci plus en avant, Sec. 5.2, lorsque nous aurons à les calculer explicitement.

On utilise alors les fonctions de Wannier pour décomposer les opérateurs de champ sur une base d'opérateurs localisés. En notant \hat{a}_i l'opérateur d'annihilation bosonique au site i du réseau, on a :

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_i w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \hat{a}_i \quad (2.4)$$

Utilisant ce développement, le hamiltonien (2.3) devient :

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{i,j} J_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} U_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l \quad (2.5)$$

avec :

$$J_{ij} = - \int d^3\mathbf{r} w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (2.6)$$

$$U_{ijkl} = g \int d^3\mathbf{r} w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) \quad (2.7)$$

Le terme J_{ij} est un terme d'énergie cinétique, associé au passage par effet tunnel d'un atome du site i au site j . U_{ijkl} est lui un terme de répulsion entre les atomes localisés sur différents sites. La localisation exponentielle des fonctions de Wannier garantit que, pour des réseaux suffisamment profonds, on peut se restreindre à considérer l'effet tunnel entre sites plus proches voisins, et la répulsion entre atomes situés sur un même site.

En prenant le terme de couplage cinétique entre plus proches voisins J réel, ce qui est le cas en choisissant les fonctions de Wannier réelles, on obtient finalement le hamiltonien sur réseau de Bose–Hubbard (BH), schématisé Fig. 1 :

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (2.8)$$

Comme le hamiltonien (2.8) conserve de façon exacte le nombre d'atomes, les ensembles canonique et grand-canonique sont équivalents à température nulle. C'est également le cas à température non nulle dans la limite thermodynamique. Pour pouvoir se placer dans l'ensemble grand-canonique, on introduit un terme de potentiel chimique. Il nous servira tout au long de ce travail comme paramètre pour fixer le nombre moyen d'atomes par site à 1.

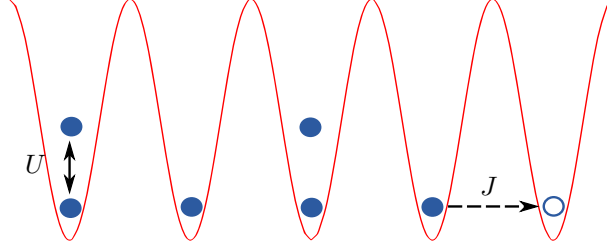


Fig. 1 – Représentation schématique du hamiltonien de Bose–Hubbard. Les atomes peuvent passer d'un site à l'autre par effet tunnel en gagnant une énergie J , mais deux atomes sur un même site se repoussent avec une énergie U .

Le hamiltonien (2.8) est un hamiltonien modèle pour décrire des systèmes de bosons sur réseau. Il a l'avantage d'être un modèle sur réseau, à un seul paramètre (seul le ratio J/U est pertinent), et réalisable expérimentalement. En outre il présente une transition de phase quantique, i.e. à température nulle, entre une phase isolante de Mott (MI) aux petits J/U et une phase superfluide (SF) aux grands J/U , comme nous le verrons Sec. 2.3.

2.2 Théorie de champ moyen de Gutzwiller

Avant de s'intéresser au diagramme de phase du modèle BH, présentons la méthode utilisée pour l'établir, à savoir la théorie de champ moyen de Gutzwiller (GMFT). Comme toutes les théories de champ moyen, elle présente un certain nombre d'inconvénients (peu quantitative, mauvais exposants critiques, ...) mais elle a l'avantage considérable d'être capable de prendre en compte *simultanément* des effets thermiques et de dépendance temporelle dans un système de dimension d quelconque.

Cette méthode a déjà été appliquée à l'étude de la transition SF–MI dans un piège parabolique [2], à celle des mélanges de bosons [4], ou bien encore à l'étude des quenches dans le modèle BH [8, 9].

2.2.1 Hamiltonien de champ moyen

Une présentation détaillée de la théorie de champ moyen est donnée en [10], nous en rappelons seulement ici les idées clés. L'idée de base est de traiter les couplages tunnels entre site de façon approximée. Pour un site j quelconque, on pose :

$$\hat{a}_j = \phi_j + \delta\hat{a}_j \quad (2.9)$$

où $\delta\hat{a}_j$ est une petite perturbation à $\phi_j = \langle \hat{a}_j \rangle$.

Dans le cadre de la théorie de Bogoliubov de la condensation de Bose–Einstein ϕ_j est un nombre complexe tel que $|\phi_j|^2$ représente la fraction condensée au site j . En effet, la fraction condensée est définie comme la valeur moyenne de la fraction d'atomes dans l'état d'impulsion nulle $\langle n_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \rangle / N$, qui est d'ordre 1 s'il y a condensation. Dans ce cas, les éléments non-diagonaux de la matrice densité à un corps prennent une valeur finie lorsque la distance à la diagonale diverge :

$$\langle a_i^\dagger a_j \rangle \xrightarrow{|i-j| \rightarrow \infty} \frac{\langle n_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \rangle}{N} \quad (2.10)$$

Sous l'hypothèse de la brisure de la conservation du nombre d'atomes, on peut découpler la valeur moyenne $\langle a_i^\dagger a_j \rangle \sim \langle a_i^\dagger \rangle \langle a_j \rangle = \phi_i^* \phi_j$, d'où l'interprétation de $|\phi|^2$ comme la fraction condensée.

Sous l'approximation (2.9), et en négligeant les termes d'ordre 2, i.e. de type $\delta\hat{a}_i^\dagger\delta\hat{a}_j$, le hamiltonien (2.8) s'écrit :

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}(\{\phi_j\}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\phi_j \hat{a}_i^\dagger + \phi_j^* \hat{a}_i) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (2.11)$$

2.2.2 Ansatz de Gutzwiller

Les états propres de ce hamiltonien s'écrivent alors sous la forme d'un produit tensoriel d'états dans lesquels les sites sont découplés, appelé *ansatz de Gutzwiller*. Ces états découplés peuvent eux-même s'écrire comme une combinaison linéaire d'états de Fock au site i :

$$|\Psi\rangle = \bigotimes_i |\psi^{(i)}\rangle = \bigotimes_i \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(i)} |n^{(i)}\rangle \quad (2.12)$$

Dans la suite de ce travail, pour des raisons évidentes d'implémentation numérique, on tronque la somme d'états de Fock à une occupation maximale $n_{\text{max}} = \langle n \rangle + 3$. Cela revient à supposer $c_{n > n_{\text{max}}}^{(i)} = 0$. Ceci n'altère pas la qualité des résultats, puisque l'on travaille à un nombre moyen d'atomes par site faible et bien contrôlé : les fortes interactions $U \gg J$ garantissent qu'il fluctue peu autour de sa valeur moyenne. Le choix de n_{max} a bien sûr été validé *a posteriori*.

On veut alors minimiser l'énergie du système $E = \langle \Psi | \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} | \Psi \rangle$, qui selon l'ansatz (2.12) est une fonctionnelle de l'ensemble des coefficients $c_n^{(i)}$:

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\phi_j \langle \psi^{(i)} | \hat{a}_i^\dagger | \psi^{(i)} \rangle + \phi_j^* \langle \psi^{(i)} | \hat{a}_i | \psi^{(i)} \rangle \right) + \frac{U}{2} \sum_i \langle \psi^{(i)} | \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) | \psi^{(i)} \rangle - \mu \sum_i \langle \psi^{(i)} | \hat{n}_i | \psi^{(i)} \rangle \quad (2.13)$$

La procédure de minimisation choisie consiste à minimiser seulement par rapport aux coefficients $c_n^{(i)}$ du site i en maintenant constants les coefficients de tous les autres sites $c_n^{(j \neq i)}$, puis de procéder itérativement pour tous les sites. On doit donc minimiser la fonction :

$$E^{(i)} = \langle \psi^{(i)} | -J \sum_{j \text{ ppv } i} (\hat{a}_i^\dagger \phi_j + \phi_j^* \hat{a}_i) + \frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \hat{n}_i | \psi^{(i)} \rangle \quad (2.14)$$

On remarque alors que la minimisation revient à trouver l'état fondamental d'un hamiltonien effectif :

$$\hat{\mathcal{H}}^{(i)}(\{\phi_j \text{ ppv } i\}) = -J \sum_{j \text{ ppv } i} (\hat{a}_i^\dagger \phi_j + \phi_j^* \hat{a}_i) + \frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \hat{n}_i \quad (2.15)$$

2.2.3 Calcul auto-cohérent de la fraction condensée

Supposons désormais le système invariant par translation : tous les sites sont équivalents. Une conséquence immédiate est que ϕ ne dépend plus du site, et en particulier $\sum_{j \text{ ppv } i} \phi_j = z\phi$, où z est le *nombre de coordination* du réseau, c'est-à-dire le nombre de plus proches voisins d'un site quelconque. Le hamiltonien (2.15) devient donc un hamiltonien *auto-cohérent* en ϕ et indépendant du site :

$$\hat{\mathcal{H}}(\phi) = -Jz(\phi\hat{a}^\dagger + \phi^*\hat{a}) + \frac{U}{2}\hat{n}(\hat{n}-1) - \mu\hat{n} \quad (2.16)$$

Remarquons que la géométrie du réseau n'a plus d'importance, seul compte son nombre de coordination. En particulier pour des réseaux hypercubiques de dimension d'espace d quelconque on a $z = 2d$, et le diagramme de phase en champ moyen ne dépendra pas de la dimension d'espace du réseau à condition d'utiliser comme paramètre adimensionné Jz/U au lieu de J/U .

En pratique on procède de la façon suivante pour résoudre le hamiltonien (2.16) par auto-cohérence :

(1) Cas d'un état pur :

- (a) On construit la matrice $\hat{\mathcal{H}}(\phi)$ pour un ϕ quelconque.
- (b) On la diagonalise pour trouver son vecteur propre de plus basse énergie $|\psi_{\text{GS}}\rangle$
- (c) On calcule alors $\phi = \langle \hat{a} \rangle = \langle \psi_{\text{GS}} | \hat{a} | \psi_{\text{GS}} \rangle$.
- (d) On réitère ensuite le processus avec le nouveau ϕ jusqu'à convergence.

(2) Cas d'un état mélange :

- (a) On construit la matrice $\hat{\mathcal{H}}(\phi)$ pour un ϕ quelconque.
- (b) On construit la nouvelle matrice densité, dépendant de $\hat{\mathcal{H}}(\phi)$ soit par une opération d'évolution temporelle (Sec. 3), soit par un calcul thermique (Sec. 4).
- (c) On calcule alors $\phi = \langle \hat{a} \rangle = \text{Tr} [\hat{\rho}(\phi)\hat{a}]$.
- (d) On réitère ensuite le processus avec le nouveau ϕ jusqu'à convergence.

2.3 Diagramme de phase à température nulle

2.3.1 Description des phases en présence

Comme brièvement mentionné Sec. 2.1.2, le modèle de Bose–Hubbard exhibe à température nulle deux phases, séparées par une transition de phase quantique. La phase isolante de Mott se caractérise par une densité de bosons par site $\langle \hat{n} \rangle$ entière, une compressibilité nulle ($\partial \langle \hat{n} \rangle / \partial \mu = 0$) et surtout une absence de cohérence ($\phi = 0$) au niveau du champ moyen. C'est la phase favorisée pour de petites valeurs de Jz/U , i.e. quand la répulsion entre bosons l'emporte sur le tunneling. Réciproquement, la phase superfluide est elle caractérisée par une densité de bosons non-entière, une cohérence et une compressibilité finies. C'est la phase favorisée pour de grandes valeurs de Jz/U .

Le diagramme de phase à température nulle du modèle BH est représenté Fig. 2. Pour l'obtenir par GMFT, on résout itérativement les équations auto-cohérentes sur la fraction condensée ϕ comme nous venons de le décrire. Le qualificatif "température nulle" signifie que l'on cherche l'état du système comme l'état fondamental du hamiltonien de champ moyen. Pour comparaison, on a représenté le diagramme de phase obtenu par GMFT et la ligne de transition obtenue par des méthodes numériquement exactes.

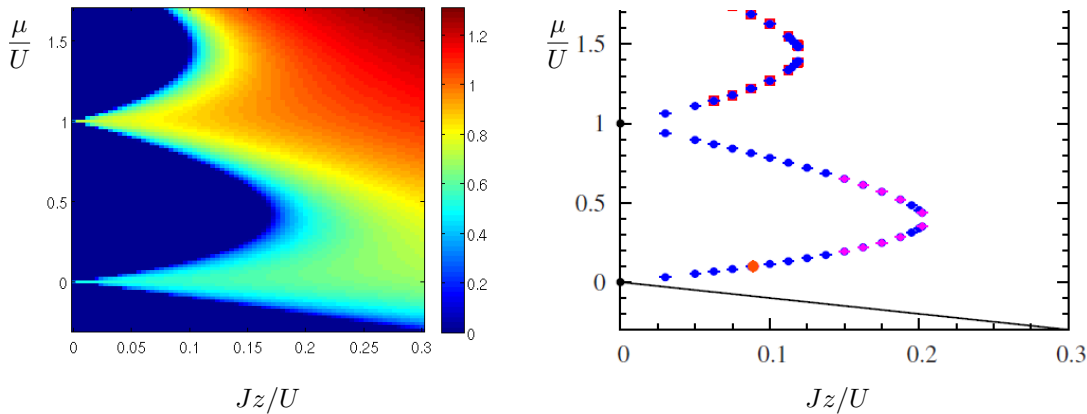


Fig. 2 – Diagramme de phase du modèle BH à température nulle. Gauche : colorplot de la fraction condensée $|\phi|^2$ en fonction des paramètres du modèle BH, obtenu par GMFT. Droite : résultat numériquement exact de la ligne de transition MI–SF en 3d, obtenu par Monte Carlo Quantique et analyse de taille finie, extrait de [11]. La phase isolante de Mott est caractérisée par $|\phi|^2 = 0$ alors que la phase superfluide est caractérisée par $|\phi|^2 \neq 0$.

Le diagramme de phase présente une structure en lobes caractéristique, chaque lobe étant associé à une densité de bosons (par exemple le lobe à $0 < \mu/U < 1$ a une densité de bosons égale à 1). Pour les valeurs entières de μ/U , la cohérence reste présente jusqu'à $Jz/U = 0$: on n'a alors pas de phase isolante de Mott.

2.3.2 Analyse des résultats champ moyen et raffinements

On remarque que la GMFT capture bien l'essentiel de la physique du modèle BH : la structure en lobes est respectée, et les valeurs critiques sont plus ou moins bien rendues. Comme attendu, les valeurs des paramètres critiques sont de mieux en mieux rendues au fur et à mesure que la dimensionnalité d'espace augmente : de façon très générale, la théorie de champ moyen devient exacte aux hautes dimensions, ou plus précisément aux dimensions supérieures à une dimension critique supérieure.

Une possibilité que nous avons envisagé pour améliorer la qualité des résultats est de considérer des groupements de c sites ("clusters") au lieu de sites uniques. Ainsi, l'intrication entre les c atomes à l'intérieur

du cluster est traitée de façon exacte, alors que l'intrication entre un atome à l'intérieur et un atome à l'extérieur du cluster est traitée selon l'hypothèse de champ moyen. La minimisation se fait alors sur des états de la forme :

$$|\Psi\rangle = \bigotimes_{\text{clusters}} \sum_{n_1, n_2, \dots, n_c} \alpha(n_1, n_2, \dots, n_c) |n_1, n_2, \dots, n_c\rangle \quad (2.17)$$

Nous avons considéré des clusters à un, deux, quatre sites, le cas à quatre sites ayant été étudié à la fois dans une géométrie linéaire ou en carré. Comme attendu, les valeurs des paramètres critiques s'améliorent légèrement au fur et à mesure que la taille du cluster augmente. Cependant, on reste dans le cadre d'une théorie de champ moyen et toutes les courbes présentent la même allure en racine carrée, associée à un exposant critique $\beta = 1/2$ typique de la classe d'universalité champ moyen.

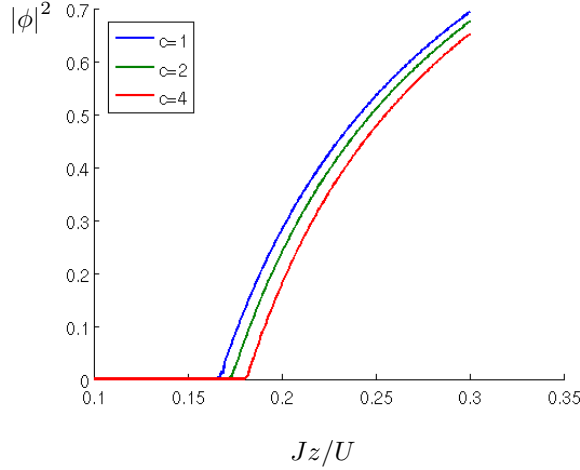


Fig. 3 – Lignes iso-potentiel chimique pour différentes tailles de clusters. Fraction condensée $|\phi|^2$ suivie le long de la ligne $\mu/U = 0.5$, pour des clusters de c atomes. La transition est attendue à $Jz/U \sim 0.19$

3 Dynamique

3.1 Principe et objectifs de l'étude dynamique

3.1.1 Évolutions considérées

Maintenant que les propriétés stationnaires du modèle BH ont été explorées, intéressons nous à ses propriétés dynamiques. Supposons qu'à $t = 0$ les paramètres du hamiltonien (2.16) soient U_0 , J_0 et μ_0 . L'état de départ du système est donné par une matrice densité $\hat{\rho}_0$ (éventuellement réduite à un état pur), associée à une fraction condensée $\phi_0 = \text{Tr}[\hat{\rho}_0 \hat{a}]$.

On modifie alors certains de ces paramètres au cours du temps. Alors l'évolution du système est gouvernée par un hamiltonien dépendant explicitement du temps. Cependant, la situation se complique encore par le fait que le hamiltonien (2.16) est auto-cohérent : il y intervient la fraction condensée $\phi = \phi(t)$. Celle-ci est déterminée à chaque instant avec la matrice diagonale évoluée ($\phi(t) = \text{Tr}[\hat{\rho}(t) \hat{a}]$), calculée en représentation d'Heisenberg :

$$\hat{\rho}(t) = \mathcal{T} \exp \left(-i \int_0^t \hat{\mathcal{H}}(t', \phi(t')) dt' \right) \hat{\rho}_0 \tilde{\mathcal{T}} \exp \left(+i \int_0^t \hat{\mathcal{H}}(t', \phi(t')) dt' \right) \quad (3.1)$$

Ici, \mathcal{T} désigne l'ordonnement temporel et $\tilde{\mathcal{T}}$ l'anti-ordonnement temporel.

Dans notre résolution numérique des équations, le temps est discrétisé avec un pas Δt choisi (empiriquement) tel que sa réduction n'affecte plus les résultats. Les exponentielles ordonnées sont développées en produits d'exponentielles, se limitant ainsi aux termes d'ordre le plus bas dans la formule de Baker–Campbell–Haußdorf. En pratique, on calcule donc $\hat{\rho}(t)$ sous la forme d'un produit de matrices itéré :

$$\hat{\rho}(n\Delta t) = \left\{ \exp \left(-i \hat{\mathcal{H}}(n\Delta t, \phi((n-1)\Delta t)) \Delta t \right) \right\} \hat{\rho}((n-1)\Delta t) \left\{ \exp \left(+i \hat{\mathcal{H}}(n\Delta t, \phi((n-1)\Delta t)) \Delta t \right) \right\} \quad (3.2)$$

où $\hat{\rho}((n-1)\Delta t)$ s'écrit de la même façon en termes de $\hat{\rho}((n-2)\Delta t)$, etc.

3.1.2 Questions d'intérêt

Quelques questions d'intérêt expérimental évident qui se posent alors sont les suivantes :

- * L'état obtenu après l'évolution est-il stationnaire ?
- * Si on part d'un état d'équilibre thermique, aboutit-on à un état d'équilibre thermique ?
- * Si oui, la température diminue-t-elle ou augmente-t-elle entre les états initiaux et finaux ?
- * Existe-il des quantités conservées au cours de l'évolution ?
- * Apparaît-il des spécificités si l'évolution nous fait traverser la transition de phase ?
- * Comment définir et caractériser l'adiabaticité de l'évolution dans ce cadre ?

Dans la suite de ce travail, nous allons chercher à répondre à ces questions.

3.2 Quantités conservées

3.2.1 Nombre moyen d'atomes par site

Une première quantité conservée est le nombre moyen d'atomes par site $\bar{n} = \langle \hat{n} \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{n}]$

Une preuve analytique est relativement simple à dériver dans le cas d'un état pur, et est donnée en Annexe A, p. 24. Cela est plus fastidieux dans le cas d'un état mélange. Remarquons que ceci est un signe positif pour la validité des résultats de l'approximation de champ moyen : le nombre total d'atomes est une quantité exactement conservée par le hamiltonien BH complet.

3.2.2 Entropie de von Neumann

L'entropie de von Neumann est l'extension de l'entropie statistique classique au cas de la physique statistique quantique. Un mélange statistique d'états quantiques est décrit par une matrice densité $\hat{\rho}$. L'entropie de von Neumann associée à cette matrice densité est alors :

$$S_{\text{vN}} = -k_{\text{B}} \text{Tr}[\hat{\rho} \log \hat{\rho}] \quad (3.3)$$

On peut comprendre l'origine de cette définition en se plaçant dans la base où la matrice densité est diagonale :

$$\hat{\rho} = \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \quad (3.4)$$

Les p_j sont alors les *poids statistiques* des états $|\psi_j\rangle$, et leur somme est normalisée à 1, ce que l'on connaît généralement sous la forme $\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$. Avec les p_j définis de la sorte, l'entropie de von Neumann s'écrit alors :

$$S_{\text{vN}} = -k_{\text{B}} \sum_j p_j \log p_j \quad (3.5)$$

Cette écriture fait clairement écho à la définition de l'entropie statistique classique.

Montrons maintenant que l'entropie de von Neumann est conservée. Pour ce faire, on repart de l'écriture diagonale (3.4), et on fait évoluer le système par l'action d'un opérateur d'évolution unitaire $\hat{U}(t)$. Alors on a :

$$\hat{\rho}(t > 0) = \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}(t)^\dagger \quad (3.6)$$

$$= \sum_j p_j \hat{U}(t) |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \hat{U}(t)^\dagger \quad (3.7)$$

$$= \sum_j p_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \quad (3.8)$$

L'écriture de $\hat{\rho}(t > 0)$ reste alors naturellement diagonale, et on voit que les poids statistiques p_j ne dépendent pas du temps. En conséquence de (3.5), l'entropie de von Neumann est conservée au cours de l'évolution.

Notons que cette propriété est très générale, et n'est pas du tout une conséquence de l'approximation de champ moyen. En effet, l'évolution est prise en compte sous la forme d'un opérateur sur lequel la seule hypothèse faite est l'unitarité. Une conséquence de cette conservation donnée par Landau [12] et reprise par Polkovnikov [13] est que l'entropie de von Neumann permet bien de caractériser des systèmes à l'équilibre thermodynamique, mais pas l'adiabaticité d'évolutions hors-équilibre comme celles auxquelles nous nous intéressons dans ce travail.

3.3 Premiers résultats

3.3.1 Rampe considérée

Pour tous les calculs présentés ensuite, on considère une rampe linéaire en J , à U et μ fixés. On choisit U comme unité d'énergie, en conséquence de quoi l'unité de temps est \hbar/U et l'unité de température U/k_B . On choisit la valeur initiale J_{init} telle que l'état fondamental soit superfluide, et la valeur finale J_{fin} telle que l'état fondamental y soit isolant de Mott. La rampe a lieu sur un temps T_r , suite auquel on laisse le système évoluer librement pendant un temps T_m , comme représenté Fig. 4.

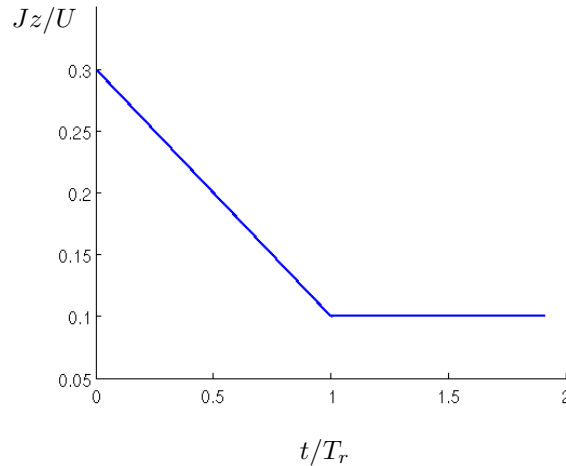


Fig. 4 – Rampe linéaire étudiée. Dans toute la suite, les évolutions se feront selon une rampe linéaire allant de $(Jz/U)_{\text{init}} = 0.3$ à $(Jz/U)_{\text{fin}} = 0.1$ en un temps T_r , suivie d'une évolution à $Jz/U = 0.1$ constant pendant un temps T_m .

Des évolutions de la fraction condensée pour différentes valeurs de T_r sont représentées Fig. 5.

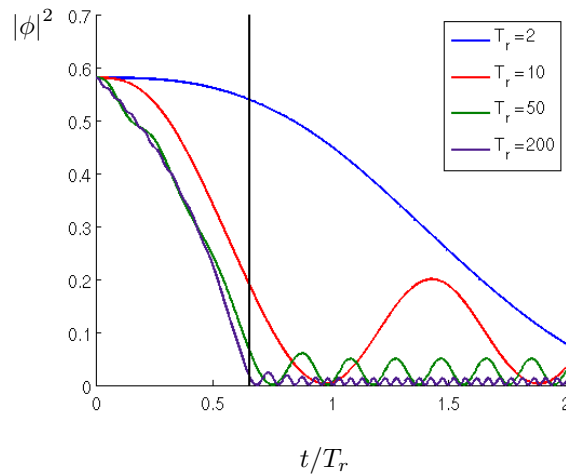


Fig. 5 – Fraction condensée pour différentes évolutions temporelles. Suivi de $|\phi|^2$ au cours de la rampe décrite Fig. 4 où l'on impose $T_m = T_r$, pour différentes valeurs du temps de rampe T_r . Le trait vertical noir est tracé à l'instant où la valeur de $J(t)$ atteint la valeur critique J_c pour la transition SF–MI d'équilibre. Ces évolutions sont faites à température $T_0 = 0.01$. On remarque la présence d'oscillations persistantes, même lorsque J n'évolue plus.

3.3.2 Oscillations permanentes et moyennage

On remarque la présence d'oscillations permanentes même lorsque J atteint sa valeur finale et n'évolue plus, d'amplitude plus forte pour les temps de rampe les plus courts. De telles oscillations sont observées sur toutes les quantités étudiées, et sont un défaut lié à l'approximation de champ moyen. L'apparition de ces oscillations est mentionnée dans divers articles [4, 14], et peut se comprendre analytiquement par le biais d'une transformation d'Holstein–Primakoff, qui relie les opérateurs bosoniques à des opérateurs de spin. Comme expliqué en Annexe B, p. 25, il apparaît alors un champ magnétique auto-cohérent, autour duquel le spin précesse, expliquant les oscillations.

Il est alors clair que la valeur instantanée de la matrice densité à la fin de l'évolution $\hat{\rho}(T_r)$ ne peut donner à elle seule des résultats complets et cohérents. On observe en fait que l'état d'équilibre est plutôt décrit par l'ensemble des micro-états visités pendant une période d'oscillation, c'est à dire par la moyenne de la matrice densité sur une telle période. Nous choisirons donc dans la suite le temps d'évolution libre T_m comme étant une période d'oscillation libre, et nous moyennons la matrice densité sur ce temps :

$$\hat{\rho}_m = \frac{1}{T_m} \int_{T_r}^{T_r+T_m} \hat{\rho}(t) dt \quad (3.9)$$

Néanmoins, cette méthode reste encore incomplète pour comparer les quantités d'évolution à des quantités d'équilibre, en particulier calculées à partir d'une matrice densité d'équilibre thermique comme nous le ferons Sec. 4. En effet, les éléments non-diagonaux de la matrice densité moyennée accumulent une phase non nulle, liée au processus d'évolution temporelle, mais non pertinente pour décrire la physique du système. Elle introduit malgré tout une différence artificielle entre les deux matrices densité. Les valeurs des observables physiques sont donc calculées en négligeant la phase des éléments de $\hat{\rho}_m$, c'est à dire avec la matrice des modules notée $|\hat{\rho}_m|$.

3.4 Comment décrire une augmentation d'entropie ?

Comme expliqué auparavant, l'entropie de von Neumann est une quantité conservée et ne peut donc pas décrire une augmentation d'entropie du système. Nous allons développer ici deux idées alternatives visant à quantifier une telle augmentation.

3.4.1 Entropie moyennée

Une première idée serait de calculer l'entropie de von Neumann de la matrice densité *moyennée*, et de la comparer à l'entropie de von Neumann de la matrice densité *instantanée*. La convexité de l'entropie impose en effet que $S_{\text{vN}}[\hat{\rho}_m] \geq S_{\text{vN}}[\hat{\rho}(t)]$. Les résultats obtenus pour différents temps de rampe et différentes températures de départ T_0 sont représentés Fig. 6.

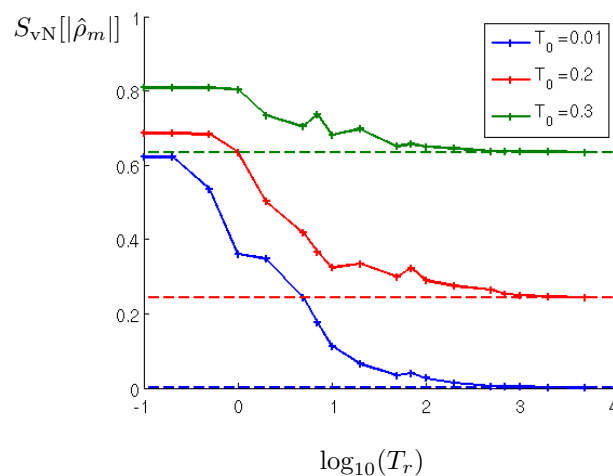


Fig. 6 – Entropie moyennée pour différents temps de rampe. Entropie de von Neumann de la matrice densité moyennée (3.9) en fonction du logarithme décimal du temps de rampe, pour différentes températures de départ T_0 . Les lignes continues tiretées sont tracées à la valeur de l'entropie de von Neumann de la matrice densité instantanée à la température considérée.

Notons que l'inégalité $S_{\text{vN}}[|\hat{\rho}_m\rangle] \geq S_{\text{vN}}[\hat{\rho}(t)]$ est bien vérifiée. L'entropie moyennée semble être une grandeur pertinente pour caractériser l'adiabaticité d'un processus, ou au moins répond aux exigences que l'on attend intuitivement d'une telle grandeur. En effet, elle décroît avec le temps de rampe et converge assez lentement vers la valeur $S_{\text{vN}}[\hat{\rho}(t)]$ lorsque le temps de rampe tend vers l'infini. L'échelle de temps sur laquelle l'entropie moyennée devient égale à l'entropie instantanée à, par exemple, 10 % près est de l'ordre de $10^2 - 10^3$, et ne semble pas dépendre de la température.

3.4.2 Entropie diagonale

Une autre idée alternative pour caractériser l'adiabaticité des processus, proposée récemment par Anatoli Polkovnikov [13], est de modifier la définition de l'entropie. Il suggère de calculer l'entropie de la distribution de probabilité des états propres du hamiltonien instantané. Ainsi en exprimant la matrice densité dans la base des états propres du hamiltonien instantané, l'*entropie diagonale* est définie par :

$$S_d = -k_B \sum_n \rho_{nn} \log \rho_{nn} \quad (3.10)$$

où $\rho_{nn} = \langle E_n | \hat{\rho} | E_n \rangle$, avec $\hat{\mathcal{H}}(t) | E_n \rangle = E_n | E_n \rangle$.

Un certain nombre de propriétés de l'entropie diagonale sont établies en [13], en particulier sa cohérence avec les postulats que doit vérifier une entropie. Mentionnons simplement que dans le cas d'un système à l'équilibre thermodynamique on peut montrer que l'entropie diagonale est égale à l'entropie de von Neumann. Il est également intéressant de noter que pour un système fermé l'entropie diagonale vérifie l'inégalité :

$$S_d(t > 0) \geq S_d(t = 0) \quad (3.11)$$

Notons que cette inégalité *n'impose pas* que l'entropie diagonale soit une fonction croissante du temps.

Néanmoins, cette définition n'a été proposée que très récemment et à ce stade l'étude se concentre plutôt sur la vérification des propriétés qu'elle doit vérifier. Une étude très récente [15] suggère qu'il faudrait distinguer les cas intégrable et non-intégrable pour analyser les propriétés de l'entropie diagonale.

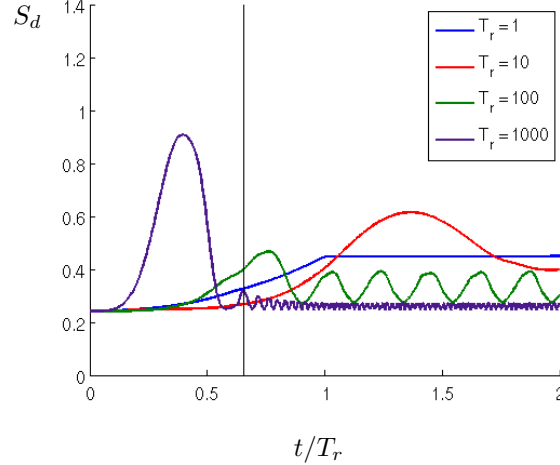


Fig. 7 – Entropie diagonale. Entropie diagonale instantanée au cours de différentes évolutions temporelles suivant la rampe décrite Fig. 4, pour différents temps de rampe T_r , et où l'on choisit $T_m = T_r$. La ligne verticale noire repère la position de la transition SF–MI. La température de départ est $T_0 = 0.2$.

Dans notre cas, Fig. 7, on remarque que toutes les propriétés de l'entropie diagonale calculée par GMFT sont en accord avec les propriétés dérivées par Polkovnikov [13]. Elle présente également les oscillations caractéristiques de la théorie de champ moyen. Cependant, elle ne semble exploitable ni pour caractériser la transition de phase ni pour étudier l'adiabaticité car elle n'a aucun comportement spécifique au point critique, et la convergence vers une limite adiabatique semble peu claire.

4 Comparaison à un équilibre thermique

4.1 Intérêt et contraintes

Dans cette nouvelle section, nous allons chercher à comparer l'état obtenu au cours de l'évolution temporelle $\hat{\rho}(t)$ ou après évolution temporelle du système, décrit par la matrice densité moyennée $|\hat{\rho}_m\rangle$, à un état d'équilibre thermique décrite par une matrice densité effective $\hat{\rho}_{\text{eq}}(\beta_{\text{eff}}) = \exp(-\beta_{\text{eff}}\hat{\mathcal{H}})/Z$.

4.1.1 Intérêt de l'étude

La question est d'intérêt fondamental, car elle est reliée au concept d'adiabaticité : si on part d'un système thermique à température T_0 , comment faut-il faire évoluer les couplages du modèle BH pour rester dans un état d'équilibre au cours de l'évolution ? Elle est aussi d'un grand intérêt expérimental : le processus de réalisation de modèles sur réseau à partir d'atomes froids est de partir d'un condensat de Bose, puis d'allumer progressivement les lasers formant le potentiel optique. En d'autres termes, on fait varier progressivement les couplages du modèle BH, jusqu'à obtenir les valeurs souhaitées. Il est alors indispensable de savoir dans quel état le système est arrivé au terme de l'évolution.

4.1.2 Contraintes liées à la dynamique GMFT

On a établi Sec. 3.2 que le nombre moyen d'atomes par site et l'entropie de von Neumann étaient des quantités conservées au cours de l'évolution par GMFT. Ainsi, si l'on veut comparer la matrice densité évoluée moyennée $\hat{\rho}_m$ à une matrice densité d'équilibre thermique, il faut que cette dernière vérifie les mêmes contraintes.

4.2 Grandeurs d'équilibre

4.2.1 Construction de la matrice densité d'équilibre thermique

Ainsi, définissons $\hat{\rho}_0$ la matrice densité du système à l'instant initial. En pratique, $\hat{\rho}_0$ est une matrice densité d'équilibre thermique à température T_0 ($\beta_0 = 1/k_B T_0$) :

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{Z_0} \exp(-\beta_0 \hat{\mathcal{H}}(0)) \quad (4.1)$$

où on définit la fonction de partition :

$$Z_0 = \text{Tr} \left[\exp(-\beta_0 \hat{\mathcal{H}}(0)) \right] \quad (4.2)$$

On a alors les constantes du mouvement :

$$\bar{n}_0 = \text{Tr} [\hat{\rho}_0 \hat{n}] \quad (4.3)$$

$$S_0 = -k_B \text{Tr} [\hat{\rho}_0 \log \hat{\rho}_0] \quad (4.4)$$

À chaque instant, on cherche une matrice densité d'équilibre thermique par résolution auto-cohérente de :

$$\phi_{\text{eq}} = \text{Tr} [\hat{\rho}_{\text{eff}}(\phi_{\text{eq}}) \hat{a}] \quad (4.5)$$

où

$$\hat{\rho}_{\text{eff}} = \frac{1}{Z_{\text{eff}}} \exp(-\beta_{\text{eff}} \hat{\mathcal{H}}(t, \phi_{\text{eq}})) \quad (4.6)$$

Pour imposer la conservation de \bar{n} et S_{vN} , on joue sur leurs deux champs conjugués, à savoir le potentiel chimique μ_{eff} et la température T_{eff} , dont la recherche est incluse dans la boucle d'auto-cohérence. Celle-ci démarre sur les valeurs obtenues au pas de temps précédent, puis s'organise de la façon suivante :

- (1) Calcul de $\bar{n} = \text{Tr} [\hat{\rho}_{\text{eff}} \hat{n}]$
 - ★ Si $\bar{n} > \bar{n}_0$ alors on change μ_{eff} en $\mu_{\text{eff}} - \delta\mu$
 - ★ Si $\bar{n} < \bar{n}_0$ alors on change μ_{eff} en $\mu_{\text{eff}} + \delta\mu$
- (2) Calcul du nouveau $\hat{\rho}_{\text{eff}}$, du nouveau ϕ_{eq}
- (3) Calcul de $S_{\text{vN}} = -k_B \text{Tr} [\hat{\rho}_{\text{eff}} \log \hat{\rho}_{\text{eff}}]$

- ★ Si $S_{vN} > S_0$ alors on change T_{eff} en $T_{\text{eff}} - \delta T$
- ★ Si $S_{vN} < S_0$ alors on change T_{eff} en $T_{\text{eff}} + \delta T$

(4) Calcul du nouveau $\hat{\rho}_{\text{eff}}$, du nouveau ϕ_{eq}

Ici, $\delta\mu$ et δT sont des incréments choisis de sorte à avoir une précision suffisante. La boucle s'arrête lorsque l'on a convergence sur les trois grandeurs, ou bien lorsque qu'elle atteint une configuration $\{\mu_{\text{eff}}, T_{\text{eff}}\}$ qu'elle avait déjà atteint précédemment (c'est le cas par exemple lorsque les incréments sont trop grands). En tous les cas, la bonne conservation de \bar{n} et S_{vN} est systématiquement vérifiée *a posteriori*.

4.2.2 Fraction condensée

Le premier point d'intérêt est de suivre au cours du temps l'évolution de la fraction condensée $|\phi(t)|^2$, et de la comparer à $|\phi_{\text{eq}}(t)|^2$, et ce pour des températures initiales et des évolutions temporelles variables. Les courbes obtenues sont représentées Fig. 8.

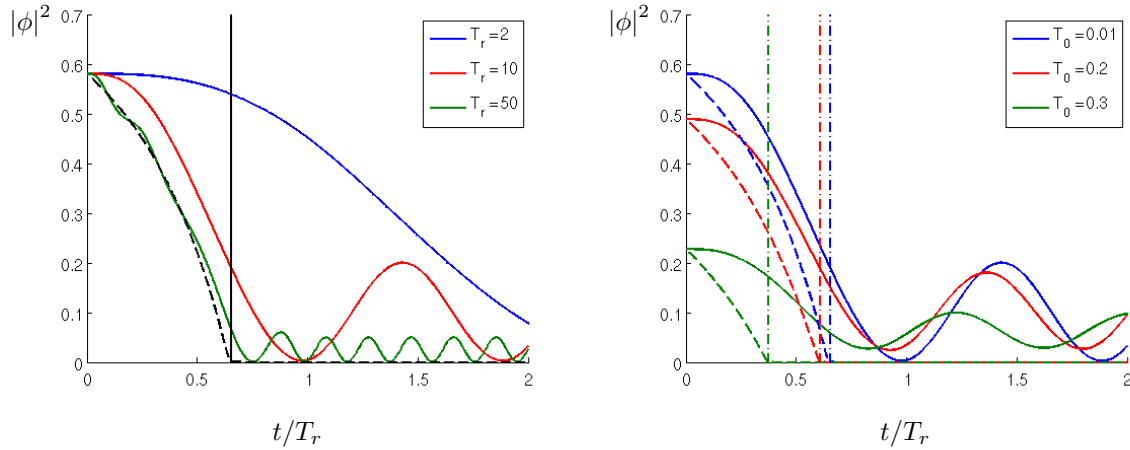


Fig. 8 – Comparaison entre la fraction condensée instantanée et celle d'équilibre au cours d'une rampe linéaire. Est représentée en trait plein $|\phi(t)|^2$ et en trait tireté $|\phi_{\text{eq}}(t)|^2$. Les traits verticaux sont tracés à la transition de phase, i.e. au moment où $|\phi_{\text{eq}}(t)|^2 = 0$. La rampe considérée est celle décrite Fig. 4, où on choisit $T_m = T_r$. Gauche : même température de départ $T_0 = 0.01$, différents temps de rampe. Droite : même temps de rampe $T_r = 10$, différentes températures de départ.

On remarque que les courbes d'évolution instantanée suivent relativement bien l'allure des courbes d'équilibre, aux oscillations permanentes près. Si l'évolution était parfaitement adiabatique, les courbes devraient se superposer deux à deux. Comme attendu, plus le temps de rampe est grand, plus l'accord entre les deux courbes est bon : lors d'une évolution plus lente, le système est moins sujet aux passages de type Landau-Zener vers des états excités, et reste donc plus proche d'une évolution d'équilibre. Enfin, du point de vue de la fraction condensée, l'adiabaticité semble meilleure à basse température.

4.2.3 Potentiel chimique et température effectifs

Il est également important de comprendre le comportement de μ_{eff} et T_{eff} au cours d'une évolution, représentés Fig. 9.

On note que le potentiel chimique effectif croît au cours de l'évolution, i.e. décroît lorsque Jz/U augmente. Autrement dit, à un potentiel chimique donné, on aura un nombre d'atomes par site plus grand pour un Jz/U plus grand, ce qui est raisonnable. En effet, augmenter Jz/U revient à augmenter l'importance du terme tunnel par rapport au terme de répulsion. Or sa valeur moyenne est plus grande pour des nombres d'atomes plus grand : $\langle n-1 | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n}$. Par ailleurs, on remarque que la valeur de μ_{eff} reste constante une fois passée la transition de phase. Ceci est là encore naturel, car la phase isolante de Mott est caractérisée par un nombre moyen d'atomes fixe. Enfin, notons que lorsque la température augmente la valeur du potentiel chimique effectif augmente aussi. Ceci est lié au fait que dans la phase de Mott à un atome par site, le premier état excité (donc le premier état thermiquement accessible) est celui à aucun atome par site pour $\mu/U < 0.5$ et celui à deux atomes par site pour $\mu/U > 0.5$. Dans le cas présent, $\mu/U < 0.5$, les sites tendent à être vidés thermiquement, et donc pour imposer la conservation de \bar{n} , il faut favoriser le remplissage des sites *via* le potentiel chimique en l'augmentant.

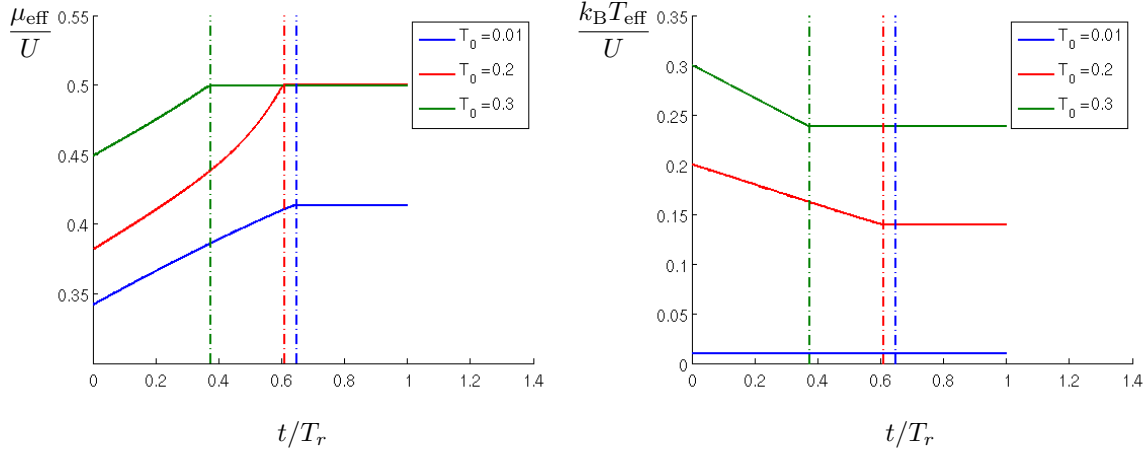


Fig. 9 – Potentiel chimique et température effectifs au cours d'une rampe linéaire. Évolution des grandeurs d'équilibre au cours de la rampe linéaire décrite Fig. 4 avec $T_m = 0$ pour différentes températures initiales T_0 . Les traits verticaux sont tracés à la transition SF–MI. Gauche : potentiel chimique effectif. Droite : température effective.

Intéressons nous maintenant à la température effective. On constate que celle-ci part systématiquement de la valeur de T_0 , ce qui est heureux puisque l'état de départ de l'évolution est un équilibre thermique à T_0 , puis décroît jusqu'à la transition de phase et reste ensuite constante. Cette décroissance peut s'interpréter en terme de densité d'états : si la densité d'états autour du fondamental augmente, alors pour maintenir la même entropie de von Neuman, reliée aux nombre d'états occupés et à leur occupation, on a besoin d'une température effective plus faible. Or l'approximation de champ moyen ne prend pas en compte correctement le spectre d'excitations du système, ou plus précisément ne prend en compte que des excitations locales (excitations du site seul, à ϕ constant) et pas des excitations collectives, où ϕ varierait. En particulier, le gap en énergie champ moyen est plus faible dans la phase de Mott que dans la phase superfluide, et ainsi pour peupler de façon identique le premier état excité, on a besoin d'une température moindre dans la phase de Mott que dans la phase superfluide. Ceci permet de comprendre les résultats obtenus, bien que ce soit *faux* du point de vue de la physique complète du modèle BH : la phase superfluide n'a pas de gap, alors que la phase de Mott en a un. En conséquence, pour maintenir l'entropie de von Neumann constante, la température devrait être plus faible dans la phase superfluide que dans la phase de Mott. On se heurte ici au gros point faible de la méthode, qui nous empêche d'exploiter les résultats sur la température effective.

4.3 Fidélité

4.3.1 Définition et pertinence

Jusqu'à présent, on n'a étudié l'adiabaticité de l'évolution que par la fraction condensée. Cependant, celle-ci ne contient que des informations partielles sur la matrice densité de par sa définition $\phi = \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{a}]$. Si la matrice densité est écrite dans la base des états de Fock, la fraction condensée ne prend en compte que sa première diagonale. Nous aurions pu étudier d'autres quantités, telles que l'énergie moyenne ou les fluctuations du nombre d'atomes, mais ces quantités ne prennent également en compte qu'une partie seulement de la matrice densité. Ainsi, pour étudier globalement le problème de l'adiabaticité et comparer complètement la matrice densité évoluée et celle d'équilibre, il nous faut introduire un outil plus fin.

La notion de *fidélité* a été introduite en 1994 par R. Josza [16], dans le cadre de l'optique quantique et de l'information quantique. C'est une mesure de la distance entre deux matrices densité, et bien que ce ne soit pas une métrique au sens mathématique du terme elle peut servir de base à la construction d'une métrique. Considérons une matrice densité quelconque $\hat{\rho}$ que l'on veut comparer à une matrice densité de référence $\hat{\rho}_0$. Alors on définit la fidélité de $\hat{\rho}$ à $\hat{\rho}_0$ par :

$$\mathcal{F}[\hat{\rho}, \hat{\rho}_0] = \text{Tr} \left[\sqrt{\sqrt{\hat{\rho}}\hat{\rho}_0\sqrt{\hat{\rho}}} \right] \quad (4.7)$$

La fidélité est un nombre réel compris entre 0 et 1. La limite supérieure 1 est atteinte si et seulement si $\hat{\rho} = \hat{\rho}_0$. Pour mieux visualiser la signification physique de cette définition, notons qu'on peut montrer

que si l'on compare deux états purs $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ et $\hat{\rho}_0 = |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|$, alors :

$$\mathcal{F}[\hat{\rho}, \hat{\rho}_0] = |\langle\Psi|\Psi_0\rangle| \quad (4.8)$$

Ainsi pour étudier l'adiabaticité du processus nous allons nous intéresser à la façon dont la fidélité tend vers 1 dans la limite des temps de rampe longs. En particulier, il sera intéressant de définir ce qu'est un temps de rampe "long", c'est-à-dire de définir un temps caractéristique de convergence à l'équilibre.

4.3.2 Suivi au cours de l'évolution

Avant d'étudier une éventuelle convergence, regardons l'évolution de la fidélité au cours d'une rampe linéaire, représentée Fig. 10. De façon précise, on étudie la fidélité $\mathcal{F} = \mathcal{F}[\hat{\rho}(t), \hat{\rho}_{\text{eff}}(t)]$ de la matrice densité instantanée $\hat{\rho}(t)$ définie Eq. (3.1), p. 9, à la matrice densité d'équilibre thermique instantanée $\hat{\rho}_{\text{eff}}(t)$ définie Eq. (4.6), p. 14.

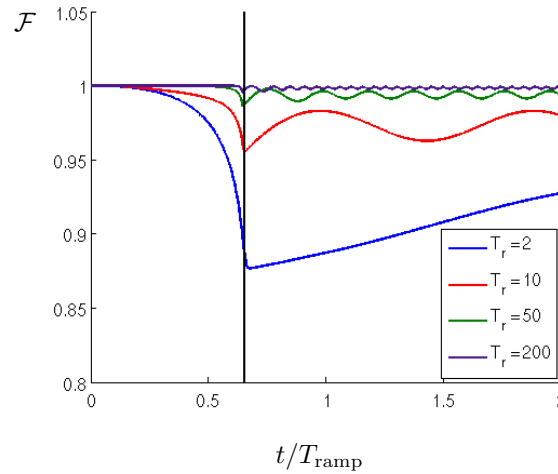


Fig. 10 – Fidélité lors de rampes linéaires de différentes durées. Suivi de la fidélité $\mathcal{F} = \mathcal{F}[\hat{\rho}(t), \hat{\rho}_{\text{eff}}(t)]$ au cours de la rampe linéaire décrite Fig. 4, p. 11, pour différentes valeurs du temps de rampe, où l'on choisit $T_m = T_r$. Le trait vertical noir est tracé à l'instant où la valeur de $J(t)$ atteint la valeur critique d'équilibre J_c . Ces évolutions partent d'un équilibre thermique à $T_0 = 0.001$. On remarque que la fidélité augmente globalement avec le temps de rampe, et toujours les oscillations persistantes.

Plusieurs observations méritent d'être signalées. Tout d'abord on note que globalement la fidélité augmente lorsque le temps de rampe augmente, ce qui est cohérent avec l'intuition que l'on a de l'adiabaticité. Ensuite, on constate que la fidélité passe par un minimum à la transition de phase, avant de présenter un comportement oscillant permanent autour d'une valeur plus élevée que ce minimum, ce qui nous conduira à nouveau à des procédures de moyennage temporel. Enfin, on remarque que pour les évolutions suffisamment lentes, la fidélité reste très proche de 1 dans la phase superfluide, avant de chuter brusquement à la transition. Cela indique que des évolutions partant et arrivant en phase superfluide seraient davantage adiabatiques que des évolutions passant au travers de la transition.

4.3.3 Évolution avec le temps de rampe

Étudions maintenant la façon dont la fidélité dépend du temps de rampe. Comme annoncé, on ne considère plus la matrice densité instantanée à la fin de l'évolution, mais la matrice densité moyennée $|\hat{\rho}_m|$ définie Eq. (3.9), p. 12. On la compare alors par la fidélité \mathcal{F} à la matrice densité effective d'équilibre thermique $\hat{\rho}_{\text{eff}}$ obtenue pour les valeurs finales des couplages. On réitère ce calcul pour différents temps de rampe et différentes températures, comme représenté Fig. 11. La rampe est toujours la rampe linéaire décrite Fig. 4, p. 11.

Plusieurs commentaires s'imposent. L'observation la plus évidente est l'augmentation de la fidélité avec le temps de rampe, ce qui était attendu comme déjà mentionné. Par ailleurs un temps de rampe caractéristique $\tau \sim 10^1$ se dégage nettement à basse température, et semble toujours pertinent aux températures plus élevées pour caractériser le passage entre un régime non-adiabatique et un régime adiabatique. Notons qu'il est un peu plus petit que celui extrait de l'étude de l'entropie moyennée Sec. 3.4, où l'on avait trouvé $\tau \sim 10^2 - 10^3$.

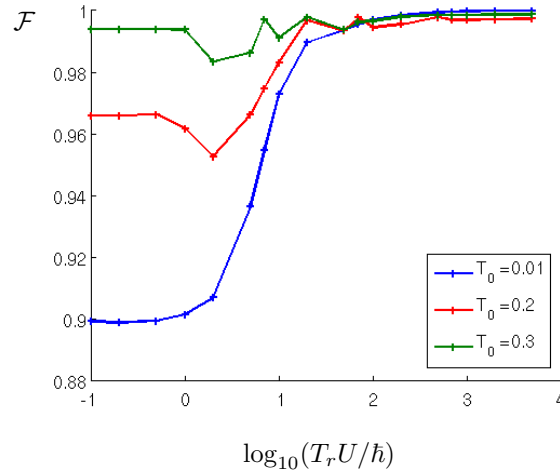


Fig. 11 – Fidélité en fonction du temps de rampe pour différentes températures. Tracé de la fidélité $\mathcal{F} = \mathcal{F}[|\hat{\rho}_m\rangle, \hat{\rho}_{\text{eff}}]$ en fonction du logarithme décimal du temps de rampe T_r exprimé en unités de \hbar/U . On considère la rampe linéaire décrite Fig. 4, p. 11. Le moyennage est fait sur un temps T_m correspondant à une période d'oscillation. On remarque que globalement la fidélité augmente avec le temps de rampe, et qu'à temps de rampe fixé la fidélité augmente avec la température.

En outre, on remarque que des évolutions à plus haute température sont plus fidèles que des évolutions à basse température, ce qui peut sembler peu intuitif. Il s'avère que la matrice densité, exprimée dans la base des états de Fock, peut s'analyser de la façon suivante. D'une part, les termes de la diagonale principale sont fortement contraints. En effet, ils doivent respecter d'une part la normalisation $\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$ et d'autre part la conservation du nombre moyen d'atomes par site $\text{Tr}[\hat{\rho}\hat{n}] = \bar{n}_0$. De plus on remarque empiriquement que pour la valeur de μ choisie seuls trois termes (ceux des états $n = 0, 1$ et 2) ont une valeur importante. Il en résulte peu de liberté pour les termes diagonaux, dont on constate en effet qu'ils prennent des valeurs presque égales dans les matrices moyennées et d'équilibre. En revanche, les termes de la première diagonale encodent la fraction condensée, qui n'est pas contrainte, qui diffère entre cas d'équilibre et instantanée, et qui diminue fortement avec la température (voir Fig. 8, p. 15). Les termes de la première diagonale diffèrent donc beaucoup entre matrice moyennée et matrice d'équilibre. On constate empiriquement que les termes autres que sur les deux premières diagonales sont presque nuls. En conséquence, il est donc raisonnable que la fidélité soit plus grande dans le cas où les termes hors-diagonale prennent les valeurs les plus faibles, qui est le cas de haute température.

5 Comparaison à des résultats expérimentaux

Pour terminer ce travail, nous allons comparer les résultats numériques obtenus par GMFT aux résultats expérimentaux obtenus à l'université de Harvard par le groupe de Markus Greiner et publiés récemment [5].

5.1 Présentation de l'expérience

Les auteurs réalisent expérimentalement un condensat de Bose–Einstein bidimensionnel de quelques centaines d'atomes de Rubidium 87, confiné dans un potentiel harmonique. Ils utilisent ensuite des lasers pour engendrer un réseau carré, dont la profondeur est augmentée au cours du temps.

Par la suite, les auteurs emploient une technique de collisions assistées par laser permettant d'expulser les atomes de chaque site uniquement par paire. Suite à cela, il reste sur le site un atome si le nombre d'atomes précédemment présent était impair, et zéro sinon : on ne peut donc avoir accès qu'à la parité de l'occupation d'un site. Les mesures sont faites à l'aide d'une technique d'imagerie perfectionnée, spatialement résolue, qui permet d'étudier la physique d'un site individuel. Les auteurs s'intéressent en particulier à la probabilité qu'un site ait une occupation impaire, notée p_{odd} .

Dans un premier temps, cela leur permet de mettre en évidence une structure en anneaux concentriques d'isolants de Mott, caractéristique d'un modèle de Bose–Hubbard confiné dans un piège harmonique, comme représenté Fig. 12.

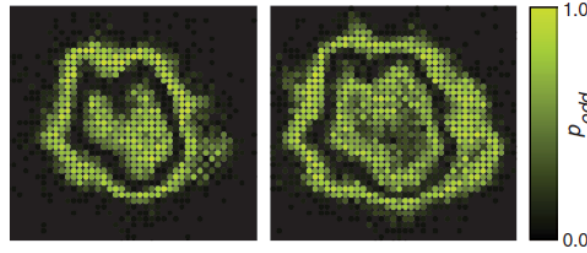


Fig. 12 – Anneaux d’isolants de Mott. Image spatialement résolue d’une structure en anneaux d’isolants de Mott, pour des nombres d’atomes confinés différents. Figure extraite de [5].

Cette technique est ensuite appliquée à l’étude de la phase isolante de Mott. Comme celle-ci est caractérisée par un nombre d’occupation de chaque site entier et bien défini, les fluctuations de parité de l’occupation forment une observable pertinente pour déterminer si le système est dans son état fondamental ou non.

Dans la suite, nous allons utiliser la GMFT pour tenter de retrouver les valeurs expérimentales de p_{odd} , d’abord pour un système bidimensionnel à l’équilibre en fonction du ratio U/J , puis ensuite pour un système ayant subi une évolution temporelle connue.

5.2 Calcul des couplages

5.2.1 Motivation : que contrôle-t-on expérimentalement ?

Expérimentalement, il est possible de contrôler l’intensité lumineuse émise par les lasers, mais évidemment pas directement les couplages J et U du modèle de Bose-Hubbard, définis par les relations (2.6) et (2.7), et spécifiées au tunneling entre sites plus proches voisins i et $i + 1$ et aux interactions sur un site i :

$$J = - \int d^3\mathbf{r} w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i+1}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (5.1)$$

$$U = g \int d^3\mathbf{r} |w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^4 \quad (5.2)$$

Il faut donc calculer explicitement les intégrales triples (5.1) et (5.2), ce qui impose de calculer directement les fonctions de Wannier du réseau. Nous allons ici procéder à ce calcul, en utilisant une méthode qui consiste à diagonaliser le hamiltonien dans l’espace des impulsions [17, 18].

Le problème se simplifie grâce à la structure séparable de l’opérateur ∇^2 et du potentiel (2.1) : $V(\mathbf{r}) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$. Cela permet de réduire le problème 3d à trois problèmes 1d, et de chercher les fonctions de Wannier sous la forme d’un produit $w(\mathbf{r}) = w_x(x)w_y(y)w_z(z)$. En outre, les auteurs précisent que le réseau engendré est un réseau carré de pas $a = 680$ nm, ce qui entraîne que $w_x = w_y$, et que le confinement dans la direction z est harmonique, la longueur caractéristique associée à l’oscillateur étant $\ell_z = 360$ nm. On en déduit donc que w_z est une gaussienne de largeur ℓ_z .

Finalement, le calcul des fonctions de Wannier 3d se restreint au calcul des fonctions de Wannier d’un réseau sinusoïdal 1d de pas a .

Par ailleurs, il nous faut redéfinir nos unités de référence puisque l’énergie de répulsion U n’est plus fixée. Conformément aux usages expérimentaux, on utilise plutôt l’énergie de recul E_r des atomes de Rubidium dans le réseau, définie par $E_r = \hbar^2/8ma^2$, où \hbar est la constante de Planck et m la masse d’un atome. Ainsi l’unité naturelle de temps est maintenant \hbar/E_r , et l’unité de température E_r/k_B .

5.2.2 Fonctions de Bloch et spectre de bande

Considérons une particule dans le potentiel périodique sinusoïdal :

$$V(x) = \frac{v_0}{2} (1 + \cos 2kx) E_r \quad (5.3)$$

Elle est décrite par une équation de Schrödinger, dont les états propres s’écrivent sous forme d’onde de Bloch [7] :

$$\Psi_q^{(n)}(x) = e^{iqx/\hbar} u_q^{(n)}(x) \quad (5.4)$$

Ici n représente la bande d'énergie considérée, et q est la quasi-impulsion. La fonction $u_q^{(n)}(x)$ a la même périodicité que le potentiel. Cette propriété de périodicité permet de décomposer le potentiel et la fonction u sur la même base d'harmoniques de Fourier :

$$V(x) = \sum_m v_m e^{2imkx} E_r, \quad m \in \mathbb{Z} \quad (5.5)$$

$$u_q^{(n)}(x) = \sum_\ell c_\ell^{(n,q)} e^{2i\ell kx}, \quad \ell \in \mathbb{Z} \quad (5.6)$$

On peut alors montrer (le calcul détaillé est donné en [17], p. 29) que l'équation de Schrödinger se réécrit :

$$\sum_{\ell'} H_{\ell\ell'} c_\ell^{(n,q)} = \epsilon_q^{(n)} c_\ell^{(n,q)} \quad (5.7)$$

où

$$H_{\ell\ell'} = \left(2\ell + \frac{q}{\hbar k}\right) \delta_{\ell\ell'} - \frac{v_0}{4} (\delta_{\ell,\ell'+1} + \delta_{\ell,\ell'-1}) \quad (5.8)$$

Il ne s'agit donc que de résoudre un problème aux valeurs propres d'une matrice tridiagonale, ce qui donne à la fois le spectre de bandes du système *via* les valeurs propres $\epsilon_q^{(n)} E_r$ et les fonctions de Bloch, *via* les vecteurs propres.

Dans la pratique, on restreint les valeurs de ℓ autorisées à l'intervalle $-L \leq \ell \leq +L$. Ceci implique que la matrice H est une matrice $(2L+1) \times (2L+1)$, ou en des termes plus physiques qu'on autorise $2L+1$ valeurs pour l'impulsion dans une zone de Brillouin, ou encore qu'on considère un réseau à $2L+1$ sites.

5.2.3 Fonctions de Wannier

Le calcul des fonctions de Wannier devient alors très simple dans le principe. Il suffit de calculer numériquement une transformée de Fourier, puisque fonctions de Wannier et fonctions de Bloch sont reliées par :

$$w(x - x_i) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{-k/2 < q \leq +k/2} e^{-iqx_i} \Psi_q(x) \quad (5.9)$$

où \mathcal{N} est une constante de normalisation calculée *a posteriori*.

Dans les faits c'est un peu plus délicat, car le calcul des fonctions de Bloch présenté à la section précédente ne les calcule qu'à un signe global près : l'opposé d'un vecteur propre est aussi un vecteur propre. En conséquence de quoi la relation (5.9) peut donner des fonctions qui sont très mal localisées, voir Fig. 13, ou bien qui sont localisées à un site autre que le site i , et qui ne répondent donc pas à la définition complète des fonctions de Wannier qui doivent être les fonctions de la forme (5.9) qui soient les mieux localisées au site i .

Pour chercher cette fonction la mieux localisée, on va exploiter le fait que seules $2L+1$ fonctions de Bloch sont prises en compte. Il suffit de tester les 2^{2L+1} combinaisons de signe, et de retenir celle qui donne la fonction la mieux localisée. Comme les définitions des couplages (5.1) et (5.2) mettent en jeu un nombre pair de fonctions de Wannier, le nombre de combinaisons à tester se réduit à 2^{2L} car un signe global sur toutes les fonctions de Wannier est sans importance.

Pour tester la localisation de la fonction de Wannier, on procède de la façon suivante. D'abord, on cherche à quel endroit le maximum de cette fonction est situé. Si c'est bien sur le site cherché, on calcule ensuite son ratio de localisation, défini de la façon suivante :

$$RL = \frac{\int dx |w(x - x_i)|^4}{\int dx |w(x - x_i)|^2} \quad (5.10)$$

Le ratio de localisation est maximal pour une fonction parfaitement localisée (il vaut 1 pour un pic de Dirac), et minimal pour une fonction parfaitement délocalisée (il vaut $1/L$ pour une onde plane dans une boîte de longueur L). C'est une grandeur utilisée fréquemment dans l'étude de la localisation d'Anderson par exemple.

Finalement, on retient comme fonction de Wannier $w(x - x_i)$ la fonction localisée au site i présentant le ratio de localisation le plus grand.

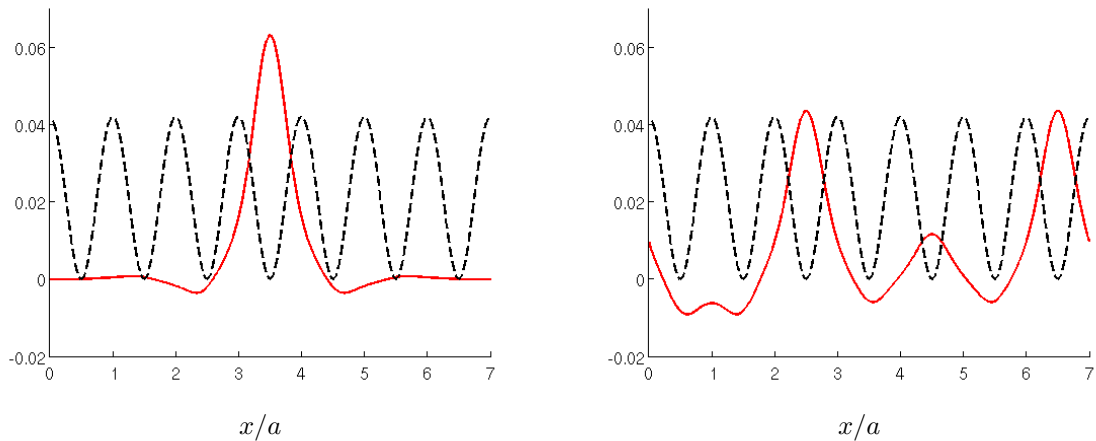


Fig. 13 – Fonctions de Wannier 1d. Tracé en unité arbitraire de différents résultats donnés par l'expression (5.9) pour la recherche d'une fonction de Wannier localisée en $x/a = 3.5$. Gauche : vraie fonction de Wannier, i.e. fonction la mieux localisée. Droite : autre résultat, mal localisé. Le réseau sinusoidal est représenté pour illustration en trait tireté noir.

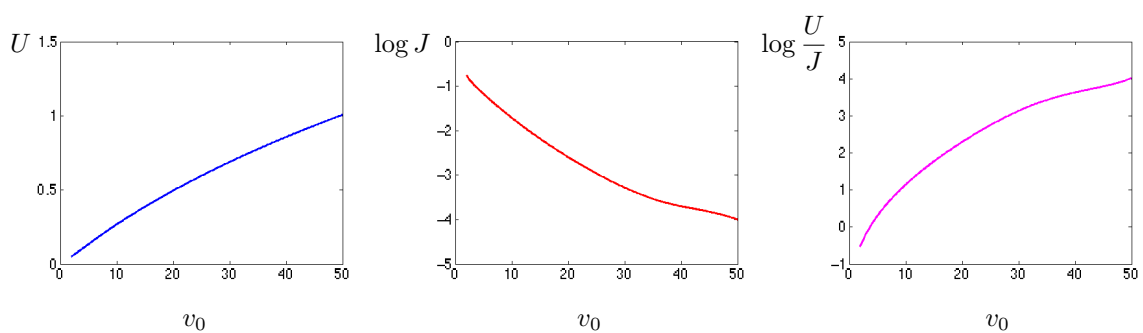


Fig. 14 – Couplages du modèle BH sur réseau cubique en fonction de la profondeur du réseau. Tracés des différents couplages du modèle BH U , $\log J$ et $\log U/J$ en fonction de la profondeur du réseau v_0 exprimée en unité de E_r . Le réseau choisi est un réseau cubique tridimensionnel, pour comparaison avec les résultats de [17]. On remarque qu'en faisant varier faiblement v_0 , on peut obtenir des valeurs du ratio U/J s'étalant sur plusieurs ordres de grandeur.

5.2.4 Couplages

Le calcul des couplages se fait ensuite par intégration numérique, selon les définitions (5.1) et (5.2), pour le cas spécifique d'un réseau cubique tridimensionnel. Les résultats sur les valeurs de J , de U et du ratio U/J en fonction de la profondeur du potentiel optique sont représentés Fig. 14, et sont en accord parfait avec ceux publiés dans la thèse de Markus Greiner [17].

Notons que dans le cas de réseaux 2d qui nous intéressent ici la transition de phase SF–MI à densité unité s'obtient, d'après les auteurs, pour une valeur $v_0 = 12.2E_r$.

5.3 Propriétés d'équilibre

Dans une première série d'expériences, les auteurs réalisent une rampe faisant passer la profondeur du réseau v_0 de 0 à 16 exponentiellement avec un temps caractéristique de 81 ms. Ils affirment que cette rampe est adiabatique. En interrompant brusquement la rampe à différentes valeurs de v_0 , ils peuvent obtenir une photographie du système à l'équilibre pour différentes valeurs du rapport U/J , qu'ils calculent vraisemblablement par une méthode analogue à celle décrite précédemment. Ils utilisent ensuite des résultats de Monte Carlo Quantique pour calculer une courbe théorique $p_{\text{odd}}(U/J)$ à différentes températures. Par ailleurs ils évaluent la température de leur système à 1.8 nK à la transition, ce qui correspond à $T = 0.1575U_c$ en unités de J .

Par GMFT nous avons calculé $p_{\text{odd}}(U/J)$ pour diverses températures, et comparons les résultats aux résultats expérimentaux Fig. 15.

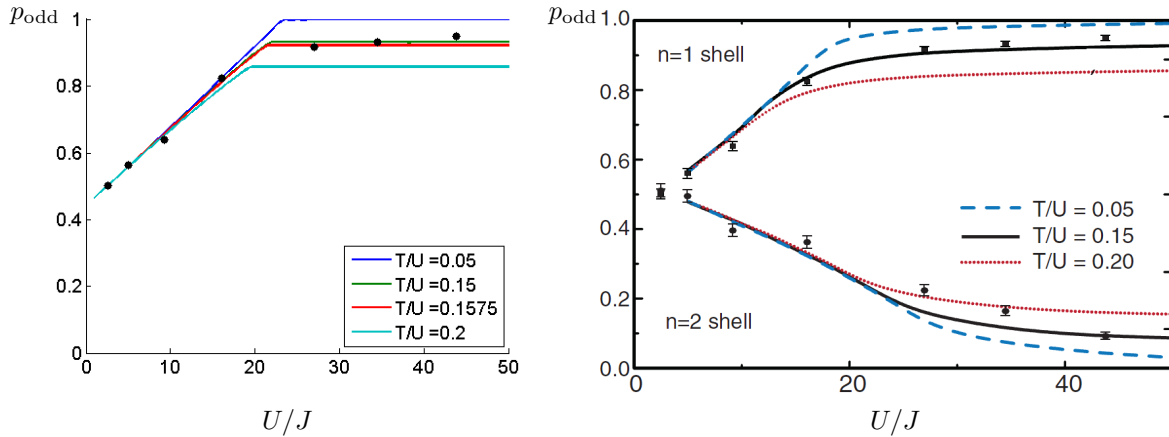


Fig. 15 – Probabilité d'occupation impaire à l'équilibre. Probabilité d'occupation impaire à l'équilibre p_{odd} , en fonction du rapport U/J pour différentes températures T/U dans une phase isolante de Mott. Gauche : résultats expérimentaux (points noirs) et calcul GMFT (courbes en couleur) pour un nombre d'atome par site égal à 1. Droite : résultats expérimentaux (points noirs) et calcul QMC (courbes en couleur), dans des phases avec un nombre d'atomes par site de 1 ou 2. Figure de droite extraite de [5].

Comme déjà mentionné à plusieurs reprises, la GMFT reproduit très bien les propriétés qualitatives du système. Dans le cas de la probabilité d'occupation impaire en phase isolante de Mott, l'accord est également bon sur le plan quantitatif entre résultats GMFT et résultats expérimentaux. En comparant aux résultats QMC, la différence majeure se produit comme prévu au voisinage de la transition de phase, où les courbes champ moyen sont beaucoup plus anguleuses que les courbes QMC. Par ailleurs il semble au vu des courbes de p_{odd} que la transition a lieu pour des U/J un peu plus grands dans les résultats GMFT que dans les résultats QMC. Ceci est en parfaite cohérence avec les résultats obtenus Sec. 2.3.

5.4 Propriétés d'évolution temporelle

Dans la suite de leurs expériences, les auteurs s'intéressent au problème de l'adiabaticité lors de la traversée de la transition. Pour commencer, le système est amené adiabatiquement à une valeur $v_0 = 11$, ce qui signifie qu'il reste superfluide, en utilisant toujours la même rampe exponentielle. La profondeur du réseau est ensuite emmenée jusqu'à $v_0 = 16$ par une rampe linéaire. À cette valeur, si la rampe est adiabatique, un isolant de Mott doit se former. Cette rampe a lieu pour des temps variables allant de 0.2 à 20 ms, suite à quoi la probabilité d'occupation impaire est mesurée. Nous avons appliqué cette rampe par GMFT, et comparons les résultats Fig. 16.

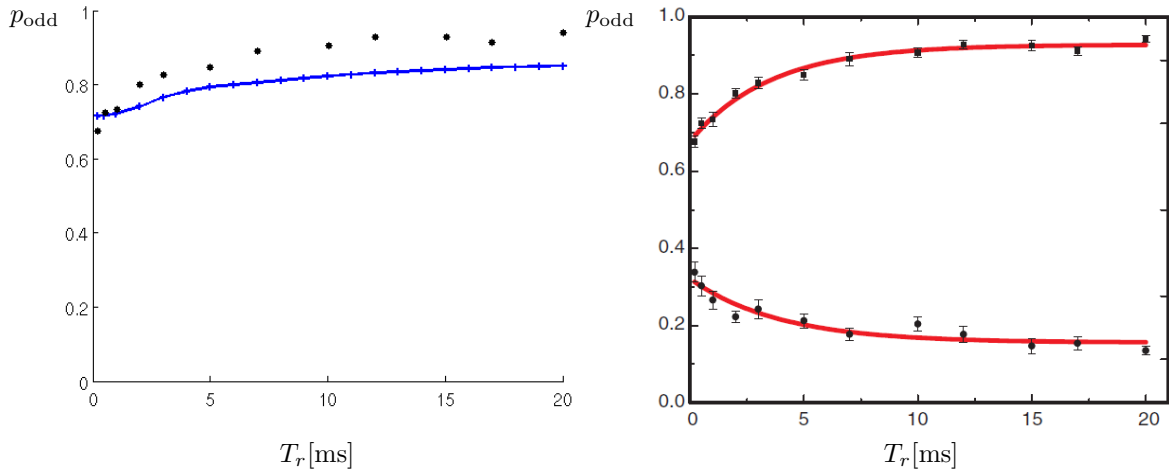


Fig. 16 – Probabilité d’occupation impaire en fonction du temps de rampe. Probabilité d’occupation impaire p_{odd} suite à une rampe linéaire entre $v_0 = 11$ et $v_0 = 16$. Gauche : résultats expérimentaux (points noirs) et calcul GMFT (courbe bleue) pour un nombre d’atome par site égal à 1. Droite : résultats expérimentaux (points noirs) et fit exponentiel (courbe rouge), dans des phases avec un nombre d’atomes par site de 1 ou 2. Figure de droite extraite de [5].

Les résultats GMFT sont ici peu satisfaisants, car peu en accord avec les résultats expérimentaux. À quoi cela peut-il être dû ? Une première hypothèse consisterait à douter de la fiabilité de la méthode GMFT elle-même. Cependant, il semble qu’elle a largement prouvé sa qualité jusqu’à présent, et l’erreur est probablement à chercher ailleurs. Ceci est corroboré par l’allure de la courbe, plutôt cohérente avec les résultats expérimentaux, mais avec un fort facteur de contraction. Il semble plus vraisemblable que le problème vienne d’un mauvais calcul des couplages BH en fonction de v_0 , et en particulier des effets du confinement 2d. Le bon fonctionnement du code de calcul par les fonctions de Wannier a en effet été testé pour un réseau 3d isotrope, mais pas pour un réseau 2d avec confinement transverse, faute de points de comparaison. Une mauvaise interprétation des données expérimentales fournies par les auteurs est donc envisageable. Malheureusement, le temps aura manqué pour approfondir davantage cet aspect. Il va de soi que la résolution de ce problème est un point prioritaire dans la poursuite de ce travail.

6 Conclusion

Résumé du travail

Au cours de ce stage, nous nous sommes penchés sur la question de l’adiabaticité dans les gaz atomiques froids en présence d’un réseau optique, et sur les effets hors-équilibre qui apparaissent dans de tels systèmes.

Dans un premier temps, nous avons montré comment dériver un modèle effectif sur réseau, le modèle de Bose-Hubbard, pour décrire la physique d’un gaz de bosons froids placé dans un potentiel optique, que nous avons étudié par la théorie approximée de champ moyen de Gutzwiller. Les premières études ont porté sur le diagramme de phase à température nulle du modèle, à la structure caractéristique en lobes, et qui présente une transition de phase quantique entre une phase isolante et une phase superfluide.

Nous avons par la suite étudié la dynamique du modèle de Bose-Hubbard lors de changements des paramètres du hamiltonien. Nous avons établi la conservation du nombre moyen d’atomes par site du réseau, et de l’entropie de von Neumann, qui est donc inadaptée pour décrire les effets d’adiabaticité. Nous avons observé que les calculs numériques menaient à des oscillations permanentes des observables physiques, nécessitant d’adapter une procédure de moyennage pour éliminer cet effet parasite. Enfin, nous avons proposé et analysé deux stratégies différentes pour quantifier une éventuelle augmentation d’entropie : la première se base sur l’utilisation d’une matrice densité moyennée, alors que la deuxième, publiée très récemment, suggère de ne s’intéresser qu’à certains termes de la matrice densité instantanée.

Puis nous avons voulu comparer l’état résultant de l’évolution temporelle à un équilibre thermique. Néanmoins, celui-ci doit obéir à un certains nombre de contraintes, liées aux quantités conservées, que nous avons établies. Nous avons alors analysé le lien entre l’évolution des paramètres effectifs de cet équilibre thermique (température et potentiel chimique) et l’évolution des couplages intervenant dans le hamiltonien BH. Pour affiner l’analyse, nous avons utilisé un outil plus puissant, issu du domaine de

l'information quantique : la fidélité.

Enfin, nous avons comparé les résultats numériques à des résultats expérimentaux récents concernant à la fois les propriétés d'équilibre et les propriétés d'adiabaticité. Cela nous a amené à calculer de façon explicite les couplages du modèle BH en fonction des caractéristiques du réseau optique, étape indispensable pour faire le lien avec des données expérimentales. Nous avons également dû exprimer à partir de nos quantités numériques les observables accessibles aux expérimentateurs. Le résultat de la comparaison est que la théorie de Gutzwiller reproduit de façon correcte les propriétés du système à l'équilibre. Concernant la dynamique, les résultats sont décevants en raison de probables erreurs dans les calculs, et le travail sur ce point n'est pas encore abouti.

Perspectives

Au delà de la fin de la comparaison à l'expérience de Greiner *et al.*, mentionnons pour terminer quelques directions dans lesquelles le sujet de ce stage pourrait s'élargir.

Tout d'abord on s'est restreint dans ce travail à un modèle de Bose-Hubbard à une seule bande d'énergie (la restriction intervient précisément lors du développement en fonctions de Wannier). Ceci n'est aucunement contraint par le modèle, et pour étudier l'intégralité du processus de mise en place du réseau optique dans un condensat de Bose, il est même nécessaire de considérer plusieurs bandes d'énergie lorsque les atomes sont faiblement localisés : le cas étudié ici correspond à la limite des réseaux profonds.

De même on s'est limité à l'effet tunnel entre plus proches voisins, et à des interactions répulsives entre atomes situés au même site seulement. Dans la limite des faibles profondeurs de réseau, les fonctions de Wannier sont mal localisées (rappelons que dans un condensat les atomes sont parfaitement délocalisés), et leur recouvrement entre sites voisins est plus important. Ainsi, toujours pour étudier l'intégralité du processus, il faudrait prendre en compte un effet tunnel entre sites seconds voisins et au delà, et de même pour les interactions répulsives.

Enfin, on a ici considéré un système homogène, mais certains effets liés à l'inhomogénéité nécessitent de rajouter au hamiltonien un terme d'énergie local de la forme $\sum_i \epsilon_i \hat{n}_i$. Ceci permet par exemple de prendre en compte un confinement harmonique ($\epsilon_i \sim i^2$), utilisé dans les expériences d'atomes froids, ou bien un terme de désordre en choisissant ϵ_i aléatoire. Un tel terme de désordre permet l'émergence d'une nouvelle phase, dite verre de Bose, dans le diagramme de phase du modèle.

Annexe A : Conservation du nombre moyen d'atomes d'un état pur

Considérons l'évolution d'un état pur $|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{n_{\max}} c_n |n\rangle$, où $|n\rangle$ est un état de Fock à n atomes. Il a été établi [9] que les coefficients $c_n(t)$ vérifient l'équation différentielle non-linéaire suivante :

$$i\dot{c}_n(t) = -J(t) \left\{ \phi(t) \sqrt{n} c_{n-1}(t) + \phi(t)^* \sqrt{n+1} c_{n+1}(t) \right\} + \left\{ \frac{U(t)}{2} n(n-1) - \mu(t)n \right\} c_n(t) \quad (\text{A.1})$$

couplée avec la définition de ϕ :

$$\phi = \langle \Psi | \hat{a} | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^{n_{\max}} \sqrt{n} c_{n-1}^*(t) c_n(t) \quad (\text{A.2})$$

Partant de là, nous allons calculer explicitement la dérivée temporelle du nombre moyen d'atomes par site, défini comme :

$$\bar{n} = \sum_{n=0}^{n_{\max}} n |c_n|^2 \quad (\text{A.3})$$

d'où (dans la suite on sous-entend les dépendances temporelles et les limites des sommes) :

$$i\dot{\bar{n}} = \sum_n n (i\dot{c}_n^* c_n + c_n^* i\dot{c}_n) \quad (\text{A.4})$$

Utilisant (A.1) et l'équation complexe conjuguée, on obtient :

$$i\dot{\bar{n}} = \sum_n n \left\{ \left(J\phi^* \sqrt{n} c_{n-1}^* + J\phi \sqrt{n+1} c_{n+1}^* \right) - \left(\frac{U}{2} n(n-1) - \mu n \right) c_n^* \right\} c_n + n c_n^* \left\{ \left(-J\phi \sqrt{n} c_{n-1} - J\phi^* \sqrt{n+1} c_{n+1} \right) + \left(\frac{U}{2} n(n-1) - \mu n \right) c_n \right\} \quad (\text{A.5})$$

On peut alors simplifier le terme local en U et μ , et réorganiser l'écriture de la somme :

$$i\dot{\hat{n}} = \sum_n nJ\sqrt{n} (\phi^* c_{n-1}^* c_n - \phi c_{n-1} c_n^*) + nJ\sqrt{n+1} (\phi c_{n+1}^* c_n - \phi^* c_{n+1} c_n^*) \quad (\text{A.6})$$

On change maintenant l'indexation de la seconde somme : au lieu de faire courir l'indice de 0 à n_{\max} , on le fait courir de 1 à $n_{\max} + 1$:

$$i\dot{\hat{n}} = \sum_{n=0}^{n_{\max}} nJ\sqrt{n} (\phi^* c_{n-1}^* c_n - \phi c_{n-1} c_n^*) + \sum_{n=1}^{n_{\max}+1} (n-1)J\sqrt{n} (\phi c_n^* c_{n-1} - \phi^* c_n c_{n-1}^*) \quad (\text{A.7})$$

Et comme par définition de n_{\max} on suppose $c_{n>n_{\max}} \equiv 0$, on peut à nouveau simplifier des termes et réécrire :

$$i\dot{\hat{n}} = \sum_{n=1}^{n_{\max}} J (\sqrt{n}\phi^* c_{n-1}^* c_n - \sqrt{n}\phi c_n^* c_{n-1}) \quad (\text{A.8})$$

On utilise maintenant la définition de ϕ , donnée Eq. (A.2), ce qui conduit à :

$$i\dot{\hat{n}} = \sum_{n=1}^{n_{\max}} \sum_{n'=1}^{n_{\max}} J (\sqrt{nn'} c_{n-1}^* c_n c_{n'-1} c_{n'}^* - \sqrt{nn'} c_{n'-1}^* c_{n'} c_n^* c_{n-1}) \quad (\text{A.9})$$

Par un changement des noms d'indice $n \leftrightarrow n'$ dans le second terme de la somme, on voit que les termes s'annulent deux à deux. On en déduit donc finalement le résultat souhaité :

$$i\dot{\hat{n}} = 0 \quad (\text{A.10})$$

ce qui signifie bien que le nombre moyen d'atomes par site est conservé dans l'approximation de champ moyen de Gutzwiller.

Annexe B : Transformation d'Holstein-Primakoff

La transformation d'Holstein–Primakoff a été formulée en 1940 [19] et permet de relier des opérateurs de spin à des opérateurs bosoniques. Un site d'occupation maximale n_{\max} peut ainsi être traité comme un spin de longueur $S = n_{\max}/2$, où les opérateurs de spin sont reliés aux opérateurs bosoniques par :

$$\hat{S}^- = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{\hat{n}}{2S}} \hat{a} \quad (\text{B.1})$$

$$\hat{S}^+ = \sqrt{2S} \hat{a}^\dagger \sqrt{1 - \frac{\hat{n}}{2S}} \quad (\text{B.2})$$

$$\hat{S}^z = \hat{n} - S \quad (\text{B.3})$$

Pour un nombre moyen d'atomes par site \bar{n} bien fixé, on peut faire raisonnablement l'approximation $\hat{n} = \bar{n}$ dans les racines carrées, ce qui permet d'inverser facilement la transformation :

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2S - \bar{n}}} \hat{S}^- \quad (\text{B.4})$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2S - \bar{n}}} \hat{S}^+ \quad (\text{B.5})$$

$$\hat{n} = \hat{S}^z + S \quad (\text{B.6})$$

Pour illustration, montrons que dans l'hypothèse où $n_{\max} = 1$, le hamiltonien de Bose–Hubbard en champ moyen (2.16) peut s'écrire comme un hamiltonien de spin 1/2 placé dans un champ magnétique effectif. En remarquant que le terme répulsif en U est systématiquement nul en raison de l'hypothèse sur n_{\max} , on part de :

$$\hat{\mathcal{H}} = -Jz(\phi\hat{a}^\dagger + \phi^*\hat{a}) - \mu\hat{n} \quad (\text{B.7})$$

ce qui devient en utilisant la transformation précédente :

$$\hat{\mathcal{H}} = -Jz \left(\frac{\phi}{\sqrt{2S - \bar{n}}} \hat{S}^+ + \frac{\phi^*}{\sqrt{2S - \bar{n}}} \hat{S}^- \right) - \mu (\hat{S}^z + S) \quad (\text{B.8})$$

En se souvenant que $\hat{S}^+ = \hat{S}^x + i\hat{S}^y$ et $\hat{S}^- = \hat{S}^x - i\hat{S}^y$, le hamiltonien devient :

$$\hat{H} = -Jz \left(\frac{\phi + \phi^*}{\sqrt{2S - \bar{n}}} \hat{S}^x + i \frac{\phi - \phi^*}{\sqrt{2S - \bar{n}}} \hat{S}^y \right) - \mu (\hat{S}^z + S) \quad (\text{B.9})$$

En otant le terme d'énergie constante μS , le hamiltonien peut donc comme annoncé se réécrire sous la forme d'un hamiltonien de spin 1/2 plongé dans un champ magnétique effectif :

$$\hat{H} = -\mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (\text{B.10})$$

où l'on a :

$$B^x = \frac{Jz(\phi + \phi^*)}{\sqrt{2S - \bar{n}}} \quad ; \quad B^y = \frac{iJz(\phi - \phi^*)}{\sqrt{2S - \bar{n}}} \quad ; \quad B^z = \mu \quad (\text{B.11})$$

Références

- [1] I. BLOCH, J. DALIBARD et W. ZWERGER, « Many-body physics with ultracold gases », *Rev. Mod. Phys.*, vol. 80, p. 885 – 964, 2008.
- [2] J. ZAKRZEWSKI, « Mean-field dynamics of the superfluid-insulator phase transition in a gas of ultracold atoms », *Phys. Rev. A*, vol. 71, p. 043601, 2005.
- [3] M. SNOEK et W. HOFSTETTER, « Two-dimensional dynamics of ultracold atoms in optical lattices », *Phys. Rev. A*, vol. 76, p. 051603, 2007.
- [4] J. WERNSDORFER, M. SNOEK et W. HOFSTETTER, « Lattice-ramp-induced dynamics in an interacting Bose-Bose mixture », *Phys. Rev. A*, vol. 81, p. 043620, 2010.
- [5] W. BAKR, A. PENG, M. TAI, R. MA, J. SIMON, J. GILLEN, S. FÖLLING, L. POLLET et M. GREINER, « Probing the Superfluid-to-Mott Insulator Transition at the Single-Atom Level », *Science*, vol. 329, p. 547 – 550, 2010.
- [6] D. JAKSCH et P. ZOLLER, « The Cold Atom Hubbard Toolbox », *Ann. Phys.*, vol. 315, p. 52–79, 2005.
- [7] N. ASHCROFT et N. MERMIN, *Solid State Physics*. Brooks/Cole, 1976.
- [8] J. ZHANG, C. SHEN et W. LIU, « Quantum quench dynamics of the Bose-Hubbard model at finite temperatures », *Phys. Rev. A*, vol. 83, p. 063622, 2011.
- [9] M. SNOEK, « Rigorous mean-field dynamics of lattice bosons : quenches from the Mott insulator ». [arXiv:1101.5006v3](https://arxiv.org/abs/1101.5006v3), 2011.
- [10] H. BRUUS et K. FLENSBERG, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*. Oxford University Press, 2004.
- [11] Y. KATO et N. KAWASHIMA, « Finite-size scaling for quantum criticality above the upper critical dimension : Superfluid-Mott-insulator transition in three dimensions », *Phys. Rev. E*, vol. 81, p. 011123, 2010.
- [12] L. LANDAU et E. LIFSCHITZ, *Statistical Physics*, vol. 5. Oxford University Press, 1999.
- [13] A. POLKOVNIKOV, « Microscopic diagonal entropy and its connection to basic thermodynamcis relation », *Ann. Phys.*, vol. 326, p. 486 – 499, 2011.
- [14] B. SCIOLLA et G. BIROLI, « Quantum quneches and off-equilibrium dynamical transition in the infinite-dimensionnal Bose-Hubbard model », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 220401, 2010.
- [15] L. SANTOS, A. POLKOVNIKOV et M. RIGOL, « Entropy of isolated quantum systems after a quench ». [arXiv:1103.0557](https://arxiv.org/abs/1103.0557), 2011.
- [16] R. JOSZA, « Fidelity for Mixed Quantum States », *J. Mod. Opt.*, vol. 41, p. 2315 – 2324, 1994.
- [17] M. GREINER, *Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials*. Thèse doctorat, Ludwig-Maximilians-Universität München, 2003.
- [18] B. PEDEN, *Atoms in Rotating Lattices and Cavity QED : Measurements of Atomic Dynamics*. Thèse doctorat, University of Colorado, 2010.
- [19] T. HOLSTEIN et H. PRIMAKOFF, « Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet », *Phys. Rev.*, vol. 58.