



HAL
open science

Miroirs de Bragg pour ondes de matière et apport de la supersymétrie aux potentiels exponentiels

Charlotte Fabre

► **To cite this version:**

Charlotte Fabre. Miroirs de Bragg pour ondes de matière et apport de la supersymétrie aux potentiels exponentiels. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2012. Français. NNT: . tel-00749622

HAL Id: tel-00749622

<https://theses.hal.science/tel-00749622>

Submitted on 7 Nov 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Université Toulouse 3 Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)

Cotutelle internationale avec :

Présentée et soutenue par :
Charlotte Fabre

Le 30 août 2012

Titre :

Miroirs de Bragg pour ondes de matière et apport de la supersymétrie aux potentiels exponentiels

ED SDM : Physique de la matière - CO090

Unité de recherche :

Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité

Directeur(s) de Thèse :

David Guéry-Odelin

Rapporteurs :

Laurence Pruvost

Olivier Gorceix

Autre(s) membre(s) du jury :

Pierre Pujol

Président

Vincent Josse

Examineur

Antoine Monmayrant

Examineur

Remerciements

Le travail de thèse qui est reporté dans ce manuscrit a été effectué au Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité. Je voudrais commencer par remercier tout particulièrement le directeur et le sous-directeur du laboratoire : respectivement Jacques Vigué et Jean-Marc L'Hermite pour m'avoir accueillie dans le laboratoire pendant ces trois ans.

Je tiens ensuite à remercier vivement les membres de mon jury de thèse : Laurence Pruvost et Olivier Gorceix qui ont été rapporteurs de ce manuscrit de thèse, Pierre Pujol pour avoir présidé le jury et Antoine Monmayrant et Vincent Josse pour leurs remarques constructives sur le manuscrit et les résultats.

Je voudrais aussi remercier chaleureusement mon équipe et surtout mon directeur de thèse David Guéry-Odelin qui m'a accueillie dans l'équipe en mars 2009 pour mon stage de M2. Merci pour ton optimisme constant qui remonte le moral, pour tes idées nouvelles chaque jour, et pour avoir été présent à la fin de la thèse pour la rédaction et les répétitions de soutenance pendant tes vacances ! Presque la moitié de ma thèse a été consacrée à la remise en marche de la manip. J'ai été très grandement aidée par Thierry Lahaye, Renaud Mathevet et Gianluca Gattobigio pour remonter l'ensemble du dispositif expérimental. Merci à tous les trois pour tout ce que vous m'avez apporté, Thierry pour tout ce que tu m'as appris sur la manip, Gianluca pour m'avoir donné tous les petits trucs pour dompter le Monster (et il y en a beaucoup !) et enfin merci à Renaud pour ta bonne humeur et pour nos discussions toujours agréables. Je vous souhaite bonne route à tous les trois. Concernant l'équipe, je voudrais continuer par remercier mes deux co-thésards préférés : François Vermersch et Pierrick Cheiney. J'ai vraiment apprécié le soutien mutuel avec toi François puisque nous avons commencé la même année et Pierrick tu as été un formidable binôme de manip ! Les prises de données auraient été moins fun sans toi ! Merci à Stéphane Faure pour avoir réalisé le logiciel de contrôle des séquences de la manip. Merci à Bertrand Georgeot pour les simulations. Enfin, merci à ceux qui ont été présents dans l'équipe à un moment ou un autre et bon courage aux nouveaux thésards Gabriel Condon et François Damon !

Je voudrais aussi remercier les services techniques du labo ; le service électronique : Thierry, Philippe et Gilles, le service mécanique : Daniel, Michel et Gérard (profite de ta retraite !), le service soutien aux expériences : William, Elsa, Laurent et Stéphane et le service informatique : Roland et Emmanuelle. Merci au secrétariat : Agnès et Marie-France pour le début de ma thèse et Christine et Sylvie pour la fin. Merci à toutes les quatre pour

avoir toujours été disponibles et pour toutes les commandes passées que nécessite toute reconstruction d'expérience.

Je voudrais dire merci aux chercheurs du labo que j'ai côtoyés tous les jours dans les couloirs et à la salle café pour leur gentillesse. Merci donc à Jean Marc, Jacques, Aziz, Cécile, Benoît, Alexandre, Patrick, Mathias, Sébastien... Un merci particulier à Béatrice pour sa disponibilité et pour m'avoir donné la possibilité de participer à la Novela pour les 50 ans du laser. Un autre merci particulier à Valérie pour son enthousiasme (t'entendre rire à l'autre bout du couloir faisait toujours chaud au coeur!) et pour nos discussions. Merci aussi aux autres doctorants du labo et de l'institut : Steven, Nicolas, Wesley, Ayan, Arun, Hugo, Simon, Jonathan, Jessica, David, et à ceux que j'oublie.

Pendant ma thèse, j'ai eu la chance de faire des enseignements, je voudrais donc remercier l'équipe d'enseignement de biophysique de la faculté de pharmacie et plus particulièrement Cécile Bon pour m'avoir accueillie dans l'équipe et m'avoir fait confiance. Je voudrais aussi remercier Cécile Cielas, Diane De Paepe et Mickaël Pasek pour les bons moments passés en TP.

Je voudrais dire un grand merci à toutes les personnes qui sont venues me voir à ma soutenance, je ne peux toutes les citer mais je les remercie vivement. Il est important pendant les trois longues années d'une thèse de ne pas faire que travailler! Je voudrais donc remercier mes amis et ma famille qui ont été là pour ça! Merci aux membres de ma famille d'être présents pour les coups durs et les moments de joies! Merci à ma maman, mon papa, mon frère, mes cousins et mes cousines, mes oncles et tantes, ma mamie. Un merci particulier à ma marraine et ma tante qui ont fait le déplacement pour ma soutenance! Merci à Pauline, Manue, Benjamin et Manu pour les week-ends annuels où les jeux de sociétés avaient une grande place! Merci aux amis du cheval pour m'avoir permis de décompresser et de passer à coup sûr un très bon moment tous les jeudis soirs : Marlène, Pauline, Camille, Anne, Catherine, Fred, et le groupe de 21 h (et merci aux chevaux Qrescendo et Sympatico qui m'en ont fait baver!!). Merci à mes amis Juju, Marie, Yoyo, Jewem, Cécé, Nownow et la bande pour les soirées où on a réussi à se retrouver. Je voudrais remercier aussi mon Bruno préféré pour être toujours aussi enthousiaste et passionné depuis les années lycées! Merci enfin à mes chers loulou(tte)s névrosé(e)s Paul, Emma, Elise, Mick, Faf, Vincent, Renaud, Jipi, Mag pour les week ends ou journée skiiiiii, les semaines à Seignosse, les soirées jeux, les soirées fromage/vin rouge, les soirées filles ou juste un match de foot!! Avec vous, je me sens bien et la thèse aurait été beaucoup moins facile sans vous!

Je voudrais finir par remercier deux personnes qui compte énormément pour moi : ma chère Lise, tu as toujours été là malgré un emploi du temps surchargé que ce soit pendant tes années agreg ou ta première année de prof! Merci d'avoir été là malgré tout dans les moments de doutes ou dans les moments joyeux. En espérant enseigner un jour à tes côtés, je te souhaite le meilleur. Je voudrais finir par remercier mon Christophe pour avoir été là tout le temps. On a vécu notre thèse ensemble et on s'est soutenu l'un l'autre. Merci pour me remonter le moral dès que je ne vais pas bien. Merci pour tous les bons moments passés dans notre appart et merci de t'occuper si bien de moi.

Table des matières

Introduction	7
I Réalisation de condensats de Bose-Einstein à partir d'un piège dipolaire croisé	17
I.1 Introduction	17
I.2 Pièges dipolaires	18
I.2.1 La source atomique	19
I.2.2 Considérations théoriques sur le potentiel dipolaire	20
I.2.3 Caractéristiques du faisceau dipolaire	22
I.2.4 Mise en forme du faisceau dipolaire et contrôle de la puissance	23
I.2.5 Séquence expérimentale et durée de vie dans la pince optique	26
I.2.6 Piège dipolaire croisé	28
I.3 Réalisation d'un condensat	30
I.3.1 Considérations théoriques sur la condensation de Bose-Einstein	30
I.3.2 Obtention du condensat	32
I.3.3 Distillation de spin	37
I.4 Système d'imagerie	38
I.4.1 Mode PMO	40
I.4.2 Mode CBE	40
I.4.3 Résolution optique	40
I.5 Conclusion	41
II Mise en place et caractérisation d'un réseau optique	43
II.1 Introduction historique	43
II.2 Mise en place du réseau optique	46
II.2.1 Rappels théoriques sur les réseaux optiques et introduction de grandeurs caractéristiques	46
II.2.2 Dispositif expérimental	47
II.3 Mesure de la profondeur des puits de potentiel par diffraction	52
II.3.1 Diffraction Raman-Nath	52
II.3.2 Au-delà de l'approximation Raman-Nath	55
II.3.3 Caractérisation expérimentale	56
II.3.4 Mesure du pas du réseau	58

II.4 Conclusion	59
III Rappel sur une particule dans un potentiel périodique en mécanique quantique	61
III.1 Généralités sur le calcul de la structure de bande	62
III.1.1 Le théorème de Bloch	62
III.1.2 Calcul de la structure de bandes d'un potentiel périodique	63
III.2 Potentiel sinusoïdal et équation de Mathieu	65
III.2.1 Equation de Mathieu	65
III.2.2 Influence du nombre de sites	67
III.2.3 Comparaison avec un potentiel périodique de puits carrés	69
III.3 Conclusion	71
IV Sonder un potentiel périodique	75
IV.1 Particule dans un potentiel périodique avec une enveloppe gaussienne	76
IV.1.1 Effet de l'enveloppe sur le diagramme de stabilité des équations de Mathieu	76
IV.1.2 Contributions des transitions Landau-Zener	76
IV.2 Du condensat de Bose-Einstein à un paquet d'ondes de matière qui se propage	78
IV.2.1 Découplage du condensat et dispersion de vitesse	79
IV.2.2 Phase d'accélération	80
IV.3 Interaction du paquet d'ondes de matière avec le réseau	83
IV.3.1 Dispositif expérimental	83
IV.3.2 Dynamique de diffusion du paquet d'ondes pour une profondeur donnée	84
IV.3.3 Réponse du système en fonction de la profondeur	86
IV.3.4 Discussion de la dynamique sans résolution	88
IV.4 Conclusion	88
V Etude analytique de solutions de l'équation de Schrödinger pour des potentiels de forme exponentielle	91
V.1 Introduction	92
V.2 Potentiels transparents	93
V.2.1 Introduction	93
V.2.2 Etude du potentiel gaussien	93
V.2.3 Etude du potentiel transparent	95
V.2.4 Comparaison et conclusion	95
V.3 Résolution de l'équation de Schrödinger pour des potentiels de forme exponentielle	96
V.3.1 Les potentiels	96
V.3.2 Les états liés (a fixé)	98
V.3.3 Les états de diffusion	99

V.4	Création de familles de potentiels : application de la supersymétrie en mécanique quantique ondulatoire (SUSY QM)	101
V.4.1	SUSY QM, le formalisme	102
V.4.2	Application au potentiel étudié	105
V.5	Etude similaire pour des potentiels définis sur un demi-espace	106
V.5.1	Définition du potentiel et fonctions d'onde	107
V.5.2	Les états liés	107
V.5.3	Les états de diffusion	109
V.5.4	Application de la supersymétrie en mécanique quantique à $U_+(x)$. .	110
V.6	Tests d'approximations	112
V.6.1	La méthode variationnelle	112
V.6.2	Les approximations semiclassiques.	115
V.7	Conclusion	121
Conclusion		123
A Généralisation à des potentiels asymétriques		127
A.1	Détermination des états liés	127
A.2	États de diffusion	128
A.2.1	Puits de potentiel asymétrique	128
A.2.2	Barrière asymétrique	129
B Les potentiels en x et x		131
B.1	Détermination des fonctions d'onde et des états liés	131
B.2	Application du formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique . .	132
B.3	Tests d'approximations	133
B.3.1	Approximation WKB	133
B.3.2	Méthode SWKB pour le potentiel $V_+(x)$	133
B.3.3	Méthode variationnelle	133
B.3.4	Comparaison des approximations	134
C Publications		137
C.1	Realization of a Distributed Bragg Reflector for Propagating Guided Matter Waves	137
C.2	A class of exactly solvable models to illustrate supersymmetry and test approximation methods in quantum mechanics	143
Bibliographie		151

Introduction

La diffraction de rayons X par des cristaux de chlorure de sodium et chlorure de potassium a été démontrée pour la première fois par William Henry Bragg et son fils William Lawrence Bragg en 1912 [1, 2]. Dans cette expérience dont le principe est résumé sur la figure 1(a), l'onde électromagnétique est diffractée par une structure périodique, en l'occurrence celle qui résulte de l'ordonnement des atomes dans le cristal. Le déphasage entre les ondes réfléchies par deux plans successifs séparés d'une distance d s'écrit $\phi = 2n_i\pi d/\lambda$ avec λ la longueur d'onde du rayonnement X utilisé et n_i l'indice du milieu i . La condition de Bragg qui traduit les interférences constructives des ondes réfléchies s'écrit sous la forme

$$2d \sin \Theta = n\lambda,$$

où n est un entier et Θ l'angle de diffraction. Elle correspond à un déphasage cumulé $\phi = \pi [\pi]$. Cette relation fait apparaître clairement la nécessité d'avoir la longueur d'onde de l'ordre de grandeur de la distance entre les plans. On comprend par suite pourquoi il est nécessaire d'avoir recours à des ondes X, très énergétiques et donc de courte longueur d'onde, pour explorer la structure de la matière. La répartition lumineuse de diffraction donne directement accès à la structure et plus précisément à l'agencement des atomes qui composent un solide, elle en donne en définitive sa transformée de Fourier. Cette méthode a ouvert un champ des possibles considérable en physique puisqu'elle permet in fine d'observer la matière à l'échelle atomique. Elle a valu à ses auteurs le prix Nobel en 1915. Le court délai entre l'observation de cette diffraction et la récompense Nobel témoigne de l'importance immédiatement reconnue par la communauté des physiciens de cette découverte. Les applications de cette technique sont très nombreuses, et nous reportons le lecteur intéressé par la richesse des développements qu'a connus cette découverte au livre "X-Ray Multiple-Wave Diffraction : Theory and Application" [3]. Encore tout récemment, l'existence des quasi-cristaux qui a valu à Dan Shechtman le prix Nobel de Chimie de 2011 s'appuyait sur des observations faites avec l'aide de cette technique (voir figure 1(b)).

Une application plus récente porte sur les miroirs optiques diélectriques. L'avantage de ce type de miroirs constitués d'une succession de couches diélectriques alternées périodiquement par rapport aux miroirs métalliques est leur plus grande probabilité de réflexion pour une longueur d'onde donnée : plus de 99 % contre 96 %. Ainsi, pour la longueur d'onde du laser utilisé, la puissance perdue après réflexion sur plusieurs miroirs est minimisée en utilisant des miroirs diélectriques (5 % contre 20 % de puissance perdue après 5

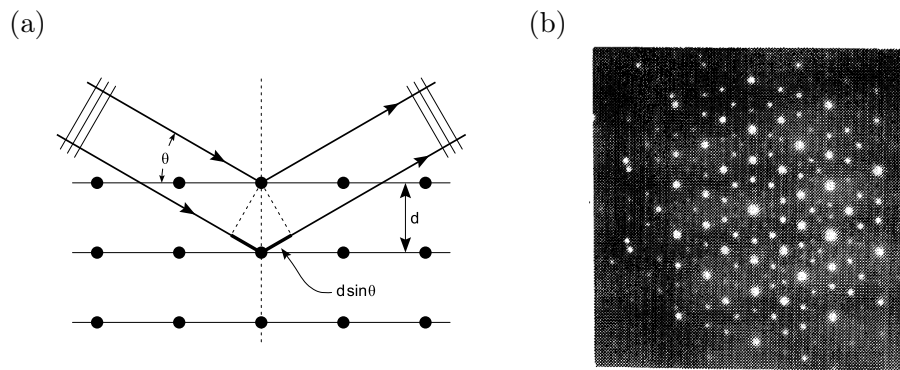


FIGURE 1 – (a) Schéma de principe de la diffraction de Bragg sur une structure périodique. (b) Figure de diffraction de Bragg d'un quasi-cristal. Cette figure est issue de la publication [4] montrant l'existence des quasi-cristaux.

miroirs). Il est donc plus intéressant d'utiliser des miroirs diélectriques dans les dispositifs laser comportant de nombreux éléments optiques, ou encore dans des cavités optiques.

Une application de ces miroirs diélectriques a permis le développement de diodes laser à cavité verticale émettant par la surface ou VCSEL en anglais ("vertical-cavity surface-emitted laser"). Ces diodes émettent un rayonnement laser perpendiculaire à la surface, contrairement aux lasers à semi-conducteurs plus traditionnels qui émettent leur rayonnement par la tranche. La zone active de ces diodes est constituée d'un ou plusieurs puits quantiques. Elle est prise en sandwich par deux couches de matériau structuré périodiquement réalisant deux miroirs de Bragg qui forment une cavité verticale. L'avantage de ces diodes est qu'on a accès à une facette du laser pendant leur fabrication. On peut donc vérifier leur bon fonctionnement au cours de la fabrication ce qui permet un rendement bien meilleur que les diodes laser émettant par la tranche pour lesquelles on ne sait si elle fonctionne que lorsque la fabrication est terminée. De plus, leur courant de seuil est plus faible que les diodes émettant par la tranche ce qui permet d'avoir une plus faible consommation. Les diodes lasers à cavité verticale émettant par la surface ont de nombreuses applications comme, par exemple, l'impression laser, le transport d'information par fibre optique ou le stockage de données. Un autre domaine en plein développement est celui des cristaux photoniques où les structures périodiques sont cette fois-ci façonnées pour guider la lumière.

Le domaine des ondes électromagnétiques ne fut pas le seul à exploiter cet effet de diffraction par un milieu de structure périodique. En effet la matière adopte dans certaines conditions un comportement ondulatoire. Ce phénomène de dualité onde corpuscule pour des particules massiques a été proposé par Louis de Broglie en 1923 dans sa thèse de doctorat [5]. Sur la base du concept de quadrivecteur issu de la relativité restreinte, Louis de Broglie a formulé l'hypothèse qu'à toute particule de masse m non nulle et de quantité de mouvement $p = mv$, dans la limite de vitesse non relativiste, est associée une onde de

longueur d'onde donnée par la relation :

$$\lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{p}, \quad (1)$$

où h est la constante de Planck et λ_{dB} est appelée longueur d'onde de de Broglie. La première preuve expérimentale de cette hypothèse a été obtenue par une expérience de type diffraction de Bragg par un cristal de nickel avec des électrons. C'est la fameuse expérience de Clinton Davisson et Lester Germer en 1927 [6]. Une autre expérience de diffraction d'un jet d'électrons a été réalisée la même année par George Paget Thomson. Le choix des électrons comme particule matérielle est apparu le plus simple du fait de la masse légère des électrons qui confère pour une vitesse donnée une longueur d'onde de de Broglie relativement grande. Toutefois, la première expérience de diffraction d'atomes intervient peu après, elle a été réalisée par Immanuel Estermann et Otto Stern en 1930. Ils ont observé la diffraction d'atomes d'hélium sur la surface d'un cristal LiF [7]. C'est ici la structure périodique de la surface qui compte car les atomes d'hélium ne pénètrent pas le cristal à la différence des électrons ou des rayons X. Cette expérience a une importance considérable car elle montre pour la première fois le comportement ondulatoire non pas d'une particule élémentaire tel l'électron mais d'un objet composite. La diffraction de Bragg a aussi été observée pour des neutrons en 1946 par Enrico Fermi et Leona Marshall [8].

L'étude et l'exploitation du comportement ondulatoire de la matière a fait émerger le domaine de l'optique atomique. De nombreuses expériences sont directement inspirées de l'optique des ondes électromagnétiques. Citons par exemple l'expérience des fentes d'Young avec un jet d'hélium superfluide [9], ou la diffraction d'un jet de sodium sur une surface périodique [10]. De plus l'interaction d'atomes avec des potentiels répulsifs a permis de réaliser des miroirs atomiques construits avec des ondes évanescentes [11] et plus récemment avec des champs magnétiques [12]. Les atomes sont réfléchis lorsqu'ils atteignent la barrière de potentiel. Dans ce sens, ces miroirs atomiques peuvent être considérés comme l'équivalent optique des miroirs métalliques.

Depuis quelques années, de nombreuses expériences ont été réalisées sur le comportement des atomes froids dans des potentiels optiques périodiques créés par des ondes lumineuses qui interfèrent. L'analogie avec la physique des solides a suscité un grand intérêt [13]. Ainsi la diffraction de Bragg a été étudiée pour les atomes ainsi que son utilisation pour construire des "lames séparatrices" à atomes, et des interféromètres [14, 15].

L'avancée des techniques de refroidissement laser, de piégeage [16, 17, 18] et de refroidissement par évaporation ont permis d'atteindre le régime de dégénérescence quantique. En effet, la condensation de Bose-Einstein prédite en 1925 par Albert Einstein sur la base des travaux de Satyendra Nath Bose a été réalisée pour la première fois avec des gaz dilués en 1995 dans les équipes de Eric Cornell et Carl Wieman avec des atomes de rubidium [19] et de Wolfgang Ketterle avec des atomes de sodium [20]. Tous trois ont été récompensés pour cette découverte par le prix Nobel de Physique en 2001. Les condensats de Bose-Einstein apparaissent lorsque la densité dans l'espace des phases devient importante, de telle sorte

qu'un nombre macroscopique de particules s'accumule dans l'état fondamental. Dans ce régime, la température des atomes est en dessous d'une température critique, ce qui se traduit par l'apparition des condensats lorsque la longueur d'onde de de Broglie λ_{dB} est de l'ordre de la distance moyenne entre atomes. Les atomes des condensats de Bose-Einstein dont la cohérence a été démontrée dans la référence [21], peuvent être extraits pour obtenir un "laser à atomes", équivalent à une impulsion laser dans le domaine optique. Les premiers "lasers à atomes" ont été réalisés en utilisant des impulsions radio-fréquences [22] ou des impulsions Raman [23]. En appliquant une onde radio-fréquence continuellement, il est possible d'obtenir un "laser à atomes" quasi-continu, seulement limité par le nombre d'atomes dans le condensat [24]. Les gaz quantiques dégénérés offrent ainsi de nouveaux systèmes pour le développement de l'optique atomique. Par opposition aux expériences pionnières des années 90, la cohérence n'est pas obtenue par filtrage d'une source thermique, mais est intrinsèque au milieu. Notre dispositif expérimental permet d'obtenir de tels paquets d'ondes de matière par une méthode de découplage optique.

Les résultats expérimentaux présentés dans ce manuscrit s'inscrivent dans la continuité des travaux de notre équipe qui relèvent de l'optique atomique guidée, et plus spécifiquement de l'étude de l'interaction d'une onde de matière se propageant sur un défaut créé optiquement [25, 26, 27]. L'onde de matière créée à partir d'un condensat de Bose-Einstein et qui se propage dans un guide joue ainsi le rôle d'une sonde qui est susceptible d'explorer des potentiels complexes. Dans ce manuscrit, nous présenterons d'une part des résultats expérimentaux sur la diffusion d'une onde de matière à travers un réseau optique dans une géométrie unidimensionnelle et d'autre part des résultats analytiques sur la diffusion d'une onde de matière à travers des potentiels de forme exponentielle. Nous montrerons dans ce dernier volet de la thèse l'apport de la supersymétrie appliquée à la mécanique quantique.

L'expérience que nous décrivons démontre la réflexion par diffraction de Bragg en géométrie 1D de certaines classes de vitesses du condensat de Bose-Einstein incident. Ce miroir est l'analogie en optique du miroir diélectrique où la succession des couches diélectriques est ici réalisée par une succession de feuillets lumineux non-résonnants qu'explorent l'onde de matière lors de sa propagation [28]. Pour mieux saisir la physique de la réflexion de Bragg dans notre contexte des ondes de matière, il nous est apparu utile dans cette introduction de rappeler les éléments fondamentaux d'un miroir diélectrique en optique.

Rappels théoriques sur les miroirs diélectriques

On considère une onde électromagnétique de longueur d'onde dans le vide λ_0 de pulsation $\omega = 2\pi c/\lambda$ se propageant à travers un milieu diélectrique constitué de bicouches alternées milieu 1 - milieu 2 d'indices n_1 et n_2 comme représenté sur la figure 2. Les chemins optiques dans chaque milieu sont a priori différents. Dans chacun des deux milieux, le champ électrique de l'onde est donné par la partie réelle de :

$$E_i(x) = E_{d,i}e^{-ik_i x} + E_{g,i}e^{+ik_i x}, \quad (2)$$

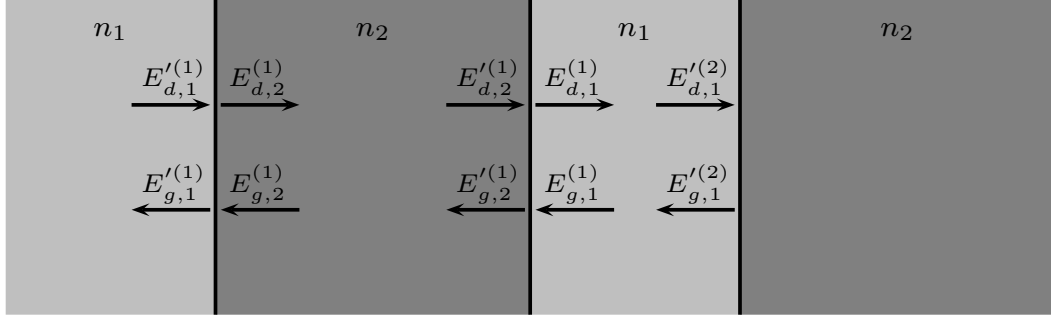


FIGURE 2 – Schéma d'un milieu diélectrique composé de bicouches 1 et 2 d'indices n_1 et n_2 et représentation des champs électriques allant vers la gauche et vers la droite avant et après passage à travers une interface.

où $i = 1, 2$ l'indice d (respectivement g) correspond à une onde se dirigeant vers la droite (resp. vers la gauche)¹. Deux phénomènes différents sont à prendre en compte dans le calcul de la propagation de l'onde dans les deux milieux : le passage d'un milieu à un autre et la propagation dans chacun des milieux.

Au niveau des interfaces entre les milieux, le champ électrique et le champ magnétique sont continus. Ce dernier s'écrit : $\mathbf{B} = \mathbf{k} \wedge \mathbf{E}/\omega$ où $k_i = 2\pi n_i/\lambda_0$. Ces conditions s'écrivent sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} E'_{g,1}^{(1)} \\ E'_{d,1}^{(1)} \end{pmatrix} = P_{1,2} \begin{pmatrix} E_{g,2}^{(1)} \\ E_{d,2}^{(1)} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad P_{1,2} = \frac{1}{\tau_{12}} \begin{pmatrix} 1 & \rho_{12} \\ \rho_{12} & 1 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

où τ_{12} et ρ_{12} sont les coefficients de transmission et de réflexion de l'onde se propageant du milieu 1 au milieu 2 lorsqu'on considère que l'onde incidente provient de la gauche ($E_{g,2}^{(1)} = 0$). Ces deux coefficients s'écrivent en fonction des indices n_i des milieux i :

$$\tau_{12} = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad \text{et} \quad \rho_{12} = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}. \quad (4)$$

On remarque que : $\tau_{12} \neq \tau_{21}$ et $\rho_{12} = -\rho_{21}$. De plus, la conservation du flux donne une relation supplémentaire qui se vérifie facilement $\tau_{12}\tau_{21} + \rho_{12}^2 = 1$.

La propagation dans un milieu i jusqu'à la prochaine interface introduit un déphasage de l'onde :

$$\begin{pmatrix} E_{g,i}^{(1)} \\ E_{d,i}^{(1)} \end{pmatrix} = D_i \begin{pmatrix} E'_{g,i}^{(1)} \\ E'_{d,i}^{(1)} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad D_i = \begin{pmatrix} e^{-i\phi_i} & 0 \\ 0 & e^{+i\phi_i} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

D_i est la matrice de déphasage et $\phi_i = k_i \ell_i = 2\pi n_i \ell_i / \lambda_0$ est le déphasage de l'onde dans la couche i d'épaisseur ℓ_i .

Grâce aux matrices de passage à travers une interface et de déphasage, on peut définir une matrice de propagation S de l'onde à travers une bicouche du matériau. Comme illustré sur la figure 2, l'onde passe à travers l'interface 1-2, se propage dans le milieu 2, passe ensuite

1. Le champ réel est de la forme $\mathcal{R}(E_i e^{i\omega t})$.

l'interface 2-1 et se propage dans le milieu 1. On déduit la relation :

$$\begin{pmatrix} E'_{g,1}(1) \\ E'_{d,1}(1) \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} E'_{g,1}(2) \\ E'_{d,1}(2) \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad S = P_{12}D_2P_{21}D_1, \quad (6)$$

où S est la matrice de propagation de l'onde à travers un motif. Pour une onde se propageant à travers N motifs de bicouches, la matrice de propagation sera égale à S^N dans l'équation (6).

La matrice S s'écrit :

$$S = \frac{1}{\tau^2} \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} e^{-i\phi_2} & 0 \\ 0 & e^{+i\phi_2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & -\rho \\ -\rho & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} e^{-i\phi_1} & 0 \\ 0 & e^{+i\phi_1} \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$\Leftrightarrow S = \frac{1}{\tau^2} \begin{pmatrix} e^{-i\phi_1} (e^{-i\phi_2} - \rho^2 e^{+i\phi_2}) & 2i \sin \phi_2 \rho e^{+i\phi_1} \\ -2i \sin \phi_2 \rho e^{-i\phi_1} & e^{-i\phi_1} (e^{+i\phi_2} - \rho^2 e^{-i\phi_2}) \end{pmatrix} \quad (8)$$

où $\rho = \rho_{12}$ et $\tau^2 = \tau_{12}\tau_{21}$. Après calcul, on trouve que le déterminant de S vaut 1.

La matrice S se diagonalise sous la forme $S = T^{-1}MT$. La matrice de propagation de l'onde à travers N bicouches est donc donnée par $S^N = T^{-1}M^N T$. Les probabilités de transmission et de réflexion sont données en supposant que l'onde provient de la gauche c'est-à-dire que $E'_{g,1}(2) = 0$ dans l'équation (6). On peut ainsi déduire les coefficients et par suite les probabilités de réflexion et de transmission :

$$\rho_N = \frac{(S^N)_{12}}{(S^N)_{22}} \quad \text{soit} \quad R_N = |\rho_N|^2, \quad (9)$$

$$\tau_N = \frac{1}{(S^N)_{22}} \quad \text{soit} \quad T_N = |\tau_N|^2. \quad (10)$$

Etudions maintenant l'influence des phases ϕ_1 et ϕ_2 introduite par les bicouches sur la réflexion R_N . Nous traçons sur la figure 3 la probabilité de réflexion R_N pour différents nombres de bicouches : $N = 1, 2, 5$ et 50 en fonction des phases ϕ_1 et ϕ_2 cumulées lors de la propagation dans chaque couche diélectrique. Pour $N = 1$, la réflexion n'est non nulle que pour $\phi_2 \simeq \pi/2$ [π] où elle vaut environ 0.06. Lorsque le nombre de motif N augmente, on voit que la probabilité de réflexion tend vers 1 sur toutes les lignes $\phi_1 + \phi_2 = \pi$ [2π], et on retrouve bien le cas "quart d'onde" avec $\phi_1 = \phi_2 = \pi/2$ [π]. Ainsi on peut généraliser l'accord de phase nécessaire pour la réflexion de Bragg après propagation à travers N motifs de bicouches par cette équation $\phi_1 + \phi_2 = \pi$ [2π] qui se réécrit : $n_1\ell_1 + n_2\ell_2 = p\lambda/2$ avec p entier. Ainsi il y a réflexion de Bragg lorsque la phase accumulée par l'onde sur une période de la structure périodique est égale à π . Avec cette condition sur la phase, on retrouve la forme plus générale de la condition de Bragg : $2d \sin \Theta = n\lambda_0$ en considérant que $d = n_1\ell_1 + n_2\ell_2$ et qu'il y a réflexion sur un motif "perpendiculaire" à la direction de propagation ($\Theta = \pi/2$).

Ce calcul justifie l'hypothèse faite dans la plupart des ouvrages traitant de ce problème où est posé le plus souvent sans justification la contrainte $\phi_1 = \pi/2$ [π] et $\phi_2 = \pi/2$ [π].

Sous cette hypothèse, les couches 1 et 2 sont de types "quart d'onde" : $n_1\ell_1 = n_2\ell_2 = (2p+1)\lambda_0/4$. La matrice S prend alors la forme simplifiée suivante :

$$S = -\frac{1}{\tau^2} \begin{pmatrix} 1 + \rho^2 & 2\rho \\ 2\rho & 1 + \rho^2 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

La diagonalisation de cette matrice donne :

$$S = T^{-1}MT \quad \text{avec} \quad M = \frac{1}{\tau^2} \begin{pmatrix} (1 + \rho)^2 & 0 \\ 0 & (1 - \rho)^2 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

La matrice de propagation de l'onde à travers N bicouches est donc donnée par :

$$S^N = T^{-1}M^NT = \frac{1}{\tau^{2N}} T^{-1} \begin{pmatrix} (1 + \rho)^{2N} & 0 \\ 0 & (1 - \rho)^{2N} \end{pmatrix} T, \quad (13)$$

$$S^N = \frac{1}{\tau^{2N}} \begin{pmatrix} (1 + \rho)^{2N} + (1 - \rho)^{2N} & (1 + \rho)^{2N} - (1 - \rho)^{2N} \\ (1 + \rho)^{2N} - (1 - \rho)^{2N} & (1 + \rho)^{2N} + (1 - \rho)^{2N} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Les probabilités de transmission et de réflexion sont données par les équations (10) et (9). On en déduit le coefficient de réflexion pour un matériau de type "quart d'ondes" :

$$R_N = \left| \frac{(1 + \rho)^{2N} - (1 - \rho)^{2N}}{(1 + \rho)^{2N} + (1 - \rho)^{2N}} \right|^2 = \left| \frac{1 - (n_2/n_1)^{2N}}{1 + (n_2/n_1)^{2N}} \right|^2, \quad (15)$$

où on prend arbitrairement $n_1 > n_2$. Dans le cas où le nombre de bicouches N devient grand, on voit que la probabilité de réflexion tend vers 1 formant un miroir diélectrique dit miroir de Bragg. Le calcul donne, pour 1 motif, la probabilité de réflexion $R_1 = 0.06$ et pour 10 motifs, on a déjà : $R_{10} = 97.9\%$. Elle est supérieure à 99 % après une succession de seulement 12 motifs et après 20 couches elle vaut : $R = 99,99\%$. Il est donc assez facile de réaliser des matériaux ayant une grande probabilité de réflexion.

Plan

Ma thèse a donné lieu à 4 articles publiés et 1 soumis [29, 30, 31, 32, 33]. J'ai choisi de concentrer le manuscrit sur deux travaux pour lesquels j'étais très investie : un travail de nature expérimentale et un de nature théorique.

Dans le premier chapitre, je décris le dispositif expérimental permettant l'obtention d'un condensat de Bose-Einstein. Ce dispositif a été remonté quasiment à l'identique après un déménagement de Paris à Toulouse en mars 2009. Le premier condensat a été obtenu environ un an après le début de la remise en place du dispositif. Je montrerai également dans ce chapitre les quelques changements opérés sur le dispositif par rapport à la thèse d'Antoine Couvert [34].

Le deuxième chapitre est consacré à la description du potentiel périodique. J'explique

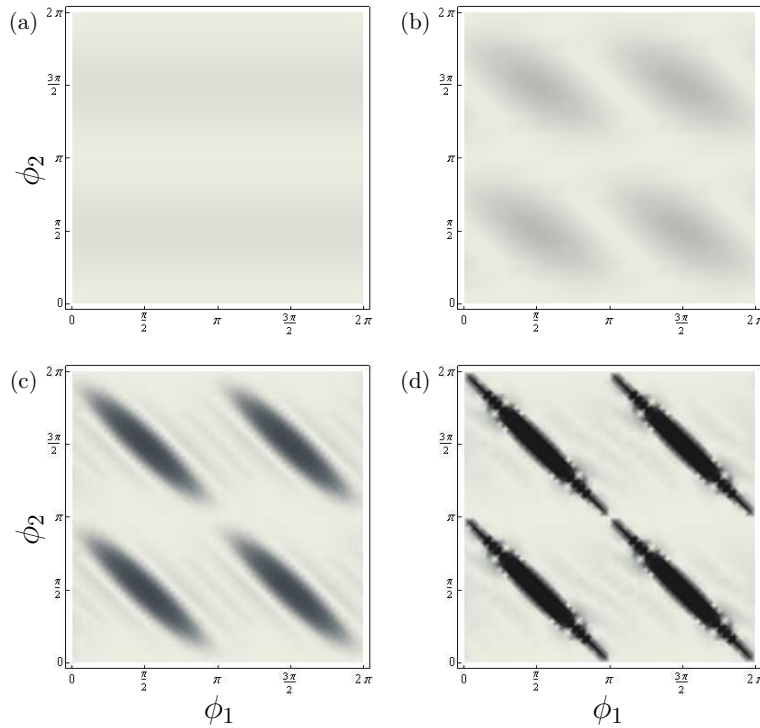


FIGURE 3 – Probabilité de réflexion en fonction des phases ϕ_1 et ϕ_2 pour un nombre de bicouches N valant (a-d) $N = 1, 2, 5, 50$. Les zones en noirs (respectivement en blancs) correspondent à une réflexion totale (resp. à une transmission totale). On remarque qu'il y a réflexion pour un grand nombre N et pour une condition sur les phases : $\phi_1 + \phi_2 = \pi[2\pi]$.

dans ce chapitre la mise en place d'un réseau optique attractif sur notre dispositif expérimental ainsi que sa caractérisation par diffraction Raman-Nath. Cette technique permet en effet de calibrer à la fois la profondeur du réseau et le grandissement de l'imagerie.

Je rappelle ensuite dans le troisième chapitre le comportement général d'une particule dans un potentiel périodique. Nous rappelons le calcul de la structure de bande et nous faisons une étude sur la stabilité des solutions de l'équation de Schrödinger, qui pour un potentiel périodique sinusoïdal n'est rien d'autre que l'équation de Mathieu. Une étude de la diffusion d'une onde plane sur un tel potentiel en fonction du nombre de périodes est aussi réalisée. Nous étudions également une autre forme de motifs périodiques : un signal carré. Nous verrons comment ce motif se rapproche plus du modèle diélectrique que le motif sinusoïdal.

Dans le quatrième chapitre, je montre l'influence d'une enveloppe gaussienne sur la réponse de diffusion d'une onde plane sur le réseau périodique. J'explique aussi la méthode utilisée pour obtenir une onde de matière à partir d'un condensat et les résultats obtenus lorsque cette onde de matière est utilisée comme une sonde du réseau périodique. Nous verrons ainsi qu'il y a réflexion de Bragg pour certaines classes de vitesses et nous ferons une étude en fonction de la profondeur du réseau.

Enfin, le dernier chapitre est une étude théorique traitant de la diffusion d'une onde

plane sur un potentiel de forme exponentielle. Je montre que les solutions d'un tel potentiel se calculent analytiquement. Cette résolution exacte permet de mettre en exergue une méthode que nous pensons trop peu connue et qui permet de construire une famille de potentiels isospectraux et avec les mêmes propriétés de diffusion. Cette méthode est la supersymétrie appliquée à la mécanique quantique. Connaître ces solutions exactes permet également de tester diverses approximations telles que les approximations semi-classiques ou l'approximation variationnelle.

Chapitre I

Réalisation de condensats de Bose-Einstein à partir d'un piège dipolaire croisé

Sommaire

I.1	Introduction	17
I.2	Pièges dipolaires	18
I.2.1	La source atomique	19
I.2.2	Considérations théoriques sur le potentiel dipolaire	20
I.2.3	Caractéristiques du faisceau dipolaire	22
I.2.4	Mise en forme du faisceau dipolaire et contrôle de la puissance	23
I.2.5	Séquence expérimentale et durée de vie dans la pince optique	26
I.2.6	Piège dipolaire croisé	28
I.3	Réalisation d'un condensat	30
I.3.1	Considérations théoriques sur la condensation de Bose-Einstein	30
I.3.2	Obtention du condensat	32
I.3.3	Distillation de spin	37
I.4	Système d'imagerie	38
I.4.1	Mode PMO	40
I.4.2	Mode CBE	40
I.4.3	Résolution optique	40
I.5	Conclusion	41

I.1 Introduction

Notre dispositif expérimental pour la réalisation de condensat de Bose-Einstein est un dispositif tout-optique, le piège qui capture les atomes est un piège dipolaire. La première démonstration de piégeage d'atomes avec un potentiel dipolaire a été faite par le groupe de

Steven Chu en 1986 [35]. Les pièges dipolaires ont l'avantage d'être très flexibles du fait des nombreux motifs possibles de répartition d'intensité dans l'espace et du contrôle en temps de l'intensité réalisable grâce aux possibilités multiples qu'offrent les nombreux éléments d'optiques existants. Le piège dipolaire que nous avons mis en place sur notre expérience a été conçu pour atteindre le régime de dégénérescence quantique.

Le dispositif expérimental a été déménagé de Paris à Toulouse en mars 2009, début de mon stage de Master 2. Durant toute la première année de ma thèse, il a été reconstruit quasiment à l'identique pour retrouver des condensats de Bose-Einstein le plus tôt possible. Les éléments de l'expérience discutés dans ce chapitre sont donc très semblables au dispositif décrit dans la thèse d'Antoine Couvert [34] qui sera citée de multiple fois dans ce chapitre. La reconstruction du dispositif n'a pas été sans complication. Ceci est vrai pour toutes les expériences et la notre n'a pas échappé à la règle. Après les problèmes de précipités de cuivre dus à la présence de glycol dans le circuit de refroidissement, les problèmes de climatisation où la température de la pièce passaient de 14°C à 28°C en 2 heures, les nombreux lasers qu'il a fallu reconstruire et les problèmes de vide, nous avons finalement réussi à obtenir la condensation de Bose-Einstein en avril 2010.

La description du dispositif commencera d'abord par la caractérisation du faisceau dipolaire avec quelques rappels théoriques et les diverses étapes pour sa mise en forme et son contrôle de puissance. Nous regarderons ensuite les conséquences de la largeur en fréquence importante du laser. Pour finir la première partie consacrée aux pièges dipolaires, nous décrirons le piège croisé permettant la condensation. La deuxième partie de ce chapitre sera consacrée aux condensats de Bose-Einstein. Nous expliciterons de manière théorique et expérimentale la signature de la transition de Bose-Einstein en décrivant la séquence expérimentale utilisée. Nous expliquerons ensuite la méthode que nous avons utilisée pour déterminer les fréquences transverses du piège à la fin de l'évaporation. Enfin nous montrerons comment contrôler les degrés de liberté internes du condensat en tirant parti d'un autre aspect avantageux du piège dipolaire. En effet le faisceau dipolaire étant très désaccordé, des champs et gradients de champs magnétiques peuvent être utilisés pour manipuler les atomes en jouant sur les différents états magnétiques disponibles. La purification dans un état magnétique donné se fait par exemple par un processus de distillation de spin dont nous décrirons le mécanisme. Le système d'imagerie sera expliqué en dernier lieu.

I.2 Pièges dipolaires

Dans cette partie, nous décrivons l'alimentation du piège dipolaire à partir d'un piège magnéto-optique (PMO) bidimensionnel. Nous présentons d'abord la première étape aboutissant au piège magnéto-optique. Après avoir rappelé quelques points théoriques essentiels sur les potentiels dipolaires, nous décrivons le dispositif mis en place pour réaliser un tel potentiel et caractériserons l'origine des pertes.

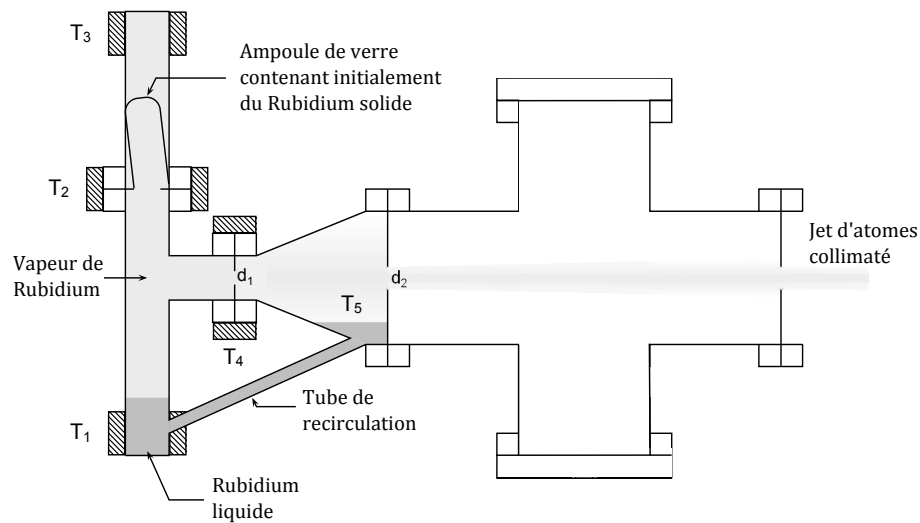


FIGURE I.1 – Schéma du four à recirculation délivrant un jet d'atomes de rubidium collimaté. Pendant toute la durée de la thèse, les expériences ont été menées avec les températures suivantes du four $T_1 = 100\text{ °C}$, $T_2 = T_3 = T_4 = 130\text{ °C}$.

I.2.1 La source atomique

La source atomique qui alimente le piège magnéto-optique est un jet collimaté d'atomes de ^{87}Rb ayant une vitesse moyenne de 300 m/s à la sortie d'un four à recirculation. Le principe du four à recirculation est détaillé dans le chapitre 2 de la thèse de Thierry Lahaye [36], dans l'article [32] et présenté sur la figure I.1. Les atomes sont ralentis grâce à un ralentisseur à effet Zeeman et atteignent la chambre d'expérience à une vitesse typique de 25 m/s . Un flux d'atomes de l'ordre de 10^{11} at/s permet de préparer un piège magnéto-optique bidimensionnel d'environ $5 \cdot 10^9$ atomes à une température aux alentours de $150\text{ }\mu\text{K}$ en 2 s . Les quatre bobines utilisées pour le piège magnéto-optique sont allongées et rendent ce dernier bidimensionnel¹. On présente un schéma du dispositif sur la figure I.2. La durée de vie du piège magnéto-optique est d'environ 25 s .

Le piège magnéto-optique sert de point de départ pour la réalisation d'un condensat de Bose-Einstein tout optique. Les atomes sont transférés dans une pince optique créée par un faisceau laser désaccordé vers le rouge. Pour gagner en densité dans la pince optique, nous réalisons un piège "sombre" [37] consistant à abaisser la puissance du faisceau repompeur d'un facteur 1000 pendant 100 ms . L'effet obtenu est le transfert des atomes essentiellement dans l'état hyperfin $F = 1$. Les atomes dans cet état ne sont plus résonnant avec la transition cyclante du piège magnéto-optique et ne se repoussent plus par réabsorption des photons diffusés par les atomes de leur entourage. Le nuage est donc plus dense et un plus grand nombre d'atomes est piégé dans le potentiel dipolaire. Il est cependant nécessaire d'avoir un minimum de lumière repompeur pour ne pas perdre complètement les atomes du piège magnéto-optique. Contrairement au dispositif précédent, la phase "sombre" n'est

1. Le zéro des champs magnétiques est en fait une ligne continue de zéros.

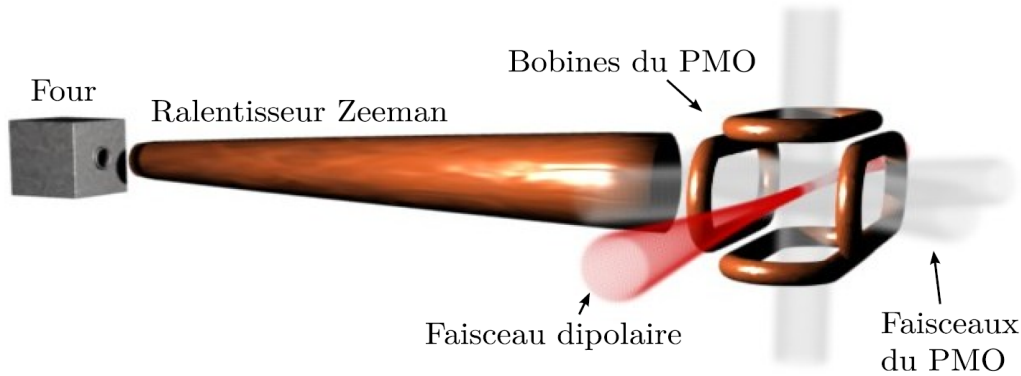


FIGURE I.2 – Schéma du dispositif expérimental pour le piège magnéto-optique (PMO) et le piège dipolaire.

plus réalisée avec un obstacle placé sur le trajet du repompeur et imagé sur les atomes (se référer à la thèse d'Antoine Couvert [34]) mais est purement temporel : l'intensité du repompeur est fortement diminuée pendant un temps $t_{\text{sombre}} = 100$ ms. Ce changement permet une simplification notable du dispositif expérimental puisqu'il n'est plus nécessaire de séparer le repompeur en deux bras. Une phase de dépompage de 10 ms où le repompeur est totalement éteint finit de transférer les atomes dans $F = 1$.

I.2.2 Considérations théoriques sur le potentiel dipolaire

Dans cette sous-section, nous rappelons les expressions du potentiel dipolaire et du taux de diffusion de photon dans le cas d'un atome de ^{87}Rb .

Expression du potentiel dipolaire

La force subie par un atome interagissant avec une lumière laser très désaccordée par rapport aux fréquences de transitions atomiques, est appelée force dipolaire. Le laser étant très désaccordé, la force de pression de radiation est négligeable par rapport à la force dipolaire. Celle-ci résulte de l'interaction du champ électrique \mathbf{E} avec le dipole atomique induit \mathbf{d} , elle est non-dissipative et dérive donc d'un potentiel. L'expression de ce potentiel pour le cas d'un atome de ^{87}Rb s'écrit [38] :

$$U_{\text{dip}}(\mathbf{r}) = \chi I(\mathbf{r}), \quad (\text{I.1})$$

où $I(\mathbf{r})$ est l'intensité du champ laser et χ un coefficient de proportionnalité qui s'exprime en fonction de la longueur d'onde de la transition atomique λ , de la pulsation du laser $\omega_L = 2\pi c/\lambda_L$ où c est la vitesse de la lumière, de la durée de vie de l'état excité Γ et des désaccords Δ_1 et Δ_2 de l'onde laser par rapport aux lignes D_1 et D_2 du ^{87}Rb [39]. Le coefficient χ s'écrit, en fonction du moment magnétique F et du sous-état magnétique m_F

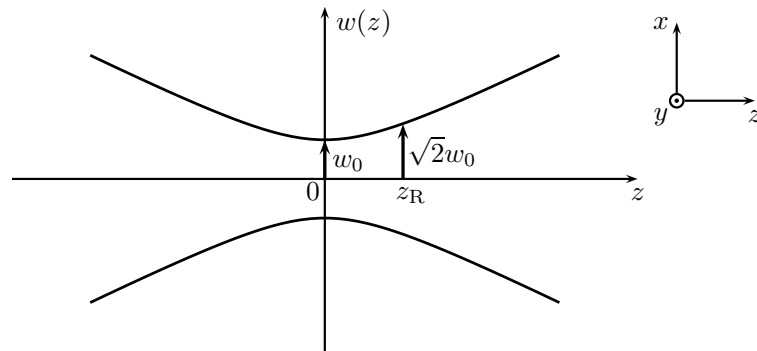


FIGURE I.3 – Représentation de la largeur $w(z)$ d'un faisceau gaussien. w_0 est le waist au point focal du faisceau, z_R est la longueur de Rayleigh telle que $w(z_R) = \sqrt{2}w_0$ et $z_R = \pi w_0^2/\lambda$.

de l'état fondamental ${}^5S_{1/2}$:

$$\chi = -\frac{\Gamma\lambda^3}{16\pi^2c} \left[\left(\frac{1}{\Delta_1} + \frac{1}{\Delta_1 + 2\omega_L} \right) (1 - qg_F m_F) + \left(\frac{1}{\Delta_2} + \frac{1}{\Delta_2 + 2\omega_L} \right) (2 + qg_F m_F) \right], \quad (\text{I.2})$$

où g_F est le facteur de Landé et q est un nombre qui dépend de la nature de la polarisation (respectivement $0, \pm 1$ pour une lumière polarisée linéairement, circulairement σ^\pm).

Le laser utilisé pour créer le faisceau dipolaire a une longueur d'onde centrale $\lambda_L = 1.07 \mu\text{m}$ correspondant à un désaccord vers le rouge par rapport aux transitions D_1 et D_2 . Il est, par ailleurs, polarisé linéairement ce qui permet d'écrire $q = 0$. La constante de proportionnalité χ vaut donc

$$\chi = -2.06 \cdot 10^{-36} \text{ J.W}^{-1}.\text{m}^{-2} \quad \text{ou} \quad \chi = -1.49 \text{ mK.MW}^{-1}.\text{cm}^{-2}. \quad (\text{I.3})$$

Dans le cas d'un laser polarisé linéairement, cette constante est la même pour tous les sous états du fondamental ${}^5S_{1/2}$. Ainsi, les sous états $|F, m_F\rangle$ sont piégés simultanément dans le potentiel dipolaire et constituent des degrés de liberté supplémentaires contrôlables à l'aide de champs magnétiques.

Le potentiel dipolaire U_{dip} est donc attractif et constitue un piège pour les atomes aux maxima de son intensité. Dans le cas idéal où le faisceau laser a un mode spatial gaussien TEM₀₀, l'intensité du champ laser vaut :

$$I(x, y, z) = \frac{2P}{\pi w(z)^2} \exp\left(-2\frac{x^2 + y^2}{w(z)^2}\right), \quad (\text{I.4})$$

où P est la puissance du faisceau laser et $w(z) = w_0\sqrt{1 + (z/z_R)^2}$ sa largeur avec w_0 la largeur de son col ou waist et $z_R = \pi w_0^2/\lambda$ sa longueur de Rayleigh (Fig. I.3). Ainsi l'intensité sera maximale au point focal du faisceau laser (pour $w(z) = w_0$).

Taux de diffusion de photon et taux de chauffage

Même si le faisceau laser utilisé pour réaliser le piège dipolaire est très désaccordé, un atome piégé a une probabilité non négligeable de diffuser un photon entraînant un chauffage du nuage d'atomes. Nous déterminons donc dans cette sous section le taux de diffusion de photon et en déduisons le taux de chauffage. Le taux de diffusion de photons s'écrit [38] :

$$\Gamma_{\text{diff}} \simeq I \frac{\Gamma^2 \lambda^3}{16\pi^2 c \hbar} \left(\frac{1}{\Delta_1} + \frac{2}{\Delta_2} \right), \quad (\text{I.5})$$

où les termes anti-résonnants ont été négligés et avec $I = 2P/(\pi w_0^2)$. Le taux de chauffage est alors donné par la relation :

$$\frac{dT}{dt} = \Gamma_{\text{diff}} \frac{mv_{\text{rec}}^2}{k_B} \simeq I \frac{\Gamma^2 \hbar \lambda}{4ck_B m} \left(\frac{1}{\Delta_1} + \frac{2}{\Delta_2} \right). \quad (\text{I.6})$$

Cette expression souligne l'avantage d'utiliser un faisceau laser très désaccordé pour minimiser le taux de chauffage. Dans nos conditions, pour le ^{87}Rb , avec un piège de profondeur $U_0 = k_B T_0$, le taux de chauffage vaut :

$$\frac{dT}{dt} = T_0 \times 2.4 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}. \quad (\text{I.7})$$

Les temps typiques de piégeage étant de quelques secondes, le chauffage sera négligeable par rapport à la profondeur du potentiel.

I.2.3 Caractéristiques du faisceau dipolaire

Le piège dipolaire est réalisé avec un laser focalisé dans la chambre d'expérience, dont l'axe long se superpose avec l'axe long du PMO comme le schématise la figure I.2. De cette manière, on maximise le nombre d'atomes transférés dans le bras horizontal du piège dipolaire.

Le laser utilisé est un laser à fibre dopée à l'ytterbium, de longueur d'onde $\lambda = 1072 \text{ nm}$, fabriqué par la société IPG Photonics. Sa puissance maximale est de 300 W. L'onde est polarisée linéairement et sa largeur de raie est de $\Delta\lambda = 2 \text{ nm}$. Compte tenu de cette importante valeur, il ne sera pas possible de faire interférer le faisceau laser avec lui-même afin par exemple de créer un réseau optique.

Au début de ma thèse, le mode du laser était un mode gaussien TEM_{00} avec un facteur de qualité $M^2 = 1.02$. Cependant, nous avons constaté une dégradation lente de ce mode laser en fonction de la puissance demandée. Le laser a été renvoyé au siège de la société IPG pour identifier les causes de cette dégradation et le réparer en conséquence. La société n'a, pour l'instant, pas fourni de réponse et a renvoyé le laser avec un mode TEM_{00} de bonne qualité ($M^2 = 1.02$). La figure I.4 montre que 6 mois plus tard le mode était de nouveau dégradé de la même façon et que la dégradation varie encore en fonction de la puissance de consigne.

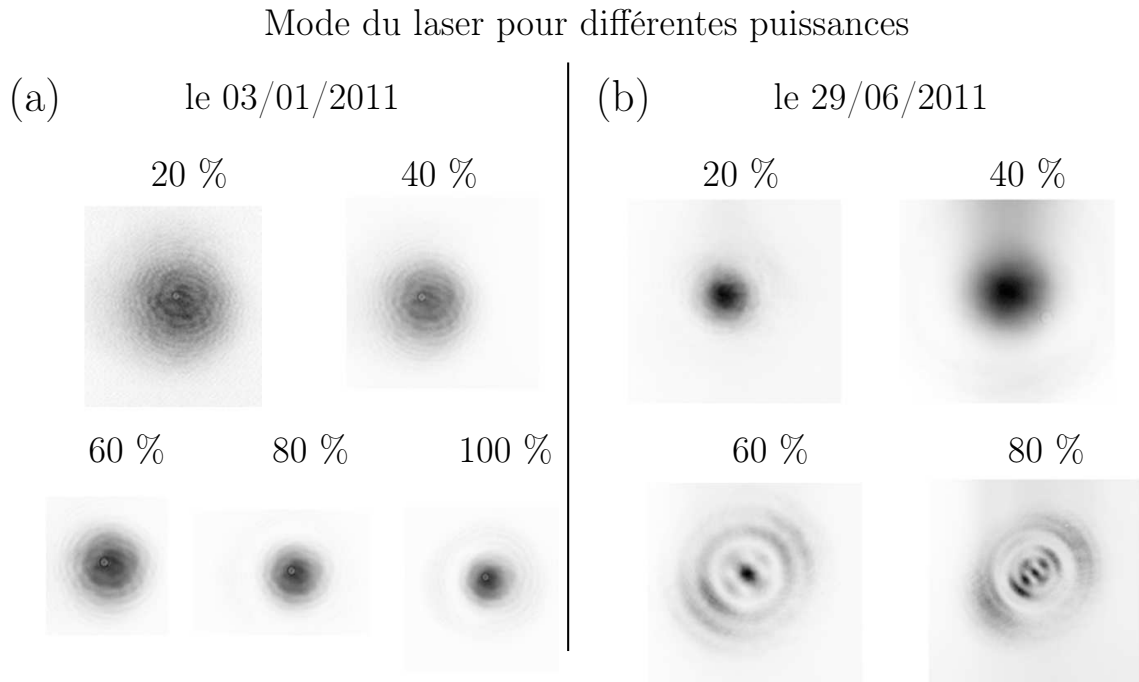


FIGURE I.4 – *Mode du laser pour différentes consignes de puissances (en % par rapport à la puissance maximale) après son retour de "réparation" chez le fabricant et environ 6 mois plus tard. Le mode se dégrade d'abord pour les hautes consignes tel 80 % et 100% puis les anneaux apparaissent aussi pour des consignes plus basses. En septembre 2011, le laser est utilisé à 30 % de sa puissance maximale pour bénéficier d'un mode correct en sortie. Le même effet de dégradation a été observé entre janvier 2010 et novembre 2010.*

La superposition du faisceau dipolaire sur le piège magnéto-optique permet un recouvrement et donc un nombre d'atomes piégés dans la pince optique optimal. Le faisceau dipolaire est par ailleurs focalisé au centre du PMO et sa puissance est contrôlée dans le but de réaliser une évaporation forcée. Dans la suite, nous décrivons la mise en forme et le contrôle de la puissance du faisceau dipolaire.

I.2.4 Mise en forme du faisceau dipolaire et contrôle de la puissance

La mise en forme du faisceau dipolaire permet d'optimiser le volume de capture et la profondeur du piège. Le volume de capture est proportionnel à w_0^3/λ [40]. La longueur d'onde du laser est assez petite par rapport, par exemple, au laser à CO_2 et ne défavorise pas le volume de capture. Il faut aussi un waist assez grand. Mais un waist trop grand conduit à une profondeur de piège trop faible ($U \propto P/w^2$). Pour compenser un waist plus grand, la puissance du laser doit être augmentée quadratiquement ! Même si nous disposons d'une gamme de puissance confortable, une trop grande puissance entraînerait des pertes (voir sec.I.2.5). Nous devons donc faire un compromis : un waist de $w_0 \simeq 50 \mu\text{m}$ et une puissance initiale à l'entrée de la chambre : $P_0 \simeq 25 \text{ W}$ qui correspondent à une profondeur de piège initiale de : $U_0/k_B \simeq 1 \text{ mK}$. Ces valeurs n'ont pratiquement pas variées pendant

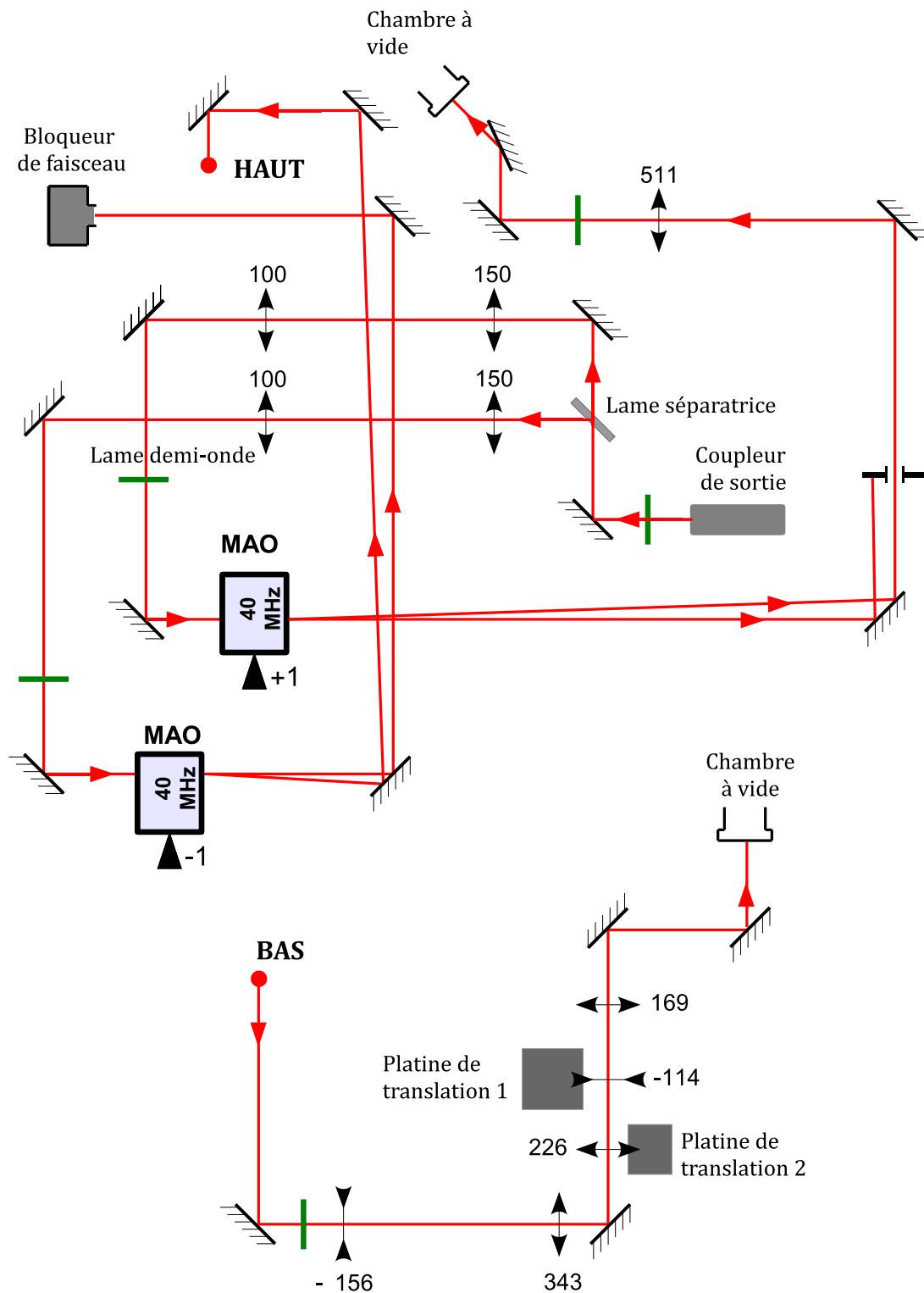


FIGURE I.5 – Montage optique réalisé pour mettre en forme les faisceaux dipolaires. Les nombres situés près des lentilles sont les valeurs de leur focale en mm. Le faisceau horizontal est le faisceau réfléchi par la lame séparatrice et le faisceau vertical est celui transmis.

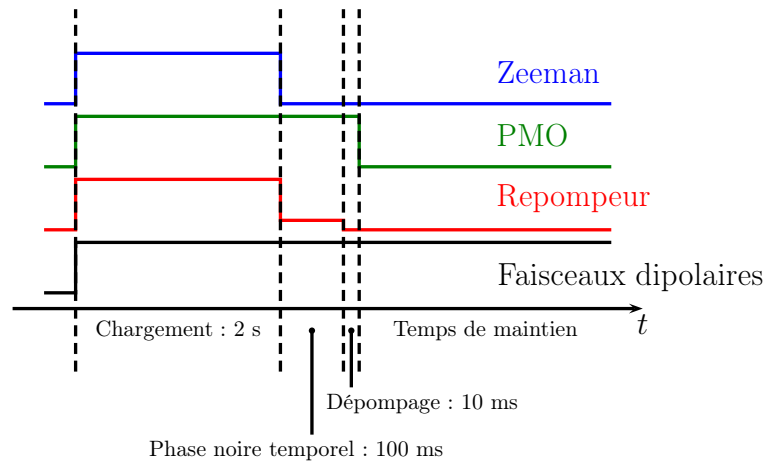


FIGURE I.6 – Séquence réalisée pour transférer les atomes du piège magnéto-optique dans la pince optique et examiner les pertes atomiques en fonction du temps de maintien dans celle-ci.

toute la durée de ma thèse.

La figure I.5 représente le schéma du montage réalisé pour mettre en forme le faisceau dipolaire afin d'obtenir un point focal de largeur $w_0 \simeq 50 \mu\text{m}$ au centre du PMO. Cette figure représente le chemin suivi par les deux faisceaux dipolaires avant leur arrivée dans la chambre. Le deuxième faisceau permettra de réaliser un piège croisé et de créer un confinement longitudinal (voir I.2.6). Par commodité, on l'appellera souvent par la suite faisceau vertical à cause de sa direction dans l'espace et nous appellerons faisceau horizontal le faisceau dipolaire considéré jusqu'ici. Nous explicitons maintenant les différents points importants du trajet parcouru par le faisceau horizontal :

- La lame séparatrice divise le faisceau après le coupleur de sortie en deux parties, le faisceau horizontal est le faisceau réfléchi.
- Le premier télescope permet de réduire la taille du faisceau d'un facteur 1.5 afin d'optimiser l'efficacité de diffraction dans le modulateur acousto-optique (MAO). En effet, en sortie de fibre la largeur du col du faisceau est d'environ 2 mm. La taille de faisceau optimale pour la diffraction dans le MAO que nous utilisons est de $800 \mu\text{m}$. Il est donc nécessaire de mettre en forme le mode du laser pour maximiser l'efficacité de diffraction dans le modulateur acousto-optique. Le faisceau à l'entrée du MAO a une taille de 1 mm.
- Dans le modulateur acousto-optique (ici refroidi à eau) on envoie une onde radiofréquence de 40 MHz et de puissance 40 W dans le cristal pour créer l'onde sur laquelle la lumière diffracte. Le faisceau laser est diffracté dans l'ordre -1 avec une efficacité de 85 %.
- Sur la partie haute, un premier télescope sert à agrandir la taille du faisceau avant la mise en forme à proprement dite pour la focalisation dans la chambre. Les trois dernières lentilles servent d'une part à obtenir la largeur de col voulu au centre de

la chambre et d'autre part à modifier la position et la largeur du col du faisceau en jouant sur la distance entre les deux lentilles montées sur platine de translation. La première platine de translation (respectivement la seconde) permet une course de 10 cm (resp. 5 cm).

En pratique, nous modifions seulement la position du waist avec les platines de translation. Le waist est quant à lui gardé à peu près constant à $50 \mu\text{m}$.

Le contrôle de la puissance est nécessaire pour la phase d'évaporation. Une consigne envoyée au modulateur acousto-optique permet un contrôle précis de la puissance. Cependant, la réponse du MAO en fonction de la valeur de consigne n'est pas linéaire. Pour la linéariser, on installe un asservissement de la puissance du laser. Le circuit d'asservissement est composé d'un sommateur et d'un inverseur pour récupérer le signal d'erreur entre la valeur de la photodiode de contrôle et la consigne puis d'un circuit intégrateur qui permet de corriger la consigne envoyée au MAO. Ainsi, la réponse du MAO est maintenant linéaire en fonction de la consigne.

La photodiode de contrôle de l'asservissement est placée devant le "piège de lumière"² disposé à la sortie de la chambre pour bloquer le faisceau. En effet nous avons remarqué que la réponse d'une photodiode récoltant une fuite de lumière derrière un miroir donnait un signal fluctuant au cours du temps. Nous pensons que ces fluctuations proviennent de faibles variations de la polarisation qui sont relativement amplifiées à travers une fuite d'un miroir. La lumière diffusée provenant du "piège de lumière" contient, quant à elle, toute l'information sur l'intensité du faisceau sans fluctuation. C'est cette lumière que nous utilisons pour asservir la puissance du laser.

I.2.5 Séquence expérimentale et durée de vie dans la pince optique

Dans cette section, nous décrivons la séquence utilisée pour capturer les atomes dans la pince optique (faisceau horizontal) et nous étudions l'effet de la puissance du laser sur le temps caractéristique de pertes d'atomes. La séquence expérimentale est présentée sur la figure I.6 et se décompose en plusieurs étapes :

1. La première étape est l'étape de chargement du PMO. Le laser "Zeeman" et le gradient de champ magnétique permettent de ralentir les atomes qui sont ensuite piégés par les faisceaux "PMO" sur la ligne de champ magnétique nul créée par les bobines allongées. Le laser "Repompeur" est également allumé pour récupérer les atomes qui sortent de la transition cyclante des lasers PMO. Cette étape dure 2 s.
2. La deuxième étape est le transfert des atomes du niveau hyperfin $F = 2$ au niveau $F = 1$ pour augmenter la densité des atomes piégés dans la pince. Cette phase dite "sombre" consiste à diminuer la puissance du repompeur d'un facteur 1000 pendant une durée de 100 ms.

2. Les "pièges de lumières" sont des obturateurs de faisceaux formant un cône recourbé en cuivre et refroidi à eau. On les utilise pour "piéger" la lumière des lasers de trop grande puissance en sortie de la chambre à vide.

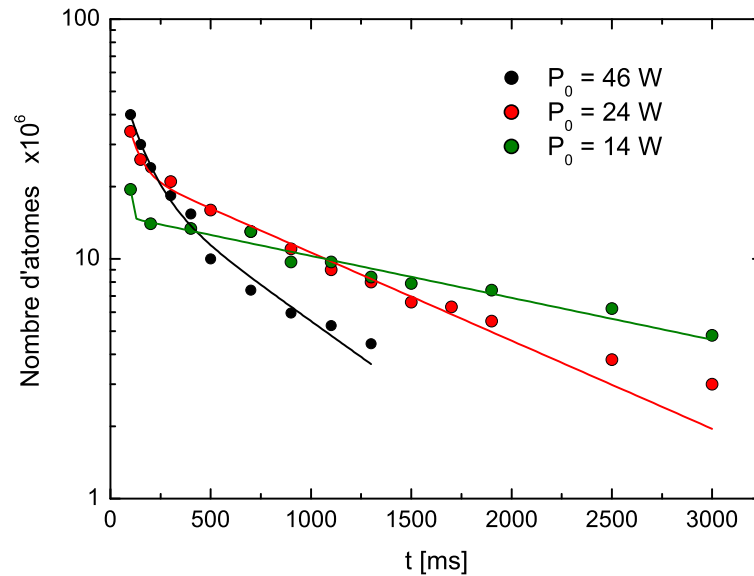


FIGURE I.7 – Mesure du nombre d’atomes (en échelle logarithmique) dans le piège dipolaire en fonction du temps de maintien à puissance constante. Les courbes d’ajustement de la forme $A_1e^{-t/t_1} + A_2e^{-t/t_2}$ donnent deux temps caractéristiques : t_1 et t_2 correspondant aux pertes à deux corps et à l’évaporation. Les temps caractéristiques de durée de vie respectivement pour $P_0 = 46$ W, $P_0 = 24$ W et $P_0 = 14$ W sont $t_1 = 0.7$ s, $t_1 = 1.2$ s et $t_1 = 2.5$ s.

3. Cette étape est suivie d’une phase de dépompage durant 10 ms pendant laquelle le faisceau repompeur est totalement obturé et la plupart des atomes encore dans le niveau $F = 2$ sont transférés dans le niveau hyperfin $F = 1$.
4. Pendant ces étapes, le faisceau dipolaire est superposé au piège magnéto-optique et capture les atomes. Les atomes transférés dans $F = 1$ étant plus dense, un plus grand nombre est piégé pour une même profondeur de potentiel. Typiquement, 100 ms après avoir coupé les faisceaux "PMO" et en gardant le faisceau horizontal à puissance constante, nous avons environ $3 \cdot 10^7$ atomes à une température de $150 \mu\text{K}$. Cependant, le nombre d’atomes présents dans la pince juste après obturation des faisceaux du PMO n’est pas mesurable car il reste encore des atomes du piège magnéto-optique qui empêche une mesure fiable des atomes du piège dipolaire. C’est pourquoi nous maintenons le faisceau dipolaire à puissance constante pendant 100 ms, temps suffisant pour que les atomes du PMO sortent du champ de la caméra. Cette mesure constitue un point de référence utile pour l’optimisation de l’expérience.

La figure I.7 représente le nombre d’atomes en fonction du temps de maintien dans la pince optique pour 3 puissances lasers différentes. Le nombre d’atomes est représenté en échelle logarithmique. Pour les trois courbes, deux constantes de temps sont observées : une première très rapide pour des nombres d’atomes élevés que nous pensons due à la grande densité dans le piège qui induit un taux de collisions élevé et une seconde plus lente qui traduit un processus de collisions avec le gaz résiduel et/ou l’évaporation naturelle.

Cette dernière durée caractéristique vaut respectivement pour $P_0 = 14$ W, 24 W et 48 W, $\tau = 2.5$ s, 1.2 s et 0.7 s. Ces courbes ne correspondent pas à l'image naïve qui serait de penser que plus la puissance du laser est importante, plus le piège est profond et plus les atomes restent capturés dans la pince. La figure I.7 montre tout l'inverse. Une explication possible du processus à l'œuvre est donnée dans la référence [41]. Les auteurs regardent une évolution temporelle du nombre d'atomes dans $F = 2$ et constatent une forte augmentation de la population dans $F = 2$ pour des temps courts. Cette augmentation est d'autant plus grande que la puissance du laser est importante. Par ailleurs, le taux de collisions à deux corps est beaucoup plus important pour des collisions entre atomes impliquant au moins un atome dans $F = 2$. Plus la quantité d'atomes dans $F = 2$ est grande, plus le taux de collisions est important et plus les pertes sont grandes.

Nous pensons que cette augmentation rapide de la population dans $F = 2$ est due au fait que le laser est multimode en fréquence. Sa largeur totale est d'environ 600 GHz et les modes sont séparés de 15 MHz (du même ordre que la durée de vie de l'état excité $\Gamma \simeq 2\pi \times 6$ MHz). L'écart en fréquence total étant beaucoup plus grand que la transition hyperfine de $F = 1$ vers $F = 2$ du ^{87}Rb ($\nu = 6.8$ GHz), on peut imaginer un processus à deux photons : un photon du laser est absorbé puis un autre est émis dans un autre mode de fréquence 6.8 GHz plus grande laissant l'atome dans le niveau $F = 2$. C'est donc le laser qui contribue à l'augmentation rapide de la population des atomes dans $F = 2$. En conclusion, plus le laser est puissant, plus la population dans $F = 2$ augmente pendant le temps de maintien et plus les collisions entre les atomes $F = 2$ et les autres induisent des pertes atomiques. En pratique, nous faisons un compromis en choisissant une puissance laser intermédiaire.

Le faisceau dipolaire utilisé tel qu'il est décrit ici ne permet pas de descendre à des températures inférieures au μK . La fréquence de piégeage longitudinale est trop faible et ralentit l'évaporation [34]. Pour atteindre de plus basses températures, il est nécessaire d'utiliser un deuxième faisceau dipolaire, croisant le premier et confinant le piège longitudinalement. Nous décrivons les caractéristiques de ce faisceau dans la section suivante.

I.2.6 Piège dipolaire croisé

Le deuxième faisceau dipolaire croise le faisceau horizontal avec un angle de 45° dans le même plan vertical (voir le schéma I.8). Leurs points de focalisation coïncident avec leur point de croisement et avec le centre du nuage atomique. Pour cela, il est nécessaire de mettre en forme aussi le faisceau vertical. Nous avons également besoin de contrôler sa puissance pour réaliser des rampes d'évaporation dans le but d'obtenir un condensat de Bose-Einstein.

Expression du potentiel dipolaire croisé

Nous donnons ici l'expression du potentiel dipolaire croisé. Les profondeurs des potentiels sont notées U et les waists des faisceaux sont notés w avec les indices h et v désignant

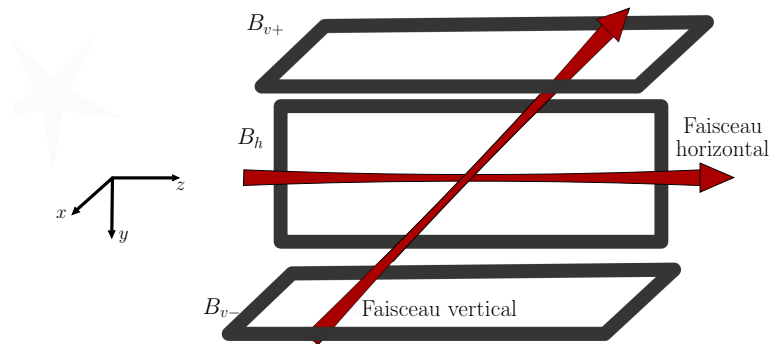


FIGURE I.8 – Vue d'ensemble des faisceaux dipolaires croisés. Le faisceau horizontal se superpose à l'axe long du PMO. Le faisceau vertical confine les atomes longitudinalement et est à 45° dans le plan vertical. Les bobines B_h , B_{v+} et B_{v-} sont allumées lors de la phase d'évaporation pour la distillation de spin.

respectivement les grandeurs relatives au faisceau dipolaire horizontal et au faisceau vertical. On fait l'approximation de faisceaux parfaitement croisés et on néglige la variation axiale de l'intensité lumineuse ($z^2 \ll z_{R,h}^2$ et $z^2, x^2 \ll z_{R,v}^2$). Pour une particule de masse m se trouvant dans la zone d'interaction du potentiel, celui-ci s'écrit :

$$U_{\text{crois}}(\mathbf{r}) = -U_h \exp\left(-2\frac{x^2 + y^2}{w_h^2}\right) - U_v \exp\left(-2\frac{x^2 + (z - y)^2/2}{w_v^2}\right) + mgy, \quad (\text{I.8})$$

les directions x , y , z sont données sur la figure I.8. Ce potentiel induit quelques modifications par rapport à un potentiel dipolaire simple. Nous les explicitons brièvement ici (pour plus de détails, le lecteur pourra se référer à la thèse d'Antoine Couvert). Les fréquences propres du piège sont les racines carrées des valeurs propres de la matrice Hessienne du potentiel $U_{\text{crois}}(\mathbf{r})$. La prise en compte de la gravité implique un décalage du centre du piège dépendant de la puissance dans le faisceau horizontal. Celui-ci doit par ailleurs avoir une puissance laser minimale supérieure à une valeur critique pour compenser la gravité et rester piégeant. Lorsque cette condition est satisfaite le décalage du centre du piège est très faible par rapport au waist. Pour notre dispositif, cette condition est toujours satisfaite même à la fin de l'évaporation quand la puissance des faisceaux est très faible.

Caractéristiques du faisceau de confinement longitudinal

Le faisceau vertical provient du même laser fibré dopé à l'ytterbium que le faisceau horizontal ($\lambda_L = 1072$ nm, $\Delta\lambda = 2$ nm). La largeur de raie importante empêche en grande partie les faisceaux d'interférer au niveau de leur point de croisement. Par ailleurs, les deux faisceaux passent à travers deux MAO semblables : l'un est diffracté dans l'ordre $+1$ et l'autre dans l'ordre -1 . La fréquence des deux faisceaux diffère donc de 80 MHz. Cette différence de fréquence a pour effet de moyennner les franges d'interférence et de créer un potentiel moyen. Après mise en forme et contrôle de la puissance, le faisceau est focalisé dans la chambre en croisant le premier avec un angle de 45° suivant la verticale comme

représenté sur la figure I.8. Les points focaux doivent être au même endroit, c'est pourquoi il est important d'avoir un contrôle précis de la position et de la taille du waist.

Mise en forme et contrôle de la puissance

Les deux faisceaux sont séparés très rapidement après le coupleur de sortie par une lame séparatrice. Ainsi la mise en forme des deux faisceaux est totalement indépendante. Nous décrivons maintenant le parcours suivi par le faisceau transmis par la lame séparatrice schématisé sur la figure I.5 (le trajet du faisceau réfléchi a déjà été décrit à la section I.2) :

- Le faisceau laser passe d'abord au travers d'un télescope afin d'optimiser la taille du faisceau avant d'entrée dans le MAO. Ce télescope réduit la taille du faisceau par un facteur 1.5 et le faisceau a une taille d'environ 1 mm en entrée du MAO.
- Le faisceau passe ensuite dans le modulateur acousto-optique refroidi à eau. Ce modulateur acousto-optique est semblable à celui utilisé pour le premier faisceau. Il permet de contrôler la puissance du faisceau diffracté en modifiant la puissance RF envoyée dans le cristal du MAO. Le faisceau vertical est diffracté dans l'ordre +1 avec une efficacité de l'ordre de 80%.
- La focalisation dans la chambre se fait à l'aide d'une seule lentille de focale 511 mm donnant une largeur de col au point focal d'environ $100 \mu\text{m}$. Le réglage de la position de la lentille est fait à la main. La longueur de Rayleigh pour une largeur de col de $100 \mu\text{m}$ vaut $z_{R,v} \simeq 3 \text{ cm}$. La position de la lentille n'est donc pas critique au micromètre près. En effet, la largeur du waist est de $\sqrt{2}w_0 = 141 \mu\text{m}$ lorsqu'on se trouve à la distante de Rayleigh. Ainsi si le point focal du faisceau est décalé d'un centimètre, cela n'aura pas de grande conséquence sur le piégeage. Pour le contrôle de la position transverse, nous disposons d'un miroir monté sur un cristal piezo-électrique auquel on envoie une tension réglable.

La puissance du faisceau vertical est asservie de la même manière que le faisceau horizontal : on compare le signal reçu par la photodiode avec la valeur de consigne. Ce signal d'erreur est corrigé dans un circuit intégrateur et la valeur corrigée est envoyée dans le contrôleur du MAO. La photodiode de contrôle est là aussi placée devant le piège de lumière de manière à collecter la lumière diffusée par celui-ci. Maintenant que le piège est caractérisé nous expliquons comment nous réalisons des condensats tout optique avec ce dispositif.

I.3 Réalisation d'un condensat

I.3.1 Considérations théoriques sur la condensation de Bose-Einstein

Avant de préciser la séquence expérimentale pour obtenir un condensat de Bose-Einstein, nous rappelons ici brièvement la théorie de la transition de Bose-Einstein dans un confinement harmonique. Nous considérons un gaz de particules indiscernables, de spin entier (bosons) et de masse m . On néglige les interactions entre les particules en considérant un

gaz très dilué (gaz idéal).

L'ensemble statistique adapté pour décrire des particules indiscernables est l'ensemble grand-canonique. Dans le cas de bosons, les particules sont décrites par la statistique quantique de Bose-Einstein qui donne le facteur d'occupation moyen N_n d'un niveau n d'énergie ε_n (avec $\varepsilon_0 = 0$) d'un piège à une température T [42] :

$$N_n = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} - 1} = \sum_{j=1}^{\infty} z^j e^{-j\beta\varepsilon_n}, \quad (\text{I.9})$$

où on a introduit le paramètre $\beta = 1/k_B T$ et la fugacité $z = e^{\beta\mu}$ définie à l'aide du potentiel chimique μ , $N_n \geq 0$ implique que $\mu \leq 0$ et $0 \leq z \leq 1$.

Le gaz considéré est soumis à un potentiel harmonique tridimensionnel non isotrope de pulsations $\omega_x, \omega_y, \omega_z$. Le hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{i=x,y,z} \frac{1}{2} m \omega_i^2 r_i^2. \quad (\text{I.10})$$

Les états propres du hamiltonien sont les produits tensoriels des états propres des trois oscillateurs harmoniques $\hat{h}_i = p_i^2/2m + m\omega_i^2 r_i^2/2$ ($i = x, y, z$). Les énergies associées à ces états propres s'écrivent :

$$\varepsilon_n = \sum_{i=x,y,z} \hbar\omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{I.11})$$

où n_x, n_y et n_z sont les nombres quantiques correspondant aux énergies des hamiltoniens \hat{h}_i et $n = (n_x, n_y, n_z)$ le triplet correspondant. La densité d'état pour un tel piège harmonique s'écrit :

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{2(\hbar\omega)^3}, \quad \text{avec} \quad \omega^3 = \prod_{i=x,y,z} \omega_i, \quad (\text{I.12})$$

la pulsation moyenne de piégeage. Lorsque le quantum moyen d'énergie du piège $\hbar\omega$ est très petit devant l'énergie thermique moyenne $k_B T$, on peut se placer dans la limite semi-classique. Pour calculer le nombre total $N = \sum_n N_n$, on peut remplacer la sommation sur tous les états n par une intégrale sur l'énergie pondérée par la densité d'état. Dans ce cas, on traite à part l'occupation de l'état fondamental N_0 puisque sa densité d'état est nulle. On a alors $N = N_0 + N'$ avec N' le nombre d'atomes présents dans les états excités. L'équation (I.9) donne pour l'état fondamental $N_0 = z/(1 - z)$ et pour les états excités :

$$N' = \int_0^{+\infty} N_{n \neq 0}(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{g_3(z)}{(\beta\hbar\omega)^3}, \quad (\text{I.13})$$

où $g_\alpha(z)$ sont les fonctions de Bose définies telles que : $g_\alpha(z) = \sum_{n=1}^{\infty} z^n/n^\alpha$, $g_3(z)$ est une fonction croissante sur $z \in [0, 1]$ bornée par $g_3(1) \simeq 1.202$. Il y a par suite une saturation du nombre d'atomes dans les états excités. A T donnée, le nombre d'atomes dans les états excités atteint une valeur maximale $N'_{\max} = \zeta(3)/(\beta\hbar\omega)^3$ où $\zeta(x) = \sum_{i=0}^{+\infty} 1/x^i$ correspond à une série de Riemann ($\zeta(3) = g_3(1) \simeq 1.202$). Lorsque le nombre d'atomes total dépasse

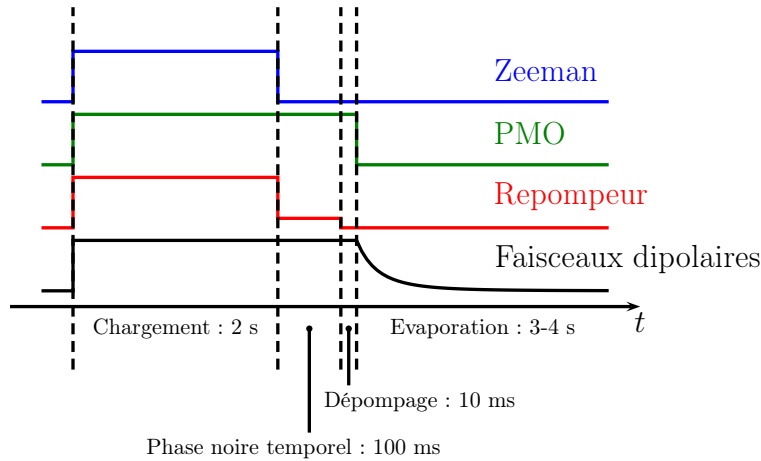


FIGURE I.9 – Séquence expérimentale typique pour la condensation de Bose-Einstein.

cette valeur maximale les atomes s'accumulent dans l'état fondamental : c'est la signature de la condensation de Bose-Einstein. L'occupation du niveau fondamental est alors donnée par la relation :

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \quad \text{avec} \quad T_c = \frac{\hbar\omega}{k_B} \left(\frac{N}{\zeta(3)}\right)^{1/3}, \quad (\text{I.14})$$

la température critique de la transition de Bose-Einstein [43]. Cette équation n'est valable que dans la limite semi-classique d'un très grand nombre d'atomes ($k_B T \gg \hbar\omega$). Nous sommes bien dans cette limite puisque nos condensats ont entre 10^4 et 10^5 atomes. Nous n'avons pas pris en compte ici les interactions entre atomes qui ont pour effet de déplacer la température de transition de quelques pourcents [44].

Concrètement, la transition de Bose-Einstein correspond à l'apparition d'effet quantique dans la statistique du gaz. Les paquets d'onde individuels se recouvrent lors de la transition et la densité dans l'espace des phases est comparable à 1 : $\tilde{\rho} = n_0 \lambda_{\text{dB}}^3 \approx 1$ avec n_0 la densité d'atomes au centre du piège et $\lambda_{\text{dB}} = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ la longueur d'onde de de Broglie thermique des atomes.

I.3.2 Obtention du condensat

Séquence expérimentale

La séquence expérimentale pour obtenir un condensat est représentée sur la figure I.9. Cette séquence se décompose de la manière suivante :

1. Chargement du PMO : les faisceaux Zeeman, PMO et Repompeur sont allumés ainsi que les bobines du champ magnétique. Les atomes sont ralentis par effet Zeeman et sont capturés dans un piège magnéto-optique allongé. Cette phase dure 2 s.
2. Phase "noire" : Le faisceau Zeeman est éteint. Les atomes sont transférés dans $F = 1$ en réduisant la puissance du repompeur d'un facteur 1000 pendant 100 ms. On

coupe ensuite totalement le repompeur pendant 10 ms pour finir de transférer les atomes dans $F = 1$.

3. Pendant ces phases, le faisceau dipolaire horizontal est présent et capture les atomes. L'intérêt de capturer les atomes dans le niveau hyperfin $F = 1$ est que la densité dans le piège n'est plus limitée par la diffusion multiple de photons permettant une accumulation d'atomes dans le piège dipolaire. Le faisceau vertical est présent également mais n'influence pas le nombre d'atomes dans la pince. Il deviendra crucial lorsque le nuage sera à la température d'environ $10 \mu\text{K}$.
4. Durant la phase d'évaporation, les faisceaux PMO et repompeur sont obturés et la puissance des faisceaux dipolaires est diminuée. La puissance du faisceau dipolaire horizontal suit la rampe d'évaporation :

$$P(t) = P_0 \left(1 + \frac{t}{\tau}\right)^{-4}, \quad (\text{I.15})$$

où $\tau = 1.3$ s. Les durées typiques d'évaporation étant de 3 à 4 s, La puissance du faisceau dipolaire est réduite d'à peu près un facteur 100.

Quant au faisceau vertical, sa puissance est soit gardée constante soit diminuée de manière linéaire. Nous avons observé la transition de Bose-Einstein dans les deux cas. Lorsque la puissance est gardée constante, sa valeur est plus faible que la valeur de départ pour une rampe linéaire (typiquement, $P_{0,v} = 12$ W contre $P_{0,v} = 20$ W). Le croisement des deux faisceaux est cruciale. Un petit décalage entre eux entraîne des pertes supplémentaires pouvant empêcher la condensation de Bose-Einstein. Nous utilisons le contrôleur piezo-électrique du miroir situé juste avant la lentille de focalisation pour régler finement la position du point focal du vertical et pour optimiser le nombre d'atomes dans le piège croisé. Nous atteignons alors le régime de dégénérescence quantique après environ 3 à 4 s d'évaporation.

Le nombre d'atomes dans les condensats que nous avons obtenus a varié au cours de la thèse entre 10^4 pour les plus petits et de l'ordre de 10^5 pour les plus gros. Nous pensons que cette variation est due à la dégradation lente du mode du laser. En effet, les premiers condensats obtenus à Toulouse avaient environ $8 \cdot 10^4$ atomes. Puis le nombre d'atomes dans le condensat a diminué alors qu'on remarquait une dégradation du mode du laser. Lorsque le nombre d'atomes est devenu trop faible pour obtenir un condensat, le laser a été envoyé chez le fabricant IPG pour réparation. Les condensats d'environ 10^5 atomes ont été obtenus au retour du laser lorsque le mode du laser était correct (voir Fig.I.4(a)). Au fil des mois, le mode du laser s'est dégradé (voir Fig.I.4(b)) et le nombre d'atomes dans le condensat a de nouveau diminué.

Signature du condensat

Nous devons être sûr que le nuage d'atomes que nous obtenons en fin d'évaporation est bien un condensat et non un nuage thermique. Nous pouvons en avoir une première

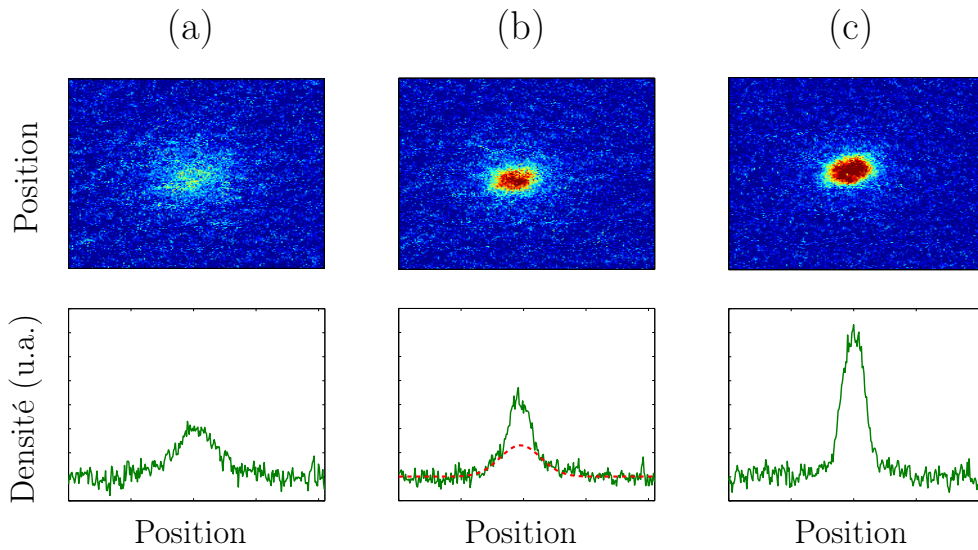


FIGURE I.10 – Signature de la condensation de Bose-Einstein après un temps de vol de 12 ms. Le nuage d’atomes passe (a) d’une distribution Gaussienne à (c) une distribution de Thomas-Fermi en passant par (b) une structure bimodal où les deux distributions contribuent. Les durées d’évaporation sont de $t_{(a)} = 3100$ ms, $t_{(b)} = 3200$ ms, $t_{(c)} = 3300$ ms.

idée en regardant l’ellipticité du nuage. En effet, même si elle est faible, l’anisotropie du piège provoque une inversion d’ellipticité des condensats car leur fonction d’onde reflète les caractéristiques du piège. Au contraire, les nuages thermiques ne subissent pas d’inversion d’ellipticité. Sur la figure I.10(c), on observe une faible ellipticité, première indication de l’obtention d’un condensat. Une manière beaucoup plus sûre de voir la transition est de réduire le temps d’évaporation de manière à avoir un nuage thermique (Fig I.10(a)) puis de réaugmenter petit à petit le temps d’évaporation jusqu’à observer une structure bimodale (Fig I.10(b)). La structure bimodale est la signature de la transition : une partie du nuage atomique est condensée mais l’autre partie est encore thermique. En augmentant encore le temps d’évaporation, on obtient des condensats quasi-purs.

Trajectoire d’évaporation

Nous traçons sur la figure I.11 la trajectoire d’évaporation représentant le nombre d’atomes en fonction de la température en échelle logarithmique. Durant cette évaporation, le faisceau vertical est maintenu à puissance constante $P_{0,v} = 12$ W et le faisceau horizontal suit la courbe d’évaporation (I.15) en partant d’une puissance initiale $P_{0,h} = 22.5$ W. Cette courbe a été obtenue pour des temps d’évaporation allant de 100 ms à 2700 ms en mesurant le nombre d’atomes et la température toutes les 100 ms. Nous prenons 5 points (N, T) pour un temps d’évaporation donné. Nous remarquons que pendant toute la durée d’évaporation nous perdons 3 ordres de grandeurs en température et 2 ordres en nombre d’atomes. La densité dans l’espace des phases étant proportionnel à N/T^3 , le gain en densité dans l’espace des phases est de 7 ordres de grandeurs. Ainsi, nous arrivons à une densité dans l’espace

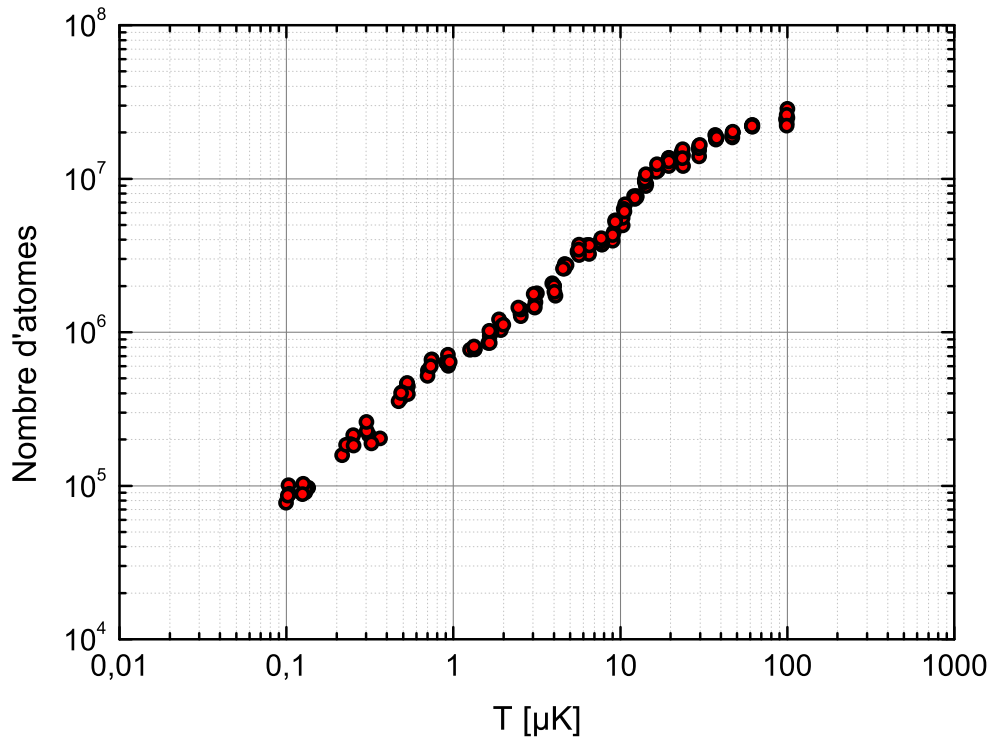


FIGURE I.11 – Trajectoire d'évaporation partant d'une pince de $2.5 \cdot 10^7$ atomes pour arriver à un condensat de $1 \cdot 10^5$ atomes. Nous prenons 5 points (N, T) toutes les 100 ms et le temps d'évaporation varie de 100 ms à 2700 ms, temps suffisant pour condenser.

des phases proche de 1, signe de dégénérescence quantique.

Determination des fréquences transverses du piège

Les fréquences transverses du piège dipolaire sont principalement dues au potentiel dipolaire créé par le faisceau horizontal, le potentiel dipolaire vertical étant confinant longitudinalement. Pour déterminer les fréquences transverses de ce piège, nous faisons osciller un condensat dans le piège : après obtention d'un condensat, les faisceaux dipolaires horizontal et vertical sont brusquement coupés pendant $500 \mu\text{s}$, temps pendant lequel le condensat est en expansion dans l'espace libre. Après ces $500 \mu\text{s}$, le faisceau horizontal est rallumé brusquement à une puissance égale ou supérieure à la puissance de fin d'évaporation. Le condensat s'étant déplacé librement pendant $500 \mu\text{s}$, il subit alors une oscillation suivant les fréquences transverses du piège. En regardant sa position en x et en y en fonction du temps nous pouvons remonter à la fréquence comme indiqué sur la figure I.12(a). Les fréquences du piège en fin d'évaporation sont : $\omega_x = 2\pi \times 79 \text{ Hz}$ et $\omega_y = 2\pi \times 132 \text{ Hz}$ pour une puissance $P_h = 120 \text{ mW}$. Nous traçons la variation de la fréquence en fonction de la puissance du faisceau horizontal sur la figure I.12(a). La fréquence en fonction de la racine de la puissance se comporte de manière linéaire. Les droites d'ajustement donnent les équations : $\omega_x/2\pi = -13.1 + 8.5 \times \sqrt{P} \text{ Hz}$ et $\omega_y/2\pi = -158.4 + 26.8 \times \sqrt{P} \text{ Hz}$. Nous

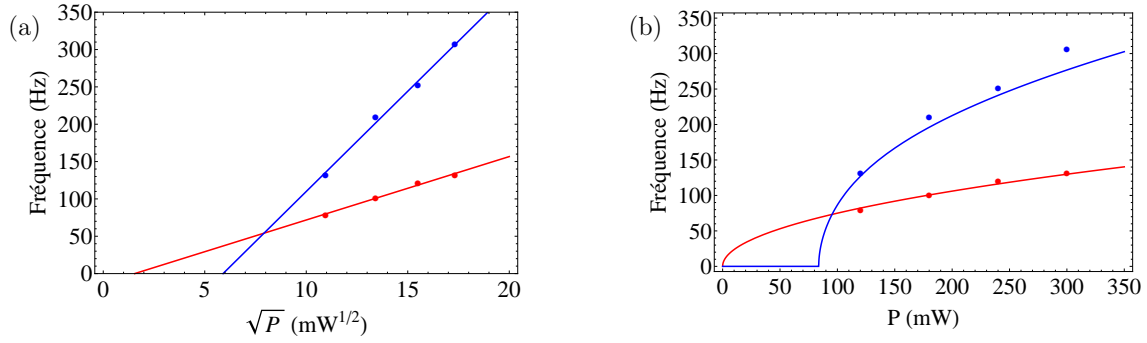


FIGURE I.12 – Fréquences transverses dans les direction x (en bleu) et y (en rouge) du piège dipolaire en fin d'évaporation. (a) Fréquences en fonction de la racine de la puissance du faisceau dipolaire. Les droites d'ajustement donnent les équations : $\omega_x/2\pi = -13.1 + 8.5 \times \sqrt{P}$ Hz et $\omega_y/2\pi = -158.4 + 26.8 \times \sqrt{P}$ Hz. (b) Fréquences en fonction de la puissance : les courbes de fréquence attendues pour des waists $w_x = 78 \mu\text{m}$ et $w_y = 34 \mu\text{m}$ concordent avec les points expérimentaux.

remarquons que la droite $\omega_x(\sqrt{P})$ est quasi-linéaire. En effet, la gravité n'influence pas l'oscillation selon l'axe x et la fréquence est donnée par : $m\omega_x^2 = U''(x_{\min})$. Le potentiel vu par les atomes sur cet axe est donné approximativement par :

$$U_x(x) \simeq -U_0 e^{-2(x/w_x)^2} \quad \text{avec} \quad U_0 = \frac{2\chi P}{\pi w_x w_y}, \quad (\text{I.16})$$

et P la puissance du faisceau, w_i le waist suivant l'axe $i = x, y$ et χ défini par l'équation (I.2). On voit donc que la valeur minimale du potentiel est en $x_{\min} = 0$ et la fréquence vaut $\omega_x = \sqrt{4U_0/mw_x^2} \propto \sqrt{P}$.

Par contre, on ne peut pas négliger la gravité dans la direction y . C'est pourquoi l'ordonnée à l'origine de la droite $\omega_y(\sqrt{P})$ est très éloignée de zéro. Le potentiel projeté sur l'axe y s'écrit approximativement :

$$U_y(y) \simeq -U_0 e^{-2(y/w_y)^2} + mgy. \quad (\text{I.17})$$

Dans ce cas, le minimum y_{\min} n'est plus égale à zéro. La fréquence prend une forme plus compliquée : $\omega_y = f(mgw_y/U_0)\sqrt{4U_0/mw_y^2}$. La fonction f est calculée simplement avec un logiciel de calcul en déterminant le minimum y_{\min} et en l'injectant dans $\omega_y = \sqrt{U''(y_{\min})/m}$. Une fois les fréquences du piège connues, on peut les tracer en jouant sur les valeurs des waists w_x et w_y pour recouvrir au mieux les points expérimentaux. Sur la figure I.12(b), les courbes sont tracées pour des waists $w_x = 78 \mu\text{m}$ et $w_y = 34 \mu\text{m}$. Ces waists correspondent à un faisceau très elliptique qui ne s'accorde pas avec les mesures du mode faites avec un profileur de faisceau. La méthode pour obtenir les waists avec les fréquences est très empirique et ne permet pas une caractérisation précise.

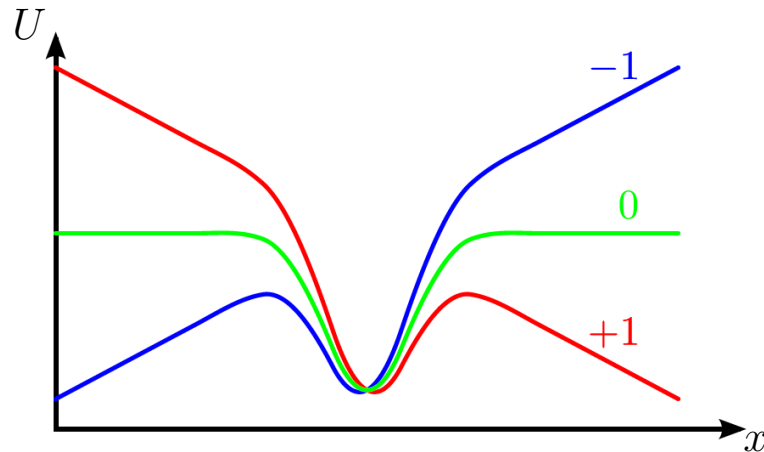


FIGURE I.13 – *Figure de principe de la distillation de spin. Sous l'effet d'un gradient de champ créé par la bobine B_h , les potentiels vus par les atomes des espèces $m_F = \pm 1$ sont moins profonds que pour les atomes des espèces $m_F = 0$. Les espèces $m_F = \pm 1$ sont préférentiellement évaporées. C'est le principe de la distillation de spin.*

I.3.3 Distillation de spin

Les faisceaux dipolaires étant très désaccordés par rapport à la transition atomique, les atomes sont piégés indifféremment dans les différents sous états internes de l'état fondamental. Le contrôle du degré de liberté interne est important car dans la production du laser à atomes à partir d'un condensat, l'état interne de celui-ci définit sa polarisation [45]. Nous piégeons les atomes dans l'état hyperfin $F = 1$ et l'évaporation sans champ magnétique implique que les trois sous-états magnétiques de $F = 1$ sont dégénérés et conduit à des condensats dont la population est en proportion équivalente dans les sous-états $m_F = \pm 1, 0$. Ceci est vérifiable en faisant une expérience de Stern et Gerlach [46, 47] qui consiste à allumer une bobine créant un gradient de champ magnétique pendant le temps de vol. Les espèces $m_F = -1, 0, +1$ se séparent : les atomes dans $m_F = -1$ sont chercheurs de champ faible et s'éloignent de la bobine et ceux dans $m_F = +1$ sont chercheurs de champ fort et se rapprochent de la bobine. Quant aux atomes dans $m_F = 0$, ils ne sont chercheurs de champ fort qu'au second ordre et ne sont donc pratiquement pas déplacés.

Dans le but de produire des lasers à atomes avec une polarisation bien définie, il est nécessaire de bien contrôler le sous-état interne dans lequel les atomes sont condensés. Cela est possible en ajoutant un gradient de champ magnétique dans une direction privilégiée pendant l'évaporation. Pour créer un tel gradient de champ, nous utilisons une des bobines du piège magnéto-optique qui sont de forme quasi-rectangulaire. Le gradient de champ sur l'axe y créé par une bobine rectangulaire de largeur a et de longueur b d'axe Oy parcourue par un courant d'intensité I s'écrit :

$$\nabla \|\mathbf{B}\| \simeq -\frac{2\mu_0 |I|}{\pi a^2} \left(1 + \frac{y^2}{a^2}\right)^{-2} \frac{y}{a} \mathbf{u}_y, \quad (\text{I.18})$$

où on fait l'approximation d'une bobine très allongée ($y^2 \ll b^2$). La référence [48] utilise un gradient de champ magnétique pour sélectionner les atomes dans le sous-état $m_F = 0$ en laissant les atomes dans le sous-état $m_F = \pm 1$ s'échapper par l'axe peu confinant de leur dispositif. Dans notre dispositif, le piège dipolaire n'offre pas de porte de sortie pour les atomes puisque les trois fréquences de piégeage sont du même ordre de grandeur. Mais un autre mécanisme permet la sélection d'un sous-état magnétique. Nous l'expliquons en prenant comme exemple le cas d'un gradient de champ horizontal : nous allumons la bobine B_h avec un courant d'intensité $I = 160$ A pendant toute la durée de l'évaporation. A la fin de l'évaporation, nous examinons les sous-états des atomes en faisant une expérience de Stern et Gerlach avec cette même bobine³. Les atomes sont quasiment tous dans $m_F = 0$. Le nombre d'atomes étant comparable, il ne s'agit pas d'un filtrage d'atomes mais d'une distillation préférentielle. Le mécanisme sous-jacent se comprend bien en considérant le potentiel vu par les atomes. Son allure est tracée schématiquement sur la figure de principe I.13. Le gradient de champ magnétique horizontal introduit ainsi une différence de profondeur de piégeage pour les différentes sous-espèces magnétiques mais ne décale que très peu le centre du piège. Ainsi les espèces sont toutes toujours piégées au même endroit et subissent la même évaporation. La profondeur du piège étant plus faible pour les espèces $m_F = \pm 1$, celles-ci sont préférentiellement évaporées par rapport à l'espèce $m_F = 0$. On appelle donc ce phénomène une distillation de spin. Le mécanisme est le même dans le principe quand on utilise une des bobines créant un gradient de champ vertical. La bobine B_{v+} placée au dessus du piège va purifier les atomes dans le sous-état $m_F = +1$. Cette espèce étant chercheuse de champ fort elle est soutenue par le gradient de la bobine B_{v+} . A l'opposé, le gradient de champ créé par la bobine B_{v-} soutient les espèces chercheuses de champ faible c'est-à-dire $m_F = -1$ et les atomes seront dans cet état en fin d'évaporation. Ces deux dernières sélections ne sont cependant possible que grâce à la gravité modifiant les profondeurs des pièges des trois espèces. Sinon les espèces seraient purifiées dans $m_F = 0$ seulement. En conclusion, la combinaison du piège dipolaire et d'un gradient de champ magnétique appliqué pendant l'évaporation permet de choisir le sous-état magnétique m_F dans lequel les atomes se condensent.

I.4 Système d'imagerie

Pour pouvoir réaliser des mesures quantitatives tant sur le piège magnéto-optique que sur le condensat de Bose-Einstein, nous avons recours à l'imagerie par absorption. Le piège magnéto-optique et le condensat de Bose-Einstein sont deux objets qui ont des tailles relativement différentes. En effet, un piège magnéto-optique a une taille de l'ordre du cm et un condensat de Bose-Einstein en expansion a une taille de l'ordre de la dizaine de micromètre. Nous utilisons donc deux modes d'imagerie différents : le mode appelé PMO permet d'observer de manière optimale le piège magnéto-optique et le mode CBE le condensat de Bose-Einstein. Pour passer d'un mode à l'autre sans avoir de réglages importants à faire,

3. Nous gardons allumé la même bobine pour éviter une inversion de spin.

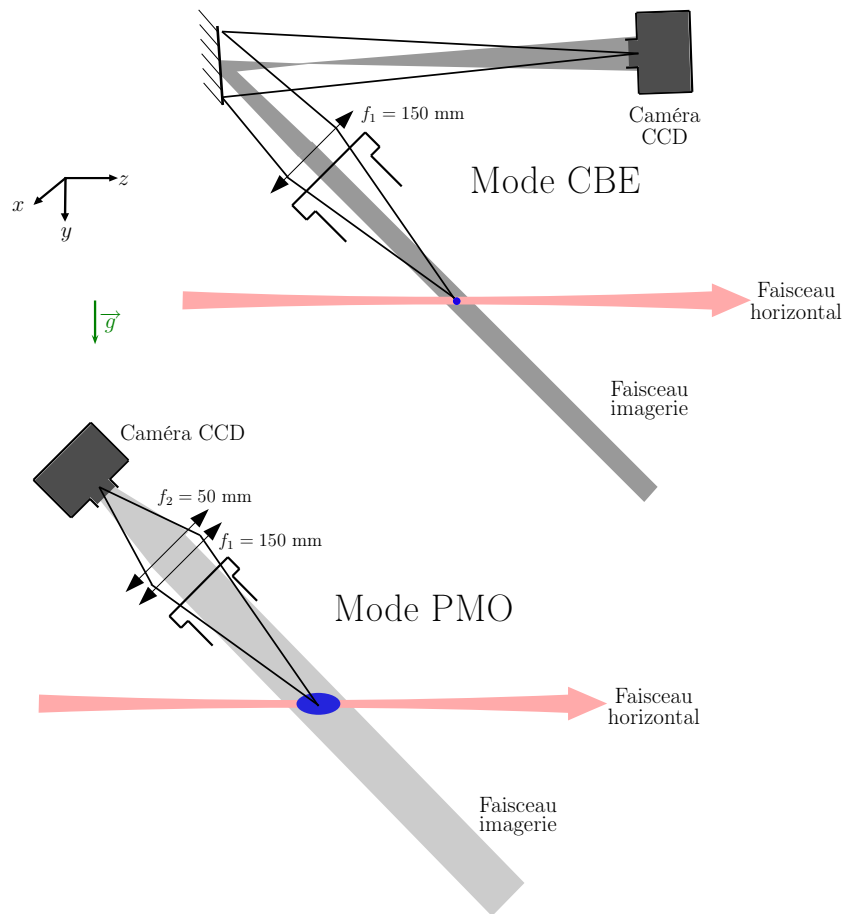


FIGURE I.14 – Schéma du chemin suivi par le faisceau imagerie dans la chambre. Les deux modes d'imagerie sont représentés : le mode CBE avec une lentille de focale 150 mm et le mode PMO pour lequel on a accolé une lentille de focale 50 mm à la première. Le chemin en gris est celui suivi par le faisceau d'imagerie.

nous utilisons des montures opto-mécaniques magnétiques⁴ qui permettent de replacer la lentille ou le miroir avec une répétabilité de l'ordre du microradian.

Le faisceau d'imagerie est à 45° dans le plan vertical comme le montre la figure I.14 perpendiculaire à la direction du faisceau vertical. Or, les atomes sont dans le plan horizontal. Sur l'axe du guide horizontal, les distances mesurées sur la caméra sont donc un facteur $\sqrt{2}$ fois plus petites que les distances réelles.

La caméra CCD utilisée est une caméra Basler A100f Séries constituée d'un réseau de 1392×1040 pixels carrés de côté $c = 6.45 \mu\text{m}$. Ainsi les dimensions de la caméra sont d'environ $9 \text{ mm} \times 7 \text{ mm}$. Nous disposons de deux caméras identiques ce qui permet d'avoir un minimum d'éléments d'optique à changer lors du changement de mode d'imagerie et ainsi de limiter les réglages à faire.

4. De tels montures sont disponibles chez le fabricant Thorlabs, référence : SB1/M.

I.4.1 Mode PMO

Dans le mode PMO, le faisceau d'imagerie qui traverse les atomes a une taille d'environ 3 cm de diamètre. Cette taille de faisceau permet d'imager tout le piège magnéto-optique. Nous utilisons deux lentilles L_1 et L_2 distantes de 40 mm de focale $f_1 = 150$ mm et $f_2 = 50$ mm. La lentille L_1 est aussi utilisée pour le mode CBE. Nous cherchons donc l'image conjuguée des atomes par le système des deux lentilles. L'image des atomes à travers L_1 se trouve à 712.5 mm de celle-ci. Cette image est objet de L_2 . Les deux lentilles étant distantes de 40 mm, l'objet de L_2 est positionné à -672.5 mm et l'image conjuguée se trouve à 46.5 mm de L_2 . La caméra CCD est donc placée en ce point image et elle est installée sur une translation afin de mettre l'image au point.

Le grandissement obtenu est d'environ $\gamma_{\text{PMO}} \simeq 0.26$. Ainsi nous estimons pour le mode PMO la taille du pixel à $c_{\text{PMO}} = c/\gamma_{\text{PMO}} = 24.8 \mu\text{m}/\text{pixels}$.

I.4.2 Mode CBE

Dans le mode CBE, le faisceau de l'imagerie est également changé et a un diamètre de 3 mm environ. Cette plus petite taille permet d'avoir une intensité du faisceau imageur plus importante et un meilleur contraste sur les images. Les atomes sont toujours situés à 190 mm de la première lentille. On place la caméra au niveau du point conjugué image, c'est-à-dire à 712.5 mm de la lentille. La caméra est installée sur translation pour pouvoir ajuster sa position et mettre le système au point.

Le grandissement résultant est de $\gamma_{\text{CBE}} = 712.5/190 \simeq 3.75$. Ainsi, la taille du pixel sur la caméra correspond pour ce grandissement à $c_{\text{CBE}} = c/\gamma_{\text{CBE}} = 1.72 \mu\text{m}/\text{pixels}$. Une calibration plus précise de la taille du pixel est réalisée par diffraction Raman-Nath ; cette méthode sera développée au chapitre II.

I.4.3 Résolution optique

La résolution optique est donnée par la distance minimale qui sépare deux taches que l'on peut distinguer (critère de Rayleigh). Elle vaut :

$$R = 0.61 \frac{\lambda}{\text{O.N.}}, \quad (\text{I.19})$$

où O.N. est l'ouverture numérique et λ est la longueur d'onde du laser imagerie⁵. Dans notre dispositif, l'ouverture numérique vaut : $\text{O.N.} \simeq 0.07$; elle est limitée par la taille des fenêtres de la chambre qui ont un diamètre de 38 mm et par la taille de la lentille qui a un rayon de 15 mm. La résolution optique de notre système d'imagerie est donc d'environ $R \simeq 7 \mu\text{m}$. Cependant, cette valeur correspond à la résolution optique du système idéal sans aberrations sphériques. La résolution réelle du système est par suite un peu plus grande. Nous considérons qu'elle est de l'ordre de $10 \mu\text{m}$. Cette résolution n'est pas limitante pour

5. Le laser imageur est résonnant sur la transition $|F = 2\rangle \rightarrow |F' = 3\rangle$ et $\lambda = 780$ nm. Pour imager les atomes condenser dans $|F = 1\rangle$, le laser repompeur est allumé en même temps que le laser imageur.

le mode PMO puisque la taille du pixel est plus grande. C'est dans ce cas la taille du pixel qui nous limite. Par contre dans le mode CBE, la résolution optique correspond à la taille de 5 pixels environ ce qui peut s'avérer limitant.

I.5 Conclusion

Nous avons dans ce chapitre caractérisé notre dispositif expérimental. Le faisceau dipolaire horizontal permet tout d'abord de capturer les atomes du piège magnéto-optique. La densité dans le piège est fortement augmentée en transférant préalablement les atomes dans l'état magnétique $F = 1$. La mise en forme et le contrôle de la puissance permettent d'obtenir un faisceau focalisé sur les atomes avec un waist de $50 \mu\text{m}$ et une puissance initiale de $P = 24 \text{ W}$. Nous avons constaté qu'une puissance plus élevée entraînait plus de pertes d'atomes qu'une puissance plus faible même si le piège est plus profond. Le laser utilisé pour les pièges dipolaires est très multimode et cette grande largeur de fréquence induit des transitions vers l'état $F = 2$. Les collisions avec un tel état sont plus fréquentes et entraînent plus de pertes.

Le faisceau dipolaire horizontal est croisé avec un faisceau dipolaire vertical afin de confiner le piège longitudinalement. Là aussi, il est important de soigner la mise en forme du faisceau et le contrôle des puissances. Ce deuxième faisceau croise donc le premier avec un waist d'environ $100 \mu\text{m}$ et une puissance maximum de 22 W . Grâce à ce piège dipolaire croisé, nous pouvons atteindre après une phase d'évaporation de 3 s le régime de dégénérescence quantique. Nous avons au fil du temps constaté que la dégradation lente du mode du faisceau entraînait une perte d'atomes dans le condensat. Cette dégradation en fonction de la consigne de puissance n'est pas encore comprise et pouvait être telle que nous n'arrivions plus à condenser les atomes.

Les fréquences transverses du piège à la fin de l'évaporation ont été déterminées en faisant osciller le condensat dans le piège. Cela nous a permis de montrer l'importance de prendre en compte la gravitation dans notre expression du piège dipolaire. Nous avons finalement étudié comment le degré de liberté interne pouvait être contrôlé. La distillation de spin permet en effet de sélectionner le sous-état magnétique dans lequel les atomes se condensent en favorisant l'évaporation des autres sous-états. Ce dispositif est la première étape avant la réalisation d'ondes de matières guidées et le contrôle des degrés de liberté interne lors de la condensation permet de choisir la polarisation de ces "lasers à atomes".

Chapitre II

Mise en place et caractérisation d'un réseau optique

Sommaire

II.1	Introduction historique	43
II.2	Mise en place du réseau optique	46
II.2.1	Rappels théoriques sur les réseaux optiques et introduction de grandeurs caractéristiques	46
II.2.2	Dispositif expérimental	47
II.3	Mesure de la profondeur des puits de potentiel par diffraction	52
II.3.1	Diffraction Raman-Nath	52
II.3.2	Au-delà de l'approximation Raman-Nath	55
II.3.3	Caractérisation expérimentale	56
II.3.4	Mesure du pas du réseau	58
II.4	Conclusion	59

II.1 Introduction historique

Les réseaux optiques ont de nombreuses applications dans le domaine des atomes froids. Ils résultent d'interférences d'ondes lumineuses et il est donc possible de contrôler précisément la profondeur du réseau en ajustant l'intensité des ondes lumineuses. Cela permet ainsi de contrôler l'effet tunnel entre chaque puits du réseau. De plus, de nombreuses géométries pour ces réseaux optiques peuvent être créées. Il est par exemple possible de modifier la période du réseau en changeant l'angle entre les ondes lumineuses qui interfèrent. Il est aussi possible de créer des géométries plus compliquées comme des réseaux triangulaires [49, 50]. En variant la polarisation d'une onde lumineuse par rapport à l'autre, on peut créer des réseaux dépendant de l'état interne. Les atomes interagissant avec ce réseau ne verront pas le même potentiel suivant leur état interne. De tels réseaux permettent de réaliser le transport cohérent d'atomes suivant leur spin dans des potentiels périodiques

[51]. La référence [52] offre un autre exemple de potentiel périodique dépendant de l'état interne pour une géométrie hexagonale. Les réseaux optiques bichromatiques permettent, quant à eux, de simuler le désordre afin d'étudier la localisation d'Anderson [53] ainsi que le régime de délocalisation [54]. Les potentiels périodiques dépendant du temps ont aussi de nombreuses applications comme le contrôle dynamique de l'effet tunnel [55]. En combinant les réseaux dépendant du temps et les réseaux bichromatiques, on peut imiter le mouvement d'une "roue à cliquet" ou "ratchet" en allumant et éteignant successivement des potentiels périodiques et asymétriques [56, 57]. Les réseaux optiques offrent ainsi de grandes possibilités d'expériences dans le domaine des atomes froids.

Dans les chapitres suivants, nous décrivons une expérience de diffusion d'un condensat se propageant sur un réseau optique. Pour réaliser cette expérience, il faut d'abord avoir une idée précise de la profondeur du réseau. Dans ce chapitre, nous présentons donc la méthode employée pour calibrer la profondeur ainsi que la mise en place expérimentale du réseau optique.

La méthode utilisée pour calibrer le réseau est une méthode de diffraction Kapitza-Dirac. Ces deux scientifiques ont été les premiers à proposer la diffraction d'onde de matières par la lumière pour les électrons en 1933 [58]. Le mécanisme consiste à redistribuer les photons entre deux ondes par diffusion Compton : un photon d'une onde est diffusé par un électron dans l'autre onde par diffusion Compton. En se basant sur ces travaux, S. Atshuler, L. M. Frantz et R. Braunstein [59] ont, en 1966, étendu l'idée à la diffraction d'atomes neutres par la lumière. Ils ont ainsi montré que la proposition de Peter Kapitza et Paul Dirac pour les électrons pouvait s'étendre à toute particule capable de diffuser des photons, incluant les atomes neutres. Ils font remarquer alors que la probabilité de diffraction est accrue lorsque la fréquence de la lumière utilisée se rapproche de la fréquence de résonance. Les premières expériences de diffraction d'atomes par une onde stationnaire ont été effectuées par le groupe de David Pritchard, d'abord dans le régime de Raman-Nath, régime correspondant aux temps d'interaction courts [60, 61] puis dans le régime de Bragg, pour des temps d'interaction plus longs et des potentiels peu profonds [62].

Les expériences de diffraction d'atomes sur un réseau optique sont maintenant monnaie courante dans le domaine de la physique atomique. Notamment, la diffraction d'atomes dans le régime de Bragg est souvent employée pour réaliser des lames séparatrices et des miroirs pour atomes dans le but de créer par exemple des interféromètres atomiques, comme les interféromètres de Mach-Zehnder. Les ondes stationnaires peuvent aussi être employées comme des éléments directifs pour la réalisation de lithographie atomique. La diffraction des atomes par l'onde stationnaire permet de privilégier une direction pour le dépôt des atomes sur une surface [63]. La diffraction dans le régime de Raman-Nath [64] est souvent utilisée quant à elle pour mesurer la profondeur des potentiels périodiques.

Un troisième régime de diffraction apparaît aux temps longs et pour des potentiels périodiques profonds, c'est le régime "de guidage" ("Channeling Regime" en anglais.). Il est appelé ainsi car les atomes sont guidés le long des puits de potentiel. La figure II.1 issue de l'article de Keller et al. [65] résume les domaines des différents régimes en fonction du

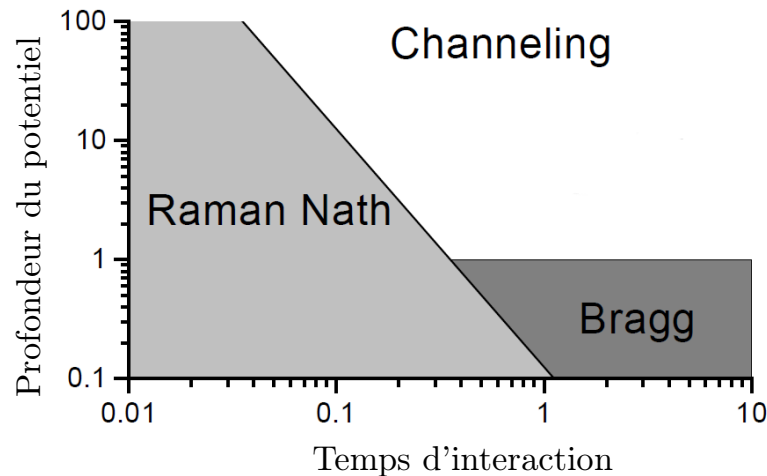


FIGURE II.1 – Domaines des différents régimes de diffraction en fonction du temps d'interaction et de la profondeur de potentiel. Le régime Raman-Nath est le régime des temps courts. Pour des temps d'interaction plus long, le régime de Bragg correspond à des profondeurs de potentiels faibles tandis que le régime de "channeling" ou "guidage" correspond à des potentiels profonds. Cette figure est issue de l'article de Keller et al.[65]. Le temps d'interaction et la profondeur sont adimensionnés avec des paramètres définis dans la référence [65].

temps et de la profondeur du potentiel. Les auteurs étudient en particulier comment le fait d'allumer et d'éteindre adiabatiquement ou non le réseau influence la figure de diffraction des atomes dans le régime de "guidage". On peut citer d'autres expériences étudiant ce régime : la référence [66] étudie la distribution spatiale des atomes dans une onde stationnaire proche de résonance et la référence [67] dans laquelle les auteurs guident les atomes le long d'une onde sphérique qui défléchit le jet atomique. Par ailleurs, comparativement aux autres régimes, le calcul des populations dans les différents ordres n'est pas aussi aisé dans le régime de "guidage" que dans l'approximation Raman-Nath qui donne une formule analytique assez simple. Cependant, un modèle classique permet de comprendre en grande partie les figures de diffraction [68].

Nous présentons dans ce chapitre la mise en place d'un réseau optique et sa calibration par diffraction Raman-Nath. La première partie de ce chapitre est consacrée à la mise en place du réseau optique. En particulier, nous rappelons quelques aspects théoriques sur les réseaux et nous introduisons des grandeurs les caractérisant. Nous explicitons ensuite le dispositif expérimental permettant la réalisation du réseau. La deuxième partie de ce chapitre est dédiée à la caractérisation de la profondeur du réseau par diffraction Raman-Nath. Quelques aspects théoriques sur ce régime sont explicités. On explique ensuite le protocole expérimental de caractérisation de la profondeur et de la période du potentiel.

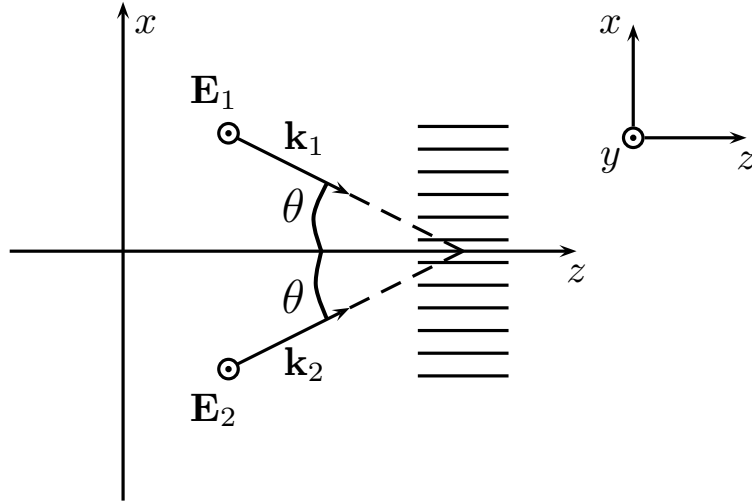


FIGURE II.2 – Schéma des deux ondes lumineuses $(\mathbf{E}_1, \mathbf{k}_1)$ et $(\mathbf{E}_2, \mathbf{k}_2)$ créant un réseau 1D. L'angle θ est le demi-angle entre les deux directions de propagation des faisceaux.

II.2 Mise en place du réseau optique

II.2.1 Rappels théoriques sur les réseaux optiques et introduction de grandeurs caractéristiques

Notre réseau optique résulte de l'interférence de deux faisceaux lasers de même longueur d'onde λ_R faisant un angle de 2θ (voir figure II.2).

Modélisons nos deux faisceaux lasers par deux ondes planes polarisées linéairement de vecteur d'onde \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 dans le plan (Oxz) schématisées sur la figure II.2. Les ondes planes se croisent avec un angle 2θ telles que $\mathbf{k}_1 = k_1 \cos \theta \mathbf{u}_z - k_1 \sin \theta \mathbf{u}_x$ et $\mathbf{k}_2 = k_2 \cos \theta \mathbf{u}_z + k_2 \sin \theta \mathbf{u}_x$ avec $k_i = |\mathbf{k}_i|$ la norme du vecteur d'onde ($i = 1, 2$). Les champs électriques des deux ondes sont dans la direction y . Le champ électrique total s'écrit :

$$\mathbf{E}_T(\mathbf{r}, t) = [E_1 \cos(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t) + E_2 \cos(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} - \omega_2 t)] \mathbf{u}_y. \quad (\text{II.1})$$

L'intensité totale est donc égale à :

$$\begin{aligned} E_T^2(\mathbf{r}, t) &= E_1^2 \cos^2(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t) + E_2^2 \cos^2(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} - \omega_2 t) + E'^2(\mathbf{r}, t), \\ \text{avec} \quad E'^2(\mathbf{r}, t) &= 2E_1 E_2 \cos(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t) \cos(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} - \omega_2 t). \end{aligned} \quad (\text{II.2})$$

Le dernier terme se réécrit comme la somme de deux cosinus :

$$E'^2(\mathbf{r}, t) = E_1 E_2 [\cos((\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r} - (\omega_1 + \omega_2) t) + \cos((\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r} - (\omega_1 - \omega_2) t)]. \quad (\text{II.3})$$

On écrit le produit scalaire $(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r} = (k_1 - k_2) z \cos \theta - (k_1 + k_2) x \sin \theta$. En faisant, en plus, l'hypothèse que $\omega_1 = \omega_2$ et $k_1 = k_2 = k$, l'expression de l'intensité moyenne du

champ s'écrit :

$$\langle E^2 \rangle = \frac{E_1^2}{2} + \frac{E_2^2}{2} + E_1 E_2 \cos(2kx \sin \theta), \quad (\text{II.4})$$

On remarque alors que l'intensité moyenne $I(x) = \langle E^2 \rangle$ varie suivant une seule direction x . En considérant que les intensités des deux ondes sont égales : $E_1^2/2 = E_2^2/2 = I_0$, l'intensité moyenne s'écrit :

$$I(x) = 2I_0 (1 + \cos(2kx \sin \theta)) = 4I_0 \cos^2(kx \sin \theta). \quad (\text{II.5})$$

Les zéros d'intensité sont donnés par : $2kx_p \sin \theta = \pi + 2p\pi$ soit $x_p = \lambda_R(1 + 2p)/4 \sin \theta$. Le pas du réseau d vaut donc :

$$d = x_{p+1} - x_p = \frac{\lambda_R}{2 \sin \theta}. \quad (\text{II.6})$$

Cette période d du réseau permet d'introduire une vitesse $v_R = h/md$ et une énergie $E_R = mv_R^2/2$ caractéristiques du réseau, où m est la masse des atomes.

Le potentiel $U(x) = \chi_R I(x)$ vu par les atomes est écrit :

$$U(x) = U_0 \cos^2(k_R x) = \frac{U_0}{2} (1 + \cos(2k_R x)), \quad (\text{II.7})$$

où $k_R = k \sin \theta = \pi/d$ et $U_0 = 4\chi_R I_0$ et χ_R est le coefficient de proportionnalité entre l'intensité lumineuse et la profondeur de potentiel. Il est défini au chapitre I dans l'équation (I.2). Dans le cas du laser de longueur d'onde $\lambda_R = 840$ nm, ce coefficient vaut :

$$\chi_R = -7.59 \cdot 10^{-36} \text{ J.W}^{-1}.\text{m}^{-2} \quad \text{ou} \quad \chi_R = -5.50 \text{ mK.MW}^{-1}.\text{cm}^{-2}. \quad (\text{II.8})$$

Le laser utilisé pour réaliser le réseau optique est séparé en deux bras qui se croisent avec un angle $2\theta \simeq 80.5^\circ$. La période du réseau vaut donc $d \simeq 650$ nm. Pour les atomes de rubidium de masse $m = 1.44 \cdot 10^{-25}$ kg la vitesse caractéristique du réseau vaut $v_R = h/md \simeq 7$ mm/s et l'énergie caractéristique du réseau vaut : $E_R = mv_R^2/2 \simeq 3.61 \cdot 10^{-30}$ J ou $E_R/k_B = 262$ nK.

Nous décrivons maintenant le dispositif expérimental mis en place pour réaliser notre réseau optique.

II.2.2 Dispositif expérimental

Le dispositif expérimental est présenté sur la figure II.3. Il est séparé en deux parties : l'une sur une table optique indépendante permettant d'avoir la place nécessaire pour bien caractériser la fréquence du laser (Table 1), l'autre sur la table d'expérience pour former le réseau optique dans la chambre (Table 2). Les deux sont reliées entre elles par une fibre optique. Nous décrivons dans la suite le dispositif expérimental sur les deux tables.

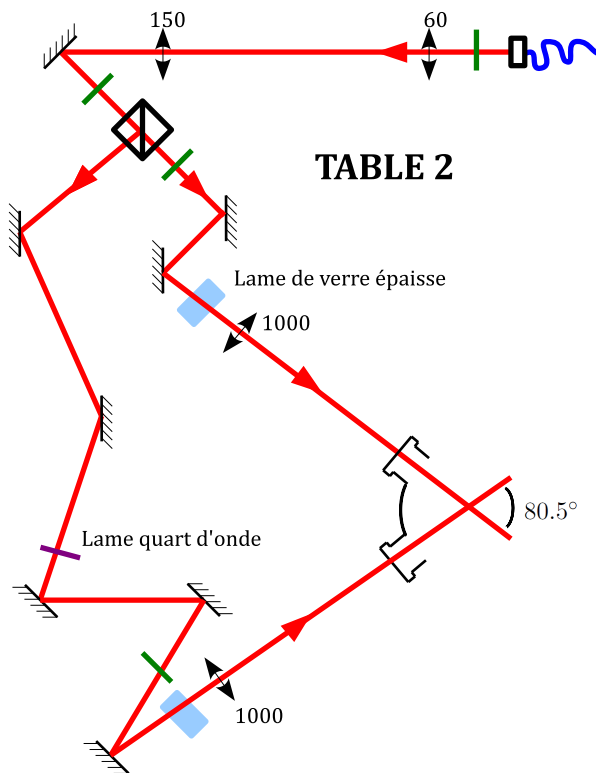
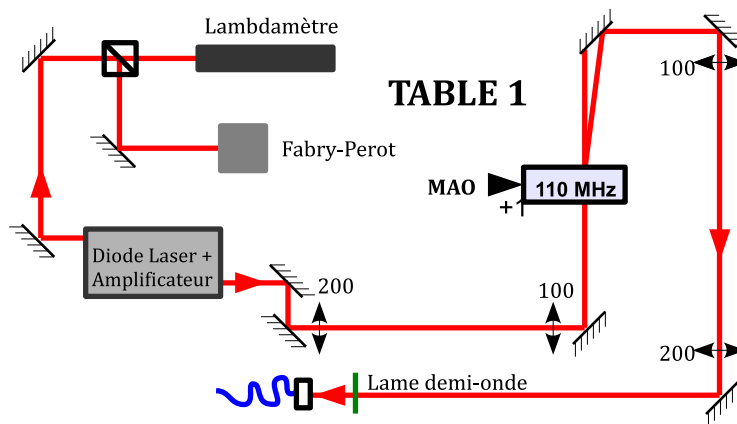


FIGURE II.3 – Montage optique réalisé pour créer le réseau optique. La table 1 est une table optique sur laquelle on dispose de la place nécessaire pour caractériser le laser (contrôle de la fréquence et de la puissance). La table 2 est la table optique qui accueille la chambre d'expérience. Le faisceau passe de l'une à l'autre à l'aide d'une fibre optique. Les nombres à côté des lentilles correspondent à leurs focales en mm.

Caractéristiques du laser créant le réseau optique

Le laser utilisé pour créer le réseau optique est un laser provenant de la société Toptica à la longueur d'onde 840 nm, un laser maître injectant un amplificateur de puissance¹. Une petite portion du laser maître est prélevée pour vérifier que la longueur d'onde reste constante avec un lambdamètre commercial de la société HighFinesse et vérifier que le laser est monomode à l'aide d'une cavité Fabry-Pérot. L'autre portion du laser est envoyée dans l'amplificateur Toptica et la puissance en sortie est de 550 mW environ. Le laser passe ensuite à travers un modulateur acousto-optique (MAO) qui permet d'avoir un contrôle de sa puissance. Avant d'entrée dans le MAO la taille du faisceau est réduite d'un facteur 2 grâce à un télescope pour optimiser l'efficacité de diffraction. Celle-ci est de 72 % en sortie du MAO, ce qui correspond à une puissance laser de 400 mW environ. Le faisceau est alors envoyé sur la table de la chambre d'expérience à l'aide d'une fibre optique après passage au travers d'un télescope de facteur 2 pour optimiser l'efficacité de couplage dans la fibre. Nous avons typiquement 200 mW en sortie de fibre.

Mise en forme et contrôle de la puissance

Sur la table 2, la taille du faisceau est d'abord multipliée par un facteur 3 environ à l'aide d'un télescope. Une lame demi-onde suivie d'un cube polariseur sépare ensuite le faisceau en deux bras (voir figure II.3). La lame demi-onde est réglée de manière à avoir la même puissance à l'entrée de la chambre pour les deux faisceaux après passage à travers toutes les optiques. Après leur séparation, les deux faisceaux passent chacun à travers une autre lame demi-onde qui permet de régler la polarisation des faisceaux afin qu'ils interfèrent. Deux lentilles de focale 1000 mm focalisent les deux faisceaux dans la chambre avec un waist de $w = 110 \mu\text{m}$. Les deux faisceaux se croisent au niveau de leur waist au centre de la chambre d'expérience. La puissance maximale disponible est d'environ $P_0^{\text{max}} = 50 \text{ mW}$ par bras. Avec un tel waist et une telle puissance, la valeur maximale du potentiel vaut :

$$U_0^{\text{max}} = 4\chi_R \times \frac{2P_0^{\text{max}}}{\pi w} = 22E_R \quad \text{soit} \quad \frac{U_0^{\text{max}}}{k_B} \simeq 5.8 \mu\text{K}. \quad (\text{II.9})$$

Grâce au modulateur acousto-optique, nous contrôlons la profondeur du potentiel jusqu'à la valeur U_0^{max} .

Un grand soin est à apporter à la polarisation des faisceaux entrant dans la chambre. En effet, elle doit être naturellement dans la même direction pour les deux faisceaux afin qu'ils interfèrent (comme indiqué sur la figure II.2). Nous choisissons, en conséquence, une polarisation verticale. Pour régler la polarisation, nous plaçons temporairement avant l'entrée de la chambre un cube polariseur. Le cube polariseur transmet la lumière polarisée horizontalement et réfléchit la lumière polarisée verticalement. Nous minimisons alors la quantité de lumière transmise à l'aide de la lame demi-onde placée avant le cube. La lame est maintenant réglée et le cube peut être retiré du chemin optique.

1. L'amplificateur est un MOPA : "Master Oscillator Power Amplifier".

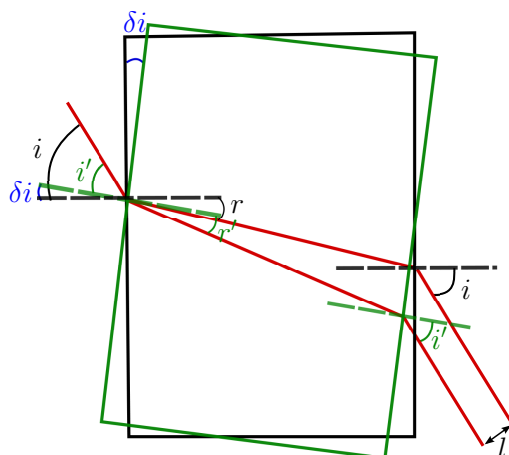


FIGURE II.4 – Schéma de principe du trajet d'un rayon lumineux passant par une lame épaisse que l'on tourne d'un angle δi .

Le modulateur acousto-optique permet un contrôle de la puissance du faisceau à travers une consigne qui lui est envoyée. La réponse du MAO est rendue linéaire grâce à un asservissement. La consigne envoyée au MAO est comparée au signal reçu sur une photodiode placée à la fin du trajet d'un des deux bras à la sortie de la chambre. Le signal d'erreur obtenu est intégré à l'aide d'un circuit intégrateur pour corriger la consigne envoyée au MAO. Nous disposons donc d'un contrôle linéaire de la puissance dans les deux bras, le modulateur acousto-optique étant placé bien en amont de la séparation. Le fait que la photodiode ne recueille la puissance que de l'un des deux bras ne pose pas de problème puisque la séparation est faite à l'aide d'un "robinet" composé d'une lame demi-onde suivie d'un cube. C'est la lame demi-onde qui est ici critique pour la répartition de la puissance dans les deux bras.

Positionnement du point de croisement

Le réglage de la position des faisceaux est délicat puisqu'il faut d'une part que les deux faisceaux coïncident au niveau de leur waist et d'autre part que ce croisement se superpose sur la position du condensat de Bose-Einstein. Les miroirs permettant l'alignement étant placés à un mètre, il est difficile de faire un réglage précis à la centaine de micromètres. En effet, un tour de vis de la monture du miroir placée avant la lentille de focale 1000 mm correspond à une déviation angulaire de 13 mrad. En considérant que le miroir est placé à 1 m du centre de la chambre et en faisant l'approximation de petits angles, la distance balayée par le faisceau lorsqu'on tourne la vis d'un tour est donc de $l \simeq 1 \text{ m} \times 13 \cdot 10^{-3} \text{ rad} \simeq 13 \text{ mm}$. Or les faisceaux ayant un waist de $100 \mu\text{m}$, il faut pouvoir régler la position des faisceaux avec une précision bien meilleure que la centaine de micromètre. En nombres de tour, il faudrait être précis à moins d'un centième de tour de vis!

Pour augmenter la précision on installe une lame de verre épaisse d'un centimètre montée elle aussi sur une monture à vis de révolution 13 mrad par tour sur le trajet du

faisceau. Lorsque la lame subit une rotation de $\delta i = 13$ mrad, le faisceau en sortie reste parallèle et est décalé de la longueur l qui vaut, dans l'approximation des petits angles :

$$l \simeq e\delta i \left(\frac{n-1}{n} \right) \simeq 40 \mu\text{m}. \quad (\text{II.10})$$

où $e = 1$ cm est l'épaisseur de la lame et $n = 1.5$ est l'indice du verre. Ainsi, en un tour de vis nous pouvons balayer $40 \mu\text{m}$. La figure II.4 montre l'effet d'une rotation de la lame épaisse sur le faisceau. Il y a une complémentarité entre le réglage avec le miroir et le réglage avec la lame épaisse. En effet, jouer sur les vis du miroir permet un pré-positionnement du faisceau et jouer sur les vis de la lame épaisse permet d'ajuster précisément sa position. De même, nous avons deux techniques complémentaires pour régler la position des faisceaux. Une première étape permet d'être relativement bien placé et une seconde étape permet un réglage précis de la position des deux faisceaux entre eux et par rapport au condensat. Le protocole d'alignement des faisceaux entre eux est le suivant :

1. Nous remplaçons temporairement le laser à 840 nm par un laser à 780 nm asservi sur la transition $|F = 2\rangle \rightarrow |F' = 2\rangle$ du ^{87}Rb . Ce remplacement temporaire sans dérégler les optiques est possible : il suffit de remplacer la fibre optique transportant le laser à 840 nm par une fibre optique transportant un laser sur la transition $|F = 2\rangle \rightarrow |F' = 2\rangle$. Ce laser a pour effet de dépomper les atomes : ainsi la position du laser est repérée par un trou dans le nuage d'atomes. Ce premier réglage permet de superposer les faisceaux avec le piège magnéto-optique d'abord et avec le piège dipolaire ensuite. En général, nous prenons comme point de repère le piège dipolaire après 100 ms de maintien constant de la puissance du faisceau dipolaire horizontal. La figure II.5 montre ainsi la position des atomes manquants dans la pince optique c'est-à-dire la position des deux bras. Sur cette figure, les deux bras ne sont pas superposés.
2. Un réglage plus fin est effectué après évaporation. En effet, les faisceaux à 840 nm pris indépendamment permettent de réaliser des pièges dipolaires croisés à l'intersection du faisceau dipolaire horizontal. Si toute la puissance est concentrée dans un bras (environ 100 mW maximum), la profondeur du piège est d'environ $U_{\text{dip}} \simeq 3 \mu\text{K}$. Le faisceau dipolaire horizontal atteint cette profondeur après environ 3 secondes d'évaporation. Le faisceau du réseau permet alors de confiner les atomes longitudinalement remplaçant l'action du faisceau dipolaire vertical. Le piège dipolaire est positionné au niveau du condensat de Bose-Einstein. Pour régler la position du faisceau plus précisément, on optimise la profondeur du piège croisé. L'opération est répétée pour le deuxième bras du réseau optique.

Le réseau est maintenant mis en place au niveau du condensat. Dans la section suivante, nous expliquons la méthode de calibration de sa profondeur.

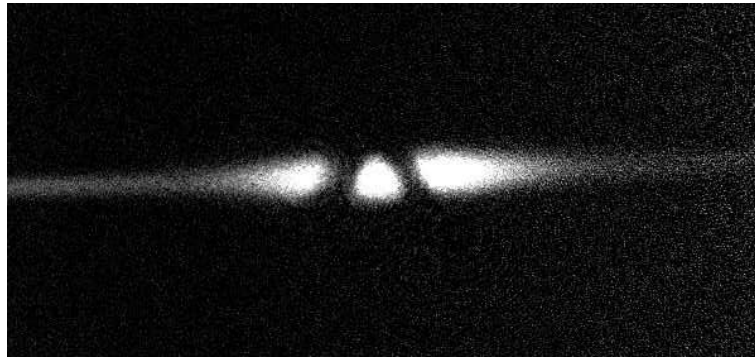


FIGURE II.5 – Image par absorption du piège dipolaire après 100 ms de maintien de la puissance du faisceau dipolaire horizontal sur lequel on superpose les faisceaux bloqués sur la transition $|F = 2\rangle \longrightarrow |F' = 2\rangle$ du ^{87}Rb . Les atomes sont poussés hors du piège. La figure montre donc que les faisceaux qui vont constituer le réseau ne sont pas encore superposés.

II.3 Mesure de la profondeur des puits de potentiel par diffraction

II.3.1 Diffraction Raman-Nath

La méthode consiste à appliquer le réseau sur le condensat pendant une durée τ et à observer après temps de vol comment la distribution des impulsions a été affectée. L'analyse quantitative donne accès aux caractéristiques du réseau et permet la calibration de la profondeur du réseau et du grandissement de l'imagerie.

L'approximation de Raman-Nath consiste à négliger le terme d'énergie cinétique du Hamiltonien $H = p^2/2m + U$ ce qui se justifie pour des durées d'interaction plus courtes que la période de l'oscillateur harmonique d'un puits du potentiel. La diffraction Raman-Nath a pour effet d'imprimer une phase spatiale sur la fonction d'onde atomique du condensat. Dans ce régime de diffraction, la distance parcourue par les atomes dans la direction transverse pendant l'interaction avec le réseau optique peut être négligée. Après un temps d'évolution τ dans le potentiel $U(x) = U_0 \cos^2(k_R x) = (U_0/2) \times (1 + \cos(2k_R x))$, la fonction d'onde s'écrit en négligeant le terme d'énergie cinétique du Hamiltonien $H = p^2/2m + U$, justifié par les temps d'interaction courts par rapport à la période de l'oscillateur harmonique d'un puits du potentiel :

$$\psi(x, \tau) = e^{-iU(x)\tau/\hbar} \psi_0(x), \quad (\text{II.11})$$

où $\psi_0(x)$ est la fonction d'onde initiale du condensat. Le terme d'évolution se développe sur les fonctions de Bessel :

$$e^{-U_0 i(1+\cos(2k_R x))\tau/2\hbar} = e^{-iU_0\tau/2\hbar} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n J_n \left(\frac{U_0\tau}{2\hbar} \right) e^{2ink_R x}. \quad (\text{II.12})$$

Le facteur $\exp(-iU_0\tau/2\hbar)$ est un facteur de phase global qu'on fixe égal à 1 dans la suite. On a alors :

$$\psi(x, \tau) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n J_n\left(\frac{U_0\tau}{2\hbar}\right) e^{2ink_{\text{R}}x} \psi_0(x). \quad (\text{II.13})$$

Le potentiel périodique projette la fonction d'onde sur une grille dans l'espace des impulsions de pas $2\hbar k_{\text{R}}$. Ce pas traduit la nature des processus cohérents qui ont lieu au cours de la diffraction (absorption, émission stimulée). Dans le régime de Raman-Nath, les poids de chaque composante sont donnés par la valeur des fonctions de Bessel d'ordre n pour un argument égal à $U_0\tau/(2\hbar)$. Après l'interaction du condensat avec le réseau optique, un temps de vol Δt avant la prise d'images permet d'avoir accès à l'espace des impulsions et donc à la figure de diffraction.

Etudions maintenant l'évolution de la fonction d'onde d'un ordre de diffraction : $\psi_n(x, 0) = \exp(2ink_{\text{R}}x)\psi_0(x)$ pendant le temps de vol Δt . On considère que la fonction d'onde initiale $\psi_0(x)$ est une fonction gaussienne :

$$\psi_0(x) = g(x, \sigma, 0) \quad \text{avec} \quad g(x, \sigma, x_0) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{\sigma}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (\text{II.14})$$

avec σ la largeur de la fonction gaussienne et x_0 la position de son centre. Pour évaluer $\psi_n(x, \Delta t)$, nous étudions l'évolution pendant un temps Δt d'un paquet d'onde gaussien ayant une vitesse moyenne $k_n = 2nk_{\text{R}}$. La transformée de Fourier de $\psi_n(x, 0)$ est une gaussienne centrée en k_n^2 :

$$\tilde{\psi}_n(k, 0) = \tilde{\psi}_0(k - k_n) = g(k, 1/\sigma^2, k_n). \quad (\text{II.15})$$

L'évolution dans le temps de cette fonction d'onde est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d\psi(x, t)}{dt} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x, t)}{dx^2}. \quad (\text{II.16})$$

En appliquant la transformée de Fourier à cette équation, on obtient l'équation différentielle du premier ordre :

$$\frac{d\tilde{\psi}(k, t)}{dt} = \frac{-i\hbar}{2m} k^2 \tilde{\psi}(k, t), \quad (\text{II.17})$$

qui a pour solution $\tilde{\psi}_n(k, t) = \exp(-i\hbar k^2 t/2m) \tilde{\psi}_n(k, 0)$. On applique maintenant la transformée de Fourier inverse pour retrouver l'évolution dans l'espace réel après un temps de vol $t = \Delta t$.

$$\psi_n(x, \Delta t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\hbar k^2/2m} \tilde{\psi}_n(k, 0) e^{ikx} dk. \quad (\text{II.18})$$

2. On rappelle que la transformée de Fourier d'une gaussienne est aussi une gaussienne ($\int \exp(-iku) \exp(-\gamma u^2) du = \sqrt{\pi/\gamma} \exp(-k^2/4\gamma)$).

En posant $\hat{x} = x/\sigma$, $\widehat{k}_n = k_n\sigma$ et $\eta = \hbar\Delta t/(2m\sigma^2)$, l'intégrale se résout en :

$$\psi(\hat{x}, \Delta t) = \frac{\exp[A]}{\pi^{1/4}\sqrt{\sigma(1+2i\eta)}} \quad \text{avec} \quad A = \frac{-2\eta\widehat{k}_n^2 + 2\widehat{k}_n\hat{x} + i\hat{x}^2}{4\eta - 2i}. \quad (\text{II.19})$$

Afin de distinguer la partie complexe de la partie réelle du facteur A , nous le multiplions par $(4\eta + 2i)/(4\eta + 2i)$. A vaut alors :

$$A = \frac{1}{16\eta^2 + 4} \left[-2 \left(\hat{x} - 2\widehat{k}_n\eta \right)^2 + 4i \left(\widehat{k}_n\hat{x} + \eta\hat{x}^2 - \eta\widehat{k}_n^2 \right) \right]. \quad (\text{II.20})$$

De plus, $\left(\hat{x} - 2\widehat{k}_n\eta \right)^2 = (x - \hbar k_n \Delta t/m)^2 / \sigma^2$. Donc la fonction d'onde s'écrit après un temps d'évolution Δt :

$$\psi_n(x, \Delta t) = \frac{1}{\left[\pi\sigma^2 \left(1 + \frac{\hbar^2\Delta t^2}{m^2\sigma^4} \right) \right]^{1/4}} e^{i\varphi_n} \exp \left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_n \Delta t}{m} \right)^2}{2 \left(\sigma^2 + \frac{\hbar^2\Delta t^2}{m^2\sigma^2} \right)} \right], \quad (\text{II.21})$$

$$\psi_n(x, \Delta t) = e^{i\varphi_n} g \left(x, \sigma \sqrt{1 + \frac{\hbar^2\Delta t^2}{m^2\sigma^4}}, \frac{\hbar k_n \Delta t}{m} \right), \quad (\text{II.22})$$

avec $\varphi_n = 4 \left(k_n x + x^2 \hbar \Delta t / (2m\sigma^4) - k_n^2 \hbar \Delta t / (2m) \right)$.

Au final, dans le cas d'un paquet d'onde gaussien auquel on applique pendant un temps τ un potentiel périodique, la fonction d'onde après un temps de vol Δt s'écrit dans l'approximation de Raman-Nath :

$$\psi(x, \Delta t + \tau) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n J_n \left(\frac{U_0\tau}{2\hbar} \right) e^{i\varphi_n} g \left(x, \sigma \sqrt{1 + \frac{\hbar^2\Delta t^2}{m^2\sigma^4}}, \frac{2n\hbar k_R \Delta t}{m} \right). \quad (\text{II.23})$$

De plus, les différents ordres de diffraction sont bien séparés car la largeur de la gaussienne est petite devant la distance entre deux gaussiennes soit $\sigma k_R \gg 1$ et la densité de probabilité s'écrit donc :

$$|\psi(x, \Delta t + \tau)|^2 \simeq \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left| J_n \left(\frac{U_0\tau}{2\hbar} \right) \right|^2 g^2 \left(x, \sigma \sqrt{1 + \frac{\hbar^2\Delta t^2}{m^2\sigma^4}}, \frac{2n\hbar k_R \Delta t}{m} \right). \quad (\text{II.24})$$

La population des différents ordres de la figure de diffraction est donnée par les fonctions de Bessel. La propriété des fonctions de Bessel $|J_{-n}(x)|^2 = |J_n(x)|^2$ nous indique que la population dans les différents ordres de diffraction est symétrique par rapport à l'ordre zéro. De plus, la position de chaque ordre est donnée par $x_n = 2n\hbar k_R \Delta t/m$, l'espacement entre deux ordres de diffraction est dans l'espace réel, après un temps de vol Δt , de $\Delta x = 2\hbar k_R \Delta t/m$. Dans l'espace des impulsions, la différence Δp entre deux ordres vaut :

$$\Delta p = m\Delta v = m \frac{\Delta x}{\Delta t} = 2\hbar k_R. \quad (\text{II.25})$$

Les ordres de diffraction d'un condensat de Bose-Einstein dans un potentiel périodique sont espacées de $2\hbar k_R$ dans l'espace des impulsions. Après un temps de vol Δt , la distance séparant les ordres est de

$$\Delta x = \frac{h\Delta t}{md}. \quad (\text{II.26})$$

Cette distance permet de vérifier que notre système d'imagerie est bien calibré. L'espacement entre les différents ordres ne change pas lorsque l'approximation Raman-Nath ne s'applique plus. Dans la section suivante, nous déterminons à partir de quel temps d'interaction cette approximation n'est plus valable et nous décrivons les deux régimes qui apparaissent au-delà de ce temps.

II.3.2 Au-delà de l'approximation Raman-Nath

L'approximation Raman-Nath consiste à négliger le terme d'énergie cinétique du Hamiltonien. Cette approximation n'est donc valable que lorsque les atomes se déplacent d'une distance plus petite que la période du réseau pendant le temps d'interaction. Près du minimum d'énergie de chaque puits le potentiel peut être considéré comme un potentiel harmonique de fréquence ω_{ho} . Ainsi l'approximation Raman-Nath est valable lorsque la durée d'impulsion est plus petite qu'une période de l'oscillateur harmonique approximant les potentiels :

$$\tau \ll \tau_{\text{RN}} = \frac{1}{\omega_{\text{ho}}}, \quad \text{avec} \quad \omega_{\text{ho}} = \sqrt{U_0 E_R}/\hbar, \quad (\text{II.27})$$

la période de l'oscillateur harmonique. La valeur τ_{RN} , limite entre l'approximation Raman Nath et les autres régimes, dépend de la profondeur. Cette dépendance en puissance $-1/2$ est d'ailleurs illustrée dans la figure II.1. La droite limite entre le régime Raman-Nath et les régimes de Bragg et de "guidage" perd en effet deux ordres de grandeur en profondeur lorsqu'elle gagne un ordre de grandeur en temps d'interaction. Pour nos valeurs de potentiels la valeur de τ_{RN} varie entre $30 \mu\text{s}$ pour les potentiels peu profonds ($U_0 \simeq 1E_R$) et $10 \mu\text{s}$ pour des profondeurs plus grandes ($U_0 \simeq 10E_R$).

La référence [68] étudie aussi la diffraction d'un condensat sur un réseau optique dans le régime de Raman-Nath et au-delà. Ils observent des retours à un maximum de population dans l'ordre zéro après un temps d'interaction plus long que τ_{RN} , dans le régime de "guidage". Ils expliquent ces retours par un modèle classique où les atomes sont initialement au repos sur un potentiel sinusoïdal. Ils observent aussi un brutal effondrement des populations dans les ordres de diffraction. Cet effondrement est partiel et est expliqué par l'anharmonicité des puits de potentiel. L'ordre de diffraction le plus peuplé n'est en effet pas totalement vidé. Ces effondrements traduisent bien le fait que nous ne sommes plus dans l'approximation Raman-Nath puisqu'ils apparaissent à des temps supérieurs à τ_{RN} .

Pour des potentiels périodiques de profondeur faible à des temps d'interaction plus longs, on se trouve dans le régime de Bragg. La première réalisation expérimentale de diffraction de Bragg d'atomes neutres sur une onde stationnaire a été faite dans l'équipe de D. E. Pritchard [62]. La diffraction de Bragg permet donc de diffracter les atomes entre

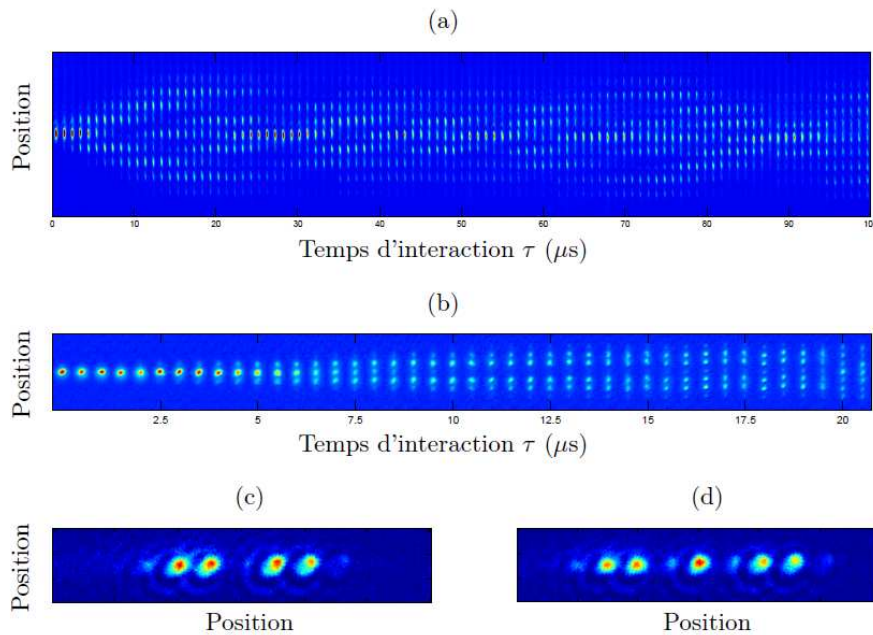


FIGURE II.6 – Profils de diffraction en fonction du temps d'interaction τ pour (a) des temps variant de 0 à 100 μs par pas de 1 μs , et pour des puissances par faisceaux de 48 mW et (b) des temps τ allant de 0 à 20.5 μs toutes les 0.5 μs et pour des puissances par faisceaux de 43 mW. Les images (c) et (d) sont des zooms de (a) pour des temps respectifs $\tau_0 = 9 \mu\text{s}$ et $\tau_1 = 15 \mu\text{s}$. La figure (c) montre l'annulation de l'ordre zéro de diffraction.

deux états séparés de $2\hbar k$ [69]. Suivant les paramètres de l'onde stationnaire, il est possible de créer une séparatrice du jet d'atomes (les atomes sont peuplés à 50% dans les deux états) ou un miroir pour lequel toute la population est transférée d'un état à l'autre. Ces deux analogies d'éléments d'optiques pour les atomes ont été mis à profit dans les interféromètres atomiques de Mach-Zehnder [14, 15, 70].

II.3.3 Caractérisation expérimentale

Nous décrivons maintenant les calibrations expérimentales effectuées par diffraction Raman-Nath. Nous utilisons cette méthode pour calibrer la profondeur de notre potentiel périodique. Nous avons vu dans la section II.3.1 que cette méthode est valable pour des temps courts d'interaction. Pour calibrer le réseau, nous réalisons d'abord un condensat de Bose-Einstein suivant la séquence décrite au chapitre I. Le réseau optique est superposé au condensat et est allumé pendant un temps τ . Nous regardons alors la population relative dans les différents ordres de diffraction en fonction de ce temps d'interaction τ . La population en fonction du temps de l'ordre n est proportionnelle à la fonction de Bessel $|J_n(U_0\tau/2\hbar)|^2$.

La figure II.6 montre quelques exemples de profils de diffraction. Sur la figure II.6(a), le temps τ d'interaction avec le réseau varie de 0 à 100 μs toutes les microsecondes pour des puissances dans chaque bras du réseau de 48 mW. On constate une annulation de

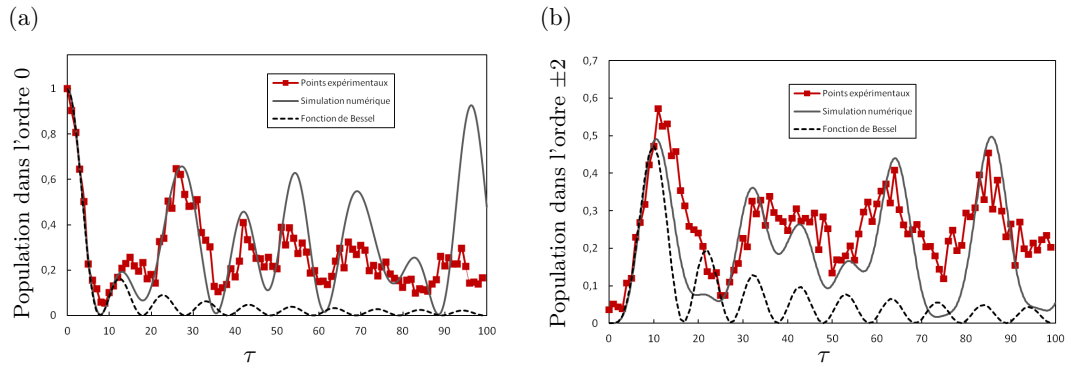


FIGURE II.7 – Population dans (a) l'ordre zéro et (b) l'ordre ± 2 en fonction du temps d'interaction τ avec le réseau optique. Les courbes rouges sont les points expérimentaux obtenus et les courbes grises en trait plein sont les courbes théoriques obtenues numériquement pour une profondeur $U_0 = 18 E_R$. Les courbes en pointillés noirs sont les fonctions de Bessel pour ce paramètre de profondeur. Ces courbes recouvrent les deux autres pour des temps courts $\tau < \tau_{RN}$.

la population dans l'ordre zéro au temps $\tau_0^{(a)} \simeq 9 \mu s$. Cette annulation de la population dans l'ordre zéro nous donne un premier aperçu de la profondeur du potentiel. En effet, le premier zéro de la fonction de Bessel d'ordre zéro $|J_0(x_0)|^2 = 0$ s'obtient pour $x_0 \simeq 2.40483$. On a alors $U_0^{(a)} = 2\hbar \times 2.40483/\tau_0^{(a)}$. Dans notre cas de figure nous avons $\tau_0 = 9 \mu s$, donc $U_0 \simeq 4.23 \cdot 10^{-29} \text{ J} \simeq 15.7 E_R$. Cette valeur est à comparer avec la valeur théorique que l'on obtiendrait si nos faisceaux étaient parfaitement croisés pour une puissance de 48 mW : $U_{0,th}^{(a)} = 18.4 E_R$. La valeur expérimentale est à 15 % de la valeur théorique ce qui est très convenable !

La figure II.6(b) montre un profil de diffraction pour des temps d'interaction allant de 0 à 20.5 μs toutes les 0.5 μs pour des puissances par bras de 38 mW. La première annulation de l'ordre zéro de diffraction est obtenue pour $\tau_0^{(b)} = 12 \mu s$. Cela nous donne une profondeur de réseau de : $U_0^{(b)} = 11.8 E_R$. La valeur théorique obtenue pour des puissances par bras de 38 mW est $U_{0,th}^{(b)} = 14.4 E_R$. L'erreur relative entre la valeur expérimentale et la valeur attendue est de 18 %.

Pour calibrer plus précisément le réseau à partir des images obtenues montrées sur la figure II.6(a), on mesure les populations dans les différents ordres de diffractions pour un temps donné. Ainsi on obtient une courbe des populations en fonction du temps d'interaction avec le réseau pour chaque ordre et on la compare avec la courbe théorique obtenue à l'aide d'un calcul numérique sans approximation³. Deux exemples de profils obtenus sont représentés sur la figure II.7 pour les ordres de diffraction 0 et ± 2 . Sur cette figure, les données expérimentales sont superposées aux profils théoriques calculés pour $U_0 = 18 E_R$. Pour cette profondeur, on trace aussi les fonctions de Bessel : $|J_0(U_0\tau/2\hbar)|^2$ et $|J_2(U_0\tau/2\hbar)|^2$ pour comparer les allures des courbes aux temps courts. Ces courbes qui se superposent parfaitement aux temps courts avec les courbes théoriques calculées sans

3. Ces courbes ont été calculées par François Vermersch dans le cadre de sa thèse.

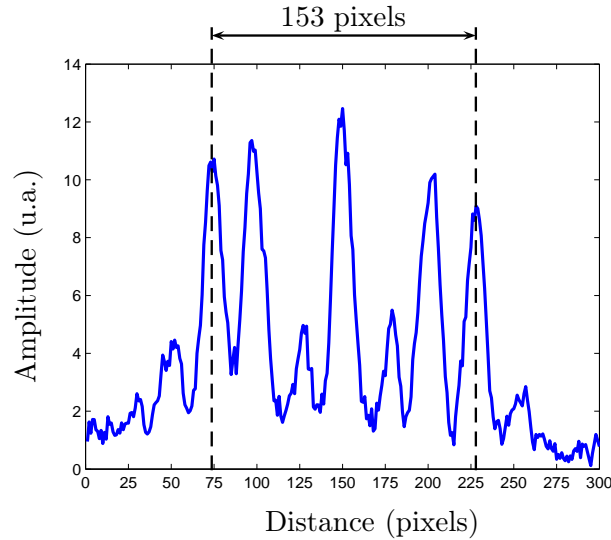


FIGURE II.8 – Exemple de profil de diffraction pour $15 \mu\text{s}$ d'interaction avec le réseau et 10 ms de temps de vol. Ces données correspondent au profil intégré dans la direction transverse de la figure II.6(d). Nous mesurons une distance de 153 pixels entre les ordres -3 et $+3$ donnant une distance entre les ordres d'environ 26 pixels .

approximation montrent bien que l'approximation de Raman-Nath est très satisfaisante aux temps courts. On peut aussi trouver graphiquement le temps limite τ_{RN} . En effet, vers $\tau \simeq 12 \mu\text{s}$, les fonctions de Bessel ne se superposent plus ni à la courbe numérique ni aux points expérimentaux. La profondeur de réseau $U_0 \simeq 18 E_{\text{R}}$ permet de superposer les courbes théoriques aux points expérimentaux aux temps plus long. Cependant, la profondeur qui ajuste le mieux l'annulation de l'ordre zéro de diffraction est $U_0 \simeq 16 E_{\text{R}}$. Nous retenons donc la profondeur calibrée intermédiaire de $U_0 \simeq (17 \pm 1) E_{\text{R}}$.

II.3.4 Mesure du pas du réseau

Le motif de diffraction obtenu permet aussi de retrouver le pas du réseau et de confirmer plus précisément la calibration de la taille du pixel pour notre imagerie dans le mode CBE (voir chapitre I). Dans le paragraphe II.3.1, l'équation (II.24) donne la forme de la fonction d'onde après interaction avec le réseau pendant τ et temps de vol Δt . Les différents ordres sont séparés de

$$\Delta x = \frac{h\Delta t}{md}, \quad (\text{II.28})$$

où d est la période du réseau. Lorsque le temps de vol est de 10 ms , la distance entre les différents ordres de diffractions de Raman-Nath est de $\Delta x = 71 \mu\text{m}$. En pratique, la mesure de la distance des différents ordres de diffraction permet une calibration précise de la taille du pixel de notre imagerie et par conséquent du grandissement. Ainsi le profil représenté sur la figure II.8 permet de retrouver la distance Δx séparant les différents ordres. Nous trouvons une distance $\Delta x \simeq 26 \text{ pixels}$. Pour comparer cette distance à la valeur théorique, il faut prendre en compte le fait que le faisceau d'imagerie traverse les

atomes à 45° ⁴. Ainsi, la calibration de l'imagerie vaut : $c_{\text{CBE}} = 71/(26\sqrt{2}) = 1.93 \mu\text{m}$ par pixels. L'erreur relative par rapport à la calibration par le calcul géométrique est de l'ordre de 12%. La diffraction Raman-Nath permet une calibration plus précise de la taille du pixel dans le mode d'imagerie CBE puisque la source est directement le condensat. Ainsi nous adoptons la valeur de $1.93 \mu\text{m}$ par pixels pour les expériences à venir. Le grandissement correspondant est de : $\gamma_{\text{CBE}} = 3.34$.

II.4 Conclusion

Dans ce chapitre, on a présenté notre dispositif expérimental pour le réseau optique que nous utilisons dans les chapitres suivants. Nous avons détaillé la méthode qui permet de calibrer à la fois la profondeur du réseau au niveau des atomes et le grandissement de l'imagerie. Cette méthode est utilisée dans de nombreux laboratoires ; elle consiste à exposer le condensat pendant un temps court au réseau optique, puis à analyser quantitativement l'impact de cette exposition dans l'espace des vitesses.

4. En pratique, il suffit de multiplier le nombre de pixels initial par $\sqrt{2}$.

Chapitre III

Rappel sur une particule dans un potentiel périodique en mécanique quantique

Sommaire

III.1 Généralités sur le calcul de la structure de bande	62
III.1.1 Le théorème de Bloch	62
III.1.2 Calcul de la structure de bandes d'un potentiel périodique . . .	63
III.2 Potentiel sinusoïdal et équation de Mathieu	65
III.2.1 Equation de Mathieu	65
III.2.2 Influence du nombre de sites	67
III.2.3 Comparaison avec un potentiel périodique de puits carrés . . .	69
III.3 Conclusion	71

Dans ce chapitre, nous commençons par rappeler l'approche théorique appropriée pour rendre compte de la dynamique d'une particule dans un potentiel périodique infini. Nous rappelons le théorème de Bloch et la méthode de calcul de la structure de bande du potentiel.

Nous présentons ensuite le résultat d'une diffusion d'une particule sur un potentiel périodique qui permet d'explorer à la fois la structure en bandes de "conduction" et en bandes interdites. Nous étudions la diffusion sur deux potentiels périodiques : l'un sinusoïdal, l'autre ayant pour motifs des puits carrés. Pour ces deux potentiels, nous regardons l'influence du nombre de site sur le coefficient de transmission des atomes. On considère que les potentiels étudiés dans ce chapitre sont sans enveloppe, c'est-à-dire que la profondeur de chaque puits du potentiel périodique est la même en tout point du réseau. L'effet d'une enveloppe gaussienne sur le coefficient de transmission sera étudié dans le chapitre IV.

III.1 Généralités sur le calcul de la structure de bande

III.1.1 Le théorème de Bloch

On considère un potentiel périodique à 1 dimension de forme quelconque :

$$U(x + d) = U(x), \quad (\text{III.1})$$

de période d . L'interaction d'une particule de masse m avec ce potentiel périodique est décrite par l'équation de Schrödinger à 1 dimension :

$$H\psi(x) = \left[\frac{p^2}{2m} + U(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (\text{III.2})$$

D'après le théorème de Bloch, les fonctions propres du Hamiltonien H décrivant l'évolution d'un atome dans le potentiel périodique $U(x)$ de période d s'écrivent sous la forme [71, 72] :

$$\psi_{n,k}(x) = e^{ikx} u_{n,k}(x) \quad \text{avec} \quad u_{n,k}(x + d) = u_{n,k}(x). \quad (\text{III.3})$$

La périodicité en d des fonctions $u_{n,k}$ permet une autre écriture du théorème de Bloch :

$$\psi_{n,k}(x + d) = \psi_{n,k}(x) e^{ikd}. \quad (\text{III.4})$$

De plus, la fonction $u_{n,k}(x)$ satisfait l'équation :

$$H_k u_k(x) = E_n(k) u_k(x) \quad \text{avec} \quad H_k = \frac{(p + \hbar k)^2}{2m} + U(x), \quad (\text{III.5})$$

pour laquelle il y a n solutions discrètes. Les états propres $|n, k\rangle$ de H sont appelés *états de Bloch* et ont pour valeurs propres associées $E_n(k)$. Le paramètre n correspond à un indice de bande discret et le paramètre k est une quasi-impulsion continue. Les états propres et vecteurs propres sont des fonctions périodiques de période $2\pi/d$ dans l'espace des impulsions; $2\pi/d$ est en effet la période du réseau réciproque. Par convention, on se restreint à la première zone de Brillouin définie sur $[-\pi/d, \pi/d]$ dans l'espace des impulsions. Il est à noter que les états propres sont délocalisés sur tout le potentiel périodique.

La fonction propre de l'état de Bloch $|n, k\rangle$ se décompose en séries de Fourier de la forme :

$$\psi_{n,k}(z) = e^{ikz} u_{n,k}(z) = \sum_l a_l e^{i(k+2lk_R)z}, \quad (\text{III.6})$$

où les a_l sont des coefficients constants et $k_R = \pi/d$. Cette notation permet de mettre en avant le fait que pour une quasi-impulsion k donnée, les états propres pour les différentes bandes d'énergies résultent de la combinaison linéaire entre les ondes planes $|\hbar k\rangle$ et $|\hbar k + 2\hbar l k_R\rangle$ (avec l entier relatif). Cela signifie que les seuls états qui sont couplés à l'onde plane $|\hbar k\rangle$ sont les états dont l'impulsion diffère de $2\hbar k_R$. Dans le cas d'un réseau optique composé de deux ondes lumineuses, cette propriété s'interprète facilement : un photon est

absorbé dans une onde et réémis par émission stimulée dans l'autre onde. Ce processus entraîne un transfert d'impulsions de $2\hbar k_R$ du champ vers l'atome [69].

III.1.2 Calcul de la structure de bandes d'un potentiel périodique

Nous décrivons dans cette section le calcul du diagramme de bande par méthodes matricielles. Nous décrivons ici deux méthodes de calcul : la méthode des différences finies et la représentation par ondes planes. Dans les deux cas, on effectue une discrétisation de l'équation de Schrödinger. Pour obtenir la structure de bandes, il faut calculer les valeurs propres $E_n(k)$ en fonction du vecteur d'onde k .

Pour la première méthode, on discrétise directement l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{\Delta x^2} + U(x_i)\psi_i = E\psi_i, \quad (\text{III.7})$$

avec $x = i\Delta x$ et $\Delta x = d/N$, avec par conséquent des indices i allant de 1 à N . Les conditions aux bords s'écrivent :

$$\psi_0 = \psi_N e^{-ikd}, \quad (\text{III.8})$$

$$\psi_{N+1} = \psi_1 e^{ikd}. \quad (\text{III.9})$$

Le système d'équations (III.7) peut donc se réécrire sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} b_1 & a & & & ae^{-ikd} \\ a & b_2 & a & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a & b_{N-1} & a \\ ae^{ikd} & & & a & b_N \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{pmatrix}, \quad (\text{III.10})$$

avec

$$a = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Delta x^2} \quad \text{et} \quad b_i = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + U(x_i). \quad (\text{III.11})$$

Les énergies propres $E(k)$ sont les valeurs propres de la matrice de l'équation (III.10) pour un k donné. Les vecteurs propres de cette matrice donnent les amplitudes des fonctions d'onde ψ_i . Cependant les termes $ae^{\pm ikd}$ situés dans les coins supérieur droit et inférieur gauche compliquent grandement la diagonalisation de la matrice.

La représentation par les ondes planes offre une autre méthode pour le calcul de la structure de bande qui permet de s'affranchir de ces termes. Pour ce calcul, on développe le potentiel périodique en série de Fourier. Dans le cas particulier du potentiel sinusoïdal, $U(x) = (U_0/2) \cos(2\pi x/d)$, le développement en série de Fourier vaut :

$$U(x) = U_0 \frac{e^{2\pi ix/d} + e^{-2\pi ix/d}}{4}. \quad (\text{III.12})$$

L'équation (III.6) donne accès à la transformée de Fourier des fonctions d'onde $\psi(x)$. On

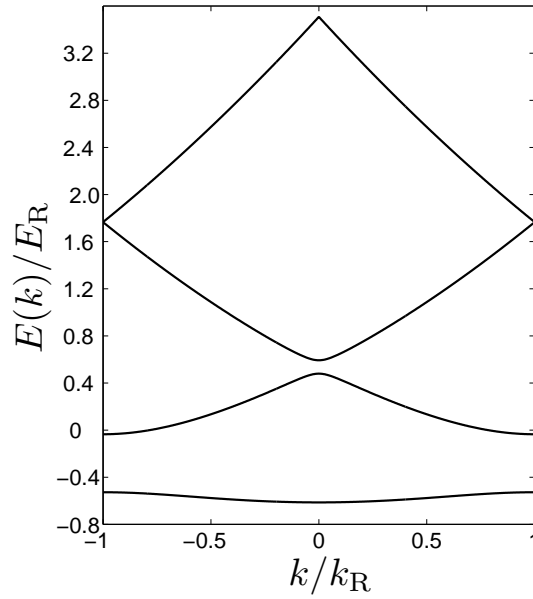


FIGURE III.1 – Structure de bande $E_n(k)$ pour un réseau de profondeur $U_0 = 4E_R$ avec $E_R = mv_R^2/2$, $v_R = h/(md)$ et $k_R = \pi/d$.

remplace l'expression de $\psi_{n,k}(x)$ et $U(x)$ dans l'équation de Schrödinger par leur développement de Fourier respectifs. On a alors un système d'équations pour les coefficients a_l de la fonction d'onde $\psi_{n,k}(x)$:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(k + l \frac{2\pi}{d} \right)^2 a_l + \frac{U_0}{4} (a_{l-1} + a_{l+1}) = E a_l. \quad (\text{III.13})$$

On déduit de ses équations le système matriciel suivant pour des l allant de $-N$ à $+N$:

$$\begin{pmatrix} b_{-N} & u & & & \\ u & b_{-N+1} & u & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & u & b_{N-1} & u \\ & & & u & b_N & \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_{-N} \\ a_{-N+1} \\ \vdots \\ a_{N-1} \\ a_N \end{pmatrix} = E(k) \begin{pmatrix} a_{-N} \\ a_{-N+1} \\ \vdots \\ a_{N-1} \\ a_N \end{pmatrix}, \quad (\text{III.14})$$

avec

$$u = \frac{U_0}{4} \quad \text{et} \quad b_l = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k + l \frac{2\pi}{d} \right)^2. \quad (\text{III.15})$$

On obtient la structure de bande $E(k)$ en diagonalisant la matrice de l'équation (III.14). Les coefficients a_l correspondent aux amplitudes des fonctions d'onde propre $\psi_{n,k}(x)$. L'algorithme utilisé pour diagonaliser cette matrice tridiagonale est plus simple et plus rapide que pour la diagonalisation de la matrice de l'équation (III.10). En effet, les termes isolés et non diagonaux $ae^{\pm ikd}$ compliquant la résolution numérique ont disparu. Les quatre premières bandes de la structure de bande $E_n(k)$ pour une profondeur de réseau $U_0 = 4E_R$

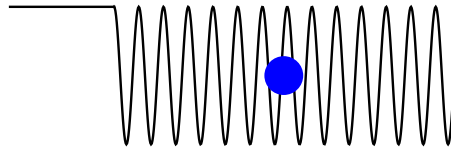


FIGURE III.2 – Schéma d'une particule (en bleu) dans un potentiel périodique semi-infini.

sont tracées sur la figure III.1.

Pour le calcul de la structure de bande d'un autre potentiel, le développement en série de Fourier du potentiel rajoute des diagonales secondaires dans la matrice à diagonaliser.

III.2 Potentiel sinusoidal et équation de Mathieu

Nous regardons maintenant la diffusion d'une particule sur un potentiel périodique sinusoidal semi-infini. La diffusion d'une particule sur ce potentiel permet de sonder les bandes de conduction et les bandes interdites. Nous allons ainsi voir que les particules qui arrivent avec une énergie incidente qui se situe dans une bande interdite sont réfléchies.

III.2.1 Equation de Mathieu

Nous regardons maintenant l'évolution d'une particule de masse m se propageant avec une vitesse v comme schématisé sur la figure III.2 au travers du réseau semi-infini $U(x) = -U_0 \sin^2(\pi x/d)$. Ce potentiel ne diffère que d'un facteur de phase du potentiel $-U_0 \cos^2(\pi x/d)$ ce qui est sans conséquence sur la physique du système. L'équation de Schrödinger pour une particule de masse m et d'énergie $mv^2/2$ évoluant dans le potentiel $U(x)$ s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - U_0 \sin^2\left(\frac{\pi x}{d}\right) \psi(x) = \frac{mv^2}{2} \psi(x), \quad x \geq 0. \quad (\text{III.16})$$

Cette équation est adimensionnée en posant $\tilde{x} = \pi x/d$ et nous obtenons :

$$\frac{d^2\psi}{d\tilde{x}^2} + \left[\frac{2U_0}{E_R} (1 - \cos(2\tilde{x})) + 4 \left(\frac{v}{v_R} \right)^2 \right] \psi(\tilde{x}) = 0. \quad (\text{III.17})$$

En posant $\eta = 4(v/v_R)^2 + 2U_0/E_R$ et $q = U_0/E_R$ où v_R et E_R sont deux grandeurs caractéristiques du réseau définies au chapitre II, on reconnaît l'équation de Mathieu dans l'expression suivante :

$$\frac{d^2\psi}{d\tilde{x}^2} + [\eta - 2q \cos(2\tilde{x})] \psi = 0. \quad (\text{III.18})$$

Cette équation a été étudiée pour la première fois par Emile Mathieu pour le calcul des modes vibrationnels d'une membrane elliptique [73]. Les solutions de l'équation III.18 sont des fonctions transcendentes. Elles ne peuvent pas s'écrire en terme de fonctions élémentaires. Elles sont seulement séparées entre solutions paires notées $C(\eta, q, \tilde{x})$ et solutions

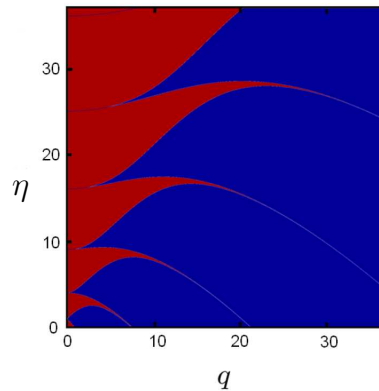


FIGURE III.3 – Diagramme de stabilité de l'équation de Mathieu pour les paramètres (q, η) . Les régions en rouges sont les régions stables. Les lignes limites entre les zones stables et instables sont les fonctions caractéristiques de Mathieu $a_n(q)$ et $b_n(q)$, $n \in \mathbb{N}$.

impaires $S(\eta, q, \tilde{x})$. Ces solutions sont périodiques lorsque le paramètre η prend des valeurs spécifiques qui sont appelées fonctions caractéristiques de Mathieu : $a_n(q)$ et $b_n(q)$ où $n \in \mathbb{N}$. Ces deux fonctions permettent de tracer le diagramme de stabilité des fonctions de Mathieu (fig. III.3) . Elles sont la limite entre les zones des paramètres (q, η) stables où toutes les solutions sont bornées et les zones instables où au moins une solution diverge. Les régions des paramètres (q, η) stables sont tracées en rouge.

Dans le cas d'une particule se propageant sur le potentiel périodique de profondeur U_0 avec une vitesse v , on trace ce même diagramme de stabilité pour les paramètres (v, U_0) sur la figure III.4. Les régions instables du diagramme correspondent aux situations pour lesquelles l'énergie incidente de la particule se trouve dans une bande interdite du diagramme d'énergie. Ce phénomène implique une réflexion totale de la particule par le réseau.

De plus, pour une profondeur très faible du réseau ($U_0 \ll E_R$), les particules réfléchies sont celles qui remplissent la condition de Bragg : $2d \sin \Theta = n\lambda$, avec $\lambda = h/(mv)$ est la longueur d'onde de de Broglie pour les atomes avec une vitesse incidente v . Θ est l'angle entre la normale et la direction des particules réfléchies et nous avons $\Theta = \pi/2$. La condition se réécrit donc $\kappa d = n\pi$ où $\kappa = 2\pi/\lambda$. Les particules qui sont réfléchies ont accumulées une phase multiple de π pendant leur propagation sur une période comme il est montré dans l'introduction. En terme de vitesse, la condition de Bragg correspond à $v = nv_R/2$ puisque $v_R = h/(md)$ [74]. Les atomes avec de telles vitesses sont donc réfléchis sur des potentiels de profondeurs très faibles.

Le réseau étudié ici est semi-infini. De tels réseaux ne sont pas envisageables expérimentalement et il faut considérer des potentiels périodiques ayant un nombre de sites finis. Nous étudions dans la section qui suit l'influence de ce nombre fini de sites sur le diagramme de stabilité pour les paramètres $(v/v_R, U_0/E_R)$.

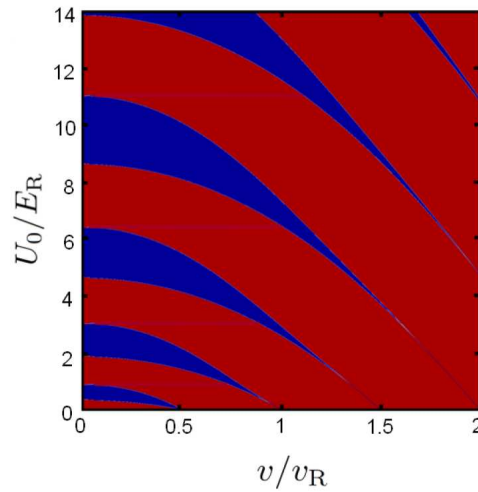


FIGURE III.4 – Diagramme de stabilité de l'équation de Mathieu pour les paramètres $(v/v_R, U_0/E_R)$. Les régions en rouges sont les régions stables. Les régions bleues instables correspondent aux particules réfléchies. L'énergie incidente de ces particules se situe au niveau d'une bande interdite de la structure de bande.

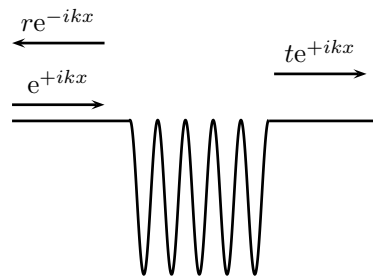


FIGURE III.5 – Schéma d'une expérience de diffusion pour un potentiel périodique fini.

III.2.2 Influence du nombre de sites

Lorsque le nombre de sites du potentiel périodique n'est pas infini, il n'y a pas de solution analytique de l'équation de Schrödinger. Pour obtenir les coefficients de réflexion et de transmission (schématisés sur la figure III.5), nous la résolvons donc numériquement pour des ondes planes. Nous calculons la probabilité de transmission $|t|^2$ des atomes en fonction de la profondeur du potentiel et la vitesse incidente des atomes. Nous traçons des diagrammes à deux dimensions du même type que celui de la figure III.4 mais pour un nombre de sites fini. Nous étudions ainsi l'influence du nombre de sites sur la probabilité de transmission.

Les figures III.6(a-e) montrent le calcul de la probabilité de transmission en fonction des paramètres (v, U_0) pour des potentiels ayant un nombre de sites respectifs 1, 2, 3, 5, 25. La figure III.6(f) est un agrandissement de la figure III.6(e).

La figure III.6(a) correspond à la transmission d'une onde plane à travers un potentiel à un seul site sinusoïdal. Il y a réflexion quantique pour les vitesses faibles (typiquement

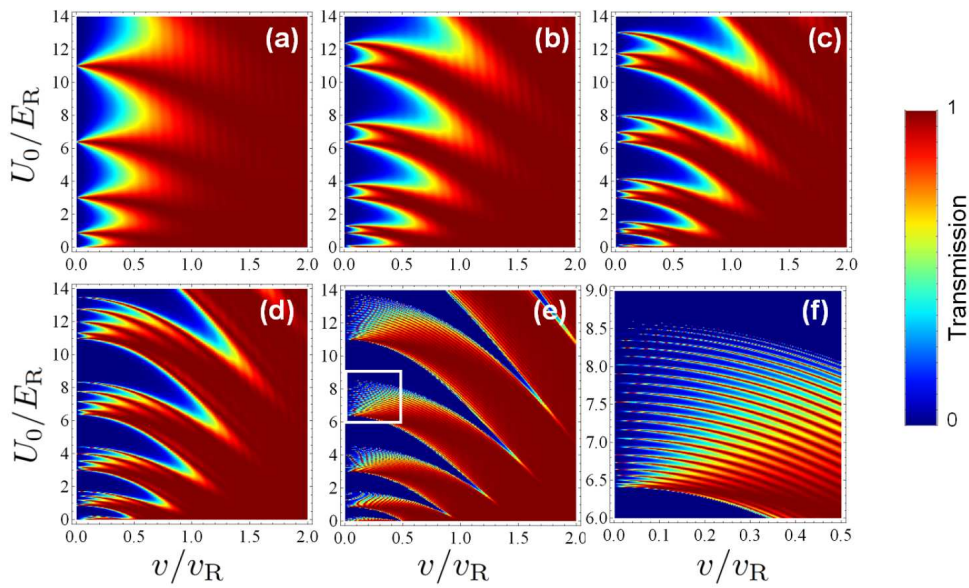


FIGURE III.6 – (a-e) Probabilités de transmission pour un réseau sinusoïdal ayant respectivement $N = 1, 2, 3, 5, 25$ sites. (f) Agrandissement de la région dans le rectangle blanc dans (e). Cet agrandissement montre clairement que la bande d'énergie autorisée continue lorsque le réseau est infini est en pratique constituée de N résonances de largeur $1/N$.

$v \leq 0.3v_R$) excepté pour certaines valeurs discrètes de profondeurs U_0 pour lesquelles il y a transmission totale. Cela correspond à l'apparition d'un nouvel état du potentiel sur lequel se propage les atomes permettant un maximum de transmission. Cette fenêtre de transparence correspond à un effet Fabry-Perot.

Lorsqu'on augmente le nombre N de sites dans le réseau, on constate deux effets :

- Pour des vitesses incidentes faibles, les valeurs discrètes de U_0 pour lesquelles la transmission est totale se séparent en N composantes. On compte ainsi 25 résonances sur la figure III.6(f), agrandissement de la figure III.6(e). Cela est dû au couplage entre les sites du potentiel. Plus N augmente, plus ces figures de transmission totale s'étendent sur toutes les bandes d'énergies permises données par l'équation de Mathieu. On peut s'en convaincre en comparant la figure III.6(e) pour $N = 25$ sites à la figure III.4 où N est infini. La largeur des résonances varie comme $1/N$. Ainsi quand le réseau est infini, la largeur des résonances est nulle et la bande est continue. Le nombre de site du réseau mis en place sur notre dispositif expérimental est d'environ 800. On comprend bien qu'il ne sera alors pas possible de les distinguer expérimentalement et elles ne pourront n'être observées que numériquement avec une grande résolution dans le pas de calcul.
- Les régions de totale réflexion s'étendent à des vitesses plus grandes lorsque le nombre de sites augmente. On distingue ainsi de mieux en mieux l'apparition des réflexions dues à la condition de Bragg pour des profondeurs de potentiel faible. En effet cette condition correspond à des interférences constructives dues à l'exploration d'un grand

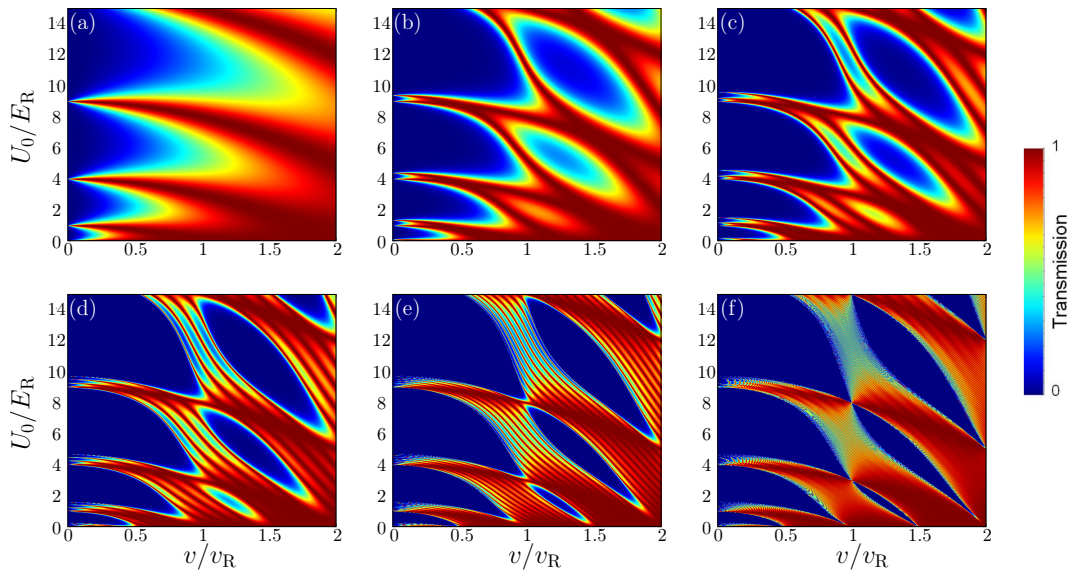


FIGURE III.7 – Probabilités de transmission d’une particule diffusant sur le potentiel périodique U_c dont les puits sont de formes carrées. Ce coefficient est tracé pour des potentiels ayant différents nombres de sites. De (a) à (f), on a respectivement $N = 1, 2, 3, 5, 10, 50$ sites.

nombre de sites dans le réseau.

L’étude de cette section concerne un potentiel sinusoïdal. Nous proposons de regarder dans la suite l’influence de la forme du potentiel sur la figure de diffusion en étudiant un potentiel périodique fait de puits carrés dans la section suivante.

III.2.3 Comparaison avec un potentiel périodique de puits carrés

Potentiel carré périodique

On définit le potentiel périodique carré suivant :

$$U_c(x) = -U_0 \sum_{n=-N/2}^{N/2} \Pi(x + nd), \quad (\text{III.19})$$

où $\Pi(x)$ est la fonction porte. On considère une particule de masse m de vitesse v et d’énergie $mv^2/2$ qui interagit avec le potentiel U_c . On trace comme pour le réseau sinusoïdal le coefficient de transmission en fonction de la profondeur de potentiel et de la vitesse des atomes sur la figure III.7. Les figures III.7(a-f) sont respectivement pour des potentiels avec un nombre de site $N = 1, 2, 3, 5, 10, 50$.

On remarque plusieurs effets du potentiel sur la figure de transmission. Pour un potentiel à puits carré à un site, on retrouve sur la figure III.7(a) la même phénoménologie que pour la figure III.6(a).

Pour un réseau constitué de plusieurs motifs, à des vitesses incidentes faibles, on retrouve comme pour le réseau sinusoïdal la séparation des résonances de la probabilité de

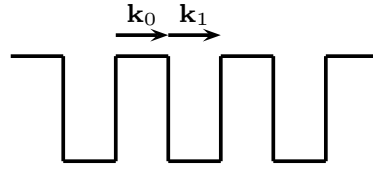


FIGURE III.8 – Schéma du potentiel périodique à motifs carrés U_c de période d . Les vecteurs d'onde \mathbf{k}_0 et \mathbf{k}_1 correspondent respectivement au vecteur d'onde de propagation dans l'espace libre sur une distance $d/2$ et au vecteur d'onde de propagation dans un puits carré de profondeur U_0 sur une distance $d/2$.

transmission. Elles sont dues au couplage des états liés entre les sites du potentiel périodique.

Un autre effet commun avec le réseau sinusoïdal est la réflexion des atomes ayant des vitesses incidentes bien définies pour des profondeurs faibles. Les atomes doivent satisfaire la condition de Bragg qui s'écrit $kd = n\pi$ avec k vecteur d'onde de propagation des atomes. En terme de vitesse, on retrouve la relation $v = (n/2)v_R$ avec $v = \hbar k/m$.

Lorsque le nombre de site est supérieur à 1 on remarque l'apparition de résurgences de réflexion pour des vitesses supérieures à v_R . Ainsi pour un potentiel à 2 puits, on a une seule résurgence. Une de plus pour le potentiel à 3 puits. Cependant, des "îlots" plus marqués se dégagent lorsque le nombre de sites augmente. Ces "îlots" et les fines résurgences de réflexion n'apparaissent que pour un nombre de site supérieur à 1 traduisant un effet dû à plusieurs sites. Les "îlots" ne sont pas présents pour le potentiel périodique sinusoïdal. Ils sont donc spécifiques à cette forme de potentiel. La présence de deux discontinuité dans le motif entraînent des résonances d'ordre supérieure. Ces "îlots" proviennent d'interférences constructives entre plusieurs sites combinés avec un effet spécifique au motif carré. Nous regardons d'abord l'effet du motif du potentiel. Lorsqu'un atome se propage avec un vecteur d'onde \mathbf{k}_0 sur une période du potentiel, sa progression se fait en deux étapes : une étape d'interaction avec le potentiel et une étape où l'atome se propage librement (voir figure III.8). Dans le premier cas, le vecteur d'onde \mathbf{k}_1 associé à sa propagation dans le potentiel est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + U_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \Leftrightarrow k_1 = \sqrt{k_0^2 - \frac{2mU_0}{\hbar^2}}. \quad (\text{III.20})$$

La réflexion par interférences constructives est prise en compte avec la condition de Bragg. Cette condition s'écrit dans le cas du potentiel U_c en intégrant la phase cumulée sur les deux parties du potentiel ($U_c = -U_0$ et $U_c = 0$) [75]. Comme montré dans l'introduction dans le cadre des miroirs diélectriques en optique, la phase accumulée sur une période doit être égale à π pour qu'il y ait réflexion de Bragg :

$$k_0 \frac{d}{2} + k_1 \frac{d}{2} = \pi [2\pi] = \pi (2n + 1). \quad (\text{III.21})$$

On considère que chaque phase $k_i d/2$ ($i = 0, 1$) contribue de moitié à la phase accumulée et nous avons donc deux conditions de Bragg :

$$k_0 \frac{d}{2} = p \frac{\pi}{2} \quad [\pi] = \frac{\pi}{2} (2p + 1), \quad (\text{III.22})$$

$$k_1 \frac{d}{2} = p' \frac{\pi}{2} \quad [\pi] = \frac{\pi}{2} (2p' + 1). \quad (\text{III.23})$$

Ce choix d'une répartition $\pi/2 - \pi/2$ se justifie par le fait que la première condition doit correspondre à la condition de Bragg, on se place ainsi dans le type "quart d'onde" explicité dans la partie portant sur les miroirs optiques diélectriques de l'introduction. Cette première condition (III.22) devient : $v/v_R = p + 1/2$ ce qui confirme le choix de diviser par 2 la phase totale accumulée. En élevant la deuxième condition (III.23) au carré, et en remplaçant k_1 par son expression (III.20), on trouve facilement :

$$k_1^2 = \frac{\pi^2}{d^2} (2p' + 1)^2 = \frac{\pi^2}{d^2} (2p + 1)^2 + \frac{2mU_0}{\hbar^2}. \quad (\text{III.24})$$

De plus, $E_R = mv_R^2/2 = \hbar^2/(2md^2)$, on a alors :

$$\frac{\pi^2}{d^2} (2p' + 1)^2 = \frac{\pi^2}{d^2} (2p + 1)^2 + (2\pi)^2 \frac{U_0}{d^2 E_R} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{U_0}{E_R} = \frac{1}{4} \left[(2p' + 1)^2 - (2p + 1)^2 \right]. \quad (\text{III.25})$$

Lorsque $p = p'$, nous avons $U_0/E_R = 0$ et nous retrouvons la condition de Bragg. Par contre, lorsque $p \neq p'$, nous avons pour une vitesse $v/v_R = p + 1/2$ donnée la profondeur U_0/E_R correspondant à la position des îlots de réflexion totale. On peut vérifier que ces points $(v/v_R, U_0/E_R)$ correspondent à la position des "îlots" sur la figure III.9 qui montre la probabilité de transmission en fonction des paramètres $(v/v_R, U_0/E_R)$ pour un potentiel ayant 25 sites et pour des échelles v/v_R et U_0/E_R plus grandes. Par exemple, pour $p = 1$, c'est-à-dire pour une vitesse $v = 1.5v_R$, les "îlots" de réflexion sont positionnés pour $p' = 2, 3, 4 \dots$ soit respectivement en $U_0/E_R = 4, 10, 18, \dots$. On peut aussi retrouver les positions des premières réflexions pour $p = 0$ équivalent à la vitesse incidente $v = 0.5v_R$. Dans ce cas les profondeurs de potentiel correspondant à des réflexions sont : $U_0/E_R = 2, 6, 12, \dots$. Ces points sont désignés par les points blancs sur la figure III.9 et correspondent à la réflexion de Bragg pour ce choix de répartition de phase de type "quart d'onde".

Ce phénomène de résonances de réflexion sous forme d'"îlots" est donc dû au fait que les atomes passent alternativement par deux étapes pendant leurs propagations : une étape d'interaction avec le potentiel et une étape de propagation libre. Ces deux étapes rappellent les matériaux diélectriques qui sont formés par l'alternance entre deux milieux d'indices différents et qui sont étudiés dans l'introduction.

III.3 Conclusion

Ce chapitre fournit les aspects théoriques requis pour le calcul de la structure de bande d'un potentiel périodique sans enveloppe. Nous rappelons le théorème de Bloch nécessaire à

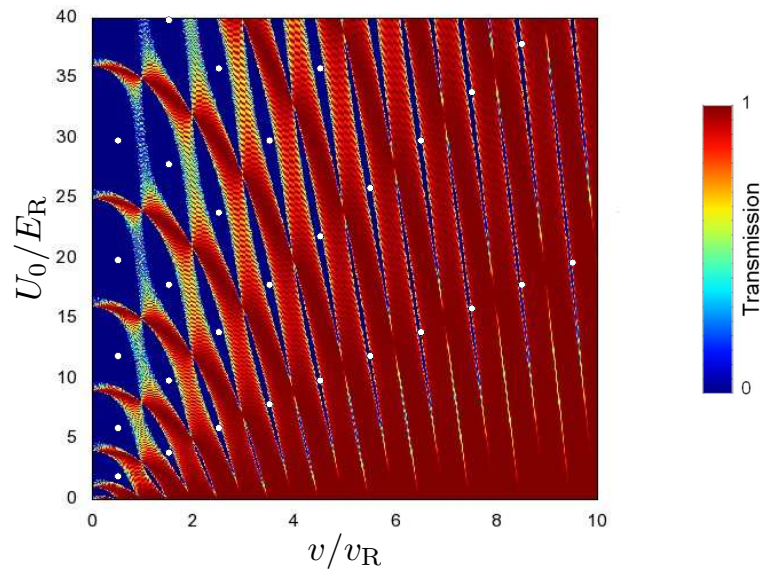


FIGURE III.9 – Probabilité de transmission d'une particule interagissant avec un réseau à puits carrés ayant $N = 25$ sites pour les paramètres (v, U_0) . Pour mieux observer les résonances de réflexion sous forme d'"îlots", l'échelle est élargie pour des vitesses incidentes variant de 0 à $10v_R$ et des profondeurs de 0 à $40E_R$.

ce calcul. Nous montrons aussi que pour un potentiel sinusoïdal, l'équation de Schrödinger décrivant l'interaction d'une particule de masse m et de vitesse v s'écrit sous la forme de l'équation de Mathieu. Nous avons tracé le diagramme de stabilité dans le cas d'un réseau infini. Les zones instables de ce diagramme correspondent aux bandes interdites de la structure de bandes.

Dans une expérience de diffusion, un atome est réfléchi lorsque son énergie incidente se trouve dans une bande interdite de la structure de bandes du potentiel.

L'étude de la probabilité de diffusion en fonction du nombre de sites montre les effets dus à la multiplicité des sites. La réflexion à potentiel faible ou nul pour des valeurs discrètes de vitesses ($v = nv_R/2$) est expliquée par la condition de Bragg. Les résonances en fonction de la profondeur apparaissant pour des vitesses faibles traduisent, quand à elles, un couplage entre les états liés de chaque puits du réseau.

Nous avons comparé les résultats obtenus avec un réseau sinusoïdal à un réseau formé de puits carré. On voit alors apparaître des "îlots" de réflexion pour des vitesses assez élevées. Leurs existences s'expliquent en considérant les effets combinés d'une phase accumulée après la traversée de plusieurs sites entraînant une réflexion et de la forme du potentiel en elle-même qui peut se séparer en deux formes distinctes : un puits carré de longueur $d/2$ et un potentiel nul pendant une distance $d/2$. Ainsi les atomes ont deux vecteurs d'onde de propagation distincts selon s'ils sont en interaction avec le potentiel carré ou s'ils se propagent librement.

Ce chapitre est utile pour le chapitre IV dans lequel on prend en compte le fait que le réseau optique a une enveloppe gaussienne dû à la focalisation des deux faisceaux lumineux

qui le créent. Le rappel sur les particules se propageant dans des réseaux optiques sans enveloppe fait dans ce chapitre peut constituer une première étape pour le lecteur avant d'aborder le sujet plus complexe d'un réseau avec une enveloppe gaussienne.

Chapitre IV

Sonder un potentiel périodique

Sommaire

IV.1	Particule dans un potentiel périodique avec une enveloppe gaussienne	76
IV.1.1	Effet de l'enveloppe sur le diagramme de stabilité des équations de Mathieu	76
IV.1.2	Contributions des transitions Landau-Zener	76
IV.2	Du condensat de Bose-Einstein à un paquet d'ondes de matière qui se propage	78
IV.2.1	Découplage du condensat et dispersion de vitesse	79
IV.2.2	Phase d'accélération	80
IV.3	Interaction du paquet d'ondes de matière avec le réseau	83
IV.3.1	Dispositif expérimental	83
IV.3.2	Dynamique de diffusion du paquet d'ondes pour une profondeur donnée	84
IV.3.3	Réponse du système en fonction de la profondeur	86
IV.3.4	Discussion de la dynamique sans résolution	88
IV.4	Conclusion	88

Nous avons décrit la réalisation du condensat de Bose-Einstein au chapitre I ainsi que la mise en place et la caractérisation du réseau optique au chapitre II. Le chapitre précédent III a permis de traiter les cas généraux d'une particule dans un réseau périodique ou diffusant sur un tel réseau. Pour compléter cette étude effectuée en considérant un réseau sans enveloppe, nous étudions dans ce chapitre l'effet d'une enveloppe gaussienne sur la figure de diffusion. Nous explicitons ensuite comment nous réalisons un paquet d'ondes de vitesse moyenne \bar{v} et de dispersion de vitesse Δv à partir d'un condensat de Bose-Einstein, puis le résultat de la diffusion de ce paquet d'ondes sur le réseau optique. Certaines classes de vitesses du paquet d'ondes subissent une réflexion de Bragg. L'interaction avec le réseau réalise un filtre passe-haut dans l'espace des vitesses.

IV.1 Particule dans un potentiel périodique avec une enveloppe gaussienne

IV.1.1 Effet de l'enveloppe sur le diagramme de stabilité des équations de Mathieu

Le dispositif expérimental utilisé pour réaliser le réseau optique dans la chambre d'expérience est détaillée au chapitre II. Les deux faisceaux qui créent le réseau se croisent en leurs points focaux. Le croisement de ces faisceaux gaussiens est à l'origine de l'enveloppe gaussienne du réseau. La largeur \tilde{w} de l'enveloppe gaussienne est obtenue en fonction des waists des deux faisceaux qui interfèrent et de l'angle θ que font les faisceaux entre eux (cf Fig. IV.5) : $\tilde{w} = w / \cos(\theta) \simeq 140 \mu\text{m}$ et le potentiel engendré par le réseau optique a alors pour expression :

$$U(z) = -U_0 \cos^2(k_{\text{R}}z) \exp\left(-\frac{2z^2}{\tilde{w}^2}\right), \quad (\text{IV.1})$$

où $k_{\text{R}} = \pi/d$. La forme du réseau est représentée sur la figure IV.1. En pratique l'enveloppe a un impact important sur la réponse du système comme nous allons le voir. La figure IV.2(a) montre, en fonction des paramètres (v, U_0) , le diagramme de stabilité de l'équation de Mathieu qui régit l'évolution d'une particule dans un réseau infini uniforme. Ce diagramme a été commenté dans le chapitre III. Les zones en bleues sont les zones instables et correspondent aux paramètres pour lesquelles la particule est réfléchi par le réseau optique. Les zones stables en rouge correspondent à une transmission totale de la particule. La figure IV.2(b) montre le diagramme auquel on peut à priori s'attendre dans le cas d'un réseau avec enveloppe gaussienne. En effet, avec une enveloppe et pour une vitesse v fixée, il n'y a transmission qu'en dessous d'une certaine valeur critique de profondeur de potentiel $U_0^{(c)}$. Pour expliquer ce diagramme et cette valeur critique, nous considérons que l'amplitude du réseau ne change pas sur plusieurs sites adjacents et que les particules interagissent localement avec un réseau d'amplitude constante. Cette approximation correspond à l'approximation lentement variable et est validée dans notre cas puisque nous avons : $\tilde{w} \simeq 230d \gg d$. Ainsi lorsque la particule se déplace dans le réseau avec enveloppe, tout se passe comme si elle voyait un réseau d'amplitude constante avec une profondeur qui augmente petit à petit. Pour une certaine profondeur à une vitesse v fixée, la particule rencontrera une bande interdite et sera réfléchi. Ainsi les profondeurs supérieures ne seront pas explorées comme on le voit sur le diagramme de la figure IV.2.

Les simulations numériques sont cependant un peu différentes de l'intuition présentée ci-dessus et nous expliquons l'origine des différences dans la section suivante.

IV.1.2 Contributions des transitions Landau-Zener

La figure IV.3 montre le résultat de simulations numériques donnant la probabilité de transmission pour les paramètres de l'expérience en fonction des paramètres de profondeur U_0 et de la vitesse incidente des particules v . Quelques différences sont à noter par rapport

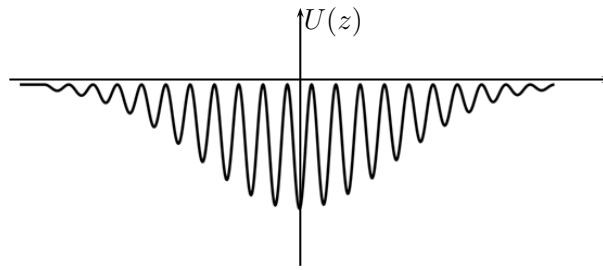
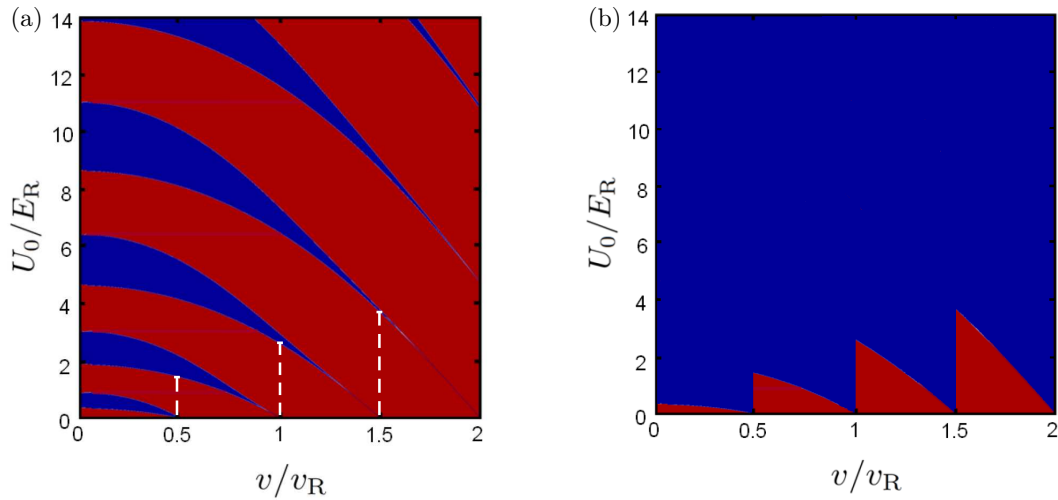
FIGURE IV.1 – Forme du réseau $U(z)$ avec enveloppe.

FIGURE IV.2 – Probabilité de transmission pour un réseau dans le cas théorique d'un nombre de site infini (a) sans enveloppe et (b) avec enveloppe gaussienne. Sans enveloppe, la probabilité de transmission d'une particule interagissant avec le potentiel est donnée par l'équation de Mathieu.

à la figure IV.2(b). On observe des résurgences de transmission pour des vitesses incidentes élevées alors qu'on s'attend à ce que les particules soient réfléchies pour ces profondeurs.

Pour des vitesses incidentes élevées, c'est-à-dire des énergies incidentes plus importantes, les bandes interdites dans la structure de bandes sont plus étroites. On peut le voir par exemple sur la structure de bande du potentiel périodique infini tracé sur la figure III.1 du chapitre III. Ainsi, si la zone dans laquelle la réflexion doit avoir lieu est trop étroite énergétiquement, la particule n'a pas le temps d'être réfléchi lorsqu'elle traverse cette zone et elle passe sur la bande autorisée supérieure.

De plus la figure IV.3 est tracée pour un nombre de sites N fini (quelques centaines de sites). On observe les fines résonances dues au nombre de sites fini. Ces résonances sont commentées dans le chapitre III et proviennent du couplage des états liés entre les différents sites du potentiel. La résolution optique du système d'imagerie mis en place sur l'expérience (voir chapitre I) n'est pas suffisante pour pouvoir les observer expérimentalement.

En présence d'une enveloppe, un autre phénomène complique la figure de transmission. En effet, chaque "côté" de l'enveloppe gaussienne joue le rôle de miroir. Les deux miroirs

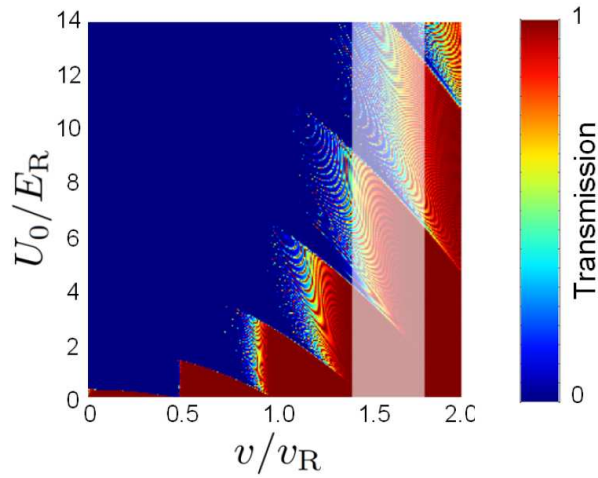


FIGURE IV.3 – *Probabilité de transmission calculée numériquement d'une particule diffusant sur un potentiel périodique fini avec une enveloppe gaussienne pour des ondes planes en fonction des paramètres (v, U_0) . La partie voilée correspond à la vitesse moyenne et à la dispersion de vitesses utilisées dans les expériences.*

de Bragg locaux, situés de chaque côté de l'enveloppe, constituent en réalité une cavité Fabry-Perot. La transmission qui en résulte a des résonances étroites comme le montre la figure IV.3.

De plus, on voit qu'en présence de l'enveloppe, la réflexion quantique est gommée : il n'y a plus de résurgences de transmission pour les faibles vitesses. C'est la physique de la réflexion de Bragg qui domine. Ajoutons enfin que les motifs en "dents" sont la trace de la structure de bande du réseau avec enveloppe gaussienne.

La partie suivante est consacrée à la réalisation expérimentale d'un paquet d'ondes à partir d'un condensat de Bose-Einstein.

IV.2 Du condensat de Bose-Einstein à un paquet d'ondes de matière qui se propage

Pour réaliser une expérience de diffusion d'un paquet d'ondes de matière sur un réseau optique, nous devons mettre en mouvement le condensat dans le guide horizontal et le faire agir en aval avec le réseau optique.

Pour étudier de manière la plus complète possible le problème de diffusion, il est nécessaire de disposer d'un paquet d'ondes avec une dispersion de vitesse relativement large ce qui est l'analogie en optique d'une source spectrale large pour extraire la réponse spectrale d'un élément d'optique. Le fait d'avoir une dispersion de vitesse assez large permet de sonder un grand nombre de composantes de vitesse. Ainsi nous obtenons en une seule expérience le même résultat qu'en utilisant plusieurs paquets d'ondes de dispersion de vitesse très fine et de différentes vitesses incidentes. On connaît alors la réponse d'un large

éventail de composantes de vitesses. Cependant, une dispersion de vitesse trop large risque de trop disperser les atomes du paquet d'ondes et il serait difficilement détectable par notre système d'imagerie.

Nous voulons donc contrôler la vitesse moyenne des atomes et avoir une dispersion de vitesse ni trop large ni trop fine. Pour obtenir une telle distribution de vitesse nous utilisons une méthode de découplage optique du condensat que nous expliquons dans la suite. Une vitesse moyenne \bar{v} est donnée aux atomes en les accélérant à l'aide d'une impulsion de gradient de champ magnétique. Le dispositif expérimental utilisé pour accélérer les atomes est expliqué dans la partie IV.2.2.

IV.2.1 Découplage du condensat et dispersion de vitesse

Nous avons décrit dans le chapitre I la méthode d'obtention d'un condensat tout optique. Nous utilisons pour cela deux faisceaux dipolaires : le premier horizontal confine les atomes dans les directions transverses et le second vertical permet un confinement longitudinal. Pendant la phase d'évaporation, la puissance de ces faisceaux est respectivement diminuée d'un facteur 100 et 10. Le paquet d'ondes est créé en relâchant le condensat dans le faisceau horizontal qui sert de guide pour les atomes et en éteignant le faisceau vertical.

La référence [31] étudie en détail les différentes voies d'extinction du faisceau vertical et la dispersion de vitesse qui en découle. Ces études théoriques seront détaillées dans la thèse de François Vermersch. Nous nous sommes inspirés de ces travaux numériques pour découpler le condensat de Bose-Einstein. Cette phase se déroule en deux étapes. Pour la première étape, nous diminuons adiabatiquement la fréquence longitudinale du piège jusqu'à une valeur très faible en diminuant adiabatiquement la puissance du faisceau vertical. On bénéficie ainsi d'une diminution de la dispersion de vitesse du paquet d'atomes piégés par l'ouverture adiabatique du potentiel de confinement. La deuxième étape consiste à éteindre brusquement le faisceau vertical et à laisser les atomes se propager librement dans le guide horizontal.

A la fin de la phase d'évaporation, le faisceau vertical a une puissance de $P_{\text{evap},v} \simeq 2 \text{ W}$. Pour que la diminution de la puissance soit adiabatique, il faut remplir la condition :

$$\frac{d\omega}{dt} \frac{1}{\omega^2} = C \ll 1. \quad (\text{IV.2})$$

Nous prenons en pratique : $C = 0.1$ ce qui permet de ne pas aller trop vite mais assez vite pour ne pas être limité par le chauffage résiduel. Il suffit ensuite d'intégrer l'équation (IV.2) pour obtenir une condition sur la puissance et sur la durée de diminution¹ :

$$P_f = \frac{P_i}{(1 + C' \times t)^2}, \quad (\text{IV.3})$$

où $C' = 0.044 \text{ ms}^{-1}$ dépend de la fréquence initiale du piège ω_i et de C . En suivant la courbe de l'équation (IV.3), nous partons d'une puissance initiale $P_i = P_{\text{evap},v} \simeq 2 \text{ W}$

1. On considère que $\omega^2 \propto P$ en dépit du décalage gravitationnel.

et nous arrivons à une puissance finale : $P_f \simeq 100$ mW c'est-à-dire une diminution de la puissance du faisceau vertical d'un facteur 20. En terme de fréquence, cela correspond à partir d'une fréquence longitudinal d'environ $\omega_{i,l} \simeq 35$ Hz correspondant à la fréquence du piège croisé à la fin de l'évaporation à une fréquence² de l'ordre de $\omega_{f,l} \simeq 8$ Hz. Le temps nécessaire pour réaliser cette diminution en suivant l'équation IV.3 est de 79 ms.

Maintenant que la fréquence du piège est très faible, nous coupons brusquement le faisceau vertical afin de laisser les atomes se propager librement dans le guide horizontal. La dispersion de vitesse minimale obtenue par cette méthode est $\Delta v = 1.7$ mm/s. La dispersion de vitesse provient du transfert de l'énergie d'interaction entre les particules du condensat en énergie cinétique. L'ouverture adiabatique suivie de la coupure brutale permet de limiter au mieux la valeur de cette dispersion [31].

La vitesse moyenne donnée aux atomes est alors déterminée par la pente du guide horizontal. En effet, le guide n'a aucune raison d'être parfaitement horizontal et sa pente donne une accélération résiduelle aux atomes. Nous mesurons l'accélération résiduelle en laissant propager le paquet d'atomes et en regardant la position du centre du paquet en fonction du temps de propagation. Le paquet d'ondes de matière se déplace de moins de $\Delta x = 200$ μm en $\Delta t = 300$ ms de propagation. Cela correspond à une accélération résiduelle de : $a = 2\Delta x/\Delta t^2 = 4.4 \cdot 10^{-3}$ m.s⁻². Cette accélération résiduelle est très faible puisqu'elle est de l'ordre de $g/1000$ où g est la constante de gravitation ($g = 9.81$ m.s⁻²).

Nous partons donc d'un condensat d'environ $N_{\text{at}} = 3 \cdot 10^4$ atomes et après la phase de découplage, nous obtenons un paquet d'ondes qui se propage dans le guide horizontal avec une vitesse moyenne de $v = \Delta x/\Delta t \simeq 0.3$ mm/s et une dispersion de vitesse $\Delta v = 1.7$ mm/s. Le paquet d'ondes reste pour l'instant quasiment sur place puisque la dispersion de vitesse est beaucoup plus grande que la vitesse moyenne. Or dans les expériences de diffusion que nous voulons réaliser, le paquet d'ondes doit être envoyé avec une certaine vitesse non nulle sur le réseau. Dans la figure de diffusion IV.3, les vitesses permettant d'avoir à la fois réflexion et transmission pour une large gamme de profondeur de potentiel sont comprises entre $1 \lesssim v/v_R \lesssim 2$ soient $7 \lesssim v \lesssim 14$ mm/s. De telles vitesses sont conférées aux atomes en les accélérant avec un gradient de champ magnétique. C'est l'objet de la partie suivante.

IV.2.2 Phase d'accélération

Pour créer le gradient de champ magnétique permettant d'accélérer les atomes, nous utilisons une bobine appelée bobine accélératrice dont l'axe coïncide avec le guide horizontal. La sélection du sous-état hyperfin du condensat ou distillation de spin est ici mis à profit. En effet, selon leur sous-état les atomes seront accélérés, repoussés ou ne subiront presque pas d'effet : les atomes dans le sous état $m_F = +1$ (respectivement $m_F = -1$) sont "chercheurs" de champ fort (respectivement faible) et les atomes dans le sous-état $m_F = 0$ ne sont "chercheurs" de champ fort qu'au second ordre. La bobine accélératrice est placée

2. Ces fréquences sont évaluées en diagonalisant les matrices Hessiennes correspondant au piège dipolaire croisé en prenant en compte tous les paramètres de l'expérience.

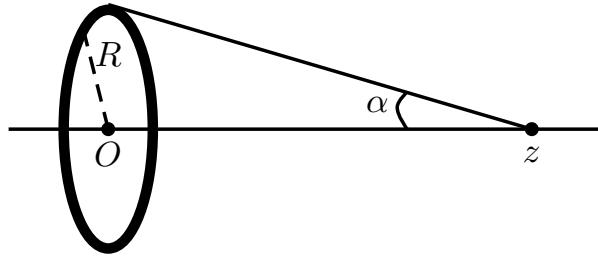


FIGURE IV.4 – Schéma de la bobine avec les conventions. Le point O est le point origine. Le point z correspond à la position des atomes. On a $z = 8.5$ cm et $R = 4.5$ cm. La bobine est composée de N spires.

de telle sorte que les atomes chercheurs de champ fort sont accélérés vers le réseau (voir figure IV.4).

Au cours de ma thèse, nous avons utilisé deux configurations de sous-état hyperfin : $m_F = +1$ et $m_F = 0$. Dans le premier cas, le gradient de champ vertical change la forme du piège dipolaire : il faut 5 s d'évaporation pour condenser les atomes et l'accélération résiduelle est plus grande ($g/250$) et il faut la compenser avec un autre gradient de champ magnétique. Le second cas est le cas explicité au chapitre I.

Calcul du champ créé par la bobine

Pour calculer l'accélération subie par les atomes en fonction du courant dans la bobine accélératrice, nous avons besoin de déterminer le champ magnétique créé par celle-ci ainsi que son gradient.

La bobine accélératrice est une bobine circulaire de rayon R d'axe (Oz) distante de z des atomes. On définit l'angle α comme l'angle entre l'axe de la bobine et la direction entre la position des atomes et un point de la bobine comme représenté sur la figure IV.4. Le champ en un point de l'axe z s'écrit :

$$B(z) = B(0) \sin^3(\alpha), \quad \text{avec} \quad B(0) = \frac{\mu_0 N I}{2R}. \quad (\text{IV.4})$$

De plus, on exprime $\sin^3(\alpha)$ en fonction de z et R et on a

$$B(z) = B(0) \left(\frac{R}{\sqrt{z^2 + R^2}} \right)^3 = B(0) \left(1 + \left(\frac{z}{R} \right)^2 \right)^{-3/2} = B(0) (1 + \tilde{z}^2)^{-3/2}, \quad (\text{IV.5})$$

avec $\tilde{z} = z/R$. Le gradient du champ magnétique s'écrit donc :

$$\frac{dB}{dz} = \frac{d\tilde{z}}{dz} \frac{dB}{d\tilde{z}} = \frac{-3\tilde{z}}{R} B(0) (1 + \tilde{z}^2)^{-5/2}. \quad (\text{IV.6})$$

Les atomes sont distants de $z = 8.5$ cm de la bobine et le rayon est de $R = 4.5$ cm. Le

champ au niveau des atomes et son gradient valent :

$$B(z) \simeq 0.35 \text{ G.A}^{-1} \quad \text{et} \quad \left| \frac{dB}{dz} \right| \simeq 0.1 \text{ G.A}^{-1} \text{cm}^{-1}. \quad (\text{IV.7})$$

Calcul des accélérations subies par les atomes

Dans le cas des atomes dans $m_F = +1$, le décalage en énergie dû au champ magnétique s'écrit :

$$\Delta E_{\{m_F=\pm 1\}} = \mu_B g_F m_F B = -\frac{\mu_B}{2} B, \quad (\text{IV.8})$$

où on ne considère que l'ordre zéro de l'effet Zeeman et avec $g_F = -1/2$ pour $F = 1$, $m_F = +1$ et μ_B le magnéton de Bohr. Cette formule est issu de la référence [39] qui résume les propriétés des états électroniques du ^{87}Rb . L'accélération qui en découle pour des atomes de masse m s'écrit :

$$a_{\{m_F=+1\}} = -\frac{\mu_B}{2m} \frac{dB}{dz} = \frac{\mu_B}{2m} \frac{3\tilde{z}}{R} (1 + \tilde{z}^2)^{-5/2}. \quad (\text{IV.9})$$

L'accélération obtenue est donc :

$$a_{\{m_F=+1\}} = 3.2 \cdot 10^{-2} \text{ m.s}^{-2} \text{A}^{-1}. \quad (\text{IV.10})$$

Dans le cas où les atomes sont dans l'état $m_F = 0$, nous devons calculer le second ordre de l'effet Zeeman [39] :

$$\Delta E_{\{m_F=0\}} = \frac{1}{4} \frac{(g_J - g_I)^2 \mu_B^2 B^2}{\Delta E_{hfs}} = \frac{\mu_B^2 B^2}{\Delta E_{hfs}}, \quad (\text{IV.11})$$

où $g_J = 2$ et $g_I = 0$ et $\Delta E_{hfs} = A_{hfs}(I + 1/2)$ la séparation entre les états hyperfin et A_{hfs} la constante du dipole magnétique. L'accélération correspondante est :

$$a_{\{m_F=0\}} = \frac{1}{m} \frac{d\Delta E_{\{m_F=0\}}}{dz} = \frac{1}{m} \frac{d\Delta E_{\{m_F=0\}}}{dB} \frac{dB}{dz} = \frac{2\mu_B^2 B}{m\Delta E_{hfs}} \frac{dB}{dz}. \quad (\text{IV.12})$$

L'accélération vaut donc : $a_{\{m_F=0\}} = 9.1 \cdot 10^{-6} \text{ m.s}^{-2} \cdot \text{A}^{-2}$.

Vitesse du paquet d'ondes

Les alimentations de courant que nous utilisons permettent d'avoir jusqu'à 200 A. Lorsque nous condensons dans le sous-état $m_F = +1$, nous allumons le courant dans la bobine pendant $t_{acc} = 4$ ms. Pour calculer la vitesse à laquelle on peut aller au maximum, nous intégrons le courant envoyé à la bobine pendant t_{acc} et mesuré avec une pince ampèremétrique. En effet, il y a un temps de montée du courant et un temps de descente non négligeable (entre 0.5 et 1 ms). Nous pouvons avoir une vitesse moyenne du paquet d'ondes allant jusqu'à : $\bar{v}_{\{m_F=+1\}} \simeq 22.5 \text{ mm.s}^{-1}$. Expérimentalement, nous avons effectivement pu atteindre des vitesses de l'ordre : $\bar{v} \simeq 2 \text{ cm/s}$. En ajustant le courant de la bobine nous

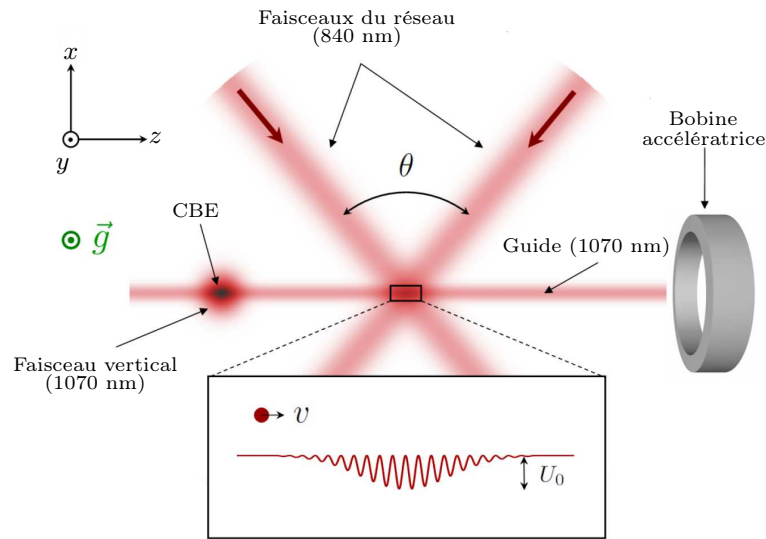


FIGURE IV.5 – Dispositif expérimental pour l'expérience de diffusion du condensat sur le réseau optique. La position initiale du condensat sera notée z_0 et il est distant du centre du réseau d'environ $350 \mu\text{m}$.

contrôlons la vitesse moyenne du paquet d'ondes atomique. Dans cette configuration, on utilise un courant $I \simeq 100 \text{ A}$ pour avoir une vitesse moyenne $\bar{v} \simeq 11 \text{ mm.s}^{-1}$.

Pour donner une vitesse aux atomes dans le sous-état $m_F = 0$, il faut délivrer le maximum de courant dans la bobine accélératrice. Même 200 A ne suffisent pas puisque, pour un tel courant, il faudrait laisser l'alimentation de courant allumé pendant 50 ms pour atteindre des vitesses de $\bar{v} = 10 \text{ mm/s}$ pour le paquet d'ondes. Nous décidons donc de mettre deux alimentations de courant en parallèle pour fournir au maximum 400 A . Nous utilisons en réalité 340 A au total. Un tel courant dans la bobine pendant 15 ms permet d'atteindre des vitesses d'environ 13 mm/s . Les expériences ont été réalisées, là encore, pour des vitesses moyennes $\bar{v} = 11 \text{ mm/s}$ obtenues pour un courant de 320 A envoyé dans la bobine pendant 15 ms .

En conclusion, nous avons un paquet d'ondes atomique qui se propage à une vitesse moyenne $\bar{v} = 11 \text{ mm/s}$ et une dispersion de vitesse $\Delta v = 1.7 \text{ mm/s}$. Ces classes de vitesses correspondent à la partie voilée de la figure IV.3. Nous allons donc dans la suite sonder la réponse du paquet d'ondes interagissant avec le réseau optique pour cet intervalle de vitesses.

IV.3 Interaction du paquet d'ondes de matière avec le réseau

IV.3.1 Dispositif expérimental

Notre expérience de diffusion est schématisée sur la figure IV.5 : nous envoyons un condensat de Bose-Einstein sur un réseau optique en aval du guide. Le condensat est envoyé sous la forme d'un paquet d'onde de vitesse moyenne \bar{v} et de dispersion de vitesse

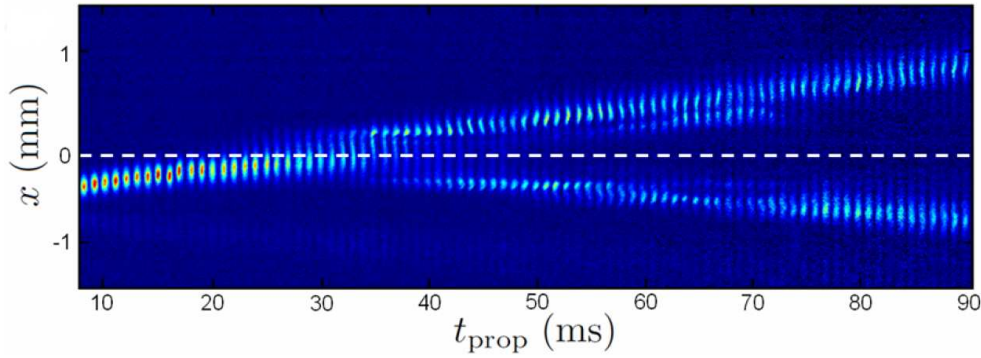


FIGURE IV.6 – Densité atomique en fonction de la position dans le guide et du temps de propagation pour une profondeur de réseau : $U_0 \simeq 11E_R$. La ligne en pointillés symbolise la position du réseau.

Δv ce qui permet de sonder la réponse de chaque composante de vitesse v .

La calibration de la profondeur du réseau a été faite au préalable par diffraction Raman-Nath (voir chapitre II). Cette calibration est importante pour savoir si les deux bras qui constituent le réseau sont correctement croisés et pour savoir quelle est la profondeur réelle du réseau. Toutefois pour réaliser cette diffraction, le condensat doit être sur le réseau optique.

Une fois la calibration réalisée, il faut déplacer le condensat de Bose-Einstein par rapport au réseau. Le réseau étant calibré, nous ne modifions plus sa position ou la position d'un de ces bras à partir de cette étape. Pour déplacer le condensat, nous changeons la position du point de croisement des faisceaux dipolaires vertical et horizontal. En effet, le faisceau vertical permet de confiner le piège dipolaire longitudinalement et le déplacer de moins de $500 \mu\text{m}$ n'a pas de grosse incidence sur la condensation. Le condensat est placé ainsi à environ $350 \mu\text{m}$ du centre du réseau, distance suffisante pour accélérer les atomes avant que ceux-ci n'interagissent avec le réseau.

Ainsi, grâce à la phase de découplage et d'accélération, nous pouvons effectuer la diffusion du paquet d'ondes sur le potentiel périodique.

IV.3.2 Dynamique de diffusion du paquet d'ondes pour une profondeur donnée

Nous réalisons d'abord l'expérience pour une profondeur donnée : $U_0 \simeq 11E_R$. La figure IV.6 montre la position des atomes en fonction du temps de propagation t_{prop} . L'origine de ce temps est prise à la fin de la phase d'accélération. Les atomes se propagent vers le haut sur cette figure, la ligne en pointillés représentant le réseau. Les images sont prises par absorption après un temps de vol $\Delta t = 10$ ms ce qui donne accès à la distribution en densité spatiale. Nous ne prenons donc pas en compte les 79 ms nécessaire pour découpler le condensat et les 15 ms pour l'accélérer.

A $t_{\text{prop}} = 0$ ms, le paquet d'ondes atomique peut être vu comme une distribution de

vitesse avec une vitesse moyenne $\bar{v} = 11$ mm/s et une dispersion de vitesse $\Delta v = 1.7$ mm/s. Les interactions entre atomes ne jouent plus aucun rôle, le paquet est trop dilué à ce stade. Le paquet d'ondes est guidé vers le réseau pendant les 20 premières millisecondes de propagation puis interagit avec celui-ci pour un temps de propagation compris entre 20 et 40 ms. Le paquet d'ondes s'étale pendant l'interaction avec le réseau. Au delà de 40 ms, on voit que le paquet d'ondes est séparé en deux : une partie réfléchiée et une partie transmise. Ce résultat est en accord avec les simulations numériques dont les prédictions sont reportées sur la figure IV.3. On voit que pour une profondeur $U_0 \simeq 11E_R$ et une distribution de vitesses telle que \bar{v} et Δv , une partie des atomes est transmise pour une certaine classe de vitesse, une autre partie est réfléchiée pour des vitesses plus faibles. L'expérience réalisée ici (fig. IV.6) confirme donc la prédiction théorique donnée par la figure IV.3 : pour certaines classes de vitesses les atomes sont réfléchiés par le potentiel périodique attractif et nous avons donc réalisé un miroir de Bragg à atomes !

Nous commentons quelques observations importantes de cette figure IV.6 :

- Lorsque les particules ont fini d'interagir avec le réseau, typiquement pour un temps de propagation $t_{\text{prop}} \geq 40$ ms, nous remarquons l'excitation des modes transverses des paquets d'ondes. Cette excitation est mise en évidence par le fait que les atomes ne se propagent plus en ligne droite dans le guide mais oscillent. Le réseau n'est en effet peut être pas aligné parfaitement avec le guide et il peut en résulter un faible couplage entre les degrés de liberté longitudinaux et transverses. Le paquet d'ondes est dévié lorsqu'il interagit avec le réseau et il oscille ensuite dans le guide, signature d'excitation des modes transverses.
- Une autre observation notable est le retard de certaines particules transmises ou réfléchiées, notamment pour $60 \lesssim t_{\text{prop}} \lesssim 70$ ms. Ces retards sont un effet de la structure de bande particulière du réseau avec une enveloppe gaussienne. En s'appuyant sur la figure IV.3, on remarque que la forme en dents de la probabilité de transmission peut donner accès à deux parties du paquet d'onde transmise et une partie au milieu de ces deux parties qui sont réfléchiées. Nous discuterons ce point de manière plus précise à la section suivante IV.3.3
- On remarque que certains atomes se propagent dans l'autre sens dans le guide, ils s'éloignent du réseau et n'interagissent même pas avec lui. Ces atomes sont très certainement des atomes condensés dans $m_F = -1$. En effet, ils sont chercheurs de champ faible et la bobine accélératrice les repousse dans le sens opposé. Cette observation montre que la méthode de distillation de spin n'est pas complète. Il faudrait un gradient de champ magnétique plus fort pour sélectionner tous les atomes dans $m_F = 0$ ou un temps plus long d'évaporation. Nous ne remarquons pas d'atomes qui seraient dans $m_F = +1$. Ces atomes seraient beaucoup plus accélérés et on les verrait en amont du paquet d'ondes principal.

Maintenant que la dynamique de diffusion a été caractérisée, nous explorons la diffusion des atomes en fonction de la profondeur du réseau.

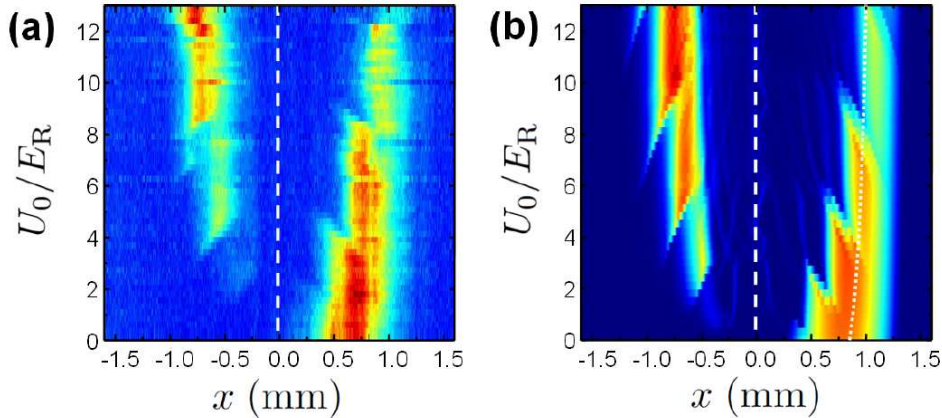


FIGURE IV.7 – (a) Résultats expérimentaux et (b) simulation numérique de la distribution spatiale du paquet d'ondes en fonction de la position dans le guide et de la profondeur du réseau. Le temps de propagation est de $t_{\text{prop}} = 100$ ms. Chaque ligne horizontale correspond à la moyenne de huit images intégrées selon la direction transverse x . La ligne blanche en tirets correspond à la position du réseau.

IV.3.3 Réponse du système en fonction de la profondeur

Dans l'expérience décrite dans cette section, nous laissons les atomes se propager et diffuser sur le réseau optique pendant $t_{\text{prop}} = 100$ ms. Les atomes ont une vitesse moyenne de $\bar{v} = 11$ mm/s et une dispersion de vitesse de $\Delta v = 1.7$ mm/s. Nous regardons l'influence de la profondeur du réseau sur la diffusion des atomes. Le graphe expérimental à deux dimensions réalisé sur la figure IV.7(a) représente la densité atomique des atomes en fonction de leur position et de la profondeur du réseau. Chaque ligne horizontale pour une profondeur U_0/E_R donnée correspond à une expérience de diffusion et plus précisément à la répétition de la même expérience huit fois. Il y a 55 lignes horizontales pour une profondeur de réseau allant jusqu'à $U_0 \simeq 13E_R$. Faire la moyenne de huit images permet de réduire le bruit d'environ un facteur 3. L'intégration le long de l'axe transverse permet de ne pas prendre en compte l'excitation des modes transverse et d'avoir une réponse à une dimension. Le paquet d'ondes se propage vers la droite et la ligne de tirets blancs représente la position du réseau.

La figure IV.7(b) est le résultat d'une simulation numérique de la dynamique du paquet d'ondes en résolvant l'équation de Schrödinger à une dimension par une méthode Split-Fourier. Cette méthode est détaillée dans la thèse de François Vermersch. Le paquet d'ondes initial est un paquet gaussien sans interaction dont la dispersion de vitesse et la vitesse moyenne sont égales aux mesures expérimentales. Il n'y a pas de paramètres supplémentaires ajustables et le bon accord entre expérience et simulation montre que résoudre le problème à une dimension suffit pour avoir accès à l'essentiel du problème physique.

On considère que pour un paquet d'ondes sans interaction avec le réseau, le temps de propagation de $t_{\text{prop}} = 100$ ms est assez long pour négliger la taille initiale du paquet d'onde

par rapport à sa taille après propagation. La distribution spatiale du paquet d'ondes donne alors accès directement à la distribution de vitesse $f(v)$: $n(z, t_{\text{prop}}) = f((z - z_0)/t) = f(v)$.

On peut ainsi comprendre les formes de la figure IV.7 qui sont le résultat de la diffusion d'un paquet d'ondes à partir de la figure IV.3 qui représente le coefficient de transmission pour une onde plane. On distingue bien sur cette figure les parties réfléchies et transmises de la zone voilée qui représente le paquet d'ondes. Lorsqu'on fait l'expérience la partie réfléchie se propage dans le sens opposé après interaction avec le réseau et on la retrouve à une position symétrique de la partie transmise par rapport au réseau. Ainsi les paquets d'ondes transmis et réfléchis sont complémentaires : on retrouverait le paquet d'onde original si on pouvait plier la figure IV.7 sur la ligne du réseau.

On retrouve aussi les formes en "dents" des parties réfléchie et transmise de la figure IV.3. Ces motifs sont une signature de la structure de bande du réseau puisqu'il y a réflexion lorsque la vitesse incidente reliée à l'énergie incidente correspond à une bande interdite de la structure de bandes. Ces formes permettent de distinguer différents cas. Pour certaines profondeurs, comme par exemple, $U_0/E_R = 10$, le paquet d'ondes est clairement séparé en deux parties : les atomes les plus lents sont réfléchis tandis que les atomes les plus rapides sont transmis. Ceci se voit facilement en comparant la distribution spatiale du paquet d'onde qui a interagit avec le réseau à une profondeur finie et celle à réseau nul. On peut ainsi dire que pour ces profondeurs le réseau joue le rôle d'un filtre de vitesse passe-haut puisqu'il laisse passer les atomes ayant des vitesses plus élevées et réfléchit les atomes plus lents.

Pour d'autres profondeurs, l'émergence des "dents" introduit des réflexions ou des transmissions pour des classes de vitesses disjointes. On peut alors parler de filtre de vitesse passe-bande ou coupe-bande (passe-bande si c'est le paquet d'ondes réfléchi qui est séparé en deux, coupe-bande si c'est le paquet d'ondes transmis). Cet effet correspond aux observations de la section précédente IV.3.2 où on voyait des paquets transmis ou réfléchis séparés du paquet principal pour des temps de propagation tel que $60 \lesssim t_{\text{prop}} \lesssim 70$ ms.

On voit ici se dégager un intérêt supplémentaire au miroir de Bragg pour ondes de matière. En effet, la réalisation d'un filtre de vitesse passe-haut est aussi possible avec une barrière de potentiel réalisée avec un laser désaccordé vers le bleu ou un champ magnétique approprié. Ainsi pour une hauteur de barrière telle qu'elle laisse passer les hautes vitesses incidentes et réfléchit les basses vitesses, on peut obtenir un filtre de vitesse passe-haut. Par contre, une telle barrière de potentiel ne permet pas la réalisation d'un filtre de vitesse passe-bande (ou coupe-bande) ce qui présente un avantage de notre dispositif. On peut aussi dire que le miroir de Bragg pour ondes de matière est une lame séparatrice sélective en vitesse pour ondes de matière. On peut imaginer une amélioration pour avoir un filtre passe-bande plus fin en modulant dans le temps l'intensité du réseau. Cette modulation d'intensité induit des transitions interbandes sélectives en vitesse. Cette amélioration sera développée dans la thèse de Pierrick Cheiney.

En plus de la réflexion de Bragg sur le réseau sinusoïdal, un autre effet est à noter.

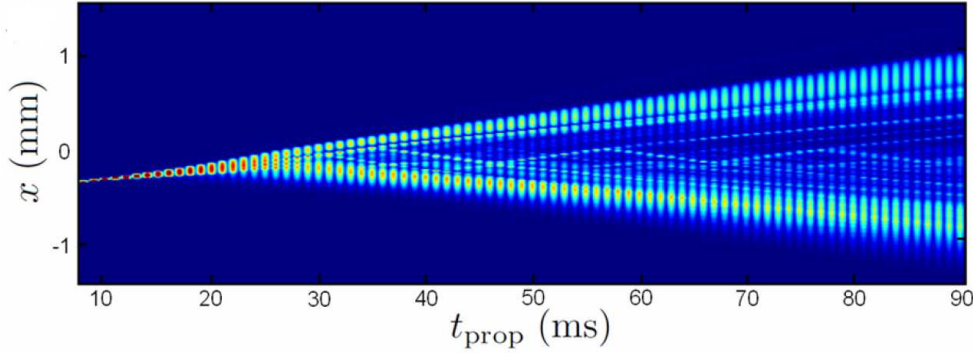


FIGURE IV.8 – *Densité atomique en fonction de la position dans le guide et du temps de propagation pour une profondeur de réseau : $U_0 \simeq 11E_R$. Cette figure est le résultat de calcul numérique de la dynamique de propagation du paquet d’ondes dans les mêmes conditions que pour la figure expérimentale IV.6 sans temps de vol et avec une résolution et un contraste accrus.*

Les atomes sont accélérés par le réseau à cause de sa forme générale de potentiel attractif gaussien. Pour montrer cela, nous faisons une simulation classique. La ligne blanche en pointillés sur la figure IV.7(b) montre la position finale d’une particule classique avec une vitesse \bar{v} , partant d’une position z_0 et se propageant pendant un temps t_{prop} en prenant en compte son accélération par le potentiel moyen du réseau. Ainsi la légère courbure en position du paquet d’ondes en fonction de la profondeur du potentiel U_0 provient de l’effet classique d’accélération par un potentiel moyen effectif.

IV.3.4 Discussion de la dynamique sans résolution

Nous développons dans cette partie un effet du réseau dû à son enveloppe en nous appuyant sur la figure IV.8. Cette figure est le résultat d’une simulation de la dynamique d’un paquet d’ondes avec la même vitesse moyenne \bar{v} et la même dispersion de vitesse Δv qu’à la section IV.3.2 mais sans temps de vol et avec une résolution et un contraste accrus. On observe alors clairement un effet de cavité mis en évidence par les multiples réflexions de certaines composantes de vitesse du paquet d’ondes à des positions symétriques. L’amplitude du paquet d’ondes réfléchi dans la cavité décroît à chaque réflexion. Les expériences réalisées à la section IV.3.2 ne permettent pas de mettre en évidence cet effet de cavité dû aux bords de l’enveloppe. Des expériences dans lesquelles le réseau est allumé au moment où le paquet d’onde passe par son centre permettront de mettre en évidence cet effet et seront exploitées dans la thèse de Pierrick Cheiney.

IV.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré les résultats de notre expérience de diffusion d’un paquet d’ondes sur un réseau. Le paquet d’ondes issu d’un condensat de Bose-Einstein est utilisé ici comme une sonde pour explorer les propriétés de diffusion d’un potentiel

périodique. Ces résultats sont publiés dans l'article "Realization of a Distributed Bragg Reflector for Propagating Guided Matter Waves", *Phys. Rev. Lett.* **107** 230401[29].

Au vu de ces résultats, plusieurs perspectives sont envisagées. Une première serait de regarder l'interaction d'un paquet d'ondes atomique sur un potentiel dépendant du temps. Ainsi en faisant osciller la profondeur du potentiel avec une certaine amplitude et une certaine fréquence, il apparaît possible de réaliser un filtre en vitesse. Ce filtre sera beaucoup plus précis que le filtre décrit dans ce chapitre. En effet, en variant la fréquence, il est possible de sélectionner une fine classe de vitesse réfléchie. L'analyse requiert une description en terme de bande de Floquet-Bloch pour prendre en compte les transitions interbandes induites par la modulation temporelle.

De même, une deuxième perspective serait d'étudier l'effet de cavité créé par l'enveloppe gaussienne du réseau. Cette idée est inspirée de la référence [76] qui étudie ce phénomène numériquement. Ces deux expériences sont en cours de réalisation et seront détaillées dans la thèse de Pierrick Cheiney.

Ces perspectives s'inscrivent dans la continuité des expériences de diffusion sur un système à sonder. Il n'y a à notre connaissance que peu d'expériences utilisant un condensat comme sonde d'un système. On peut tout de même citer la référence [77] qui utilise un condensat de Bose-Einstein pour sonder le système d'un isolant de Mott. Ils regardent ainsi l'influence de la profondeur du potentiel périodique qui permet de réaliser l'isolant de Mott à partir d'un premier condensat sur la réponse donnée par le second condensat servant de sonde pour ce système.

De plus, une étude numérique est en cours pour expliquer l'importance des confinements transverses et des couplages entre les degrés de liberté transverses et longitudinaux sur la réflexion de Bragg. Ces études révèlent une amplification de réflexion induite par le confinement [25] ce qui est en étroite analogie avec les résonances induites par confinement observées en physique des collisions entre atomes froids en géométrie quasi unidimensionnelle [78, 79]. Les détails de ces études seront présentés dans la thèse de François Vermersch.

Chapitre V

Etude analytique de solutions de l'équation de Schrödinger pour des potentiels de forme exponentielle

Sommaire

V.1	Introduction	92
V.2	Potentiels transparents	93
V.2.1	Introduction	93
V.2.2	Etude du potentiel gaussien	93
V.2.3	Etude du potentiel transparent	95
V.2.4	Comparaison et conclusion	95
V.3	Résolution de l'équation de Schrödinger pour des potentiels de forme exponentielle	96
V.3.1	Les potentiels	96
V.3.2	Les états liés (a fixé)	98
V.3.3	Les états de diffusion	99
V.4	Création de familles de potentiels : application de la supersymétrie en mécanique quantique ondulatoire (SUSY QM)	101
V.4.1	SUSY QM, le formalisme	102
V.4.2	Application au potentiel étudié	105
V.5	Etude similaire pour des potentiels définis sur un demi-espace	106
V.5.1	Définition du potentiel et fonctions d'onde	107
V.5.2	Les états liés	107
V.5.3	Les états de diffusion	109
V.5.4	Application de la supersymétrie en mécanique quantique à $U_+(x)$	110
V.6	Tests d'approximations	112
V.6.1	La méthode variationnelle	112
V.6.2	Les approximations semiclassiques.	115
V.7	Conclusion	121

V.1 Introduction

L'étude présentée dans les chapitres précédents est une étude expérimentale de diffusion d'un paquet d'ondes de matière sur un potentiel périodique. Dans ce chapitre, nous étudions d'un point de vue théorique un autre exemple de diffusion en mécanique quantique.

Une question d'importance en théorie de la diffusion est celle du type d'information sur le potentiel d'interaction qu'il est possible d'extraire à partir du résultat de la diffusion supposé connu. De nombreux travaux ont été consacrés à cette question, il ne s'agit pas ici d'en faire la synthèse. Retenons deux conclusions surprenantes de ces travaux : (i) il est possible de construire des puits de potentiel qui sont transparents, c'est-à-dire dont la probabilité de réflexion est toujours nulle quelle que soit l'énergie de l'onde plane incidente et (ii) il existe des familles de potentiels de formes différentes dont les probabilités de réflexion et de transmission sont identiques, là aussi indépendamment de l'énergie de l'onde plane incidente. L'outil mathématique qui permet de répondre avec élégance à ce type de questions est celui de la supersymétrie appliquée à la mécanique quantique, un domaine initié par les travaux d'Erwin Schrödinger [80] dans les années 40 et qui a repris vigueur au début des années 80 grâce à la contribution d'Edward Witten [81].

Dans cette optique, il devenait naturel de se poser la question de savoir si de telles familles de potentiels pouvaient être explicitées dans le cadre d'une diffusion en espace confiné. Nous n'avons pas pu répondre à cette question de manière générale. En revanche nous avons pu expliciter une nouvelle famille de potentiels dans un cas où le confinement est suffisamment fort pour que la physique devienne essentiellement unidimensionnelle. Cette limite correspond au cas où l'énergie des ondes planes incidentes reste petite devant le quantum d'énergie transverse.

Dans la première partie de ce chapitre, nous évaluons les propriétés de transparence pour un potentiel spécifique. Nous explicitons ensuite la nouvelle classe de solutions (Sec V.3). Nous mettons alors en œuvre la "machinerie" de la supersymétrie pour étendre les familles de solution. La quatrième partie est une étude d'un potentiel défini sur un demi-espace. Enfin nous exploitons ces solutions pour tester différentes méthodes d'approximation en mécanique quantique. Nous espérons que ce chapitre complétera utilement la culture du lecteur sur la mécanique quantique ondulatoire. Ce chapitre permet d'illustrer la théorie de la diffusion, les conditions d'existence d'états liés d'un puits de potentiel, les méthodes semiclassiques ou variationnelles et naturellement la puissance du formalisme de la supersymétrie.

Une partie du travail présenté dans ce chapitre est détaillée dans l'article suivant [30] : C. M. Fabre and D. Guéry-Odelin. "A class of exactly solvable models to illustrate supersymmetry and test approximation methods in quantum mechanics", *Am. J. Phys.* .

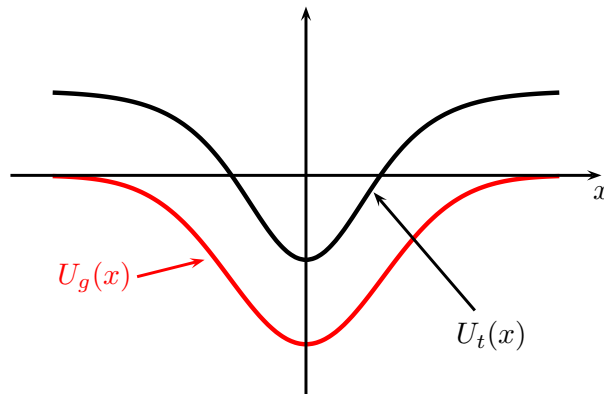


FIGURE V.1 – *Forme des potentiels* : en rouge est tracé le potentiel gaussien $U_g(x)$ et en noir le potentiel transparent $U_t(x)$.

V.2 Potentiels transparents

V.2.1 Introduction

L'objet de cette section est d'évaluer la faisabilité de la démonstration expérimentale de la transparence d'un potentiel. Pour ce faire, il est nécessaire de savoir distinguer avec précision un potentiel transparent d'un potentiel non transparent. Nous avons choisi dans cette partie de comparer un potentiel gaussien et un potentiel transparent connu. En pratique, l'onde plane incidente d'énergie E interagissant avec le potentiel serait réalisée grâce à un laser à atomes guidé. Nous abordons tout d'abord la réflexion d'une onde plane à une dimension par un potentiel gaussien, puis celle d'un potentiel transparent pour un large jeu de paramètres de ces potentiels (la figure V.1 montre la forme des potentiels étudiés).

V.2.2 Etude du potentiel gaussien

Le premier potentiel considéré s'écrit :

$$U_g(x) = -U_0 e^{-x^2/2\sigma^2}. \quad (\text{V.1})$$

Ce potentiel est caractérisé par deux paramètres : sa profondeur U_0 et sa largeur σ . L'étude de la diffusion d'une onde plane pour ce potentiel requiert la résolution de l'équation de Schrödinger (V.2)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(x), \quad (\text{V.2})$$

qui s'exprime sous forme adimensionnée :

$$\frac{d^2 \psi^2}{d\hat{x}} + \left(\hat{a}^2 e^{-\hat{x}^2/2} + \hat{b}^2 \right) \psi = 0, \quad (\text{V.3})$$

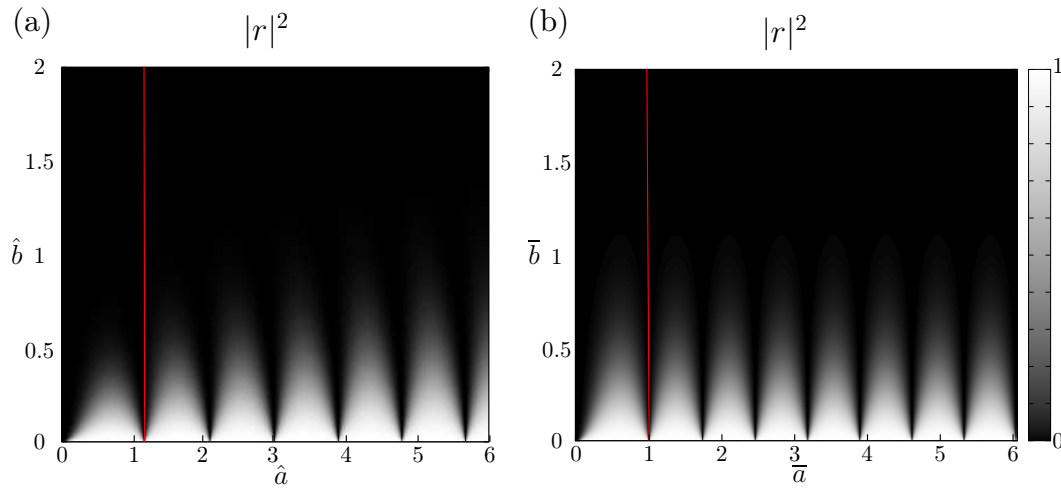


FIGURE V.2 – Coefficient de réflexion d'une onde plane abordant (a) un potentiel gaussien et (b) un potentiel transparent en fonction des paramètres des potentiels décrits par \hat{a} et \bar{a} et de l'énergie incidente apparaissant au travers des paramètres \hat{b} et \bar{b} . On observe dans les deux cas un effet Fabry-Perot. On remarque aussi que certaines valeurs de \hat{a} donnent une réflexion minimale pour certaines énergies incidentes. Les droites rouges sont des coupes de ces graphes dans le cas (a) pour $\hat{a} = 1.1584$ et (b) pour $\bar{a} = 1$, la réflexion en fonction de l'énergie incidente pour de telles valeurs est tracé sur la figure V.3.

où $\hat{x} = x/\sigma$, $\hat{a} = \sqrt{2\sigma^2 m U_0}/\hbar$ et $\hat{b} = \sqrt{2\sigma^2 m E}/\hbar$.

L'équation de Schrödinger est résolue numériquement dans le cas d'une onde plane c'est-à-dire pour une énergie incidente E . La méthode consiste à résoudre numériquement une équation différentielle du second ordre, en discrétisant l'espace entre 0 et L , avec les conditions aux limites : $\psi(x = 0) = e^{ikx} + re^{-ikx}$ et $\psi(x = L) = te^{ikx}$. Un problème de diffusion n'étant par définition pas normalisé, on peut diviser la fonction d'onde $\psi(x)$ par le coefficient t . On obtient une valeur en L pour la fonction d'onde $\psi(L)$ et sa dérivée $\psi'(L)$. La résolution numérique permet alors de remonter à la valeur en 0 de la fonction d'onde et de sa dérivée et ainsi de trouver les amplitudes de l'onde plane incidente $1/t$ et de l'onde réfléchie r/t . Cette méthode permet d'explorer facilement les propriétés de réflexion et de transmission en fonction des paramètres du potentiel : la profondeur U_0 et la largeur σ . On utilise cette méthode pour chaque énergie incidente E de l'onde abordant le potentiel et on trace sur la figure V.2(a) le coefficient de réflexion en fonction du paramètre \hat{a} caractérisant le potentiel et du paramètre \hat{b} associé à l'énergie incidente E . La réflexion à basse énergie incidente (\hat{b} et \bar{b} petits) correspond à la réflexion quantique, elle est liée à la variation spatiale rapide de la longueur d'onde de de Broglie lorsque la fonction d'onde explore le potentiel. On observe un effet de cavité. Tout se passe comme si les bords du potentiel jouaient le rôle des miroirs d'une cavité Fabry-Perot entre lesquels la particule fait des aller-retour. La succession de résonances Fabry-Perot correspond à l'entrée de nouveaux états liés lorsque la profondeur augmente. Par ailleurs, certaines valeurs de \hat{a} correspondant à des potentiels particuliers permettent une réflexion minimale voire nulle. Cette réflexion

est comparée avec une réflexion totalement nulle d'un potentiel transparent dans la suite.

V.2.3 Etude du potentiel transparent

Nous étudions ici un potentiel transparent introduit par Landau [82] qui s'écrit :

$$U_t(x) = V_0 \left(1 - \frac{2}{\cosh^2(x/x_0)} \right). \quad (\text{V.4})$$

Ce potentiel peut aussi être retrouvé simplement par le formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique [83] qui est explicité dans la partie V.4. Les paramètres caractérisant ce potentiel sont la profondeur V_0 et la taille x_0 . Pour qu'un tel potentiel soit transparent, il faut satisfaire une condition particulière entre V_0 et x_0 . Une de ces conditions possibles est : $V_0 = \hbar^2/2mx_0^2$. Comme pour le potentiel gaussien, l'équation de Schrödinger adimensionnée permet d'introduire les paramètres¹ : $\bar{a} = \sqrt{2x_0^2 m V_0}/\hbar$ et $\bar{b} = \sqrt{2x_0^2 m E}/\hbar$. On utilise la même méthode numérique pour résoudre l'équation de Schrödinger que pour le potentiel gaussien. On trace sur la figure V.2(b) le coefficient de réflexion en fonction de \bar{a} et \bar{b} décrivant respectivement la forme du potentiel et l'énergie incidente de l'onde plane interagissant avec le potentiel. Le même effet Fabry-Perot est observé ainsi que des minima de réflexion pour certaines valeurs de \bar{a} . Nous comparons maintenant ces minima de réflexion pour les deux potentiels.

V.2.4 Comparaison et conclusion

Pour le potentiel gaussien, la première valeur de \hat{a} pour laquelle la réflexion s'annule dans la limite d'une énergie incidente nulle est déterminée numériquement, $\hat{a}_0 \simeq 1.1584$. Par contre, pour le potentiel dit transparent, la réflexion est nulle lorsque la relation $V_0 = \hbar^2/2mx_0^2$ est respectée. La propriété de transparence pour cette condition particulière reliant la profondeur du potentiel et sa largeur conduit à une annulation de la réflexion pour toutes les énergies incidentes. Lorsqu'on applique cette relation au paramètre \bar{a} , on obtient : $\bar{a} = \sqrt{2mV_0x_0^2}/\hbar = 1$, dans ce cas, quelle que soit l'énergie incidente de l'onde plane, le potentiel est totalement transparent comme le montre la figure V.3. Cette figure nous montre aussi que la réflexion, pour un potentiel gaussien ne dispose pas de ces propriétés particulières. Toutefois sur la première ligne verticale (correspondant à \hat{a}_0) le maximum de réflexion est de l'ordre de 1 %. Nous concluons qu'il serait très difficile expérimentalement de distinguer les deux cas. En effet, il faudrait d'une part mesurer une réflexion de l'ordre de 1 % et d'autre part contrôler la forme du défaut avec une très grande précision. Les lasers à atomes produits expérimentalement sont extraits d'un condensat de Bose-Einstein de quelques 10^4 atomes. En considérant que tous les atomes du condensat interagissent avec le potentiel localisé, il faudrait être capable de détecter de manière précise le sort de moins d'une dizaine d'atomes étant donné le nombre d'atomes par classe de vitesses, de

1. Pour avoir des potentiels U_t et U_g de même profondeur, il faut prendre $U_0 = 2V_0$. Dans ce cas, $a = \sqrt{2}\bar{a}$.

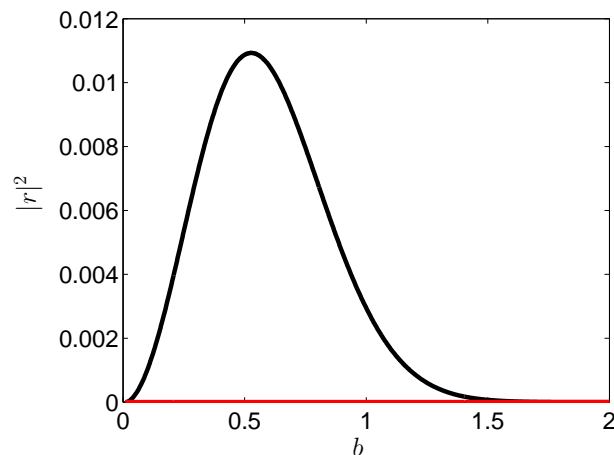


FIGURE V.3 – Coefficient de réflexion $|r|^2$ du potentiel gaussien (transparent) en fonction du paramètre \hat{b} (\bar{b}) correspondant à l'énergie incidente pour des paramètres \hat{a} (\bar{a}) tels que la réflexion soit nulle à énergie incidente nulle ($\bar{a} = 1$ pour le potentiel transparent et $\hat{a} = 1.1584$ pour le potentiel gaussien). Pour le potentiel transparent, $|r|^2 = 0$ quelle que soit l'énergie incidente (ligne rouge). Quant au potentiel gaussien, la réflexion n'est pas nulle pour toutes les énergies incidentes et elle est maximale à 1,2 % de réflexion pour $\hat{a} = 1.1584$ (courbe noire).

disposer corrélativement d'une grande reproductibilité de l'expérience et d'une méthode de réalisation des potentiels en question avec une précision submicrométrique Cette dernière contrainte est particulièrement délicate. Cependant, nous pouvons étudier un autre aspect de la diffusion en espace confiné avec des différences plus marquées. Dans la suite, nous explicitons, grâce au formalisme de la supersymétrie, une nouvelle famille de potentiel ayant les mêmes probabilités de réflexion et de transmission.

V.3 Résolution de l'équation de Schrödinger pour des potentiels de forme exponentielle

V.3.1 Les potentiels

Le formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique permet d'engendrer des familles de potentiels ayant les mêmes propriétés spectrales et les mêmes probabilités de réflexion et de transmission. Néanmoins, le point de départ de ce formalisme requiert la connaissance exacte des états de diffusion et des états liés d'un potentiel de départ. Nous choisissons pour ce potentiel une forme exponentielle :

$$U(x) = -U_0 e^{-\alpha|x|}. \quad (\text{V.5})$$

Expérimentalement, une telle forme de potentiel peut être créée à partir d'ondes évanescentes à la surface d'un prisme (décalées vers le rouge (bleu) pour obtenir un potentiel attractif (répulsif)) [84, 85]. Des résultats ont d'ailleurs été obtenus en physique atomique

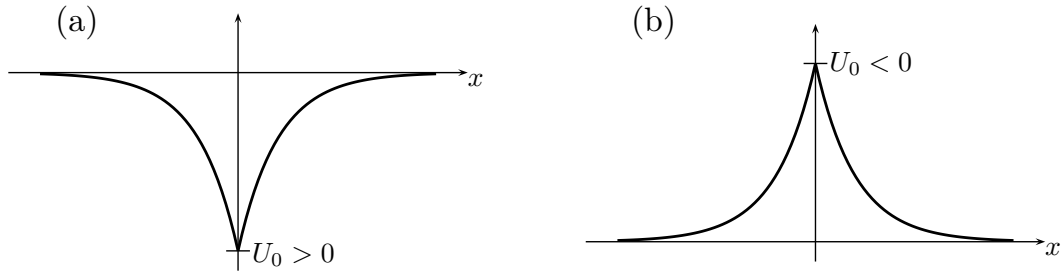


FIGURE V.4 – Représentation de $U(x)$ dans le cas (a) d'un puits ($U_0 > 0$) et (b) d'une barrière ($U_0 < 0$).

dans divers contextes notamment pour la réalisation de cavité gravitationnelle. Ce potentiel est caractérisé par deux paramètres : la profondeur U_0 et la longueur typique de variation α^{-1} . Le paramètre α est ici toujours positif. Le signe de U_0 permet de considérer soit un puits soit une barrière (voir figure V.4). La détermination des états stationnaires requiert la résolution de l'équation de Schrödinger (V.2) qui se réécrit sous forme adimensionnée :

$$\frac{d^2\psi}{dX^2} + \frac{1}{4}[a^2e^{-|X|} - b^2]\psi = 0, \quad (\text{V.6})$$

avec $X = \alpha x$, $b = \sqrt{8m(-E)/(\hbar^2\alpha^2)}$ et $a = \sqrt{8mU_0/(\hbar^2\alpha^2)}$. Le paramètre a concentre toutes les grandeurs caractéristiques du potentiel. Nous nous plaçons d'abord dans le cas d'un puits, a est alors réel. Avec nos conventions, la solution de l'équation (V.6) s'obtient grâce aux fonctions de Bessel [86]. Pour le voir plus directement, on considère d'abord $X \geq 0$ et on effectue le changement de variable $y = ae^{-X/2}$, il vient :

$$y^2 \frac{d^2\psi}{dy^2} + y \frac{d\psi}{dy} + [y^2 - b^2]\psi = 0. \quad (\text{V.7})$$

Nous déduisons que la solution générale de l'équation (V.6) se met sous la forme :

$$\psi(X \geq 0) = A_1^+ J_b \left(ae^{-X/2} \right) + A_2^+ J_{-b} \left(ae^{-X/2} \right). \quad (\text{V.8})$$

Un raisonnement de même nature pour les $X \leq 0$ permet d'exprimer la solution sous la forme

$$\psi(X \leq 0) = A_1^- J_b \left(ae^{X/2} \right) + A_2^- J_{-b} \left(ae^{X/2} \right). \quad (\text{V.9})$$

Dans le cas d'une barrière de potentiel, a est imaginaire pur. Cette fois, les fonctions d'onde sont obtenues grâce aux fonctions de Bessel modifiées :

$$\psi(X \geq 0) = \tilde{A}_1^+ I_b \left(\tilde{a}e^{-X/2} \right) + \tilde{A}_2^+ I_{-b} \left(\tilde{a}e^{-X/2} \right), \quad (\text{V.10})$$

$$\psi(X \leq 0) = \tilde{A}_1^- I_b \left(\tilde{a}e^{X/2} \right) + \tilde{A}_2^- I_{-b} \left(\tilde{a}e^{X/2} \right), \quad (\text{V.11})$$

où $\tilde{a} = a/i$ est réel.

V.3.2 Les états liés (a fixé)

Les états liés sont déterminés pour le puits de potentiel $U(x)$ ($U_0 > 0$) et ont une énergie $E < 0$ (b réel). Le potentiel $U(x)$ est pair, il commute avec l'opérateur parité : $[\Pi, U(x)] = 0$. Les fonctions d'onde de ses états liés ont par suite une parité bien définies. Elles sont soit paires soit impaires.

Considérons tout d'abord le cas où ψ est impaire. Cela nous donne les conditions $\psi(0) = 0$ et $\psi(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ qui se traduisent par :

$$\psi(0^+) = A_1^+ J_b(a) + A_2^+ J_{-b}(a) = 0, \quad (\text{V.12})$$

$$\psi(x \rightarrow +\infty) = A_1^+ J_b(y \rightarrow 0) + A_2^+ J_{-b}(y \rightarrow 0) = 0 \quad \text{avec} \quad y = a e^{-X/2}. \quad (\text{V.13})$$

Or le comportement asymptotique des fonctions de Bessel en 0 est tel que :

$$J_\nu(y \rightarrow 0) \simeq \left(\frac{y}{2}\right)^\nu \frac{1}{\Gamma(1+\nu)}. \quad (\text{V.14})$$

Donc l'équation (V.13) devient :

$$A_1^+ \frac{(a e^{-X/2})^b}{2^b} \frac{1}{\Gamma(1+b)} + A_2^+ \frac{(a e^{-X/2})^{-b}}{2^{-b}} \frac{1}{\Gamma(1-b)} = 0. \quad (\text{V.15})$$

Par ailleurs, $(a e^{-X/2})^{-b} = a e^{Xb/2} \xrightarrow{X \rightarrow +\infty} +\infty$ puisque b est réel. Les conditions aux limites en $\pm\infty$ imposent donc la condition $A_2^+ = 0$. Nous en déduisons que les énergies des fonctions d'onde impaires sont données, pour un paramètre a fixé, par la suite d'indices b_n , avec n entier que nous choisissons impair ($n = 1, 3, 5, \dots$) par commodité de classement des énergies, tels que a soit un zéro des fonctions de Bessel :

$$J_{b_n}(a) = 0. \quad (\text{V.16})$$

Etudions maintenant le cas des fonctions d'onde paires. Les conditions pour ce cas là sont seulement $\psi(x \rightarrow \pm\infty) = 0$ mais elles vont quand même imposer : $A_2^- = A_2^+ = 0$. De plus, on a par parité $A_1^- = A_1^+$. Examinons le comportement de la dérivée de ψ :

$$\psi'(X \geq 0) = -\frac{A_1^+ a}{2} J_b'(a e^{-X/2}), \quad \text{et} \quad \psi'(X \leq 0) = \frac{A_1^- a}{2} J_b'(a e^{X/2}). \quad (\text{V.17})$$

La continuité de la dérivée en 0 nous donne :

$$J_{b_n}'(a e^{X/2}) = -J_{b_n}'(a e^{-X/2}) \quad \Rightarrow \quad J_{b_n}'(a) = 0. \quad (\text{V.18})$$

Les énergies des fonctions d'onde paires sont données par la suite d'indices b_n , avec $n = 0, 2, 4, \dots$, tels que a soit un zéro de la dérivée de la fonction de Bessel. On montre en effet

facilement que $b_0 > b_1 > b_2 > \dots$ ($E_0 < E_1 < \dots$). Le spectre du potentiel $U(x)$ est donc :

$$\begin{aligned} J_{b_n}(a) &= 0 && \text{pour les } n \text{ impairs} \\ J'_{b_n}(a) &= 0 && \text{pour les } n \text{ pairs,} \end{aligned} \quad (\text{V.19})$$

et les fonctions d'onde des états liés s'écrivent :

$$\psi_n(x) = \mathcal{N}_n J_{b_n}(ae^{-\alpha|x|/2}), \quad (\text{V.20})$$

où \mathcal{N}_n est le facteur de normalisation de la fonction d'onde.

V.3.3 Les états de diffusion

Cas du puits : $U_0 > 0$

Les états de diffusion sont obtenus pour $E > 0$ ($b = i\beta$ est imaginaire pur, $\beta > 0$). Une onde plane incidente venant de $-\infty$ interagit avec le potentiel $U(x)$ et donne naissance à une onde réfléchie et une onde transmise. Cela se traduit en terme de conditions aux limites pour les fonctions d'onde par :

$$\psi(x \rightarrow -\infty) \sim e^{ikx} + r e^{-ikx} \quad \text{et} \quad \psi(x \rightarrow +\infty) \sim t e^{ikx}, \quad (\text{V.21})$$

où r et t sont respectivement les coefficients de réflexion et de transmission. En utilisant le développement asymptotique des fonctions de Bessel (V.14), les solutions (V.8) et (V.9) s'écrivent :

$$\psi(x \rightarrow +\infty) \simeq A_1^+ \left(\frac{a}{2}\right)^b \frac{e^{-ikx}}{\Gamma(1+b)} + A_2^+ \left(\frac{a}{2}\right)^{-b} \frac{e^{ikx}}{\Gamma(1-b)}, \quad (\text{V.22})$$

$$\psi(x \rightarrow -\infty) \simeq A_1^- \left(\frac{a}{2}\right)^b \frac{e^{ikx}}{\Gamma(1+b)} + A_2^- \left(\frac{a}{2}\right)^{-b} \frac{e^{-ikx}}{\Gamma(1-b)}. \quad (\text{V.23})$$

D'après l'expression de l'onde transmise pour $x \rightarrow +\infty$, nous pouvons conclure que $A_1^+ = 0$. Il faut maintenant relier les coefficients A_1^- , A_2^- et A_2^+ . Les conditions de continuité en $x = 0$ donnent :

$$\frac{A_2^+}{A_1^-} = \frac{1}{2} \left(\frac{J_b(a)}{J_{-b}(a)} - \frac{J'_b(a)}{J'_{-b}(a)} \right), \quad \text{et} \quad \frac{A_2^-}{A_1^-} = -\frac{1}{2} \left(\frac{J_b(a)}{J_{-b}(a)} + \frac{J'_b(a)}{J'_{-b}(a)} \right). \quad (\text{V.24})$$

Pour établir l'expression de r et t , il faut remplir les conditions (V.21) dans les expressions (V.22) et (V.23). Un problème de diffusion étant par définition non normalisé, il est possible de diviser l'expression des fonctions d'onde en $\pm\infty$ par $A_1^- (a/2)^b \Gamma^{-1}(1+b)$ ce qui permet d'avoir un coefficient 1 pour l'onde incidente. Nous en déduisons les coefficients de réflexion

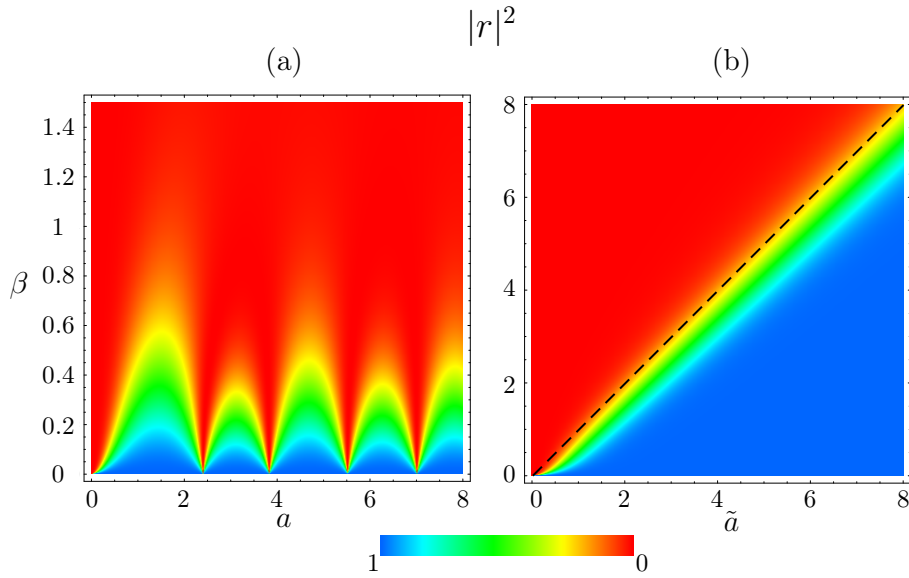


FIGURE V.5 – Coefficient de réflexion $|r|^2$ d'une onde plane interagissant avec le potentiel $U(x)$. (a) Cas du puits ($U_0 > 0$) : $|r|^2$ est tracé en fonction des paramètres $\beta = b/i$ et a . La réflexion de l'onde incidente pour de faibles valeurs de son énergie est la signature de la réflexion quantique. (b) Cas de la barrière ($U_0 > 0$) : ici, $|r|^2$ est tracé en fonction des paramètres β et \tilde{a} . La droite en pointillés représente la limite $E = U_0$ ($\beta = \tilde{a}$) et permet de mettre en évidence l'effet tunnel.

et de transmission :

$$r = \frac{A_2^-}{A_1^-} \left(\frac{a}{2}\right)^{-2b} \frac{\Gamma(1+b)}{\Gamma(1-b)} \quad \text{soit} \quad |r|^2 = \frac{1}{4} \left| \frac{J_b(a)}{J_{-b}(a)} + \frac{J'_b(a)}{J'_{-b}(a)} \right|^2, \quad (\text{V.25})$$

$$t = \frac{A_2^+}{A_1^+} \left(\frac{a}{2}\right)^{-2b} \frac{\Gamma(1+b)}{\Gamma(1-b)} \quad \text{soit} \quad |t|^2 = \frac{1}{4} \left| \frac{J_b(a)}{J_{-b}(a)} - \frac{J'_b(a)}{J'_{-b}(a)} \right|^2. \quad (\text{V.26})$$

Le coefficient $|r|^2$ est tracé sur la figure V.5(a) en fonction des paramètres a et β . Pour de faibles valeurs de l'énergie incidente, le coefficient de réflexion peut être maximum. En effet, lorsque β tend vers zéro, la longueur d'onde de de Broglie $\lambda_{\text{dB}}(x) = h/mv(x)$ varie très rapidement ce qui est à l'origine de la réflexion quantique :

$$\text{Max} \left(\frac{d\lambda_{\text{dB}}}{dx} \right) = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}} \frac{1}{\beta} \xrightarrow{\beta \rightarrow 0^+} +\infty. \quad (\text{V.27})$$

De plus, on observe un effet Fabry-Perot comme pour les potentiels gaussiens et transparents présentés au V.2 et qui correspondent à la condition de résonance associée à l'entrée de nouveaux états liés.

Cas de la barrière : $U_0 < 0$

Les états de diffusion dans le cas d'une barrière de potentiel sont obtenus avec le même raisonnement que pour le puits. En partant des fonctions d'onde (V.10) et (V.11) et en appliquant les conditions aux limites (V.21) on obtient l'expression des coefficients $|r|^2$ et $|t|^2$:

$$|r|^2 = \frac{1}{4} \left| \frac{I_b(\tilde{a})}{I_{-b}(\tilde{a})} + \frac{I'_b(\tilde{a})}{I'_{-b}(\tilde{a})} \right|^2, \quad \text{et} \quad |t|^2 = \frac{1}{4} \left| \frac{I_b(\tilde{a})}{I_{-b}(\tilde{a})} - \frac{I'_b(\tilde{a})}{I'_{-b}(\tilde{a})} \right|^2. \quad (\text{V.28})$$

On représente sur la figure V.5(b) le coefficient $|r|^2$ dans le cas d'une barrière de potentiel. Pour une énergie incidente $E < U_0$ ($\beta < \tilde{a}$), on remarque qu'une partie de l'onde incidente est transmise, signature de l'effet tunnel.

Nous avons donc déterminé les états liés et les états de diffusion du potentiel $U(x)$. En annexe A, nous généralisons les solutions de $U(x)$ pour un potentiel asymétrique. Nous appliquons dans la suite le formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique au potentiel $U(x)$.

V.4 Création de familles de potentiels : application de la supersymétrie en mécanique quantique ondulatoire (SUSY QM)

La supersymétrie (SUSY) a d'abord été introduite dans le contexte de la théorie des cordes pour unifier les descriptions bosonique et fermionique [87]. Cette théorie introduit des opérateurs de charge Q et Q^\dagger qui transforment un boson en un fermion de même énergie (donc de même masse) et inversement. En physique des particules, elle prédit que des particules telles que le quark, le lepton, le graviton, etc... ont dans la nature un superpartenaire de même masse et de spin différent de $\hbar/2$. Pour le moment, aucun superpartenaire n'a été identifié. Cela peut être expliqué par le fait que la symétrie s'est brisée entraînant une énorme augmentation de l'énergie du superpartenaire et rendant ces particules indétectables pour les accélérateurs actuels. Pour mieux comprendre ce phénomène de brisure de symétrie des superpartenaires, plusieurs théories ont été mises en place. Une application inattendue de ce développement théorique a été le formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique (SUSY QM). Ce formalisme a été introduit par Witten [81, 88] et par Cooper et Freedman [89]. Il permet entre autre de construire à partir d'un potentiel simple toute une famille de potentiels isospectraux et ayant les mêmes propriétés de diffusion. On explicite ce formalisme dans une première partie pour l'appliquer ensuite au potentiel $U(x)$ dans une deuxième partie.

V.4.1 SUSY QM, le formalisme

Factorisation du potentiel harmonique

Le formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique est inspirée de la factorisation du hamiltonien de l'oscillateur harmonique dont on rappelle le principe :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} \right) = \hbar\omega \hat{h}, \quad (\text{V.29})$$

avec $\xi = x/a_{\text{oh}}$ et $a_{\text{oh}} = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Le hamiltonien réduit \hat{h} est factorisé à l'aide des opérateurs

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \quad \text{et} \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right). \quad (\text{V.30})$$

Le produit $a^\dagger a$ donne en représentation $\{\xi\}$:

$$a^\dagger a = \frac{1}{2} \left(\xi^2 - \left[\frac{d}{d\xi}, \xi \right] - \frac{d^2}{d\xi^2} \right), \quad \text{avec} \quad \left[\frac{d}{d\xi}, \xi \right] = 1, \quad (\text{V.31})$$

donc $\hat{h} = a^\dagger a + 1/2$. Les opérateurs a et a^\dagger sont les opérateurs annihilation et création permettant de créer ou d'enlever une particule d'un état donné n du spectre de l'oscillateur harmonique. La factorisation du hamiltonien H permet d'introduire le formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique.

Généralisation à un potentiel quelconque

La généralisation par un potentiel quelconque a été proposée par Erwin Schrödinger [80, 90]. Considérons le hamiltonien :

$$H = T + V(x), \quad \text{où} \quad T = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (\text{V.32})$$

est le terme d'énergie cinétique et $V(x)$ le terme d'énergie potentielle. L'équation aux valeurs propres est $H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$, avec $n = 0, 1, 2, \dots$. On introduit le potentiel translaté $V_-(x) = V(x) - E_0$. Le hamiltonien correspondant $H_- = T + V_-(x)$ a les mêmes fonctions d'onde que H : $|\psi_n^-\rangle = |\psi_n\rangle$. Les valeurs propres de H_- sont données par celles de H translattées de l'énergie fondamentale E_0 : $E_n^- = E_n - E_0$. Ainsi les énergies E_n^- sont toujours positives et l'équation aux valeurs propres correspondante est $H_-|\psi_n^-\rangle = E_n^-|\psi_n^-\rangle$. Par construction, le niveau fondamental de H_- a une énergie nulle : $H_-|\psi_0^-\rangle = 0$. Cette relation permet d'écrire :

$$V_-(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)}, \quad (\text{V.33})$$

où $\psi_0''(x)$ est la dérivée seconde par rapport à x de la fonction d'onde de l'état fondamental $\psi_0(x)$. Le hamiltonien H_- se réécrit alors :

$$H_- = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)} \right). \quad (\text{V.34})$$

Sous cette forme, le hamiltonien H_- peut se factoriser i.e. $H_- = A^+ A^-$ grâce à l'introduction des opérateurs A^\pm :

$$A^\pm = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left(\pm \frac{d}{dx} + \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} \right). \quad (\text{V.35})$$

Cette factorisation peut être vue comme la généralisation de celle du hamiltonien de l'oscillateur harmonique explicitée ci-dessus.

Partenaires supersymétriques et superpotentiel

Introduisons maintenant le superpotentiel [81] :

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)}. \quad (\text{V.36})$$

Ce "potentiel" est défini sur le domaine \mathfrak{D} pour lequel le potentiel $V(x)$ est fini. Il diverge lorsque $\psi(0) = 0$. Le superpotentiel $W(x)$ et le potentiel $V(x)$ sont reliés par la relation :

$$V_-(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x). \quad (\text{V.37})$$

Cette relation suggère l'introduction du potentiel $V_+(x)$ appelé partenaire supersymétrique :

$$V_+(x) = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \quad \Leftrightarrow \quad V_+(x) = 2W^2(x) - V_-(x). \quad (\text{V.38})$$

Le hamiltonien correspondant $H_+ = T + V_+$ peut aussi se factoriser à l'aide des opérateurs A^\pm : $H_+ = A^- A^+$. Les relations de factorisation de H_+ et H_- permettent de relier leurs spectres :

$$H_-(A^+|\psi_n^+\rangle) = E_n^+(A^+|\psi_n^+\rangle), \quad (\text{V.39})$$

$$H_+(A^-|\psi_n^-\rangle) = E_n^-(A^-|\psi_n^-\rangle). \quad (\text{V.40})$$

Comme $E_0^- = 0$, on déduit de l'équation (V.40) que pour $n \neq 0$, $A^-|\psi_n^-\rangle$ est un état propre de H_+ avec la valeur propre associée E_n^- . En écrivant $|\psi_m^+\rangle = A^-|\psi_n^-\rangle$, on a $E_m^+ = E_n^-$. Ainsi, à part pour l'énergie fondamentale E_0^- , les énergies des Hamiltoniens H_- et H_+ coïncident parfaitement : $E_n^+ = E_{n+1}^-$. De plus, les opérateurs A^\pm peuvent être vus comme des opérateurs de passage entre les fonctions d'onde de H_+ et celles de H_- (Fig. V.6). Pour

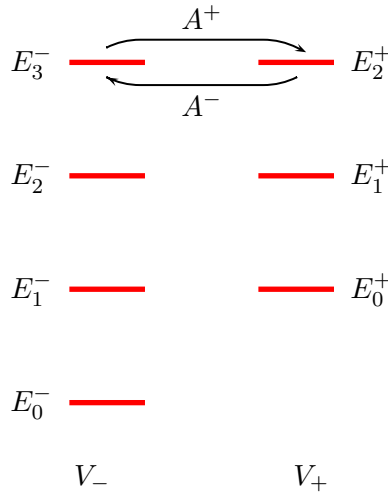


FIGURE V.6 – Correspondance entre les états issus du potentiel V_- et de son partenaire supersymétrique V_+ .

le cas où $E_0^- = 0$ et $E_n^+ = E_{n+1}^-$, la correspondance entre les fonctions d'onde s'écrit [83] :

$$|\psi_n^+\rangle = (E_{n+1}^-)^{-1/2} A^+ |\psi_{n+1}^-\rangle, \quad (\text{V.41})$$

$$|\psi_{n+1}^-\rangle = (E_n^+)^{-1/2} A^- |\psi_n^+\rangle. \quad (\text{V.42})$$

En partant d'un potentiel ayant N états liés, il est possible d'obtenir toute une famille de potentiels ayant de $N - 1$ jusqu'à 0 états liés.

La supersymétrie permet aussi de relier les coefficients de réflexion et de transmission des potentiels de la famille ayant un spectre continu. Nous considérons ici le cas simple pour lequel les potentiels V_{\pm} sont définis sur \mathbb{R} et le superpotentiel obéit aux conditions limites² : $W(x \rightarrow \pm\infty) = 0$. Ces conditions entraînent : $V_{\pm}(x \rightarrow \pm\infty) = 0$. Les conditions aux limites pour une onde plane incidente d'énergie $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ interagissant avec le potentiel sont :

$$\psi^{\pm}(k, x \rightarrow -\infty) \sim e^{ikx} + r^{\pm}(k)e^{-ikx}, \quad (\text{V.43})$$

$$\psi^{\pm}(k, x \rightarrow +\infty) \sim t^{\pm}(k)e^{ikx}. \quad (\text{V.44})$$

Or, les relations (V.40) et (V.39) permettent d'écrire : $|\psi^+\rangle = \mathcal{N}A^-|\psi^-\rangle$, où \mathcal{N} est un facteur de normalisation. Les équations aux limites (V.43) et (V.44) deviennent :

$$e^{ikx} + r^+(k)e^{-ikx} = -\mathcal{N} \frac{d}{dx} \left(e^{ikx} + r^-(k)e^{-ikx} \right) = -ik\mathcal{N} \left(e^{ikx} - r^-(k)e^{-ikx} \right), \quad (\text{V.45})$$

$$t^+(k)e^{ikx} = -\mathcal{N} \frac{d}{dx} \left(t^-(k)e^{ikx} \right) = -\mathcal{N}ikt^-(k)e^{ikx}. \quad (\text{V.46})$$

En reliant les coefficients deux à deux, on obtient $-ik\mathcal{N} = 1$. On en déduit : $r^+(k) =$

2. Ce cas simple se généralise au cas des conditions aux limites finies : $W(x \rightarrow \pm\infty) = W_{\pm}$.

$-r^-(k)$ et $t^+(k) = t^-(k)$. Ainsi les partenaires supersymétriques ont les mêmes probabilités de réflexion et de transmission : $|r^+(k)|^2 = |r^-(k)|^2$ et $|t^+(k)|^2 = |t^-(k)|^2$.

Le formalisme étant explicité, nous l'appliquons ci-après au potentiel $U(x)$.

V.4.2 Application au potentiel étudié

Pour appliquer la méthode de la supersymétrie en mécanique quantique au potentiel $U(x)$, nous introduisons le potentiel translaté $V_-(x) = U(x) - E_0$. Le superpotentiel (V.36) correspondant à $V_-(x)$ vaut :

$$W(x) = \text{sign}(x) \sqrt{U_0} e^{-\alpha|x|/2} \frac{J'_{b_0}(ae^{-\alpha|x|/2})}{J_{b_0}(ae^{-\alpha|x|/2})}. \quad (\text{V.47})$$

et le premier partenaire supersymétrique s'écrit (V.38) : $V_+(x) = 2(W(x))^2 - U(x) + E_0$ soit :

$$V_+(x) = U_0 e^{-\alpha|x|} \left[2 \left(\frac{J'_{b_0}(ae^{-\alpha|x|/2})}{J_{b_0}(ae^{-\alpha|x|/2})} \right)^2 - 1 \right] + E_0 \quad (\text{V.48})$$

Il est à noter que même si le potentiel $U(x)$ présente une singularité en zéro, la génération de la famille supersymétrique est réalisable. Les équations (V.36) et (V.38) montrent en effet que partant d'un potentiel ayant une classe de dérivabilité \mathcal{C}^n , le partenaire supersymétrique aura, quant à lui, une classe³ \mathcal{C}^{n+1} . On trace le potentiel $V_+(x)$ sur la figure V.7. On remarque l'apparition d'une forme de double puits. Ainsi, le formalisme de la supersymétrie appliqué à $U(x)$ permet d'engendrer une famille de potentiels qui peuvent être résolus analytiquement et présentant une forme en double puits. Un autre exemple de double puits, dont la solution analytique est connue, est explicité pour les potentiels de forme invariante [93]. Il existe cependant peu d'exemples de résolution analytique de potentiel présentant un double puits. La référence [94] explicite le cas du potentiel $V(x) = k(|x| - a)^2$.

Le potentiel $U_t(x)$ étudié à la section V.2 illustre aussi les avantages de la supersymétrie en mécanique quantique. En effet, il est introduit à partir du superpotentiel $W(x) = \sqrt{V_0} \tanh(x/x_0)$ qui donne deux partenaires supersymétriques $V_+ = V_0$ et $V_- = U_t(x)$ avec la condition $2mx_0^2V_0 = \hbar^2$. Il n'y a évidemment pas de réflexion pour un potentiel constant, ainsi que pour son partenaire supersymétrique. Ceci explique pourquoi $U_t(x)$ est transparent pour cette condition. Le formalisme de SUSY QM étant à présent explicité, nous pouvons l'employer pour un autre potentiel, de même forme exponentielle que $U(x)$ mais défini sur un demi-espace.

3. Il existe dans la littérature un autre exemple de singularité appliqué à la supersymétrie en mécanique quantique : le potentiel de Dirac [91, 92].

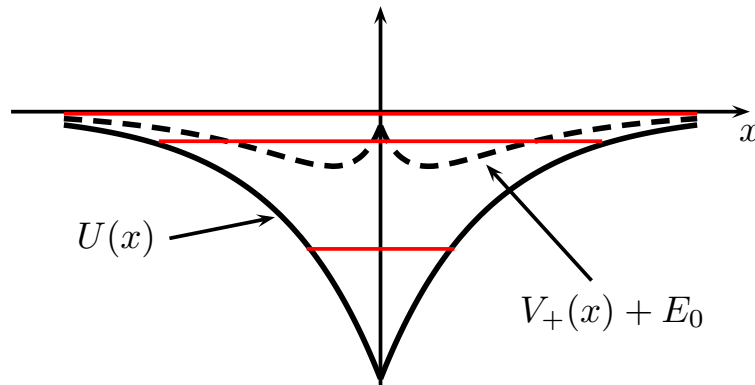


FIGURE V.7 – Représentation de $U(x)$ (en trait plein) et de son premier partenaire supersymétrique V_+ (en pointillés). Les paramètres du potentiel $U(x)$ sont $a = 4.5$ et $\alpha = 1$. Par conséquent, $U_0 \simeq 2.5$ en posant $\hbar = m = 1$. Avec ces paramètres, le potentiel $U(x)$ a 3 états liés (en rouge) : $E_0 = -1.33$, $E_1 = -0.28$ et $E_2 = -0.023$. Le potentiel V_+ présente une forme en double puits. L'état E_0 est le fondamental de $U(x)$ et l'état E_1 est le fondamental de $V_+(x) - E_0$.

V.5 Etude similaire pour des potentiels définis sur un demi-espace

Les études précédentes ne concernaient que des potentiels 1D définis sur \mathbb{R} . Nous avons vu aussi que le formalisme de la supersymétrie est un outil puissant pour dériver des potentiels qui peuvent être résolus analytiquement. Il serait maintenant intéressant d'utiliser cette méthode pour résoudre des potentiels définis sur le demi-espace des x positifs qui a l'avantage d'être analogue à la résolution de certains problèmes à trois dimensions en mécanique quantique. En effet, la résolution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel $V(\mathbf{r})$ défini sur \mathbb{R}^3 fait apparaître un terme radial et un terme angulaire dans l'expression des fonctions d'onde : $\psi(r, \theta, \phi) = (u_l(r)/r)Y_l^m(\theta, \phi)$, avec $r \in \mathbb{R}^+$. L'équation de Schrödinger se réécrit alors :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_l(r)}{dr^2} + (V(r) - E) u_l(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r) = 0. \quad (\text{V.49})$$

Comme la condition aux limites en 0 est la même pour la fonction d'onde radiale d'un potentiel sur \mathbb{R}^3 ($u_l(0) = 0$) que pour un potentiel sur \mathbb{R}^+ , pour $l = 0$, cette équation est la même que l'équation de Schrödinger à une dimension pour un potentiel défini sur \mathbb{R}^+ . Ainsi, étudier un potentiel sur le demi-espace et en générer de nouveaux avec le même spectre et les mêmes états de diffusion en appliquant la méthode de la supersymétrie permet d'avoir aussi la résolution de ces potentiels à trois dimensions pour les ondes s ($l = 0$).

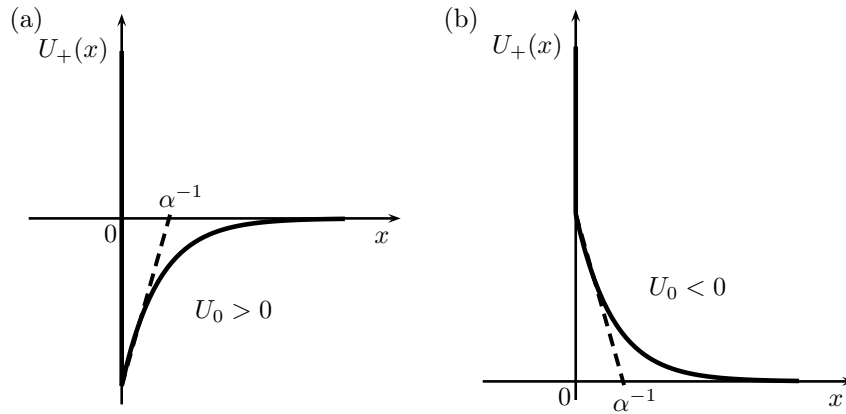


FIGURE V.8 – Présentation des potentiels $U_+(x)$ dans le cas (a) d'un puits et (b) d'une barrière.

V.5.1 Définition du potentiel et fonctions d'onde

Dans la continuité de l'étude faite précédemment, nous étudions le potentiel $U_+(x)$ défini par :

$$U_+(x) = \begin{cases} -U_0 e^{-\alpha x} & \text{pour } x \geq 0, \\ +\infty & \text{pour } x \leq 0, \end{cases} \quad (\text{V.50})$$

représenté sur la figure V.8. Tout comme le potentiel $U(x)$, le potentiel $U_+(x)$ est caractérisé par sa profondeur U_0 et sa longueur typique de variation α^{-1} . Le signe de U_0 permet d'étudier soit une barrière de potentiel ($U_0 < 0$) soit un puits ($U_0 > 0$).

Nous déterminons les fonctions d'onde en résolvant l'équation de Schrödinger (V.2) de la même manière que pour le potentiel $U(x)$ (voir la section V.3.1). Les fonctions d'onde $\psi_+(x)$ du potentiel $U_+(x)$ s'écrivent :

$$\psi_+(X) = A_1 J_b(ae^{-X/2}) + A_2 J_{-b}(ae^{-X/2}) \quad \text{si } U_0 > 0, \quad (\text{V.51})$$

$$\psi_+(X) = \tilde{A}_1 I_b(\tilde{a}e^{-X/2}) + \tilde{A}_2 I_{-b}(\tilde{a}e^{-X/2}) \quad \text{si } U_0 < 0. \quad (\text{V.52})$$

On rappelle que $X = \alpha x \geq 0$, $b = \sqrt{8m(-E)/(\hbar^2 \alpha^2)}$, $a = \sqrt{8mU_0/(\hbar^2 \alpha^2)}$ et $\tilde{a} = a/i$.

V.5.2 Les états liés

Les états liés pour un puits de potentiel défini sur le demi-espace sont déterminés avec les conditions aux limites $\psi(0) = 0$ et $\psi(x \rightarrow +\infty) = 0$. En appliquant ces conditions à l'expression (V.51), nous obtenons :

$$\psi_+(0^+) = A_1 J_b(a) + A_2 J_{-b}(a) = 0, \quad (\text{V.53})$$

$$\psi_+(x \rightarrow +\infty) = A_1 J_b(y \rightarrow 0) + A_2 J_{-b}(y \rightarrow 0) = 0 \quad \text{avec } y = a e^{-X/2}. \quad (\text{V.54})$$

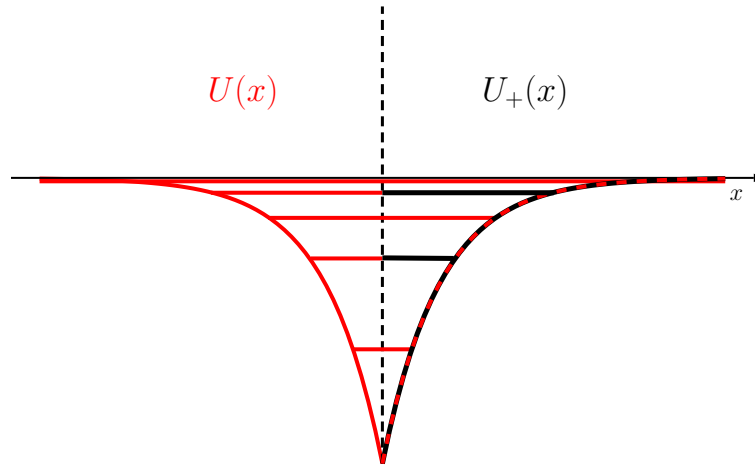


FIGURE V.9 – Comparaison des spectres de $U(x)$ et $U_+(x)$ avec $a = 8.48$: 2 états liés pour $U_+(x)$ et 5 pour $U(x)$. Le spectre de $U_+(x)$ correspond aux états liés impairs de $U(x)$.

La forme asymptotique des fonctions de Bessel donnée par l'équation (V.14) et pouvant se réduire $J_b(y \rightarrow 0) \propto y^b$ implique que $A_2 = 0$, b étant positif. Le spectre de $U_+(x)$ est donné par les zéros b_n des fonctions de Bessel pour des paramètres U_0 et α donnés :

$$J_{b_n}(a) = 0. \tag{V.55}$$

Les fonctions d'onde correspondant aux états liés s'écrivent :

$$\psi_n(x) = \mathcal{N}_n J_{b_n}(ae^{-\alpha x/2}), \tag{V.56}$$

où \mathcal{N}_n est le facteur de normalisation de la fonction d'onde.

Notons qu'il existe une valeur critique du paramètre de profondeur a en dessous de laquelle l'équation (V.55) n'a pas de solution b_n et le potentiel $U_+(x)$ n'a pas d'état lié. Cette valeur peut être déterminée numériquement, elle vaut $a_c \simeq 2.405$. Cet effet ne va pas à l'encontre du théorème prédisant qu'il existe toujours au moins un état lié pour un potentiel à une dimension [95, 96]. En effet, le potentiel $U_+(x)$ n'est pas défini sur tout l'espace car il possède une singularité en zéro avec un "mur" infini de potentiel répulsif. La comparaison des spectres des potentiels $U(x)$ et $U_+(x)$ permet de mieux comprendre cette valeur critique. En effet, comme représenté sur la figure V.9, le spectre de $U_+(x)$ correspond aux états liés impairs de $U(x)$. Ce dernier satisfaisant la condition du théorème selon lequel un potentiel 1D dispose toujours d'un état lié, il a toujours quelque soit son paramètre a au moins un état lié et la valeur critique a_c correspond à la condition d'apparition du premier état excité de $U(x)$.

V.5.3 Les états de diffusion

Cas du puits : $U_0 > 0$

Les états de diffusion sont obtenus pour $E > 0$ soit $b = i\tilde{b}$ imaginaire pur et a réel pour un puits de potentiel. Dans le cas d'un potentiel seulement défini sur les x positifs, l'onde incidente vient de $+\infty$, interagit avec le potentiel et repart vers $+\infty$. Les conditions aux limites sont :

$$\psi_+(x \rightarrow +\infty) \simeq e^{-ikx} + r e^{ikx} \quad \text{et} \quad \psi_+(0) = 0. \quad (\text{V.57})$$

La condition aux limites en zéro permet de relier les coefficients A_1 et A_2 : $A_2 J_{-b}(a) = -A_1 J_b(a)$. De plus, la fonction d'onde s'écrit en $+\infty$:

$$\psi_+(x \rightarrow +\infty) \simeq A_1 \left(\frac{a}{2}\right)^b \frac{e^{-ikx}}{\Gamma(1+b)} + A_2 \left(\frac{a}{2}\right)^{-b} \frac{e^{ikx}}{\Gamma(1-b)}. \quad (\text{V.58})$$

En posant, $A_1 \Gamma^{-1}(1+b) (a/2)^b = 1$ on détermine le coefficient de réflexion r :

$$r = -\frac{J_b(a)}{J_{-b}(a)} \frac{\Gamma(1+b)}{\Gamma(1-b)} \left(\frac{a}{2}\right)^{-2b}, \quad (\text{V.59})$$

avec $|r|^2 = 1$. Avec les coefficients A_1 et A_2 déterminés ci-dessus, la fonction d'onde devient :

$$\psi_+(x) = \left(\frac{a}{2}\right)^{-b} \Gamma(1+b) \left[J_b \left(a e^{-\alpha x/2} \right) + \frac{J_b(a)}{J_{-b}(a)} J_{-b} \left(a e^{-\alpha x/2} \right) \right]. \quad (\text{V.60})$$

Le module carré de la fonction d'onde $|\psi_+(x)|^2$ est représenté sur la figure V.10(a) pour les paramètres $a = 35$, $b = 0.25i$ et $\alpha = 1$, correspondant à un potentiel profond et une énergie incidente faible. De tels paramètres mettent en évidence la réduction de la période des oscillations lorsque la fonction d'onde entre dans la zone d'influence du potentiel ($x < \alpha^{-1}$). Cette modification de la période des oscillations est le reflet de la variation de la longueur d'onde de de Broglie de la particule interagissant avec le potentiel [85, 97].

Cas de la barrière : $U_0 < 0$

Les conditions aux limites et le raisonnement sont les mêmes que pour le puits de potentiel, à ceci près que a est maintenant imaginaire pur. En remplaçant a par $\tilde{a} = a/i$ et les fonctions de Bessel J par leurs homologues modifiées I , on retrouve rapidement l'expression des fonctions d'onde et du coefficient de réflexion dans le cas d'une barrière de potentiel défini sur un demi-espace :

$$r = -\frac{I_b(\tilde{a})}{I_{-b}(\tilde{a})} \frac{\Gamma(1+b)}{\Gamma(1-b)} \left(\frac{\tilde{a}}{2}\right)^{-2b}, \quad (\text{V.61})$$

$$\psi_+(x) = \left(\frac{\tilde{a}}{2}\right)^{-b} \Gamma(1+b) \left[I_b \left(\tilde{a} e^{-\alpha x/2} \right) + \frac{I_b(\tilde{a})}{I_{-b}(\tilde{a})} I_{-b} \left(\tilde{a} e^{-\alpha x/2} \right) \right]. \quad (\text{V.62})$$

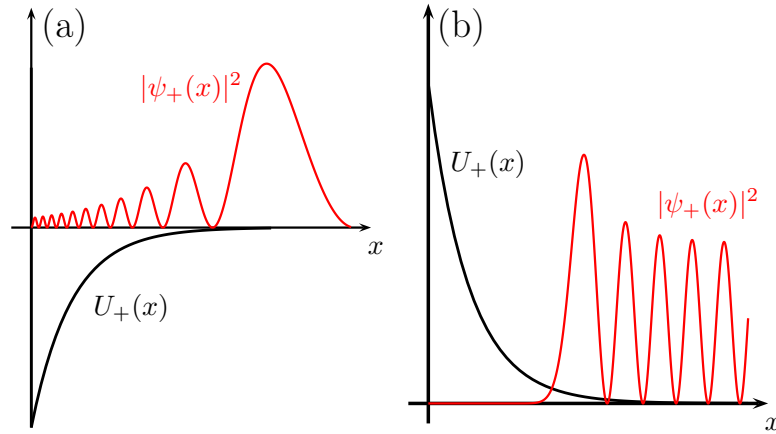


FIGURE V.10 – Représentation des fonctions d'onde de diffusion (a) dans le cas d'un puits ($U_0 > 0$) avec les paramètres $a = 35$, $b = 0.25i$ et $\alpha = 1$ et (b) dans le cas d'une barrière ($U_0 < 0$) avec $a = 45i$, $b = 8i$ et $\alpha = 1$.

Sur la figure V.10(b), on représente le module carré $|\psi_+(x)|^2$ pour les paramètres : $\tilde{a} = 45$, $b = 8i$ et $\alpha = 1$. L'énergie incidente arrive à la hauteur $U_0/32$ sur la barrière. Ces paramètres permettent ici de souligner l'augmentation de la période d'oscillation de la fonction d'onde interagissant avec le potentiel.

L'application du formalisme de SUSYQM est maintenant possible puisque les états stationnaires et les états de diffusion pour le potentiel U_+ viennent d'être explicités.

V.5.4 Application de la supersymétrie en mécanique quantique à $U_+(x)$

En appliquant une première fois, le formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique explicité au V.4, on obtient le premier partenaire supersymétrique de $U_+(x)$. Pour ce faire, on introduit le potentiel translaté $V_-^{(1)}(x) = U_+(x) - E_0$, E_0 étant l'énergie fondamentale de U_+ . On détermine le superpotential :

$$W_+^{(1)}(x) = \frac{-\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} = \sqrt{U_0} e^{-\alpha x/2} \frac{J_{b_0}'(ae^{-\alpha x/2})}{J_{b_0}(ae^{-\alpha x/2})}. \quad (\text{V.63})$$

Ainsi le premier partenaire supersymétrique $V_+^{(1)} = 2(W_+^{(1)})^2 - V_-^{(1)}$ s'écrit aussi :

$$V_+^{(1)}(x) = U_0 e^{-\alpha x} \left[2 \left(\frac{J_{b_0}'(ae^{-\alpha x/2})}{J_{b_0}(ae^{-\alpha x/2})} \right)^2 - 1 \right] + E_0. \quad (\text{V.64})$$

Appliquons une nouvelle fois le formalisme de la supersymétrie mais cette fois-ci au potentiel $V_+^{(1)}(x)$. Son énergie fondamentale est $E_1^+ = E_1 - E_0$ et on obtient sa fonction d'onde fondamentale grâce aux opérateurs de passage A^\pm entre les fonctions d'onde du potentiel

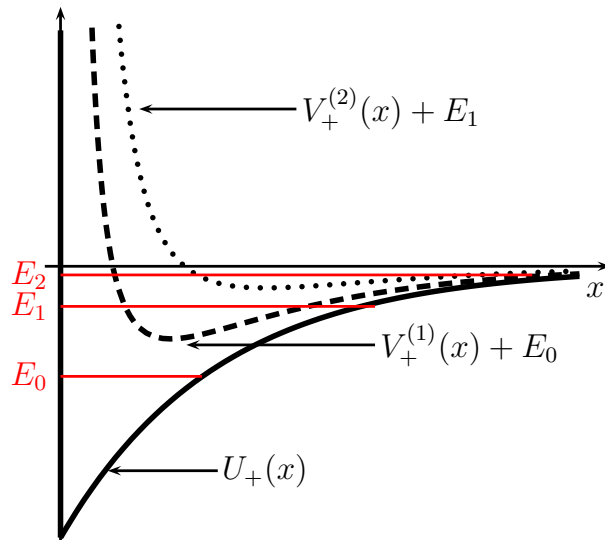


FIGURE V.11 – Représentation des potentiels $U_+(x)$ (trait plein), $V_+^{(1)}(x)$ (tirets) et $V_+^{(2)}(x)$ (pointillés) pour des paramètres $a = 11.75$ et $\alpha = 1$. Pour ces valeurs, $U_0 = 17.26$ (avec $\hbar = m = 1$) et les valeurs des 3 états liés du potentiel $U_+(x)$ sont $E_0 = -7.19$, $E_1 = -2.57$ et $E_2 = -0.547$. $V_+^{(1)}(x)$ a, quant à lui, 2 états liés E_1 et E_2 et $V_+^{(2)}(x)$ n'en a plus qu'un seul.

et de son partenaire. L'expression (V.42) donne

$$\psi_0^+(x) = (E_1^+)^{-1/2} A^+ \psi_1(x) = \frac{-\hbar}{\sqrt{2mE_1^+}} \left(\psi_1' + \frac{\psi_0'}{\psi_0} \psi_1 \right), \quad (\text{V.65})$$

où ψ_0 est la fonction d'onde de l'état fondamental et ψ_1 la fonction d'onde du premier état excité de U_+ . Pour créer un nouveau partenaire supersymétrique $V_+^{(2)}$, on introduit le potentiel translaté $V_-^{(2)} = V_+^{(1)} - E_1^+$ et le superpotentiel associé :

$$W_+^{(2)}(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0^{+'}}{\psi_0^+} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0(\psi_0\psi_1'' - \psi_0''\psi_1 - \psi_0'\psi_1') + \psi_0'\psi_0'\psi_1}{\psi_0(\psi_0\psi_1' - \psi_0'\psi_1)}, \quad (\text{V.66})$$

ce qui permet d'écrire le deuxième partenaire supersymétrique du potentiel $U_+(x)$:

$$V_+^{(2)}(x) = 2(W_+^{(2)}(x))^2 - V_+^{(1)}(x) = 2 \left(W_+^{(2)}(x) \right)^2 - 2 \left(W_+^{(1)}(x) \right)^2 + U_+(x) + 2E_0 - E_1. \quad (\text{V.67})$$

La figure V.11 représente le potentiel U_+ avec 3 états liés ($a = 11.75$) et ses deux partenaires supersymétriques $V_+^{(1)}$ et $V_+^{(2)}$. Le comportement asymptotique de $V_+^{(1)}(x)$ est $1/x$ quand $x \rightarrow 0$ et $e^{-\kappa x}$ pour $x \rightarrow +\infty$. En conclusion, nous avons explicité trois potentiels dont nous connaissons exactement les états liés et les états de diffusion à 1D sur un demi-espace.

V.6 Tests d'approximations

La plupart des potentiels étudiés en mécanique quantique ne peuvent pas être résolus analytiquement. Pour les étudier, on a donc recours à différentes méthodes d'approximation. Les études précédentes fournissent des résolutions exactes des états liés et des états de diffusion. Disposer de telles solutions exactes permet de tester les approximations couramment utilisées en mécanique quantique. Nous nous proposons ainsi dans cette partie de présenter et de tester la méthode variationnelle qui estime l'énergie de l'état fondamental d'un potentiel, et les approximations semiclassiques permettant d'évaluer le spectre entier et le coefficient de transmission à travers une barrière tunnel. Le développement de ces méthodes offre un intérêt pédagogique appréciable pour l'enseignement de la mécanique quantique.

V.6.1 La méthode variationnelle

L'approximation variationnelle permet d'estimer le niveau fondamental d'un potentiel en choisissant une fonction d'onde $\{\varphi_\sigma(x)\}$ dépendant uniquement du paramètre variable σ . On minimise alors la valeur moyenne du hamiltonien $H = p^2/2m + U(x)$ pour cette fonction d'onde $\{\varphi_\sigma(x)\}$ pour établir une borne supérieure $E_0(\sigma)$ à l'énergie de l'état fondamental :

$$\text{Min}_\sigma (\langle \varphi_\sigma | H | \varphi_\sigma \rangle) \geq E_0. \quad (\text{V.68})$$

Le choix de la fonction d'onde est crucial pour être le plus proche de la valeur exacte E_0 . Cette méthode est employée ici pour les deux potentiels $U_+(x)$ et $U(x)$.

Application à $U_+(x)$

Comme ce potentiel a une barrière infinie en $x = 0$, la fonction d'onde de l'état fondamental doit s'annuler en $x = 0$. On choisit d'abord la famille de fonctions suivante :

$$\varphi_\sigma(x) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{x}{\sigma^{3/2}} e^{-x^2/4\sigma^2}, \quad (\text{V.69})$$

normalisée à 1 et qui obéit à la condition limite $\varphi_\sigma(0) = 0$ et $\varphi_\sigma(+\infty) = 0$ comme attendu pour la fonction d'onde du niveau fondamental. Cette fonction est inspirée de la fonction d'onde du premier état excité de l'oscillateur harmonique à une dimension. Nous devons d'abord calculer la valeur moyenne du hamiltonien H pour la fonction d'onde $\{\varphi_\sigma(x)\}$ avant de la minimiser par rapport au paramètre σ qui caractérise la taille caractéristique des fonctions d'essai $\varphi_\sigma(x)$.

$$E(\sigma) = \langle \varphi_\sigma | H | \varphi_\sigma \rangle = E_c(\sigma) + E_p(\sigma). \quad (\text{V.70})$$

On trouve :

$$E_c(\eta) = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{+\infty} \left| \frac{d\varphi_\sigma}{dx} \right|^2 dx = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{4\sigma^2} = \frac{3U_0}{2a^2\eta^2}, \quad (\text{V.71})$$

$$E_p(\eta) = \int_0^{+\infty} U_+(x)|\psi|^2 dx = -U_0 \left[e^{\eta^2} (1 + 2\eta^2) \operatorname{erfc}(\eta) - \frac{2\eta}{\sqrt{\pi}} \right], \quad (\text{V.72})$$

en posant $\eta = \alpha\sigma/\sqrt{2}$ et où $\operatorname{erfc}(z)$ est la fonction complémentaire de la fonction erreur⁴ : $\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z)$. La minimisation de l'énergie totale est obtenue pour $\eta = \eta_0$ dépendant uniquement du paramètre a .

$$\left. \frac{dE}{d\eta} \right|_{\eta_0} = 0, \Leftrightarrow \frac{3}{8a\eta_0^3} + e^{\eta_0^2} \operatorname{erfc}(\eta_0) (3\eta_0 + 2\eta_0^3) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (1 + \eta_0^2). \quad (\text{V.73})$$

En résolvant cette équation pour une valeur de a donnée, on trouve la valeur η_0 qui donne l'énergie minimale $E(\eta_0)$. Sur la figure V.12, on compare l'erreur relative $\Delta = |E_{\text{exact}} - E(\eta_0)|/|E_{\text{exact}}|$ pour l'énergie de l'état fondamental en fonction du seul paramètre a (triangles rouges). La faible précision pour une petite profondeur du piège (a proche de zéro) est due à la forme inappropriée de la fonction d'onde qui reproduit mal l'étirement de la fonction d'onde dans la limite d'un potentiel peu profond. On peut le confirmer en utilisant une autre famille de fonctions d'onde moins localisées pour la minimisation de l'énergie fondamentale : $\bar{\varphi}_\sigma(x) = 2xe^{-x/\sigma}/\sigma^{3/2}$. Les énergies cinétique et potentielle s'écrivent pour cette famille :

$$E_c(\sigma) = \frac{\hbar^2}{2m\sigma^2} \quad \text{et} \quad E_p(\sigma) = \frac{-8U_0}{(2 + \sigma\alpha)^3} \Rightarrow E(\eta) = U_0 \left(\frac{1}{a^2\bar{\eta}^2} - \frac{1}{(1 + \bar{\eta})^3} \right), \quad (\text{V.74})$$

où $\bar{\eta} = \alpha\sigma/2$. On détermine l'énergie minimale pour un certain η_0 et pour une valeur du paramètre a donné tel que :

$$\left. \frac{dE}{d\bar{\eta}} \right|_{\bar{\eta}_0} = 0 \Leftrightarrow \frac{2}{a^2\bar{\eta}_0^3} = \frac{3}{(1 + \bar{\eta}_0)^4}. \quad (\text{V.75})$$

Pour ce cas là aussi, on trouve une valeur $\bar{\eta}_0$ dépendant du seul paramètre a qui permet de remonter à l'énergie minimale $E(\bar{\eta}_0)$ tracée sur la figure V.12 (carrés verts). Les fonctions d'onde $\{\bar{\varphi}_\sigma(x)\}$ ont une plus grande taille à large x que celles de la famille $\{\varphi_\sigma(x)\}$ et apporte une meilleure précision pour de petites valeurs du paramètre a c'est-à-dire pour une profondeur de piège peu profonde (Fig. V.12). Par ailleurs, la méthode variationnelle permet aussi d'obtenir une approximation de la valeur critique a_c en dessous de laquelle le potentiel n'a pas d'états liés. On trouve $a_c^{\text{ansatz}} \simeq 2.5142$. Cette valeur diffère de 4.5 % de celle obtenue numériquement $a_c = 2.405$. Quand la profondeur du piège augmente (a grand), la fonction d'onde devient plus localisée et l'estimation de l'énergie fondamentale est meilleure avec la famille $\{\varphi_\sigma(x)\}$ comme l'illustre la figure V.12.

4. La fonction erreur est définie par $\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-u^2} du$.

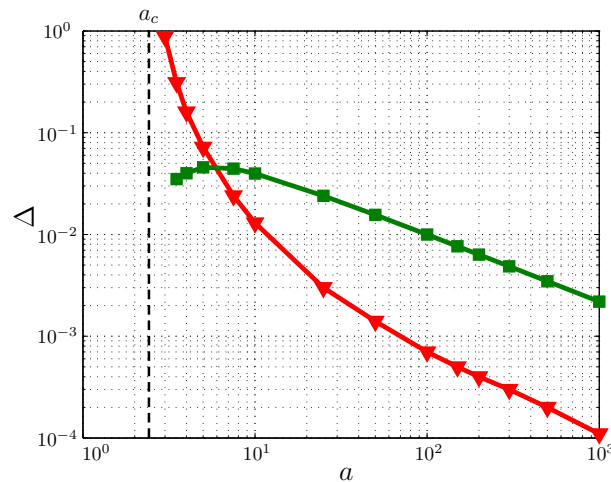


FIGURE V.12 – Erreur relative $\Delta = |E_{\text{exact}} - E(\eta_0)|/|E_{\text{exact}}|$ de l'énergie fondamentale du potentiel U_+ calculée avec l'approximation variationnelle pour deux fonctions d'onde différentes : $\{\varphi_\sigma\}$ de forme gaussienne (triangles rouges) et $\{\tilde{\varphi}_\sigma\}$ à allure exponentielle (carrés verts) en fonction du paramètre a . En dessous de la valeur critique $a_c \simeq 2.405$ représentée par la ligne pointillé, le potentiel $U_+(x)$ n'a pas d'états liés. Au niveau du croisement des deux courbes, le piège est toujours peu profond et a seulement deux états liés.

Application à $U(x)$

Pour minimiser l'énergie de l'état fondamental du potentiel $U(x)$, on utilise les fonctions d'onde de forme gaussienne :

$$\tilde{\varphi}_\sigma(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sigma^{1/2}} e^{-x^2/4\sigma^2}. \quad (\text{V.76})$$

Cette famille de fonctions d'onde est inspirée de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. Elle n'a pas de noeuds comme on l'attend pour un état fondamental d'un puits de potentiel sans singularité. On calcule l'énergie totale $E = E_c + E_p$ pour la minimiser ensuite.

$$E_c = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\psi}{dx}\right)^2 dx = \frac{\hbar^2}{8m\sigma^2}, \quad (\text{V.77})$$

$$E_p = \int_{-\infty}^{+\infty} U(x)|\psi|^2 dx = -U_0 e^{\alpha^2\sigma^2/2} \operatorname{erfc}\left(\frac{\alpha\sigma}{\sqrt{2}}\right). \quad (\text{V.78})$$

En introduisant $\eta = \alpha\sigma/\sqrt{2}$, l'énergie totale s'écrit :

$$E(\eta) = U_0 \left[\frac{1}{2a^2\eta^2} - e^{\eta^2} \operatorname{erfc}(\eta) \right]. \quad (\text{V.79})$$

et se minimise

$$\left. \frac{dE}{d\eta_0} \right|_{\eta_0} = 0 \Leftrightarrow -\frac{1}{a^2\eta_0^3} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} - 2\eta_0 e^{\eta_0^2} \operatorname{erfc}(\eta_0) = 0 \quad \text{avec} \quad \left. \frac{d^2E}{d\eta_0^2} \right|_{\eta_0} > 0. \quad (\text{V.80})$$

Ainsi, on trouve pour $a = 5$, $E(\eta_0) \simeq -0.545U_0$ qui diffère de la valeur exacte d'environ 1 %.

En étendant sur tout l'espace la famille de fonctions d'onde utilisée pour l'approximation variationnelle de $U_+(x)$, il est possible d'estimer le premier état excité du potentiel $U(x)$. Il faut pour cela que la famille choisie soit orthogonale à celle utilisée pour l'estimation du niveau fondamental de $U(x)$ et qu'elle ait la même symétrie que l'état considéré. Ainsi la famille $\{\hat{\varphi}_\sigma(x \geq 0) = \varphi_\sigma(x)$ et $\hat{\varphi}_\sigma(x \leq 0) = -\varphi_\sigma(-x)\}$ convient tout à fait puisque elle a un et un seul noeud et qu'elle est orthogonale à la famille $\{\tilde{\varphi}_\sigma\}$. Le calcul est exactement le même que celui effectué précédemment pour le potentiel $U_+(x)$ sur le demi-espace $x \geq 0$ et dont la précision est résumée dans la figure V.12. En conclusion, l'approximation de l'énergie fondamentale pour $U_+(x)$ avec la méthode variationnelle nous donne également l'estimation du premier état excité du potentiel $U(x)$, extension symétrique de $U_+(x)$.

V.6.2 Les approximations semiclassiques.

Il existe diverses approximations semiclassiques qui permettent de déterminer tout le spectre. L'approximation Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)[98, 99, 100] est la plus courante. L'approximation JWKB est une extension aux ordres supérieurs et la méthode SWKB est introduite par la supersymétrie en mécanique quantique. Dans une première sous-partie, ces trois méthodes sont explicitées et leurs prédictions sont comparées aux valeurs exactes. Dans une deuxième sous-partie, nous examinerons l'approximation semiclassique de la probabilité de transmission tunnel.

Les approximations semiclassiques WKB, JWKB et SWKB du spectre des potentiels

La forme générale de la méthode WKB prenant en compte les conditions aux limites introduites par Einstein-Brillouin-Keller [101, 98, 102] est :

$$\oint p dx = \left(n + \frac{\nu}{4}\right) h, \quad (\text{V.81})$$

où ν est l'indice de Maslov [103, 104, 105]. Celui-ci prend en compte la variation de phase pendant une période en unité de $\pi/2$. Ainsi, un mur mou (raide) donne une contribution 1 (2). Le potentiel $U_+(x)$ a une limite molle en $x \rightarrow +\infty$ mais un bord raide en $x = 0$ c'est pourquoi $\nu = 1 + 2 = 3$. Le calcul de l'action $\oint p dx$ dans l'équation (V.81) pour le potentiel $U_+(x)$ donne l'estimation du spectre à travers l'expression suivante :

$$\left(n + \frac{3}{4}\right) \frac{\pi}{a} = \sqrt{1 - y_n^2} - y_n \cos^{-1}(y_n) \equiv F(y_n), \quad (\text{V.82})$$

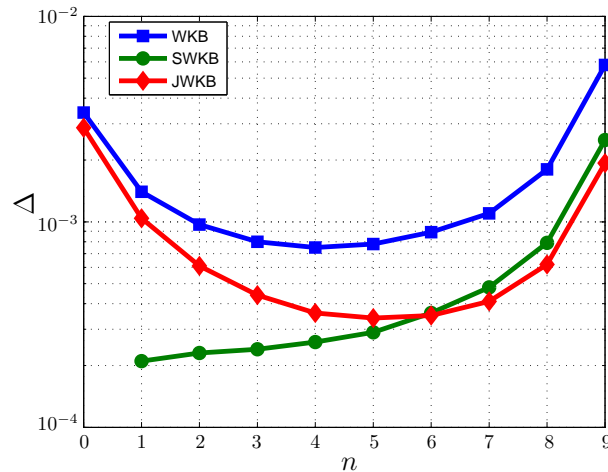


FIGURE V.13 – Comparaison des 3 méthodes d’approximations semiclassiques étudiées ici avec les valeurs exactes : WKB (bleu), SWKB (vert), JWKB (rouge). On trace $\Delta = |E_{\text{exact}} - E_{S,J,WKB}|/|E_{\text{exact}}|$ pour le spectre entier du potentiel $U_+(x)$ avec un paramètre a fixé à $a = 32$ qui induit 10 états liés. On remarque que les méthodes SWKB et JWKB sont bien meilleures que WKB. Les approximations JWKB et WKB ont cependant même allure. La précision s’accroît lorsqu’on s’éloigne du niveau fondamental, atteint une valeur minimum et réaugmente quand on se rapproche du dernier état excité et du continuum. La méthode SWKB permet une plus grande précision dans l’estimation des premiers niveaux du potentiel.

où $y_n = \exp(-\alpha x_n/2)$ et $E_n = U(x_n)$. En général, les approches semiclassiques marchent mieux pour des grands nombres quantiques n . Nous comparons sur la figure V.13 les résultats de la méthode WKB par rapport aux solutions exactes du potentiel $U_+(x)$ pour des paramètres $a = 32$ et $\alpha = 1$ pour lesquels $U_+(x)$ a 10 états liés. La méthode est de plus en plus précise jusqu’au 5^{ème} état et le devient de moins en moins lorsqu’on se rapproche du continuum. L’erreur relative maximum obtenue pour le dernier état excité vaut 0.6%.

Cette méthode WKB peut être grandement améliorée en prenant en compte les corrections d’ordres supérieurs en \hbar . Ces corrections ont été introduites par H. Jeffreys [106] (dont l’initiale est rajoutée à WKB) qui avait en 1923 développé une méthode générale d’approximation pour des équations linéaires différentielles du second ordre incluant bien entendu l’équation de Schrödinger à une dimension. La méthode JWKB combine la méthode WKB avec la méthode générale d’approximations de Jeffreys. Cela se traduit par plusieurs ordres de corrections en \hbar explicités dans la référence [107]. Dans ce chapitre, nous exploitons la méthode JWKB pour la première correction uniquement :

$$\left(n + \frac{\nu}{4}\right) = \frac{1}{\hbar} \oint p \, dx + \delta. \quad (\text{V.83})$$

La référence [107] donne l'expression générale de δ :

$$\delta = -\frac{1}{24\pi} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial E} \left(\int_{x_1}^{x_2} \frac{U''(x)}{(E - U(x))^{1/2}} dx \right). \quad (\text{V.84})$$

Pour le potentiel $U_+(x)$, l'approximation JWKB donne :

$$\left(n + \frac{3}{4} \right) = \frac{a}{\pi} F(y_n) - \frac{1}{12\pi a \sqrt{1 - y_n}}. \quad (\text{V.85})$$

Comparé à l'approximation WKB, JWKB donne une plus grande précision pour la détermination du spectre (Fig. V.13). La même forme est cependant observée lorsqu'on regarde l'erreur relative sur tout un spectre : la précision augmente jusqu'à une certaine valeur n d'états liés puis diminue jusqu'au continuum. L'erreur maximale obtenue cette fois-ci pour l'état fondamental vaut 0.287% et cette valeur se rapproche le plus de l'erreur relative de la méthode WKB pour ce niveau (0.34%).

En combinant le formalisme de la supersymétrie avec la méthode WKB, on peut déduire l'approximation SWKB [108, 109, 110] dont on rappelle le principe pour un potentiel à bords mous comme $U(x)$ ($\nu = 2$) :

$$\begin{aligned} \oint p dx &= \left(n + \frac{1}{2} \right) h = 2 \int_{x_L}^{x_R} \sqrt{2m(E_n^- - V(x))} dx \\ &= 2 \int_{x_L}^{x_R} \sqrt{2m \left[E_n^- - W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x) \right]} dx, \end{aligned} \quad (\text{V.86})$$

où x_L et x_R sont les points tournants classiques du potentiel $U(x)$ et où $E_n^- = E_n - E_0$ sont les états propres du potentiel translaté $V(x) = U(x) - E_0$ (Les $\{E_n\}$ étant bien entendu les énergies du potentiel $U(x)$). Supposons que le superpotentiel $W(x)$ ait une action de l'ordre $O(\hbar^0)$, l'action du terme en $\hbar W'(x)$ sera de l'ordre de $O(\hbar^1)$. Il est donc possible de faire un développement en puissance de \hbar :

$$\begin{aligned} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \pi &= \int_a^b \sqrt{2m(E_n^- - W^2(x))} \sqrt{1 + \frac{\hbar W'(x)}{\sqrt{2m}(E_n^- - W^2(x))}} dx \\ &= \int_a^b \sqrt{2m(E_n^- - W^2(x))} dx + \frac{\hbar}{2} \int_a^b \frac{W'(x) dx}{\sqrt{E_n^- - W^2(x)}} + o(\hbar^2), \end{aligned}$$

où a et b sont les points tournants définis par $W^2(a) = W^2(b) = E_n^-$. L'intégrale d'ordre $O(\hbar)$ vaut :

$$\frac{\hbar}{2} \int_a^b \frac{W'(x) dx}{\sqrt{E_n^- - W^2(x)}} = \frac{\hbar}{2} \left[\arcsin \left(\frac{W(x)}{\sqrt{E_n^-}} \right) \right]_a^b = \frac{\hbar \pi}{2}, \quad (\text{V.87})$$

avec $-W(a) = W(b) = \sqrt{E_n^-}$. On obtient donc l'expression générale de l'approximation

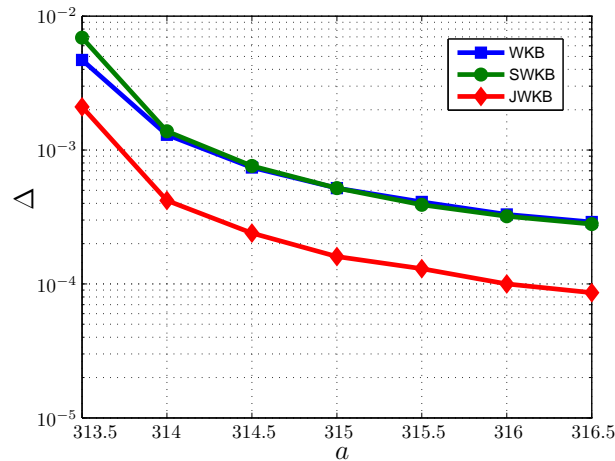


FIGURE V.14 – Comparaison des 3 méthodes d’approximations semiclassiques : WKB (bleu), SWKB (vert), JWKB (rouge) avec la valeur exacte pour l’état lié le plus proche du continuum : $\Delta = |E_{\text{exact}} - E_{S,J,WKB}|/|E_{\text{exact}}|$. Le paramètre $313.5 < a < 316.5$ correspond à un potentiel ayant 100 états liés. Plus a est proche de 313.5 plus l’état lié est proche du continuum. Dans les 3 cas, les meilleures estimations apparaissent lorsque l’état est le plus profond et la méthode JWKB apparaît clairement être la plus précise pour estimer ce dernier état lié.

SWKB :

$$\int_a^b \sqrt{2m(E_n^- - W^2(x))} dx = n\hbar\pi. \quad (\text{V.88})$$

La méthode SWKB requiert la connaissance exacte de l’état fondamental (énergie et fonction d’onde) pour calculer le superpotentiel $W(x)$ mais permet de trouver une nouvelle estimation des autres états liés de $U(x)$. De plus, elle est aussi valable pour évaluer le spectre du potentiel $U_+(x)$. La formulation SWKB est même exacte pour des potentiels de forme invariante (SIP pour Shape Invariant Potential) c’est-à-dire pour des partenaires supersymétriques V_+ et V_- ayant mêmes formes et ne différant que par leurs paramètres [109, 111]. Les potentiels $U(x)$ et $U_+(x)$ ne sont pas de formes invariantes et permettent donc de tester l’approximation SWKB. La figure V.13 montre clairement que cette dernière méthode estime mieux les états plus profonds que les états proches du continuum qui sont, quant à eux, mieux évalués par l’approximation JWKB.

Nous considérons maintenant l’état lié le plus proche du continuum pour un potentiel très profond (100 états liés). En théorie de la diffusion 3D, selon le théorème de Levinson [112], ce dernier état joue un rôle particulier pour déterminer l’ordre de grandeur et le signe de la longueur de diffusion. Pour les trois méthodes (WKB, JWKB, SWKB), plus ce dernier état est profond (i.e. loin du continuum), meilleure est l’approximation (voir figure V.14). La formulation JWKB donne systématiquement une meilleure évaluation de l’énergie du dernier état. Ce résultat est bien connu en physique moléculaire. Le résultat de JWKB pour le dernier état vibrationnel d’une molécule peut encore être amélioré en utilisant la formule de Gribakin et Flambaum [112] pour la longueur de diffusion [113, 114].

Le potentiel $U(x)$, pour sa part, a deux bords mous en $x \rightarrow \pm\infty$ donc $\nu = 1 + 1 = 2$ et la méthode WKB s'écrit :

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{2a} = \sqrt{1 - y_n^2} - y_n \cos^{-1}(y_n), \quad (\text{V.89})$$

avec $y_n = \exp(-\alpha x_n/2)$ et $U(x_n)$ est l'énergie du $n^{\text{ème}}$ état. Comme attendu les énergies avec n impairs correspondent parfaitement avec les énergies déterminées en appliquant l'approximation WKB (V.82) pour le potentiel $U_+(x)$. Ce fait illustre bien l'importance de l'indice de Maslov sans lequel les énergies impaires de $U(x)$ ne coïncideraient pas avec les énergies estimées du potentiel $U_+(x)$ comme on l'attend. D'autres tests d'approximations sont illustrés dans l'annexe B avec des potentiels de forme $|x|$. Tout comme il est important de bien choisir la fonction d'onde pour effectuer l'approximation variationnelle, le choix de la méthode semiclassique est aussi crucial. En effet, si on veut étudier les états proches du continuum on préférera JWKB tandis que si on veut étudier les premiers états, SWKB est plus appropriée lorsqu'on peut l'employer.

La référence [115] stimulée par notre publication [30] propose une amélioration instructive de l'approximation WKB. En s'inspirant des travaux de Goldstein et Thaler [116] et de Friedrich et Trost [117, 118], les auteurs réécrivent les fonctions de Bessel :

$$J_b(x) = A_b(x) \cos(\Phi_b(x)) \text{ avec } \frac{d\Phi_b}{dx} = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} [A_b(x)]^{-2}, \quad (\text{V.90})$$

et développent les solutions pour $A_b(x)$ et $\Phi_b(x)$ sous formes de séries asymptotiques en puissance de $1/x$ jusqu'à l'ordre $1/x^{10}$ (coefficients donnés dans [116]). L'approximation WKB consiste à ne retenir que le plus petit ordre pour l'expression des fonctions de Bessel. Les états liés du potentiel $U_+(x)$ et les états liés impairs du potentiel $U(x)$ sont déterminés par les zéros des fonctions de Bessel c'est-à-dire pour une phase telle que $\Phi_b(a) = (n + 1/2)\pi$. Ainsi l'approximation WKB modifiée s'écrit :

$$\frac{\pi}{a} \left(n + \frac{3}{4}\right) = \sqrt{1 - \left(\frac{m}{a}\right)^2} + \frac{m}{a} \sin^{-1} \left(\frac{m}{a}\right) - \frac{\pi b}{2a} \equiv \tilde{F}(a), \quad (\text{V.91})$$

avec $m^2 = b^2 - 1/4$. Les états liés pairs de $U(x)$, quant à eux, sont déterminés pour $J'_b(a) = 0$. L'approximation WKB modifiée pour les états liés pairs de $U(x)$ s'écrit :

$$\frac{\pi}{a} \left(n + \frac{1}{4}\right) = \tilde{F}(a) + \frac{1}{a} \tan^{-1} \left(\frac{1}{2ak^p(a)}\right), \quad (\text{V.92})$$

avec $k(x) = \sqrt{1 - m^2/x^2}$ et p un entier variant de 0 à 3, le meilleur résultat étant obtenu pour $p = 2$. Ces approximations WKB améliorées conduisent à des résultats plus précis pour des états n proches du continuum. En effet, la figure V.13 montre que pour l'approximation WKB non modifiée, l'erreur relative, pour un spectre de 10 états, croît à partir de $n = 5$ jusqu'au continuum. Contrairement à ces résultats, l'approximation WKB modifiée décroît continuellement plus on s'approche du continuum alors que les approximations sont

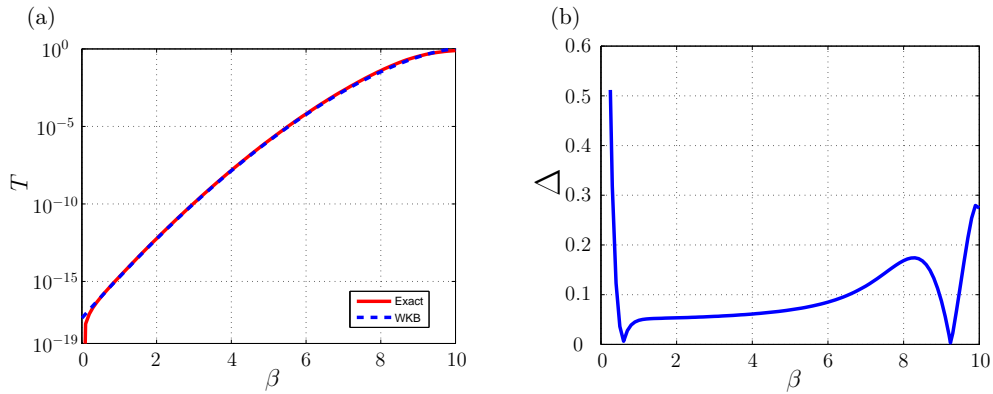


FIGURE V.15 – (a) Tracé du coefficient de transmission $T = |t|^2$ en fonction de l'énergie incidente traduite par le paramètre $\beta \equiv ib$ calculé exactement (trait plein) et avec la méthode WKB (tiret). (b) Représentation de l'erreur relative $\Delta = |T_{\text{exact}} - T_{\text{WKB}}|/|T_{\text{exact}}|$ en fonction de β . Le paramètre $\tilde{a} = 10$ et $\alpha = 1$. On ne regarde ici que l'effet tunnel ($E < U_0$) et on remarque que même si la transmission varie de 12 ordres de grandeur pour β entre 1 et 8 l'erreur relative, elle, reste toujours inférieure à 15%.

comparables pour des états proches de l'état fondamental. Le même effet est aussi observé pour le potentiel $U(x)$ quelle que soit la valeur de p . Toutefois, pour $p = 2$, l'approximation WKB modifiée est bien meilleure pour tous les états n . Ainsi la référence [115] propose une nette amélioration de l'approximation WKB et met en avant la richesse des approximations semi-classiques.

Approximation de l'effet tunnel

La méthode WKB permet également d'évaluer la probabilité de transmission. Pour l'appliquer à la barrière de potentiel $U(x)$ ($U_0 < 0$), il faut déterminer la quantité K définie par :

$$K = \frac{1}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx, \quad (\text{V.93})$$

où $x_0 > 0$ est défini comme $U(x_0) = E$. On trouve $K = 2|\tilde{a}|F(\sqrt{e})$, avec $e = E/|U_0|$. L'estimation de la transmission par la méthode WKB est donné par l'expression $T_{\text{WKB}} = e^{-2K}$ [93]. La figure V.15(a) montre la comparaison entre le résultat analytique (rouge) et l'approximation WKB (bleu) pour la transmission pour les paramètres $\tilde{a} = 10$ et $\alpha = 1$. L'erreur relative $\Delta = |T - T_{\text{WKB}}|/T$ est tracée sur la figure V.15(b). Entre $1 < b < 8 < a$, la probabilité de transmission diminue de plus de 12 ordres de grandeur tandis que l'erreur relative donnée par la formulation WKB reste en dessous de 15%!

L'approximation de l'effet tunnel peut aussi être testée grâce à l'approximation SWKB. Le formalisme est développé dans la référence [119] mais nous ne l'étudions pas dans ce manuscrit.

V.7 Conclusion

Dans ce chapitre, différents aspects de la mécanique quantique ont été approfondis. Nous nous sommes placés dans le cadre restreint d'un espace à une dimension. Ce cadre permet cependant d'étudier le cas d'un laser à atomes ou d'une onde de matière se propageant dans un guide et interagissant avec des potentiels. Nous avons explicité un cas de potentiel transparent c'est-à-dire dont la réflexion est toujours nulle quelle que soit l'énergie incidente. Ce potentiel a été comparé au potentiel gaussien pour montrer qu'il n'était pas possible en pratique de distinguer expérimentalement si la réflexion minimale était nulle ou non (i.e. si le potentiel était effectivement transparent ou non).

Un potentiel de forme exponentielle a été étudié pour servir de potentiel de départ à la méthode de la supersymétrie en mécanique quantique (SUSYQM). Cet outil très puissant permet d'obtenir toute une famille de potentiels ayant les mêmes états liés et états de diffusion. Pour utiliser cette méthode à bon escient on a besoin d'un potentiel initial dont on connaît exactement les états stationnaires et de diffusion. Cette méthode a été appliquée à deux potentiels : le premier de forme exponentielle défini sur tout l'espace et le deuxième de même forme défini sur un demi-espace. La résolution du problème sur un demi-espace à une dimension permet avantageusement de le résoudre pour un cas particulier en trois dimensions : le cas des ondes s ($l = 0$). En appliquant le formalisme de SUSYQM, nous avons créé deux potentiels, partenaires supersymétriques, résolus sur le demi-espace. Par conséquent la solution de la diffusion des ondes s est connue pour ces trois potentiels. Connaître de telles solutions exactes a permis de tester la méthode variationnelle et les approximations semiclassiques qui présentent, par ailleurs, un intérêt pédagogique majeur pour l'enseignement de la mécanique quantique. Il y a plusieurs approximations dites semi-classiques : la classique WKB, celle issue de la supersymétrie SWKB et celle comprenant des corrections d'ordre supérieurs en \hbar JWKB. Nous avons en dernier lieu testé l'approximation de l'effet tunnel avec la méthode WKB. Pour conclure, nous avons montré que l'outil souvent méconnu de la SUSYQM permet d'introduire une approximation semi-classique précise et d'avoir toute une famille de potentiels résolus analytiquement. Les résultats et développements explicités dans ce chapitre, notamment le formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique, présentent un intérêt pédagogique appréciable permettant un approfondissement des notions vues en mécanique quantique ainsi qu'en théorie de la diffusion.

Les annexes A et B sont des études qui complètent le chapitre. La première présente la généralisation de l'étude des potentiels de forme exponentielle à un cas asymétrique et l'effet de la dissymétrie sur la diffusion d'une onde plane sur ces potentiels. La deuxième annexe étudie deux autres potentiels : x et $|x|$. Pour ces potentiels, les états liés sont trouvés de manière exacte afin d'appliquer le formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique et de tester une nouvelle fois les diverses approximations développées dans le chapitre.

Conclusion

Dans ce manuscrit, nous avons présenté l'essentiel des travaux effectués pendant ma thèse sur la diffusion d'ondes de matière sur des potentiels complexes. Les quatre premiers chapitres décrivent la réalisation expérimentale d'un miroir de Bragg pour ondes de matière. En premier lieu, nous décrivons le dispositif expérimental qui permet de réaliser des condensats de Bose-Einstein. Nous détaillons la séquence expérimentale utilisée pour piéger les atomes d'abord dans la pince optique, ensuite dans le piège dipolaire croisé avant de les refroidir par évaporation jusqu'au régime de dégénérescence quantique. Le sous-état magnétique interne du condensat est sélectionné par un processus de distillation de spin qui consiste en l'application d'un gradient de champ magnétique pendant la phase d'évaporation. Nous rappelons aussi quelques aspects théoriques sur les pièges dipolaires et les condensats de Bose-Einstein. Grâce à ce dispositif, nous obtenons des condensats de Bose-Einstein avec un nombre d'atomes variant entre 3.10^4 et 1.10^5 .

Nous avons ensuite expliqué la mise en place du potentiel périodique sur le dispositif expérimental. Ce réseau optique est créé par la superposition de deux faisceaux lasers de longueur d'onde 840 nm. La calibration de la profondeur du réseau optique est effectuée par une diffraction de Raman-Nath réalisée sur le condensat en l'exposant au potentiel périodique pendant des durées courtes (de l'ordre de la dizaine de microseconde). La figure de diffraction après temps de vol permet aussi de calibrer précisément le grandissement du système d'imagerie.

Le troisième chapitre propose un rappel du comportement d'une particule dans un potentiel périodique. L'équation de Schrödinger décrivant l'évolution de la particule n'est rien d'autre que l'équation de Mathieu. Les solutions stables ou instables de cette équation correspondent aux bandes autorisées ou interdites de la structure de bande du réseau. Dans le cas de la diffusion d'une particule sur un réseau de taille finie, la particule est réfléchie quand son énergie incidente coïncide avec une bande interdite. On peut tracer le diagramme de réflexion et de transmission de la particule en fonction de la vitesse incidente de la particule et de la profondeur du réseau. Sur ce diagramme, on a remarqué qu'il y a réflexion pour certaines valeurs discrètes de vitesse à profondeur de réseau quasi-nulle. Ces valeurs discrètes satisfont la condition de Bragg. Cette condition est un effet des interférences constructives dues à l'exploration d'un grand nombre de sites. L'effet du motif du potentiel périodique a aussi été étudié en considérant un potentiel périodique à motifs carrés. On observe dans ce cas l'apparition de nouvelles réflexions dues aux demi-périodes

du réseau carré qui est une succession de puits et de potentiels nuls.

Les faisceaux lasers qui composent le réseau sont gaussiens attribuant une enveloppe gaussienne au potentiel périodique. L'enveloppe gomme presque toutes les résurgences de transmission observées lorsqu'on considérait le réseau infini. En effet, pour une vitesse incidente donnée, après une profondeur minimale du réseau où la condition de réflexion est atteinte en son centre, il y a toujours un point du potentiel périodique qui satisfait la condition de Bragg. On observe cependant quelques résurgences de transmission pour des vitesses incidentes élevées dues aux transitions Landau-Zener inter-bandes.

La réalisation d'une onde de matière à partir du condensat de Bose-Einstein est effectuée en deux étapes. Une première étape consiste à diminuer adiabatiquement la puissance du faisceau vertical qui confine le piège dipolaire longitudinalement. Après la diminution de la puissance, le faisceau est éteint et les atomes se propagent dans le guide horizontal avec une dispersion de vitesse Δv . Un gradient de champ magnétique est alors appliqué dans un deuxième temps pour donner une vitesse \bar{v} non nulle au paquet d'ondes.

Nous avons fait interagir ce paquet d'ondes de matière avec le réseau optique. Nous avons observé que, selon la profondeur du réseau, une partie ou la totalité du paquet d'ondes était réfléchi, signature de la réflexion de Bragg. Nous avons étudié l'influence de la profondeur du réseau sur les parties réfléchies et transmises. Nous avons aussi remarqué que le potentiel périodique, suivant sa profondeur, agissait comme un filtre de vitesse soit passe-haut soit passe-bande. En effet, à une profondeur telle qu'il y ait une partie réfléchi et une partie transmise, cette dernière correspond aux atomes plus rapides du paquet d'ondes. Pour une autre profondeur, on peut remarquer que ce sont des classes de vitesses disjointes de la partie réfléchi donnant lieu à un effet de filtrage de vitesse passe-bande ou coupe-bande. Ce phénomène est une conséquence de l'enveloppe du réseau. Un autre effet de l'enveloppe est de créer une cavité de deux miroirs de Bragg situés sur les deux bords de l'enveloppe et une perspective de l'équipe est de mettre en évidence cet effet de cavité en observant directement l'effet tunnel au niveau des bords de l'enveloppe dans l'espace des pseudo-impulsions.

Cette thèse constitue une première étape pour la transposition de l'optique diélectrique aux ondes de matières. Une perspective s'inscrivant dans la transposition avec l'optique diélectrique est l'étude de l'interaction de l'onde de matière avec un réseau incliné en présence d'un confinement pour amplifier la réflexion de Bragg, idée en analogie étroite avec la notion de résonances induites par confinement ou "CIR" (confinement induced resonances)⁵.

Une autre perspective envisagée est l'étude de la diffusion d'une onde de matière sur un potentiel dépendant du temps. Ce problème est équivalent au problème du transport quantique en physique mésoscopique. Une première approche envisagée sur notre dispositif est de moduler dans le temps l'amplitude du réseau sur lequel diffuse l'onde de matière pour contrôler et façonner la distribution de vitesse du paquet d'onde⁶.

5. Cette perspective sera développée dans la thèse de François Vermersch.

6. Cette perspective ainsi que l'effet de cavité seront détaillées dans la thèse de Pierrick Cheiney.

Dans le dernier chapitre, nous nous sommes intéressés à des études théoriques sur la diffusion d'onde de matière sur des potentiels de forme exponentielle. Nous avons déduit de l'équation de Schrödinger les états liés et les états de diffusion obtenus analytiquement. A partir de ces solutions, nous avons pu exploiter le formalisme de la supersymétrie appliquée à la mécanique quantique. Ce formalisme permet de créer à partir d'un potentiel dont on connaît exactement le spectre et les fonctions d'onde, toute une famille de potentiels isospectraux ayant notamment les mêmes propriétés de diffusion. Les solutions exactes obtenues permettent de tester différentes approximations utilisées en mécanique quantique. Nous avons ainsi pu montrer que le choix de la fonction d'onde d'essai dans l'approximation variationnelle est très important. Nous avons aussi comparé différentes approximations semi-classiques entre elles : la "classique" WKB, JWKB qui prend en compte un ordre supérieur et SWKB qui vient du formalisme de la supersymétrie. L'approximation SWKB apporte une meilleure approximation pour le calcul des états proches du niveau fondamental alors que l'approximation JWKB est meilleure pour les états proches du continuum. Les études reportées dans ce chapitre, notamment le formalisme de la supersymétrie appliquée à la mécanique quantique présentent un outil pédagogique supplémentaire pour l'enseignement de la mécanique quantique.

Annexe A

Généralisation à des potentiels asymétriques

A.1 Détermination des états liés

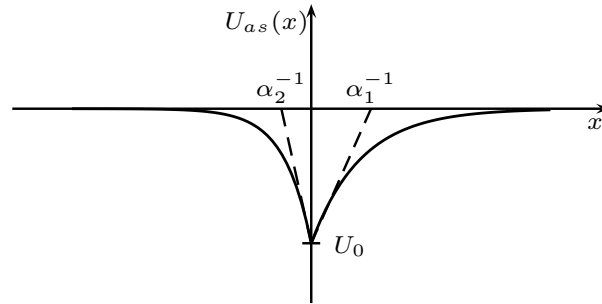


FIGURE A.1 – *Grphe du potentiel asymétrique*

On généralise le potentiel $U(x)$ étudié précédemment à un cas asymétrique (Fig.A.1). Nous considérons d'abord le cas d'un puits.

$$U_{as}(x) = \begin{cases} -U_0 e^{-\alpha_1 x} & \text{pour } x \geq 0 \\ -U_0 e^{\alpha_2 x} & \text{pour } x \leq 0 \end{cases} \quad \text{avec } U_0 > 0. \quad (\text{A.1})$$

Les fonctions d'onde gardent la même forme que pour la partie (V.3). En tenant compte de l'asymétrie du potentiel on obtient :

$$\begin{aligned} \psi(x \geq 0) &= A_{+1} J_{b_1}(a_1 e^{-\alpha_1 x/2}) + A_{-1} J_{-b_1}(a_1 e^{-\alpha_1 x/2}), \\ \psi(x \leq 0) &= A_{+2} J_{b_2}(a_2 e^{\alpha_2 x/2}) + A_{-2} J_{-b_2}(a_2 e^{\alpha_2 x/2}). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

où les $A_{\pm i}$ sont constantes d'intégration et avec $a_i = \sqrt{8mU_0/\hbar^2 \alpha_i^2}$, $b_i = \sqrt{8m(-E)/\hbar^2 \alpha_i^2}$, ($i = 1, 2$). Il existe certaines conditions pour déterminer les états liés de ces fonctions d'onde. En effet, il faut que $\psi(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ et $\psi(x)$ et $\psi'(x)$ soient continues en $x = 0$.

Exploitions tout d'abord la condition $\psi(x \rightarrow +\infty)$:

$$\psi(x \rightarrow +\infty) = A_{+1}J_{b_1}(z_1 \rightarrow 0) + A_{-1}J_{-b_1}(z_1 \rightarrow 0) \quad \text{avec} \quad z_1 = a_1 e^{-\alpha_1 x/2}. \quad (\text{A.3})$$

Or le comportement asymptotique des fonctions de Bessel donné par l'équation (V.14) dans la partie V.3 combiné à la condition aux limites $\psi(x \rightarrow +\infty) \rightarrow 0$ impose $A_{-1} = 0$. De la même manière, la condition $\psi(x \rightarrow -\infty) \rightarrow 0$ impose $A_{-2} = 0$. Donc la fonction d'onde donnée en (A.2) devient :

$$\psi(x \geq 0) = A_{+1}J_{b_1}\left(a_1 e^{-\alpha_1 x/2}\right) \quad \text{et} \quad \psi(x \leq 0) = A_{+2}J_{b_2}\left(a_2 e^{\alpha_2 x/2}\right). \quad (\text{A.4})$$

Pour déterminer les états liés, on utilise les conditions de continuité en 0 pour la fonction d'onde et sa dérivée.

$$A_{+1}J_{b_1}(a_1) = A_{+2}J_{b_2}(a_2), \quad (\text{A.5})$$

$$-\frac{\alpha_1 a_1}{2}A_{+1}J'_{b_1}(a_1) = \frac{\alpha_2 a_2}{2}A_{+2}J'_{b_2}(a_2). \quad (\text{A.6})$$

On remarque que $\alpha_1 a_1/2 = \sqrt{2mU_0}/\hbar = \alpha_2 a_2/2$. En faisant (A.5)/(A.6) puis (A.6)/(A.5), on obtient des équations déterminant les énergies des états liés.

$$\frac{(\text{A.5})}{(\text{A.6})} \Rightarrow \frac{J_{b_1}(a_1)}{J'_{b_1}(a_1)} + \frac{J_{b_2}(a_2)}{J'_{b_2}(a_2)} = 0, \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{(\text{A.6})}{(\text{A.5})} \Rightarrow \frac{J'_{b_1}(a_1)}{J_{b_1}(a_1)} + \frac{J'_{b_2}(a_2)}{J_{b_2}(a_2)} = 0. \quad (\text{A.8})$$

On retrouve bien les conditions (V.19) lorsque $\alpha_1 = \alpha_2$ ($a_1 = a_2$).

A.2 États de diffusion

A.2.1 Puits de potentiel asymétrique

On détermine les états de diffusion pour le puits de potentiel asymétrique ($U_0 > 0$). L'expression de la fonction d'onde est donnée par l'équation (A.2). Lors de la diffusion les conditions asymptotiques sont $\psi(x \rightarrow -\infty) \simeq e^{ikx} + r e^{-ikx}$ et $\psi(x \rightarrow +\infty) \simeq t e^{ikx}$ (V.21). Par ailleurs, les conditions asymptotiques des fonctions de Bessel données par l'équation (V.14) permettent d'écrire :

$$\psi(x \rightarrow +\infty) \simeq A_{+1} \left(\frac{a_1}{2}\right)^{b_1} \frac{1}{\Gamma(1+b_1)} e^{-ikx} + A_{-1} \left(\frac{a_1}{2}\right)^{-b_1} \frac{1}{\Gamma(1-b_1)} e^{ikx}, \quad (\text{A.9})$$

$$\psi(x \rightarrow -\infty) \simeq A_{+2} \left(\frac{a_2}{2}\right)^{b_2} \frac{1}{\Gamma(1+b_2)} e^{ikx} + A_{-2} \left(\frac{a_2}{2}\right)^{-b_2} \frac{1}{\Gamma(1-b_2)} e^{-ikx}. \quad (\text{A.10})$$

On en déduit que $A_{+1} = 0$. Les coefficients r et t s'écrivent $|r|^2 = |A_{-2}/A_{+2}|^2$ et $|t|^2 = |A_{-1}/A_{+2}|^2$. On écrit les conditions de continuité en zéro pour la fonction d'onde et sa

dérivée. Cela permet d'écrire le système suivant :

$$\frac{A_{-1}}{A_{+2}} J_{-b_1}(a_1) - \frac{A_{-2}}{A_{+2}} J_{-b_2}(a_2) = J_{b_2}(a_2), \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{A_{-1}}{A_{+2}} J'_{-b_1}(a_1) - \frac{A_{-2}}{A_{+2}} J'_{-b_2}(a_2) = -J'_{b_2}(a_2), \quad (\text{A.12})$$

dont les solutions donnent les coefficients $|r|^2$ et $|t|^2$:

$$|t|^2 = \left| \frac{-J'_{b_2}(a_2)J_{-b_1}(a_1) + J_{b_2}(a_2)J'_{-b_1}(a_1)}{J'_{-b_2}(a_2)J_{-b_1}(a_1) + J_{-b_2}(a_2)J'_{-b_1}(a_1)} \right|^2, \quad (\text{A.13})$$

$$|r|^2 = \left| \frac{J'_{b_2}(a_2)J_{-b_2}(a_2) + J_{b_2}(a_2)J'_{-b_2}(a_2)}{J'_{-b_2}(a_2)J_{-b_1}(a_1) + J_{-b_2}(a_2)J'_{-b_1}(a_1)} \right|^2. \quad (\text{A.14})$$

Le coefficient $|r|^2$ est tracé en fonction de l'énergie incidente et de la profondeur du potentiel pour différents paramètres α_1 et α_2 sur la figure A.2.

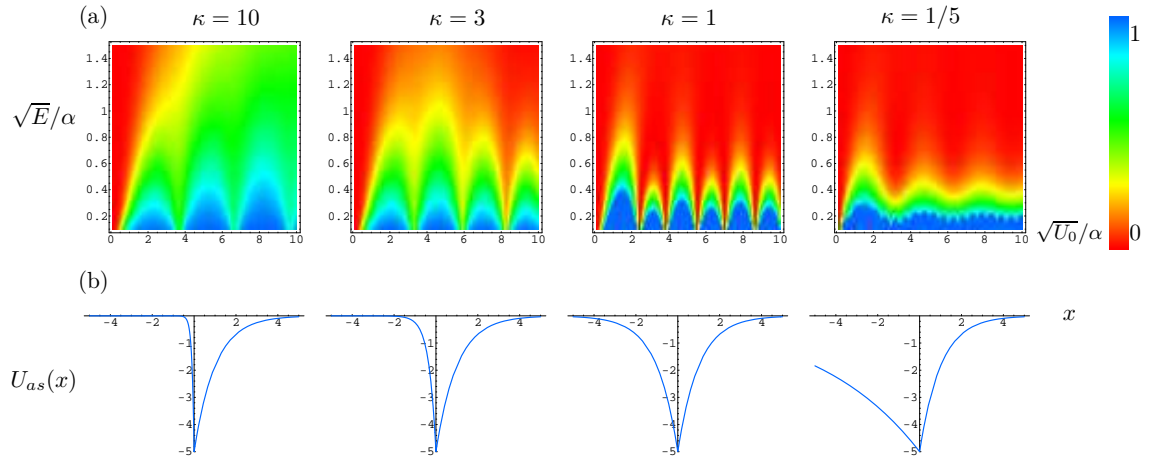


FIGURE A.2 – (a) Représentations en densité du coefficient $|r|^2$ en fonction de $\sqrt{U_0}/\alpha$ et de \sqrt{E}/α suivant différents paramètres $\alpha = \alpha_1 = \kappa\alpha_2$. (b) Formes des potentiels $U(x)$ en fonction du paramètre κ . Lorsque κ est grand, la particule n'est totalement transmise que pour un potentiel peu profond. Plus on se rapproche de $\kappa = 1$, plus il y a de résonances dans la "cavité" faite par les murs des potentiels. Lorsque $\kappa = 1/5$, la particule est réfléchi à basse énergie pour des potentiels de profondeur supérieur à un certain seuil et l'effet Fabry-Perot disparaît.

A.2.2 Barrière asymétrique

Dans cette partie, on regarde la diffusion d'une particule de masse m sur la barrière de potentiel $U_{as}(x)$ avec $U_0 < 0$. La méthode pour calculer les états de diffusion est la même qu'au paragraphe V.3. En résolvant l'équation de Schrödinger, les fonctions d'onde

s'écrivent :

$$\psi(x \leq 0) = A_{+2}I_{b_2}(a_2e^{\alpha_2x/2}) + A_{-2}I_{-b_2}(a_2e^{\alpha_2x/2}), \quad (\text{A.15})$$

$$\psi(x \leq 0) = A_{+1}I_{b_1}(a_1e^{\alpha_1x/2}) + A_{-1}I_{-b_1}(a_1e^{\alpha_1x/2}). \quad (\text{A.16})$$

Les conditions asymptotiques des fonctions d'onde donnent $A_{+1} = 0$. Et les conditions de continuité en zéro de la fonction d'onde et de sa dérivée permettent de trouver les coefficients de réflexion et de transmission à travers les coefficients A_{+2} , A_{-2} et A_{-1} :

$$|r|^2 = \left| \frac{I'_{b_2}(a_2)I_{-b_2}(a_2) + I_{b_2}(a_2)I'_{-b_2}(a_2)}{I'_{-b_2}(a_2)I_{-b_1}(a_1) + I_{-b_2}(a_2)I'_{-b_1}(a_1)} \right|^2, \quad (\text{A.17})$$

$$|t|^2 = \left| \frac{-I'_{b_2}(a_2)I_{-b_1}(a_1) + I_{b_2}(a_2)I'_{-b_1}(a_1)}{I'_{-b_2}(a_2)I_{-b_1}(a_1) + I_{-b_2}(a_2)I'_{-b_1}(a_1)} \right|^2. \quad (\text{A.18})$$

Le coefficient $|r|^2$ est tracé en fonction de l'énergie incidente pour différents paramètres α_1 et α_2 sur la figure A.3. Sur cette figure, on représente aussi la forme des potentiels correspondants.

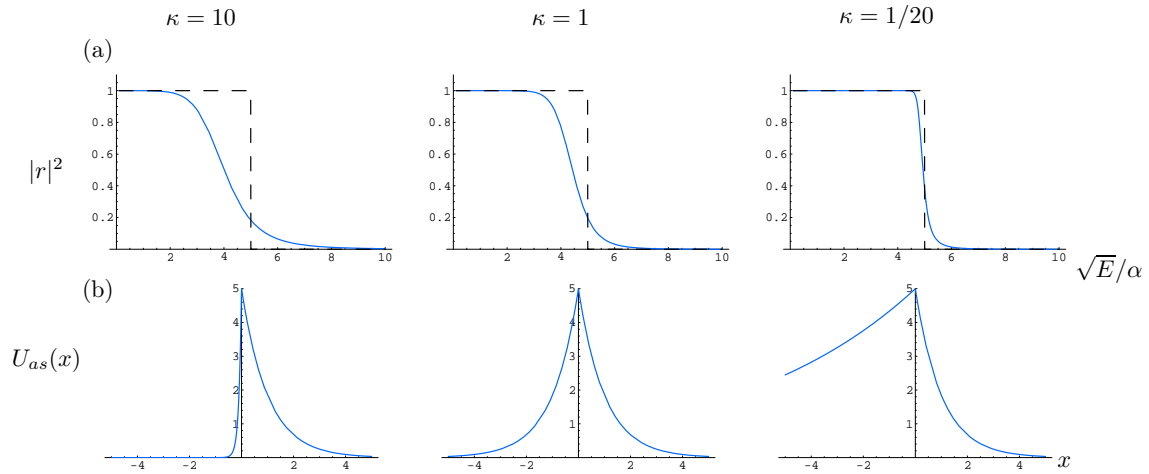


FIGURE A.3 – (a) Représentations du coefficient $|r|^2$ en fonction de \sqrt{E}/α suivant différents paramètres $\alpha = \alpha_1 = \kappa\alpha_2$. (b) Formes des potentiels $U(x)$ en fonction du paramètre κ . On remarque que pour $\kappa < 1$ le potentiel se comporte de plus en plus classiquement puisque le potentiel est plus large. Pour $\kappa = 10$, au contraire, le potentiel est très fin et l'effet tunnel est très important. On note que ces résultats sont en accord avec les résultats trouvés pour la barrière symétrique représentés sur la figure A.2.

Annexe B

Les potentiels en $|x|$ et x

Dans cette annexe, nous étudions un potentiel comportant aussi une singularité en zéro et son homologue sur le demi-espace. Nous traitons ces deux potentiels en parallèle.

B.1 Détermination des fonctions d'onde et des états liés

Les potentiels étudiés sont définis de la manière suivante :

$$\tilde{V}(x) = V_0 \frac{|x|}{\lambda} \text{ et } \tilde{V}_+(x) = \begin{cases} V_0 \frac{x}{\lambda} & \text{pour } x \geq 0 \\ +\infty & \text{pour } x < 0 \end{cases}. \quad (\text{B.1})$$

Nous résolvons l'équation stationnaire de Schrödinger V.2 pour $\tilde{V}(x)$. L'équation se réécrit :

$$\frac{d^2\psi}{d\hat{x}^2} + (e - |\hat{x}|)\psi = 0, \quad (\text{B.2})$$

où $\hat{x} = x/\lambda$ et $e = 2m\tilde{E}\lambda^2/\hbar^2$. On fixe pour plus de simplicité $2m\lambda^2V_0/\hbar^2 = 1$, on aura $e = \tilde{E}/V_0$ l'énergie adimensionnée. En posant $u = -e + |\hat{x}|$ on a :

$$\forall \hat{x}, \frac{d^2\psi}{du^2} - u\psi = 0. \quad (\text{B.3})$$

Les solutions de l'équation (B.3) sont les fonctions de Airy. Nos fonctions d'onde s'écrivent donc

$$\psi(u) = A \text{Ai}(u) + B \text{Bi}(u), \quad (\text{B.4})$$

où A et B sont deux constantes. Mais $\text{Bi}(u \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$ et les fonctions d'onde recherchées décrivent des états liés et sont donc localisées ($\psi(u \rightarrow \infty) \rightarrow 0$), par conséquent $B = 0$. On a donc $\psi(u) = A \text{Ai}(u)$. Soit en fonction de x :

$$\psi_n(x > 0) = A_+ \text{Ai}\left(-e_n + \frac{x}{\lambda}\right) \quad \text{et} \quad \psi_n(x < 0) = A_- \text{Ai}\left(-e_n - \frac{x}{\lambda}\right). \quad (\text{B.5})$$

Les fonctions d'onde $\psi_n(x > 0)$ sont les fonctions d'onde du potentiel \tilde{V}_+ .

Pour trouver les états liés du potentiel $\tilde{V}(x)$, on applique le même principe que pour le

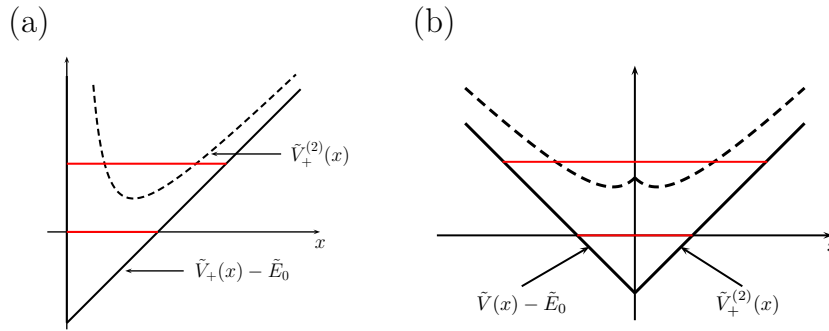


FIGURE B.1 – (a) Représentation de $\tilde{V}_+(x) - \tilde{E}_0^+$ et $\tilde{V}_+^{(2)}(x)$ pour le potentiel en x . (b) Tracé de $\tilde{V}(x) - \tilde{E}_0^-$ et $\tilde{V}^{(2)}(x)$ pour le potentiel en $|x|$. En rouge, on a aussi tracé les énergies $\tilde{E}_0^- = 0$ et $\tilde{E}_1^- = (\tilde{E}_1 - \tilde{E}_0)/V_0$ pour des paramètres constants : $2m\lambda^2V_0/\hbar^2 = 1$.

potentiel $U(x)$ (section V.3). La condition pour les fonctions d'onde impaires est : $\psi(0) = 0$ et pour les fonctions d'onde paires, les ψ' seront paires et la condition est alors $\psi'(0) = 0$. Les énergies E_n des états liés sont donc données par :

$$\begin{aligned} \text{Ai}(-e_n) &= 0 && \text{pour les } n \text{ impairs,} \\ \text{Ai}'(-e_n) &= 0 && \text{pour les } n \text{ pairs.} \end{aligned}$$

Pour le potentiel \tilde{V}_+ , les états liés e_k^+ correspondent aux états liés impairs du potentiel $\tilde{V}(x)$: $\text{Ai}(-e_k^+) = 0$. On a l'égalité : $e_k^+ = e_{2k+1}$.

B.2 Application du formalisme de la supersymétrie en mécanique quantique

Pour le potentiel $\tilde{V}(x)$, le superpotentiel s'écrit :

$$\tilde{W}(x) = -\text{sgn}(x) \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'}{\psi_0} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m\lambda}} \frac{\text{Ai}'\left(-e_0 + \frac{|x|}{\lambda}\right)}{\text{Ai}\left(-e_0 + \frac{|x|}{\lambda}\right)}. \quad (\text{B.6})$$

On en déduit le partenaire supersymétrique

$$\tilde{V}^{(2)} = 2\tilde{W}(x)^2 - \tilde{V}(x) + \tilde{E}_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left[2 \left(\frac{\text{Ai}'(u_0)}{\text{Ai}(u_0)} \right)^2 - V_0 u_0 \right] \text{ avec } u_0 = -e_0 + |x|/\lambda. \quad (\text{B.7})$$

Pour le potentiel défini sur le demi-espace $\tilde{V}_+(x)$, le superpotentiel $\tilde{W}_+(x)$ et le partenaire supersymétrique ont la même forme analytique que pour le potentiel $\tilde{V}(x)$ en remplaçant l'énergie dans les expressions (B.6) et (B.7), l'énergie e_0 par e_0^+ et en s'affranchissant des valeurs absolues puisque x est dans ce cas toujours positif. Les partenaires supersymétriques sont représentés sur la figure B.1.

B.3 Tests d'approximations

B.3.1 Approximation WKB

L'approximation semiclassique WKB déjà vue dans la partie (V.6.2) s'écrit :

$$\oint p \, dx = \left(n + \frac{\nu}{4}\right) h. \quad (\text{B.8})$$

Le potentiel $\tilde{V}(x)$ a deux bords mous en $\pm\infty$, son indice de Maslov vaut $\nu = 2$, tandis que le potentiel $\tilde{V}_+(x)$ possède un bord raide en zéro, son indice de Maslov vaut : $\nu = 3$. L'approximation WKB se traduit pour les potentiels \tilde{V} et \tilde{V}_+ par les expressions :

$$\tilde{E}_n = V_0 \left[\frac{3\pi}{4} \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^{2/3} \quad \text{et} \quad \tilde{E}_n^+ = V_0 \left[\frac{3\pi}{2} \left(n + \frac{3}{4}\right) \right]^{2/3}. \quad (\text{B.9})$$

On a ainsi accès aux spectres de \tilde{V} et \tilde{V}_+ avec la méthode WKB. Cette méthode est comparée avec le calcul exact et avec la méthode SWKB décrite ensuite dans le tableau B.1 pour le potentiel $\tilde{V}_+(x)$.

B.3.2 Méthode SWKB pour le potentiel $V_+(x)$

L'approximation SWKB s'écrit ici :

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m \left(\tilde{E}_n^+ - \tilde{E}_0^+ - \tilde{W}_+(x)^2 \right)} dx - n\pi\hbar = 0, \quad (\text{B.10})$$

où x_1 et x_2 sont tels que $\tilde{W}_+^2(x_1) = \tilde{W}_+^2(x_2) = \tilde{E}_n^-$. On résout ce système d'équations en itérant : on fixe une énergie qui nous donne les points tournants x_1 et x_2 . On résout ensuite l'équation (B.10) et on vérifie qu'elle est bien égale à zéro. Les valeurs d'énergies adimensionnées évaluées avec SWKB sont comparées dans la table B.1.

B.3.3 Méthode variationnelle

Dans cette sous-partie, beaucoup de calculs sont similaires à ceux de la partie (V.6.1) consacrée à la méthode variationnelle appliquée aux potentiels $U(x)$ et $U_+(x)$. La fonction d'onde utilisée pour faire l'approximation de l'énergie fondamentale est la fonction gaussienne inspirée de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique déjà utilisée pour estimer l'état fondamental de $U(x)$:

$$\tilde{\varphi}_\sigma(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sigma^{1/2}} e^{-x^2/4\sigma^2}. \quad (\text{B.11})$$

L'énergie cinétique de cette fonction d'onde est déjà calculée pour $U(x)$ (voir section V.6.1) et vaut $\tilde{E}_c = \hbar^2/8m\sigma^2$. Déterminons maintenant l'énergie potentielle pour le potentiel

$\tilde{V}(x)$:

$$\tilde{E}_p = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{V_0|x|}{\lambda\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2\sigma^2} dx = \frac{2V_0\sigma}{\lambda\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{B.12})$$

En posant $\hat{\sigma} = \sigma/\lambda$, l'énergie totale s'écrit :

$$\tilde{E}[\hat{\sigma}] = V_0 \left(\frac{1}{4\hat{\sigma}^2} + \hat{\sigma}\sqrt{\frac{2}{\pi}} \right). \quad (\text{B.13})$$

En minimisant cette énergie en fonction de $\hat{\sigma}$, on trouve un certain $\hat{\sigma}_0 = (\pi/8)^{1/6}$ qui, remplacé dans l'expression de l'énergie totale (B.13), donne :

$$\tilde{E}_0 = \frac{3V_0}{4} \left(\frac{8}{\pi} \right)^{1/3}. \quad (\text{B.14})$$

Les fonctions d'onde utilisées pour l'approximation variationnelle de l'état fondamental du potentiel $\tilde{V}_+(x)$ sont inspirées des fonctions d'onde du premier état excité de l'oscillateur harmonique.

$$\varphi_\sigma(x) = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/4} \frac{x}{\sigma^{3/2}} e^{-x^2/4\sigma^2}. \quad (\text{B.15})$$

De la même façon que pour la famille $\{\tilde{\varphi}_\sigma(x)\}$, l'énergie cinétique correspondant à la famille $\{\varphi_\sigma(x)\}$ est déjà calculée dans la section V.6.1 pour le potentiel $U_+(x)$: $E_c^+ = 3\hbar^2/8m\sigma^2$. L'énergie potentielle se calcule facilement en intégrant par partie. Une fois l'énergie potentielle obtenue, le minimum d'énergie est trouvé pour un paramètre $\hat{\sigma}_0 = \sigma_0/\lambda$ et l'expression de l'énergie fondamentale est :

$$\tilde{E}^+[\hat{\sigma}_0] = 3V_0\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \right)^{1/3}. \quad (\text{B.16})$$

B.3.4 Comparaison des approximations

Pour le potentiel $\tilde{V}(x)$, on compare les énergies du niveau fondamental adimensionnées pour l'approximation WKB et l'ansatz gaussien. La valeur exacte de l'énergie fondamentale est le premier zéro de la dérivée première de la fonction de Airy $e_0 = 1.018793$. L'énergie fondamentale obtenue par l'approximation WKB est $e_0^{\text{WKB}} = (3\pi/8)^{2/3} = 1.115460$ soit une incertitude relative par rapport au calcul exact d'environ 9%. Pour l'approximation variationnelle, l'énergie fondamentale vaut $e_0^{\text{ansatz}} = 1.024176$ soit une incertitude relative inférieure à 1%.

Dans la table B.1, nous comparons pour 5 états liés les différents résultats obtenus pour les calculs des énergies de $\tilde{V}_+(x)$. Les valeurs numériques sont les énergies adimensionnées $e_n = E_n/V_0$. Les énergies sont tout d'abord calculées de manière exacte en résolvant $\text{Ai}(-e_n) = 0$, ensuite en faisant l'approximation WKB où les énergies approximées sont données par l'équation (B.9), enfin en effectuant l'approximation SWKB. Les deux méthodes sont de bonnes estimations des énergies pour ces potentiels puisque l'erreur rela-

tive est toujours inférieur à 1%. L'approximation SWKB étant quand même meilleure que l'approximation WKB.

n	Exact	WKB	SWKB	Δ_{WKB}	Δ_{SWKB}
0	2.3381	2.32025	2.3381	0.76%	0%
1	4.0879	4.0818	4.0889	0.15%	0.02%
2	5.52055	5.5172	5.52142	0.061%	0.016%
3	6.7867	6.78445	6.78743	0.033%	0.01%
4	7.94413	7.9425	7.94474	0.021%	0.008%
5	9.02264	9.02137	9.02318	0.014%	0.006%

TABLE B.1 – *Tableau de comparaison des énergies calculées de manière exacte et approximative avec les méthodes WKB et SWKB pour le potentiel $\tilde{V}_+(x)$. Les erreurs relatives $\Delta_{WKB} = |e_{exact} - e_{WKB}|/e_{exact}$ et $\Delta_{SWKB} = |e_{exact} - e_{SWKB}|/e_{exact}$ sont aussi évaluées. L'énergie du niveau fondamental de l'approximation SWKB est exacte par définition.*

Annexe C

Publications

Les résultats reportés dans ce manuscrit ont donné lieu à deux publications que nous présentons dans cette annexe.

C.1 Realization of a Distributed Bragg Reflector for Propagating Guided Matter Waves

C. M. Fabre, P. Cheiney, G.L. Gattobigio, F. Vermersch, S. Faure, R. Mathevet, T. Lahaye and D. Guéry-Odelin, Realization of a distributed Bragg reflector for propagating guided matter waves, *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 230401 (2011).

Realization of a Distributed Bragg Reflector for Propagating Guided Matter Waves

C. M. Fabre, P. Cheiney, G. L. Gattobigio, F. Vermersch, S. Faure, R. Mathevet, T. Lahaye, and D. Guéry-Odelin

Université de Toulouse, UPS, Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité, IRSAMC, F-31062 Toulouse, France and CNRS, UMR 5589, F-31062 Toulouse, France

(Received 27 July 2011; published 29 November 2011)

We report on the experimental study of a Bragg reflector for guided, propagating Bose-Einstein condensates. A one-dimensional attractive optical lattice of finite length created by red-detuned laser beams selectively reflects some velocity components of the incident matter wave packet. We find quantitative agreement between the experimental data and one-dimensional numerical simulations and show that the Gaussian envelope of the optical lattice has a major influence on the properties of the reflector. In particular, it gives rise to multiple reflections of the wave packet between two symmetric locations where Bragg reflection occurs. Our results are a further step towards integrated atom-optics setups for quasi-cw matter waves.

DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.230401

PACS numbers: 03.75.Kk, 03.75.Lm

The interaction of light with structures having a periodic refractive index profile is ubiquitous in photonics. Applications range from simple antireflection coatings to the fabrication of dielectric mirrors with ultrahigh reflectivities, used for instance in high-finesse cavities, and to semiconductor laser technology with the example of vertical cavity surface-emitting lasers (VCSELs), and distributed feedback or distributed Bragg reflector lasers. In the field of guided optics, fiber Bragg gratings are essential components for the telecommunication industry, as well as for the realization of outcoupling mirrors in high-power fiber lasers. Photonic crystal devices also have a huge range of applications [1].

In matter wave optics and interferometry, interactions of free-space propagating beams or trapped clouds with periodic structures or potentials have been extensively investigated and are commonly used as mirrors and beam splitters [2–4]. In this Letter, we demonstrate, following the proposals of Refs. [5–9], a Bragg reflector for manipulating a guided Bose-Einstein condensate (BEC) propagating in an optical waveguide, i.e., the exact atom-optics counterpart of a photonic fiber Bragg grating. We study the dynamics and the transmission of a probe wave packet as a function of the depth of the optical lattice. As we will develop later on, this quasi-1D configuration clearly exemplifies two textbook features of quantum mechanics: quantum reflection [10–12] and band theory [13,14]. This Letter is organized as follows. We first present a simple model to gain some physical insight into the Bragg reflection of a matter wave packet by a finite-length lattice having a Gaussian envelope. Then we describe our experimental implementation and show quantitative agreement between the data and our model. Finally, we discuss numerical simulations that give access to unresolved details in the experiment.

We consider a BEC with given mean velocity \bar{v} and dispersion Δv propagating in a horizontal waveguide

defining the x axis. At some distance, two intersecting laser beams interfere and create an *attractive* quasiperiodic potential of finite length, with lattice spacing d (see Fig. 1).

The potential experienced by the atoms is modeled by

$$U(x) = -U_0 \exp\left(-\frac{2x^2}{w^2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi x}{d}\right), \quad (1)$$

whose depth $U_0 > 0$ is proportional to the power of the laser beams. The period d naturally introduces typical scales in velocity $v_R = h/(md)$ and energy $E_R = mv_R^2/2$.

We are interested in a wave packet with finite size and velocity dispersion impinging on a finite-length lattice. Let us consider first the textbook case of an incident plane wave and a square-envelope lattice (see, e.g., [15] for an analytical treatment of the problem). Figure 2(a) shows the transmission coefficient for a lattice of $N = 800$ sites, calculated by solving numerically the corresponding stationary Schrödinger equation. For a given velocity v , one observes that the transmission coefficient essentially

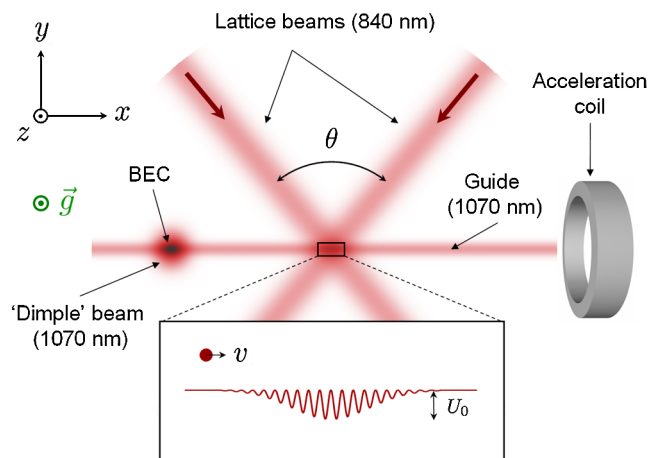


FIG. 1 (color online). Schematic view of the experimental setup (not to scale).

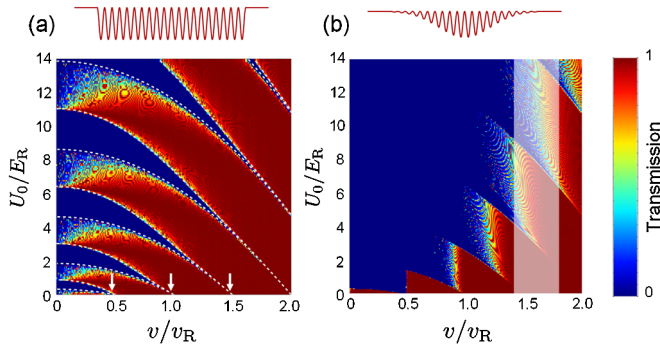


FIG. 2 (color online). Intensity transmission coefficient of the lattice for an incident plane wave of velocity v , as a function of the lattice depth U_0 . (a) Square-envelope lattice with 800 sites. The white dashed lines are obtained from the Mathieu characteristic functions; white arrows show the velocities for which the Bragg condition is fulfilled (see text). (b) Lattice with a Gaussian envelope ($1/e^2$ radius $\hat{w} \approx 230d$). The vertical shaded stripe corresponds to the relevant velocity components in the wave packet used for the measurements shown in Figs. 3 and 4. The insets on top of (a) and (b) illustrate the shape of the lattice envelope, but the number of sites is reduced to $N = 20$ for clarity.

switches between 0 and 1 as a function of the depth of the lattice U_0 . It can be interpreted as follows. At the entrance, the incoming state of energy $E_i = mv^2/2$ is projected onto the eigenstates of the lattice. The associated eigenenergies distribute into energy bands [13] whose position can be expressed in terms of the characteristic functions of the Mathieu equation [16,17] as depicted by the white dashed lines in Fig. 2(a). Reflection occurs if E_i lies in the gap between two allowed energy bands. Because of the finite length of the lattice the energy bands are not strictly continuous and resolve into N separate states for vanishing incident velocity [17]. Undersampling of the image gives rise to the “foamy” aspect of the low-velocity side of transmission bands. Obviously, the reflection by an *attractive* potential is a purely quantum effect, with no classical counterpart.

A second interesting feature appears in the limit of a vanishing potential depth U_0 . One still observes reflection but it occurs only for incident velocities of the form $v = nv_R/2$ where n is an integer [see the white arrows in Fig. 2(a)]. This corresponds to Bragg’s condition $2d \sin\Theta = n\lambda$ [14], where $\Theta = \pi/2$ for retroreflection, and $\lambda = h/(mv)$ is the incident de Broglie wavelength of the atoms: the reflection amplitude at each lattice site is small, but constructive interference between all the reflected waves results in a macroscopic reflected wave building up. For the range of parameters of Fig. 2(a), quantum reflection by a *single* lattice well occurs only for velocities that are very small as compared to v_R [17] and thus cannot explain the observed features.

Figure 2(b) shows the result of the same calculation, but now for the experimentally relevant case of a lattice having

a smooth Gaussian envelope. One clearly observes a drastic change in the dependence of the transmission coefficient: for a fixed velocity v , the transmission is essentially equal to one only *below* a critical value $U_0^{(1)}$ of the lattice depth, and then goes essentially to zero for increasing U_0 (except for very narrow resonances). That critical value corresponds to the smallest one at which total reflection would occur for the square-envelope lattice. Almost no resurgence of the transmission is observed if U_0 is further increased, which gives a “sawtooth” appearance to the boundary between reflection and transmission.

This can be understood as follows. We are in the slowly varying envelope limit as $\hat{w} \gg d$. The amplitude of the lattice does not change appreciably over a few sites, and thus one can consider that, locally, the matter wave interacts with a constant-amplitude lattice. When $U_0 = U_0^{(1)}$ the reflection condition is met at the center of the lattice, i.e., at $x = 0$. Then, for higher values of U_0 , there are some locations $\pm x_{\text{refl}}$, on both sides of the center, for which $U(\pm x_{\text{refl}}) = U_0^{(1)}$. In this case, reflection occurs at $x = -x_{\text{refl}}$. If there were not a second, identical mirror at $x = x_{\text{refl}}$, the transmission of the lattice would strictly vanish for $U_0 > U_0^{(1)}$. However, as in optics, the two local Bragg mirrors actually constitute a Fabry-Perot resonator, analog to a VCSEL cavity for example, and transmission exhibits sharp resonances which gives the same foamy aspect as in Fig. 2(a).

We now come to the experimental realization. Our technique to produce all-optical BECs has been described in detail elsewhere [18]; in what follows we thus simply recall the major steps. We produce an almost pure ^{87}Rb condensate containing typically 5×10^4 atoms by forced evaporation over 4 s in a crossed optical dipole trap. It is made of two intersecting beams with a wavelength of 1070 nm. A horizontal one, with a waist of 50 μm , to be used later as a guide for the BEC, defines the \hat{x} direction. The second, the “dimple” beam, of waist 150 μm , propagates along the diagonal in the (x, z) plane, \hat{z} being the vertical (Fig. 1). Spin distillation using a magnetic field gradient during evaporation [18] results in the BEC being prepared in the state $|F = 1, m_F = 0\rangle$. We then decrease adiabatically the power in the dimple beam by a factor ~ 20 over 80 ms, thus barely keeping a longitudinal confinement for the BEC, before switching it off abruptly to outcouple a wave packet in the horizontal guide. In this way, we produce a wave packet with a minimal intrinsic longitudinal velocity dispersion [19,20]. To set the wave packet in motion, we then switch on a coil, coaxial with the guide, that produces an inhomogeneous magnetic field. Through the quadratic Zeeman effect the wave packet is accelerated in 15 ms to a final mean velocity $\bar{v} = 11$ mm/s. The residual acceleration of the packet due to stray fields and beam curvature is negligible (we measure an upper bound of 10 mm/s²).

Centered 350 μm downstream from the dimple location x_0 , the optical lattice is produced at the intersection of two

beams with a wavelength $\lambda_L = 840$ nm (red-detuned with respect to the ^{87}Rb $D1$ and $D2$ lines) and a waist $w = 110$ μm , linearly polarized along \hat{z} , crossing at an angle $\theta \approx 81^\circ$. The lattice detuning is large enough so that spontaneous emission does not play any role in our experimental time scales. The resulting lattice spacing is $d = \lambda_L/[2 \sin(\theta/2)] \approx 650$ nm, and the envelope $1/e^2$ radius is $\tilde{w} = w/\cos(\theta/2) \approx 145$ μm . In a set of preliminary experiments we calibrate the potential depth U_0 using Kapitza-Dirac (KD) diffraction [21,22]. A BEC is created at the position of the lattice and exposed to the lattice potential for a short time τ_{KD} , typically a few tens of microseconds. The diffraction pattern of the BEC after time of flight as a function of τ_{KD} is then compared to numerical simulations of the process. A typical 35 mW per beam results in U_0 up to $15E_R$.

After being launched as described above, the wave packet propagates in the horizontal guide for an adjustable time t_{prop} . Then all the lasers are switched off abruptly and the cloud is imaged by absorption after a 10 ms time of flight. This gives access to the spatial density distribution $n(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ of the wave packet with a resolution of about 10 μm limited by the numerical aperture of our collection lens.

In a first set of experiments, the propagation time $t_{\text{prop}} = 100$ ms is sufficiently long so that the interaction with the lattice is completed. We measured in a separate experiment the mean velocity $\bar{v} \approx 11$ mm/s $\approx 1.6v_R$ and a rms velocity spread $\Delta v \approx 1.3$ mm/s $\approx 0.2v_R$ corresponding to the shaded region of Fig. 2(b). For each lattice depth U_0 , an average image is generated from eight individual runs and then integrated along the transverse direction \hat{y} . Figure 3(a) is a stack of 55 such profiles. For sake of comparison, Fig. 3(b) is the result of a numerical simulation of the

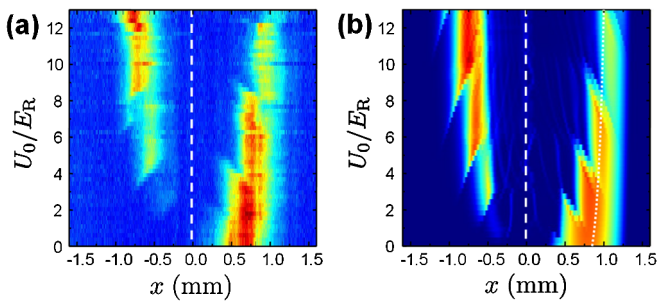


FIG. 3 (color online). (a) Measured density distribution of the wave packet (of initial mean velocity $\bar{v} = 11$ mm/s) after a propagation time $t_{\text{prop}} = 100$ ms, for different lattice depths U_0 . Each horizontal line is the average of typically eight absorption images integrated along the \hat{y} direction. The vertical white dashed line shows the position of the center of the lattice. (b) Results of the simulation without any adjustable parameters. The finite resolution of the imaging system (~ 10 μm) is included. The dotted line is the expected position of the center of the wave packet according to classical dynamics (see text).

wave packet dynamics using the one-dimensional Schrödinger equation solved by the split-Fourier method; the initial condition is a Gaussian wave packet with the experimentally measured momentum and position dispersions [19]. There is no adjustable parameter and the overall agreement with experimental data means that our simple 1D model captures most of the physics involved.

Let us concentrate first on the transmitted part of the wave packet ($x > 0$). If there were no lattice, the propagation time t_{prop} is long enough so that the initial size of the wave packet is negligible with respect to its size after propagation. The spatial distribution of the wave packet would then be a direct mapping of its initial velocity distribution $f(v)$: $n(x, t_{\text{prop}}) \propto f[(x - x_0)/t_{\text{prop}}]$.

One can then understand intuitively the main features of Fig. 3 for the scattering of a wave packet, from the transmission coefficients shown in Fig. 2(b) for a plane wave. In the background of the shaded area of Fig. 2(b) representing the wave packet one can see the transmitted and reflected components. In the presence of the lattice, the reflected part propagates backwards and is located, for the propagation time chosen here, at a symmetrical position. This explains why the transmitted and reflected wave packets appear like a complementary mirrored image of each other. The sawtoothlike boundary, reminiscent of the transmission diagram, is a fingerprint of the band structure inside the lattice. However, the effect of the lattice potential is not limited to the one of the sinusoidal component, responsible for the Bragg reflection described above. The spatially averaged attractive potential also accelerates the wave packet. The white dotted line in Fig. 3(b) shows the final position of a classical particle starting with velocity \bar{v} from position x_0 and propagating for a time t_{prop} , taking into account its acceleration by the spatially averaged lattice potential. The fair agreement with the data indicates that the slight curvature in the position of the wave packet as a function of U_0 simply arises from this classical effect.

Beyond studying the asymptotic scattering states, it is also possible to visualize the dynamics of the interaction by varying t_{prop} . Figure 4(a) displays such a time sequence that fairly compares to the numerical simulation depicted in the same conditions in Fig. 4(b). One clearly observes the spreading of the incident wave packet over the whole lattice for $30 \leq t_{\text{prop}} \leq 45$ ms and its subsequent splitting into a reflected and a transmitted one. Unfortunately, the details of the inner dynamics are washed out by the free expansion of the wave packet during the time-of-flight sequence and the finite resolution of the imaging system.

Numerical simulations, properly checked against the previous experimental results, are useful here. In Fig. 4(c) we have deliberately suppressed the time-of-flight period and enhanced the optical resolution and the contrast with respect to Fig. 4(b): one then clearly observes multiple reflections of some components of the wave packet at symmetric positions $\pm x_{\text{refl}}$, with decreasing amplitude at

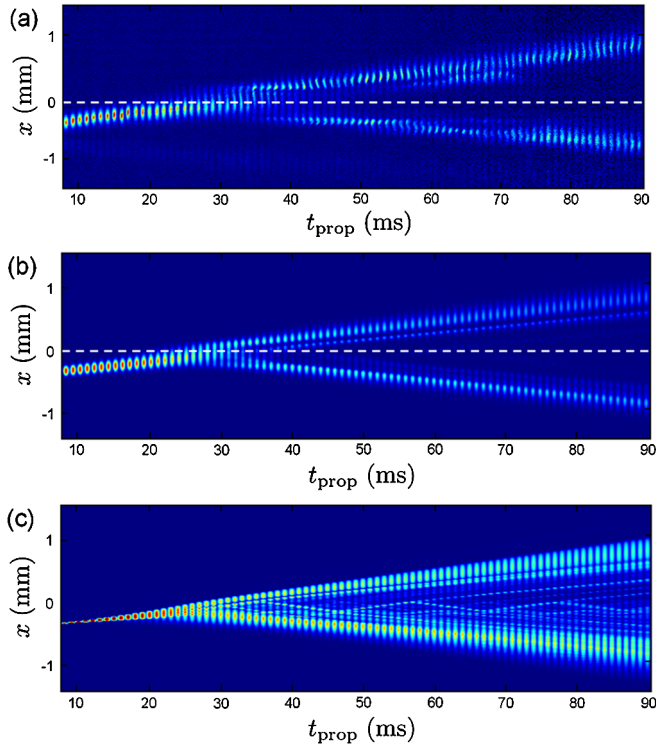


FIG. 4 (color online). Time sequence showing the scattering of a wave packet with mean velocity $\bar{v} \approx 11$ mm/s on the optical lattice for $U_0 \approx 11E_R$. The white dashed lines in (a) and (b) show the position of the center of the lattice. The time interval between successive images is 1 ms. (a) Experimental data. (b) Simulation, taking into account the finite imaging resolution as well as the time of flight (TOF) period. (c) Same as (b) but without TOF nor reduced resolution; the color scale is nonlinear in order to enhance contrast.

each bounce. This “cavity-ring-down” behavior explains the formation of structures in the transmitted and reflected wave packets as observed in Fig. 4(a) and especially visible as a parallel lower stripe in the transmitted wave packet for $50 \leq t_{\text{prop}} \leq 75$ ms. However, experimentally, observing several bounces is not possible here due to the small number of atoms involved.

In the same way, in images such as Fig. 3 the reflected wave packet appears to be relatively smooth. It is actually not the case, as can be seen in simulations with full resolution (Fig. 5). The lattice acts as a matter wave interference filter with very narrow features due to the high number of lattice sites (foamy zones of Fig. 2).

Until now we have used a simple one-dimensional description of the system. However, the system is actually far from being one dimensional, since the transverse quantum of energy $\hbar\omega_{\perp} \approx h \times 90$ Hz is much smaller than the typical longitudinal energy scales, typically by 2 orders of magnitude. Our simple one-dimensional model agrees well with the experimental results as shown above because couplings between longitudinal and transverse degrees of freedom are weak (they are due only to experimental

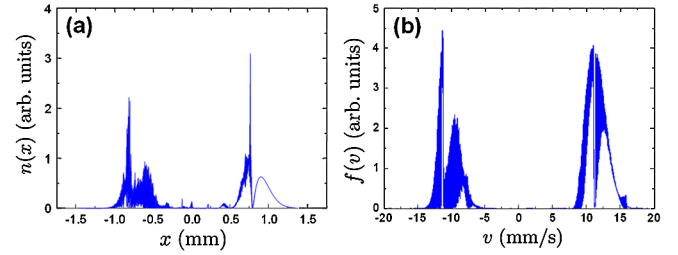


FIG. 5 (color online). (a) Calculated density and (b) velocity distribution of a wave packet of initial mean velocity $\bar{v} = 11$ mm/s after a propagation time $t_{\text{prop}} = 100$ ms with full resolution. The lattice depth is $U_0 = 8E_R$.

imperfections such as misalignments of the lattice beams with respect to the guide, for instance); some transverse excitations can nevertheless be observed on our data [see, e.g., the long wavelength dipole oscillations in Fig. 4(a), especially for $t_{\text{prop}} \geq 30$ ms]. Stronger couplings would be expected to significantly alter the scattering properties of the structure [23,24].

In conclusion, we have studied in detail the scattering of a guided matter wave by a finite-length optical lattice in the slowly varying envelope limit. The experiments can be interpreted in the framework of a local band structure, and the whole lattice can be seen as a cavity based on Bragg mirrors.

Major improvements are expected with the use of high numerical aperture optics [25,26]. Drastically reducing the length \tilde{w} of the lattice and thus generating a structure consisting of only a few sites, possibly with a shaped envelope, one could tailor almost arbitrarily the matter wave filter response. The latter can also be altered using a moving optical lattice [27,28]. The transmission band of the filter could then be adjusted at will. Such setups would prove useful in measuring, for instance, the coherence length [29] of guided atom lasers [30–32]. In a different direction, it would be appealing to study the effect of interatomic interactions [33] on the propagation of the wave packet, with the possible appearance of soliton trains [34] or atom-blockade effects [35]. This regime could be reached by using much higher transverse frequencies for the guide, in order to enhance the effects of nonlinearities.

We thank I. Carusotto for useful discussions, and acknowledge support from Agence Nationale de la Recherche (GALOP project), Région Midi-Pyrénées, and Institut Universitaire de France.

-
- [1] B.E.A. Saleh and M.C. Teich, *Fundamentals of Photonics* (Wiley InterScience, New York, 2007).
 - [2] A.D. Cronin, J. Schmiedmayer, and D.E. Pritchard, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 1051 (2009).
 - [3] D.E. Pritchard *et al.*, *Ann. Phys. (Leipzig)* **10**, 35 (2001).
 - [4] S.L. Rolston and W.D. Phillips, *Nature (London)* **416**, 219 (2002).

- [5] L. Santos and L. Roso, *J. Phys. B* **30**, 5169 (1997).
- [6] L. Santos and L. Roso, *Phys. Rev. A* **58**, 2407 (1998).
- [7] N. Friedman, R. Ozeri, and N. Davidson, *J. Opt. Soc. Am. B* **15**, 1749 (1998).
- [8] I. Carusotto, M. Artoni, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. A* **62**, 063606 (2000).
- [9] T. Lauber *et al.*, *J. Phys. B* **44**, 065301 (2011).
- [10] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics* (Wiley, New York, 1977).
- [11] F. Shimizu, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 987 (2001).
- [12] T. A. Pasquini *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 223201 (2004).
- [13] C. Kittel, *Introduction to Solid-State Physics* (Wiley, New York, 1953).
- [14] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders, Philadelphia, PA, 1976).
- [15] D. W. L. Sprung, H. Wu, and J. Martorell, *Am. J. Phys.* **61**, 1118 (1993).
- [16] N. W. McLachlan, *Theory and Application of Mathieu Functions* (Oxford University Press, Oxford, 1947).
- [17] See Supplemental Material at <http://link.aps.org/supplemental/10.1103/PhysRevLett.107.230401> for more details.
- [18] A. Couvert *et al.*, *Europhys. Lett.* **83**, 50001 (2008).
- [19] Nonlinearities due to atom-atom interactions are negligible for the dilute wave packets studied here, and thus are not accounted for in the simulation (the chemical potential of the BEC when it reaches the lattice is on the order of $0.1E_R$, and thus negligible as compared to any longitudinal energy scale). The only effect of interactions is to set (in addition to the quantum pressure) the velocity dispersion of the wave packet in the initial stages of the expansion in the guide, by conversion of the interaction energy of the BEC into kinetic energy. For more details, see [20].
- [20] F. Vermersch *et al.*, *Phys. Rev. A* **84**, 043618 (2011).
- [21] B. Gadway *et al.*, *Opt. Express* **17**, 19173 (2009).
- [22] J. H. Huckans *et al.*, *Phys. Rev. A* **80**, 043609 (2009).
- [23] G. L. Gattobigio, A. Couvert, B. Georgeot, and D. Guéry-Odelin, *New J. Phys.* **12**, 085013 (2010).
- [24] G. L. Gattobigio, A. Couvert, B. Georgeot, and D. Guéry-Odelin, [arXiv:1105.1971](https://arxiv.org/abs/1105.1971).
- [25] Y. R. P. Sortais *et al.*, *Phys. Rev. A* **75**, 013406 (2007).
- [26] K. Henderson *et al.*, *New J. Phys.* **11**, 043030 (2009).
- [27] L. Fallani *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 240405 (2003).
- [28] B. Eiermann *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 060402 (2003).
- [29] M. Köhl, T. W. Hänsch, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 160404 (2001).
- [30] W. Guérin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 200402 (2006).
- [31] J. Billy *et al.*, *Ann. Phys. (Paris)* **32**, 17 (2007).
- [32] A. Bernard *et al.*, *New J. Phys.* **13**, 065015 (2011).
- [33] O. Morsch and M. K. Oberthaler, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 179 (2006).
- [34] I. Carusotto, D. Embriaco, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. A* **65**, 053611 (2002).
- [35] I. Carusotto, *Phys. Rev. A* **63**, 023610 (2001).

C.2 A class of exactly solvable models to illustrate supersymmetry and test approximation methods in quantum mechanics

C. M. Fabre and D. Guéry-Odelin, A class of exactly solvable models to illustrate supersymmetry and test approximation methods in quantum mechanics, *Am. J. Phys.*, **79**, 755-761 (2011).

A class of exactly solvable models to illustrate supersymmetry and test approximation methods in quantum mechanics

C. M. Fabre and D. Guéry-Odelin^{a)}

Laboratoire de Collisions Agrégats Réactivité, CNRS UMR 5589, IRSAMC, Université Paul Sabatier, 118 Route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex 4, France

(Received 15 December 2010; accepted 23 February 2011)

We obtain analytical expressions for the eigenvalues and eigenstates of a family of exponential-type potential wells. The supersymmetry formalism applied to quantum mechanics is summarized and illustrated by producing from this family of potentials another class of exact solutions made of their isospectral partners. A subset of the supersymmetric partners provides a class of exactly solvable double well potentials. The exact solutions of these potentials are used to test the robustness and accuracy of different approximation methods. We determine the ground state through a variational method applied to a set of trial functions and the entire spectrum using the WKB, JWKB, and its supersymmetric extension formulas. We comment on the importance of the Maslov index and on the range of validity of these semiclassical quantization approaches. © 2011 American Association of Physics Teachers.

[DOI: 10.1119/1.3567002]

I. INTRODUCTION

Analytically solvable models in quantum mechanics are of much interest because they allow the abstract theoretical framework to be illustrated by concrete examples. For instance, the square well potential is convenient for introducing the notion of reflection and transmission coefficients for the scattering states with a minimum of calculations, yielding some astonishing results such as the total quantum reflection of a low incident energy particle interacting with a potential well. Besides the square potential, there are not many scattering one-dimensional potentials that are discussed in quantum mechanics textbooks. Reference 1 gives the interesting example of the step potential $U(x)=U_0/(1+e^{\alpha x})$, for which one has to deal with subtle asymptotic conditions at infinity to solve the scattering problem.

Interestingly, once an analytical solution is known, supersymmetry techniques applied to quantum mechanics provide a whole family of analytical solutions having closely related properties. Analytically solvable models provide a way for comparing approximate methods to exact solutions and can be used to model more complex situations.

In this article, we first investigate a family of one-dimensional exponential-type potential wells. In contrast to square well potentials, these potentials are characterized by two parameters—the depth of the potential U_0 and the typical length of variation α^{-1} of the potential (see Fig. 1). We solve the scattering problem analytically and determine the bound states. This family of potentials provides an interesting example of the role of parity symmetry and the importance of boundary conditions on the existence and the number of bound states.

The second part of the article is devoted to the use of the supersymmetry formalism for exponential potential wells^{2,3} and a new class of exactly solvable double well potentials.

The third part explores the robustness and accuracy of approximation methods in quantum mechanics. We compare the exact energy of the ground state for exponential potentials with approximate results based on variational calculations. We give examples of the importance of the appropriate set of trial functions to obtain an accurate estimate of the ground state along with the limitations of this method. The

exact bound spectrum of the potential wells is also compared with the predictions of different semiclassical quantization formulas. We recover general conclusions on the relative range of validity of these different approaches.

II. EXPONENTIAL POTENTIALS

We first solve for the eigenstates for potentials $U_I(x)$ defined for $x>0$ with a sharp wall at $x=0$ and then for even potentials $U_{II}(x)$ defined on the entire real axis with only soft walls. We have

$$U_I(x) = \begin{cases} -U_0 e^{-\alpha x} & (x > 0) \\ \infty & (x < 0) \end{cases} \quad (1)$$

and

$$U_{II} = -U_0 e^{-\alpha|x|}, \quad (2)$$

with $\alpha>0$. We set $U_0>0$ because we are considering potential wells.⁵ The potentials $U_I(x)$ and $U_{II}(x)$ are represented in Fig. 1.

The determination of the motion of a particle of mass m that experiences $U_I(x)$ or $U_{II}(x)$ requires the knowledge of the stationary states, which are solutions of the time-independent Schrödinger equation. If we introduce the dimensionless variable $X=\alpha x$ and the dimensionless parameters $a=[8mU_0/(\hbar^2\alpha^2)]^{1/2}$ and $b=[8m(-E)/(\hbar^2\alpha^2)]^{1/2}$, we can express the time-independent Schrödinger equation in the form

$$\frac{d^2\psi}{dX^2} + \frac{1}{4}[a^2 e^{-X} - b^2]\psi(X) = 0. \quad (3)$$

By making the change of variable $y=ae^{-X/2}$, Eq. (3) takes the form of the second-order differential equation satisfied by the Bessel functions,

$$y^2 \frac{d^2\psi}{dy^2} + y \frac{d\psi}{dy} + [y^2 - b^2]\psi(y) = 0. \quad (4)$$

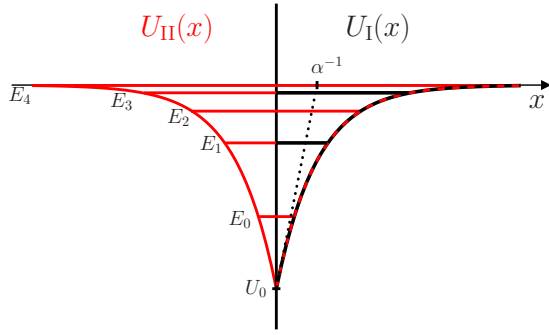


Fig. 1. (Color online) Potentials $U_{II}(x)$ and $U_I(x)$ of depth U_0 and characteristic length α^{-1} . $U_{II}(x)$ is plotted with five bound states ($a=8.48$) with energies $E_4 > E_3 > E_2 > E_1 > E_0$, and $U_I(x)$ is represented for the same parameters. This latter potential accommodates only two bound states with energies E_3 and E_1 .

A. The bound energies and states of $U_I(x)$

The energy of the bound states of the potential well $U_I(x)$ is found for energy $E < 0$ (b is real and positive). In this case, the solution of Eq. (3) takes the form

$$\psi(X \geq 0) = A_1^+ J_b(ae^{-X/2}) + A_2^+ J_{-b}(ae^{-X/2}), \quad (5)$$

where J_b are the Bessel functions of the first kind. The spectrum is determined by the boundary conditions, $\psi(0)=0$ and $\psi(x \rightarrow \infty)=0$, and we obtain

$$A_1^+ J_b(a) + A_2^+ J_{-b}(a) = 0, \quad (6)$$

$$[A_1^+ J_b(y \rightarrow 0) + A_2^+ J_{-b}(y \rightarrow 0)] \rightarrow 0. \quad (7)$$

We have $J_\nu(y \rightarrow 0) \propto y^\nu$. Because $b > 0$, the divergence of $J_{-b}(y)$ when $y \rightarrow 0$ requires that $A_2^+ = 0$ to satisfy Eq. (7). The discrete spectrum of energy $\{E_n\}$ is therefore obtained from Eq. (6) and involves the zeros $\{b_n\}$ of the Bessel function for fixed values of U_0 and α ,

$$J_{b_n}(a) = 0. \quad (8)$$

The number of bound states is thus dictated by the value of the parameter a . The ground state energy is $E_0 = -U_0 b_0^2 / a^2$. The wave function associated with the eigenenergy E_n is

$$\psi_n(x) = \mathcal{N}_n J_{b_n}(ae^{-\alpha|x/2}), \quad (9)$$

where \mathcal{N}_n is a normalization factor. If $a < a_c \approx 2.405$, there is no value of b that satisfies Eq. (8), meaning that the potential U_I does not have a bound state. The sharp wall of the potential at $x=0$ rules out the application of the theorem, according to which there is always at least a bound state for a one-dimensional potential.^{6,7} The analysis of the bound states of $U_{II}(x)$ enables a simple interpretation of the nonexistence of a bound state for $U_I(x)$ when $a < a_c$.

B. The bound energies and states of $U_{II}(x)$

The general form of the solution of the stationary Schrödinger equation for the potential $U_{II}(x)$ is

$$\psi(X \geq 0) = A_1^+ J_b(ae^{-X/2}) + A_2^+ J_{-b}(ae^{-X/2}), \quad (10a)$$

$$\psi(X \leq 0) = A_1^- J_b(ae^{X/2}) + A_2^- J_{-b}(ae^{X/2}). \quad (10b)$$

$U_{II}(x)$ is even and thus commutes with the parity operator. As a result, the eigenfunctions have a well-defined parity. The determination of the bound states is made by searching for solutions such that $\psi(x \rightarrow \pm\infty) = 0$, which implies that $A_2^+ = A_2^- = 0$, with the extra conditions $\psi(0) = 0$ for the odd solutions and $\psi'(0) = 0$ for the even solutions. For a given value of a , the corresponding discrete spectrum is given by the zeros $\{b_n\}$ of the Bessel function for the odd eigenfunction and the zeros $\{\tilde{b}_n\}$ of its first derivative for the even solution,

$$J_{b_n}(a) = 0 \quad \text{and} \quad J'_{\tilde{b}_n}(a) = 0, \quad (11)$$

with $\tilde{b}_0 > b_0 > \tilde{b}_1 > b_1 > \dots$. The eigenstates are

$$\psi_n(x) = \mathcal{N}_n J_{b_n}(ae^{-\alpha|x/2}) \quad (12)$$

for the eigenenergies $E_n = -U_0 b_n^2 / a^2$ and

$$\tilde{\psi}_n(x) = \tilde{\mathcal{N}}_n J'_{\tilde{b}_n}(ae^{-\alpha|x/2}) \quad (13)$$

for the eigenenergies $\tilde{E}_n = -U_0 \tilde{b}_n^2 / a^2$, where $\tilde{\mathcal{N}}_n$ is another normalization factor. The subset of solutions $\{b_n\}$ coincides with the eigenenergies of $U_I(x)$ because they satisfy the same boundary conditions, $\psi(0) = 0$ and $\psi(x \rightarrow +\infty) = 0$. The extra subset $\{\tilde{b}_n\}$ results from the extra symmetry of the potential $U_{II}(x) = U_{II}(-x)$. The ground state is given by the first root \tilde{b}_0 of the even solutions, that is, $\tilde{E}_0 = -U_0 \tilde{b}_0^2 / a^2$.

In contrast to $U_I(x)$, there is always at least one bound state for the symmetric potential $U_{II}(x)$.⁶ The threshold a_c below which there is no bound state for $U_I(x)$ can now be interpreted for the extended potential $U_{II}(x)$. The threshold leads to the appearance of the first excited state of $U_{II}(x)$. The comparison between the spectra of $U_{II}(x)$ and $U_I(x)$ gives an example illustrating how boundary conditions influence the existence of at least one bound state for a one-dimensional potential.

C. Scattering states of $U_{II}(x)$

The scattering states are obtained for $E > 0$ ($b = i\beta$ is purely imaginary, $\beta > 0$) and are discussed here only for $U_{II}(x)$. An incident plane wave coming from $-\infty$ gives rise to reflected and transmitted waves. The asymptotic expansion for large $|x|$ of Eq. (10b) yields

$$\psi(x) \approx A_1^+ \left(\frac{a}{2}\right)^b \frac{e^{-ikx}}{\Gamma(1+b)} + A_2^+ \left(\frac{a}{2}\right)^{-b} \frac{e^{ikx}}{\Gamma(1-b)}, \quad (14a)$$

$$\psi(x) \approx A_1^- \left(\frac{a}{2}\right)^b \frac{e^{ikx}}{\Gamma(1+b)} + A_2^- \left(\frac{a}{2}\right)^{-b} \frac{e^{-ikx}}{\Gamma(1-b)}, \quad (14b)$$

where the Γ function is defined by $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$. We infer the reflection probability $|r|^2$ as a function of the dimensionless parameters a and b by setting $A_1^+ = 0$,

$$|r|^2 = \left| \frac{A_2^-}{A_1^-} \right|^2 = \frac{1}{4} \left| \frac{J_b(a)}{J_{-b}(a)} + \frac{J'_b(a)}{J'_{-b}(a)} \right|^2. \quad (15)$$

The result, as shown in Fig. 2, exhibits reflection for small values of β due to the fast variation of the de Broglie wavelength $\lambda_{dB}(x) = h/mv(x)$ as β approaches zero,

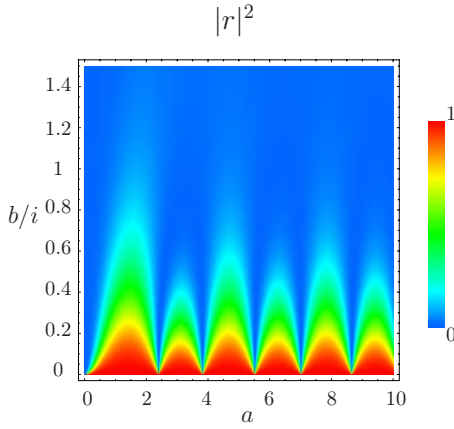


Fig. 2. (Color online) Reflection probability $|r|^2$ for the scattering states of the potential $U_{\Pi}(x)$ as a function of the dimensionless parameters a and b . The large reflection domains at low energy (low $\beta=b/i$) are a signature of quantum reflection. The periodic structure is a matter-wave Fabry-Pérot-like effect.

$$\max\left(\frac{d\lambda_{dB}}{dx}\right) = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}} \frac{1}{\beta_{\beta \rightarrow 0^+}} \rightarrow +\infty. \quad (16)$$

The reflection probability displays a periodic structure as a function of a , which is caused by a Fabry-Pérot cavity-like resonance effect of the matter wave between the walls of the potential well.

III. THE SUPERSYMMETRY FORMALISM AND ITS APPLICATION TO EXPONENTIAL POTENTIALS

Supersymmetry (SUSY) applied to one-dimensional problems in quantum mechanics allows us to construct a family of exactly solvable Hamiltonians from a given solvable problem.³ In this section, we give a brief discussion of this method and illustrate it for exponential potentials.

We consider the Hamiltonian $H=T+V(x)$, where $T=-\frac{\hbar^2}{2m}d^2/dx^2$ is the kinetic energy term and $V(x)$ is the potential energy term. The eigenvalues and eigenfunctions for the bound states satisfy $H|\psi_n\rangle=E_n|\psi_n\rangle$, with $n=0,1,2,\dots$. We introduce the potential $V_-(x)=V(x)-E_0$. The corresponding Hamiltonian $H_-=T+V_-(x)$ has the same eigenfunctions, $|\psi_n^-\rangle=|\psi_n\rangle$ as H , and its eigenenergies, $E_n^-=E_n-E_0$, are translated with respect to those of H and are therefore positive ($E_n^- \geq 0$),

$$H_-|\psi_n^-\rangle = E_n^-|\psi_n^-\rangle. \quad (17)$$

The ground state of H_- has zero energy, $H_-|\psi_0^-\rangle=0$, so that

$$V_-(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)}, \quad (18)$$

where $\psi_0''(x)$ is the second derivative of the ground state wave function, $\psi_0(x)$, with respect to the variable x . The Hamiltonian H_- can thus be recast in the form

$$H_- = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)} \right). \quad (19)$$

In this form the Hamiltonian can be factorized, that is, written as $H_- = A^+ A^-$, where we have introduced the operators

$$A^{\pm} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left(\pm \frac{d}{dx} + \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} \right). \quad (20)$$

This factorization can be viewed as a generalization of the one developed for the analysis of the one-dimensional harmonic oscillator.⁸

We introduce the superpotential²

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)}. \quad (21)$$

This potential is defined over the domain of values for which $V(x)$ remains finite. It has no divergence on this domain because the ground state wave function $\psi_0(x)$ has no nodes. The relation between the superpotential $W(x)$ and $V_-(x)$ is by definition

$$V_-(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x). \quad (22)$$

This relation suggests that we introduce another potential defined as

$$V_+(x) = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(x). \quad (23)$$

The Hamiltonian $H_+=T+V_+(x)$ can also be simply expressed in terms of the operators A^{\pm} : $H_+=A^- A^+$.

The spectra (17) of H_- and H_+ are closely related. If we use the expression for H_{\pm} in terms of the operators A^{\pm} , we can readily show that

$$H_- A^+ |\psi_n^+\rangle = E_n^+ A^+ |\psi_n^+\rangle, \quad (24a)$$

$$H_+ A^- |\psi_n^-\rangle = E_n^- A^- |\psi_n^-\rangle. \quad (24b)$$

Because $E_0^-=0$, we conclude that $A^- |\psi_n^-\rangle$ for $n \neq 0$ are eigenstates of H_+ for the eigenvalues E_n^- . We can therefore write $|\psi_m^+\rangle = A^- |\psi_n^-\rangle$, so that $E_m^+ = E_n^-$. Except for the ground state E_0^- , all the eigenenergies of H_- and H_+ coincide: $E_n^+ = E_{n+1}^-$. Starting from a given solvable potential with N_b bound states, we can thus construct by iteration a new set of N_b exactly solvable potentials having, respectively, N_b-1 , N_b-2 , \dots , 0 bound states.

Supersymmetry also permits us to relate the reflection and transmission coefficients when the two partner potentials, V_{\pm} , have continuous spectra. Let us assume for simplicity that the potentials V_{\pm} are defined over the entire real axis, and that the superpotential obeys the boundary conditions $W(x \rightarrow \pm \infty) = 0$.¹¹ It follows that $V_{\pm}(x \rightarrow \pm \infty) = 0$. We consider an incident plane wave e^{ikx} of energy $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ coming from $x \rightarrow -\infty$. The scattering states that account for the reflected and transmitted waves are

$$\psi^{\pm}(k, x \rightarrow -\infty) \sim e^{ikx} + r^{\pm}(k) e^{-ikx}, \quad (25a)$$

$$\psi^{\pm}(k, x \rightarrow +\infty) \sim t^{\pm}(k) e^{ikx}. \quad (25b)$$

If we use Eqs. (24) and (25), we find $r_+(k) = -r_-(k)$ and $t_+(k) = t_-(k)$, which implies that the partner potentials have identical reflection and transmission probabilities [$|r_+(k)|^2 = |r_-(k)|^2$ and $|t_+(k)|^2 = |t_-(k)|^2$].

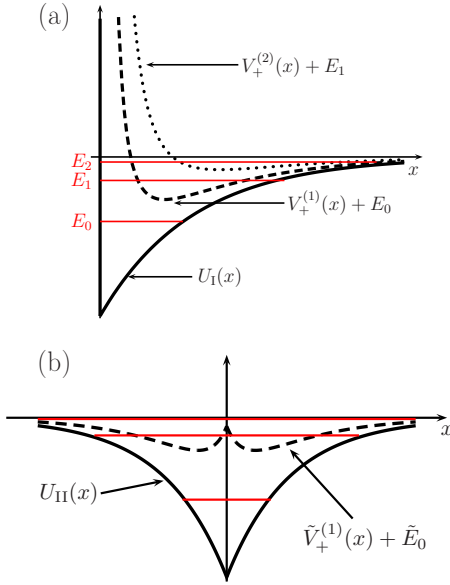


Fig. 3. (Color online) (a) The potential $U_I(x)$ with three bound states and its first two supersymmetric partners $V_+^{(1)}(x)+E_0$ and $V_+^{(2)}(x)+E_1$ ($a=11.75$). (b) $U_{II}(x)$ with three bound states and its first supersymmetric partner $\tilde{V}_+^{(1)}(x)+\tilde{E}_0$, which has a double well shape ($a=4.5$).

A. Application to $U_I(x)$

To use the formalism of supersymmetry, we introduce the potential $V_-^{(1)}(x)=U_I(x)-E_0$ and deduce from Eq. (21) the corresponding superpotential $W^{(1)}$,

$$W^{(1)}(x) = \sqrt{U_0} e^{-\alpha x/2} \frac{J'_{b_0}(ae^{-\alpha x/2})}{J_{b_0}(ae^{-\alpha x/2})}, \quad (26)$$

and the potential $V_+^{(1)}(x)=2[W^{(1)}(x)]^2+E_0-U_I(x)$. $V_+^{(1)}(x)$ is a smooth potential that behaves as $\sim x^{-2}$ as $x \rightarrow 0$ and decays as $\exp(-\alpha x)$ for $\alpha x \gg 1$ [see Fig. 3(a)].¹² Similarly, we introduce $V_-^{(2)}(x)=V_+^{(1)}(x)-(E_1-E_0)=2[W^{(1)}(x)]^2-U_I(x)+2E_0-E_1$, whose ground state wave function is

$$\psi_0^{(2)} \propto A^- \psi_1 \propto \psi_1' - \frac{\psi_0' \psi_1}{\psi_0}, \quad (27)$$

from which we deduce the explicit form of the superpotential,

$$W^{(2)} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\psi_0(\psi_0 \psi_1'' - \psi_0'' \psi_1 - \psi_0' \psi_1') + \psi_0' \psi_0' \psi_1}{\psi_0(\psi_0 \psi_1' - \psi_0' \psi_1)}. \quad (28)$$

As before, the potential $V_+^{(2)}(x)=2[W^{(2)}(x)]^2-V_-^{(2)}(x)$ has the same spectrum as $V_-^{(2)}(x)$ except for the ground state. In Fig. 3(a), we plot $U_I(x)$ for $a=11.75$, $\alpha=1$, and show that this potential has three bound states ($N_b=3$). We have also plotted the supersymmetric partners $V_+^{(1)}(x)+E_0$, whose two bound states correspond to the first two excited states of $U_I(x)$, and $V_+^{(2)}(x)+E_1$, whose unique bound state corresponds to the second excited state of $U_I(x)$.

B. Application to $U_{II}(x)$

The supersymmetric potential associated with $U(x)$ is directly deduced from the ground state wave function $\tilde{\psi}_0(x)$,

$$W^{(1)}(x) = \text{sgn}(x) \sqrt{U_0} e^{-\alpha|x|/2} \frac{J'_{b_0}(ae^{-\alpha|x|/2})}{J_{b_0}(ae^{-\alpha|x|/2})}. \quad (29)$$

Interestingly, we can derive the entire supersymmetric family as in the previous example starting from a potential that has a singularity in its first derivative.¹³ From Eq. (21), we observe that if the potential has the differentiability class C^n (the n first derivatives exist and are continuous), the supersymmetric potential has a differentiability class C^{n+1} . If we repeat the same procedure as before, we readily derive the family of supersymmetric potential partners $\{\tilde{V}_+^{(n)}\}$ of $U(x)$ [see an example in Fig. 3(b)]. The supersymmetric partner $\tilde{V}_+^{(1)}$ has a double well shape. Supersymmetry applied to the potential $U_{II}(x)$ thus generates a family of exactly solvable double well potentials. This connection between single well and double well supersymmetric partners is discussed in Ref. 14. We note that there are not many examples of analytically solvable double well potentials. We mention, for instance, the potentials of the form $V(x)=k(|x|-a)^2$.¹⁵

The scattering reflection and transmission probabilities for the potential $\tilde{V}_+^{(1)}(x)$ are the same as those for the potential $U_{II}(x)$. In particular, Eq. (15) gives the reflection probability for any value of the parameter a .

IV. APPROXIMATION METHODS

So far, the results we have obtained are exact. In the following, we approximate the ground state energy of $U(x)$ and $U_{II}(x)$ using the variational method and check the accuracy of this method and test the accuracy of various semiclassical quantization formulas for the whole spectrum.

A. The variational method

To implement the variational method, we choose a set of trial wave functions $\{\varphi_\sigma(x)\}$. We will consider a family of trial wave functions that depend on the parameter σ . The minimum of the expectation value of the Hamiltonian $H = p^2/2m + U(x)$ for these trial functions gives an upper bound for the ground state energy. The functional form of the trial ground state has to be chosen appropriately to obtain a good approximation of the ground state energy E_0 ,

$$\min_\sigma (\langle \varphi_\sigma | H | \varphi_\sigma \rangle) \geq E_0. \quad (30)$$

1. Application to $U_I(x)$

Because $U_I(x)$ has an infinite repulsive barrier at $x=0$, the ground state wave function vanishes at $x=0$. We first choose the family of functions,

$$\varphi_\sigma(x) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{x}{\sigma^{3/2}} e^{-x^2/4\sigma^2}, \quad (31)$$

which is normalized to unity and obeys the same boundary condition $\varphi_\sigma(0)=0$ and $\varphi_\sigma(+\infty)=0$ as the ground state. This guess is inspired by the first excited wave function of the

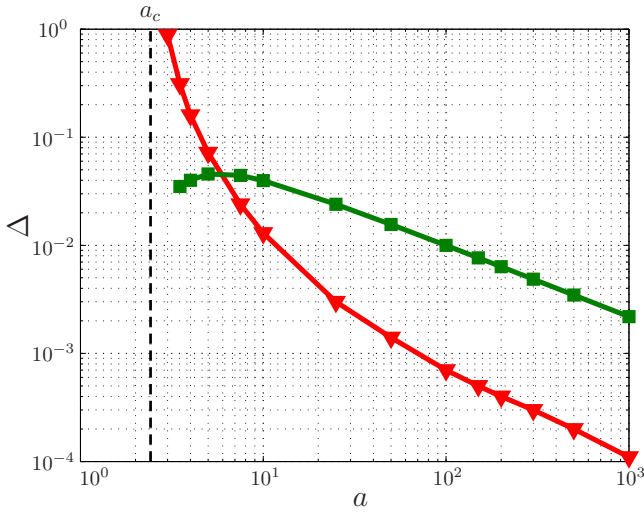


Fig. 4. (Color online) The relative error, $\Delta = |E_{\text{exact}} - E_1(\eta_0)| / |E_{\text{exact}}|$, of the estimate of the ground state energy using the Gaussian ansatz in Eq. (35) $\{\varphi_\sigma\}$ (triangles), and the exponential ansatz $\{\tilde{\varphi}_\sigma\}$ (squares) as a function of the dimensionless parameter a . For a less than the critical value $a_c \approx 2.405$, the $U_1(x)$ does not accommodate any bound states. At the crossing of the square and triangle curves, the well is still shallow and accommodates only two bound states.

one-dimensional harmonic oscillator. We now have to calculate the expectation value of H for the wave functions $\{\varphi_\sigma(x)\}$. This quantity is a function of U_0 and the dimensionless variables a and $\eta = \alpha\sigma / \sqrt{2}$,

$$E_1(\eta) = \langle \varphi_\sigma | H | \varphi_\sigma \rangle = E_c(\eta) + E_p(\eta). \quad (32)$$

We find

$$E_c(\eta) = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left| \frac{d\varphi_\sigma}{dx} \right|^2 dx = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{4\sigma^2} = \frac{3U_0}{2a^2\eta^2}, \quad (33a)$$

$$E_p(\eta) = -U_0 \left[e^{\eta^2} (1 + 2\eta^2) \text{erfc}(\eta) - \frac{2\eta}{\sqrt{\pi}} \right]. \quad (33b)$$

The minimization of the total energy is obtained for $\eta = \eta_0$, which depends only on a ,

$$\left. \frac{dE_1}{d\eta} \right|_{\eta_0} = 0 \quad \text{with} \quad \left. \frac{d^2E_1}{d\eta^2} \right|_{\eta_0} > 0. \quad (34)$$

Figure 4 compares the relative error $\Delta = |E_{\text{exact}} - E_1(\eta_0)| / |E_{\text{exact}}|$ of the estimate of the ground state energy as a function of a . The poor accuracy for small U_0 is due to the inappropriate functional form of the trial function that does not reproduce well the large extension of the wave function for small a . This interpretation can be confirmed by using the family of normalized wave functions of the form $\tilde{\varphi}_\sigma(x) = 2xe^{-x/\sigma} / \sigma^{3/2}$. These wave functions have a longer tail for large x than those of $\{\varphi_\sigma(x)\}$ and yield a better estimate for the energy for small low a , that is, for a small trap depth as illustrated in Fig. 4. The variational method allows an approximate determination of the threshold value a_c below which there is no bound states. We find $a_c^{\text{var}} \approx 2.5142$ as the lowest bound of a above which a solution of the equivalent of Eq. (34) for the family $\{\tilde{\varphi}_\sigma(x)\}$ exists. This value differs by $\approx 4.5\%$ from the exact value. If U_0 is increased, the wave function becomes more localized, and the estimate for the

ground state energy is much better with the trial wave functions of the family $\{\varphi_\sigma(x)\}$, as shown in Fig. 4.

2. Application to $U_{\text{II}}(x)$

The minimization of the Hamiltonian expectation value for the potential $U_{\text{II}}(x)$ is performed in the subspace of Gaussian trial functions,

$$\tilde{\varphi}_\sigma(x) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sigma^{1/2}} e^{-x^2/4\sigma^2}. \quad (35)$$

This family of trial functions is inspired by the ground state wave function of the one-dimensional harmonic oscillator and has no node as expected for the ground state of a potential well. We find, for example, $E(\eta_0) \approx -0.545U_0$ for $a=5$, which differs from the exact value by about 1%.

The variational method also allows for the determination of the first excited state. For this purpose, we have to choose a family that has the same symmetry as the state considered and is orthogonal to the family of states used for the determination of the ground state. The extension of the trial functions used for $U_1(x)$ to the family $\{\hat{\varphi}_\sigma(x \geq 0) = \varphi_\sigma(x)$ and $\hat{\varphi}_\sigma(x \leq 0) = -\varphi_\sigma(-x)\}$ provides a new family that is orthogonal to the family $\{\tilde{\varphi}_\sigma\}$, has one node, and is thus appropriate for the determination of the first excited state by the variational method. This calculation is exactly the one performed on the half space $x \geq 0$ for $U_1(x)$, whose accuracy is summarized for an example in Fig. 4. Thus, the search for an approximation to the ground state energy of $U_1(x)$ using the variational principle gives an estimate of the first excited state of the symmetric extension $U_{\text{II}}(x)$ of $U_1(x)$.

B. Semiclassical quantization formulas

To obtain an approximate determination of the entire spectrum, we rely on semiclassical quantization methods. The most commonly used is the Wentzel–Kramers–Brillouin (WKB) quantization condition.^{16–20} We use here the Einstein–Brillouin–Keller quantization approach, which properly takes into account the boundary conditions^{19,21,22}

$$\oint p dx = \left(n + \frac{\nu}{4} \right) h, \quad (36)$$

where ν is the Maslov index that accounts for the total phase loss during one period in units of $\pi/2$.^{23,24} A smooth wall gives a contribution to ν of 1 and a sharp wall of 2.²⁵ For $U_1(x)$, there is a sharp wall at $x=0$ and a smooth one for $x > 0$ so that $\nu = 1 + 2 = 3$. The calculation of the action $\oint p dx$ for $U_1(x)$ combined with Eq. (36) gives an implicit equation for the eigenenergies,

$$\left(n + \frac{3}{4} \right) \frac{\pi}{a} = F(y_n), \quad (37)$$

with $F(y) = \sqrt{1-y^2} - y \cos^{-1}(y)$, $y_n = \exp(-\alpha x_n/2)$, and $U(x_n) = E$. Semiclassical approaches are supposed to work better for large quantum numbers. We compare in Fig. 5 the exact energies of $U_1(x)$ with $a=32$ and $\alpha=1$ such that $U_1(x)$ accommodates ten bound states with the approximate values obtained from Eq. (37). We observe an accuracy which gets better up to the fifth level but then gets worse.

The standard WKB estimate for the energies is significantly improved by taking into account higher order correc-

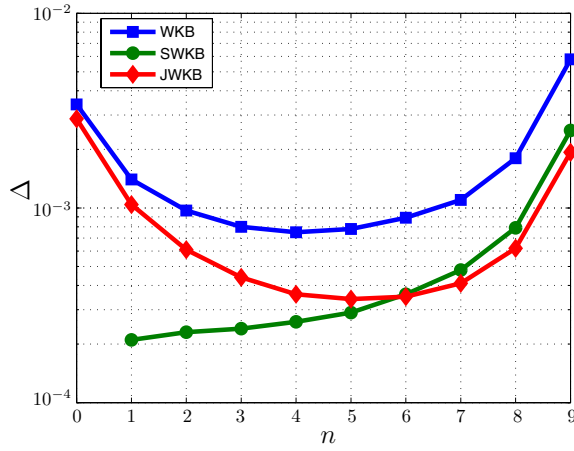


Fig. 5. (Color online) Comparison of WKB (squares), SWKB (disks), and JWKB (diamonds) predictions for the energy spectrum of $U_1(x)$ with $a = 32$ (ten bound states) with the exact results. The relative error Δ is plotted for the ten bound states as a function of a .

tions in \hbar to the standard WKB quantization condition. This approximation method is referred to as the JWKB quantization condition.²⁷ The first correction, δ , is given by

$$\left(n + \frac{\nu}{4}\right) = \frac{1}{\hbar} \oint p dx + \delta, \quad (38)$$

where

$$\delta = -\frac{1}{24\pi} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial E} \left(\int_{x_1}^{x_2} \frac{U''(x)}{[E - U(x)]^{1/2}} dx \right). \quad (39)$$

We use the explicit form of $U_1(x)$ to obtain

$$\left(n + \frac{3}{4}\right) = F(y_n) - \frac{1}{12\pi a \sqrt{1 - y_n}}. \quad (40)$$

Compared to the WKB results, we obtain an improved accuracy for the entire spectrum (see Fig. 5).

If we combine the supersymmetry formalism with the WKB method, we can work out the SWKB quantization condition.^{28–30} This semiclassical quantization formula reads as

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} (2m[E_n^- - W^2(x)])^{1/2} dx = n\hbar\pi, \quad (41)$$

where x_{\min} and x_{\max} are the turning points for the $W^2(x)$ potential defined by $E_n^- = W^2(x_{\min}) = W^2(x_{\max})$. The SWKB approach yields the exact bound state spectra for all shape invariant potentials, that is, when the pair of the SUSY partners V_+ and V_- are similar in shape and differ only in the parameters.^{31,32} The potential $U_1(x)$ is not shape invariant and, thus, provides an interesting example of the accuracy of the SWKB spectrum prediction. By construction, the SWKB approach requires knowledge of the ground state wave function and, thus, gives the exact ground state energy. As a result, it provides the best estimate for the deep energy states, as shown in Fig. 5. Among the three semiclassical approximation methods we have discussed, the JWKB expression turns out to be the most accurate for the states near the continuum. These conclusions on the relative range of validity

and accuracy of the various semiclassical quantization expressions are general.

We consider the highest bound state for a deeper potential.³⁴ For the WKB, JWKB, and SWKB approximation methods, the deeper the last bound state, the better the estimate. The JWKB method systematically gives a better account of the energy of the last state. This result is well known in molecular physics.²⁷ The JWKB quantization condition for the highest vibrational levels of a molecular potential can be further improved using the Gribakin and Flambaum formula³³ for the scattering length.^{35,36}

The WKB quantization rule for $U_{II}(x)$ yields

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{2a} = F(y_n), \quad (42)$$

where $y_n = \exp(-\alpha x_n/2)$ and $U(x_n)$ is the energy of the n th state. Because $U_{II}(x)$ has two smooth walls, $\nu = 1 + 1 = 2$. As expected, the odd values of n coincide with the energies determined by applying the WKB quantization condition to $U_I(x)$ [see Eq. (37)]. This example provides illustrates the importance of the Maslov index. An extra subset of energies is obtained that corresponds to the even values of n , including the ground state $n=0$, which has an energy lower than the ground state for $U_I(x)$ (see Fig. 1).

V. DISCUSSION

We have discussed the application of supersymmetry to the potentials $U_1(x)$ and $U_{II}(x)$, and illustrated the importance of exact solutions to test approximate methods. The same approach can be used to analyze the family of potential wells of the form $|x|$ defined either on the positive real axis as U_I or on the whole real axis as U_{II} . In addition to the pedagogical value of these examples, a discussion of supersymmetry complements the traditional teaching of quantum mechanics at the undergraduate level. It answers such basic and important questions as can two potential wells have the same spectrum and different shape? Is it possible to construct the potential shape knowing its reflection and transmission probabilities for all incident energies? Does there exist a transparent potential? It generalizes the factorization procedure of the stationary Schrödinger equation introduced for the harmonic oscillator, enlarges the class of exactly solvable potentials, and provides new approximation methods for quantization rules.

ACKNOWLEDGMENTS

It is a pleasure to thank P. Labastie, J. Vigué, and A. Comtet for fruitful discussions. The authors are grateful to R. Mathevet, T. Lahaye, I. Carusotto, O. Carraz, and P. Cheiney for useful comments. They acknowledge financial support from the Région Midi-Pyrénées, the CNRS, the Agence Nationale de la Recherche (ANR-09-BLAN-0134-01), and Institut Universitaire de France.

^{a)}Electronic mail: dgo@irsamc.ups-tlse.fr

¹L. D. Landau and L. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, 3rd ed. (Pergamon, Oxford, 1977).

²E. Witten, "Dynamical breaking of supersymmetry," *Nucl. Phys. B* **188**, 513–554 (1981).

³F. Cooper, A. Khare, and U. P. Sukhatme, *Supersymmetry in Quantum Mechanics* (World Scientific, Singapore, 2001).

- ⁴P. Biane, in *Séminaire de Probabilités XLII*, edited by C. Donati-Martin, M. Emery, A. Rouault, and C. Stricker (Springer, Berlin, Heidelberg, 2009), pp. 171–185.
- ⁵The case $\alpha < 0$ has been investigated from a mathematical point of view in Ref. 4.
- ⁶A. Messiah, *Quantum Mechanics* (Dover, New York, 2003).
- ⁷H. Ezawa, “Constructive proof of the existence of bound state in one dimension,” *Found. Phys.* **27**, 1495–1509 (1997).
- ⁸L. Infeld and T. E. Hull, “The factorization method,” *Rev. Mod. Phys.* **23**, 21–68 (1951).
- ⁹J. Goldstein, C. Lebedzik, and R. W. Robinett, “Supersymmetric quantum mechanics: Examples with Dirac δ functions,” *Am. J. Phys.* **62**, 612–618 (1994).
- ¹⁰T. Uchino and I. Tsutsui, “Supersymmetric quantum mechanics under point singularities,” *J. Phys. A* **36**, 6821–6846 (2003).
- ¹¹We can readily generalize the reasoning performed here for finite but different asymptotic limits of the superpotential $W(x \rightarrow \pm \infty) = W_{\pm} < \infty$.
- ¹²The latter potential, whose analytical solution is known, can be used for solving the three-dimensional scattering problem for the spherically symmetric potential $U_1(r)$ in the s -wave regime because the reduced radial wave function $u(r) = r\psi(r)$ obeys the standard one-dimensional Schrödinger equation.
- ¹³The SUSY literature contains another example of potential singularities that can be handled: The Dirac singularities. See Refs. 9 and 10.
- ¹⁴D. T. Barclay, R. Dutt, A. Gangopadhyaya, A. Khare, A. Pagnamenta, and U. Sukhatme, “New exactly solvable Hamiltonians: Shape invariance and self-similarity,” *Phys. Rev. A* **48**, 2786–2797 (1993).
- ¹⁵E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (Wiley, New York, 1998).
- ¹⁶For the one-dimensional harmonic potential or a Morse potential, this approximation gives a spectrum that coincides with the exact one.
- ¹⁷G. Wentzel, “Wine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die zwecke der wellenmechanik,” *Z. Phys.* **38**, 518–529 (1926).
- ¹⁸H. A. Kramers, “Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung,” *Z. Phys.* **39**, 828–840 (1926).
- ¹⁹L. Brillouin, “Remarques sur la mécanique ondulatoire,” *J. Phys. Radium* **7**, 353–368 (1926).
- ²⁰H. Jeffreys, “On certain approximate solutions of linear differential equations of the second order,” *Proc. London Math. Soc.* **23**, 428–436 (1925).
- ²¹A. Einstein, “Zum quantensatz von Sommerfeld und Epstein,” *Verh. Dtsch. Phys. Ges.* **19**, 82–92 (1917).
- ²²J. B. Keller, “Corrected Bohr-Sommerfeld quantum conditions for non-separable systems,” *Ann. Phys. (N.Y.)* **4**, 180–188 (1958).
- ²³M. V. Berry, in *Les Houches Lecture Series Session XXXV*, edited by R. Balian, M. Kléman, and J.-P. Poirier (North-Holland, Amsterdam, 1981), pp. 453–543.
- ²⁴L. J. Curtis and D. G. Ellis, “Use of the Einstein-Brillouin-Keller action quantization,” *Am. J. Phys.* **72**, 1521–1523 (2004).
- ²⁵This phase change occurs also in optics when the electromagnetic wave undergoes a mirror reflection, it depends on the characteristic length scale over which the reflection occurs compared to the wavelength (see Ref. 26).
- ²⁶S. M. Kennedy, D. M. Paganin, and D. E. Jesson, “Transition between short and long wavelength limits in quantum mechanical reflection from a linear potential,” *Am. J. Phys.* **76**, 158–162 (2008).
- ²⁷S. M. Kirschner and R. J. Le Roy, “On the application, breakdown, and near-dissociation behavior of the higher-order JWKB quantization condition,” *J. Chem. Phys.* **68**, 3139–3148 (1978).
- ²⁸A. Comtet, A. Bandrauk, and D. Campbell, “Exactness of semiclassical bound state energies for supersymmetric quantum mechanics,” *Phys. Lett. B* **150**, 159–162 (1985).
- ²⁹B. Eckhardt, “Maslov-WKB theory for supersymmetric Hamiltonians,” *Phys. Lett. B* **168**, 245–247 (1986).
- ³⁰R. Dutt, A. Khare, and U. Sukhatme, “Supersymmetry inspired WKB approximation in quantum mechanics,” *Am. J. Phys.* **59**, 723–727 (1991).
- ³¹R. Dutt, A. Khare, and U. Sukhatme, “Exactness of supersymmetric WKB spectra for shape invariant potentials,” *Phys. Lett. B* **181**, 295–298 (1986).
- ³²C. Yin, Z. Cao, and Q. Shen, “Why SWKB approximation is exact for all SIPs,” *Ann. Phys. (N.Y.)* **325**, 528–534 (2010).
- ³³G. F. Gribakin and V. V. Flambaum, “Calculation of the scattering length in atomic collisions using the semiclassical approximation,” *Phys. Rev. A* **48**, 546–553 (1993).
- ³⁴In three-dimensional quantum scattering theory, this state plays a particular role because it determines the magnitude and sign of the scattering length, a result also referred to as Levinson’s theorem (see Ref. 33).
- ³⁵C. Boisseau, E. Audouard, and J. Vigué, “Quantization of the highest levels in a molecular potential,” *Europhys. Lett.* **41**, 349–354 (1998).
- ³⁶C. Boisseau, E. Audouard, J. Vigué, and V. V. Flambaum, “Analytical correction to the WKB quantization condition for the highest levels in a molecular potential,” *Eur. Phys. J. D* **12**, 199–209 (2000).

Bibliographie

- [1] W. L. Bragg. *Proc. Calmbrigge Philos. Soc.*, 17, 43, 1912.
- [2] William Lawrence Bragg. The diffraction of X-rays by crystals. In *Nobel Lecture*, 1922.
- [3] Shih-Lin Chang. *X-ray multiple-wave diffraction : theory and application*. Springer Series in Solid-State Sciences, 2004.
- [4] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 53, 1951–1953, 1984.
- [5] Louis de Broglie. *Recherches sur la théorie des Quanta*. PhD thesis, 1924.
- [6] C. Davisson and L. H. Germer. Diffraction of electrons by a crystal of nickel. *Phys. Rev.*, 30, 705–740, 1927.
- [7] I. Estermann and O. Stern. Beugung von molekularstrahlen. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 61, 95–125, 1930. 10.1007/BF01340293.
- [8] E. Fermi and L. Marshall. Interference phenomena of slow neutrons. *Phys. Rev.*, 71, 666–677, 1947.
- [9] O. Carnal and J. Mlynek. Young’s double-slit experiment with atoms : A simple atom interferometer. *Phys. Rev. Lett.*, 66, 2689–2692, 1991.
- [10] D. W. Keith, M. L. Schattenburg, Henry I. Smith, and D. E. Pritchard. Diffraction of atoms by a transmission grating. *Phys. Rev. Lett.*, 61, 1580–1583, 1988.
- [11] V. I. Balykin, V. S. Letokhov, Yu. B. Ovchinnikov, and A. I. Sidorov. Quantum-state-selective mirror reflection of atoms by laser light. *Phys. Rev. Lett.*, 60, 2137–2140, 1988.
- [12] T. M. Roach, H. Abele, M. G. Boshier, H. L. Grossman, K. P. Zetie, and E. A. Hinds. Realization of a magnetic mirror for cold atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 75, 629–632, 1995.
- [13] M. Wilkens, E. Schumacher, and P. Meystre. Band theory of a common model of atom optics. *Phys. Rev. A*, 44, 3130–3137, 1991.

-
- [14] Ernst M. Rasel, Markus K. Oberthaler, Herman Batelaan, Jörg Schmiedmayer, and Anton Zeilinger. Atom wave interferometry with diffraction gratings of light. *Phys. Rev. Lett.*, 75, 2633–2637, 1995.
- [15] David M. Giltner, Roger W. McGowan, and Siu Au Lee. Atom interferometer based on Bragg scattering from standing light waves. *Phys. Rev. Lett.*, 75, 2638–2641, 1995.
- [16] Steven Chu. Nobel lecture : The manipulation of neutral particles. *Rev. Mod. Phys.*, 70, 685–706, 1998.
- [17] Claude N. Cohen-Tannoudji. Nobel lecture : Manipulating atoms with photons. *Rev. Mod. Phys.*, 70, 707–719, 1998.
- [18] William D. Phillips. Nobel lecture : Laser cooling and trapping of neutral atoms. *Rev. Mod. Phys.*, 70, 721–741, 1998.
- [19] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 269(5221), 198–201, 1995.
- [20] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 75, 3969–3973, 1995.
- [21] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Observation of interference between two Bose condensates. *Science*, 275(5300), 637–641, 1997.
- [22] M.-O. Mewes, M. R. Andrews, D. M. Kurn, D. S. Durfee, C. G. Townsend, and W. Ketterle. Output coupler for Bose-Einstein condensed atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 78, 582–585, 1997.
- [23] E. W. Hagley, L. Deng, M. Kozuma, J. Wen, K. Helmerson, S. L. Rolston, and W. D. Phillips. A well-collimated quasi-continuous atom laser. *Science*, 283(5408), 1706–1709, 1999.
- [24] Immanuel Bloch, Theodor W. Hänsch, and Tilman Esslinger. Atom laser with a cw output coupler. *Phys. Rev. Lett.*, 82, 3008–3011, 1999.
- [25] G L Gattobigio, A Couvert, B Georgeot, and D Guéry-Odelin. Interaction of a propagating guided matter wave with a localized potential. *New Journal of Physics*, 12(8), 085013, 2010.
- [26] G. L. Gattobigio, A. Couvert, B. Georgeot, and D. Guéry-Odelin. Exploring classically chaotic potentials with a matter wave quantum probe. *Phys. Rev. Lett.*, 107, 254104, 2011.

- [27] G. L. Gattobigio, A. Couvert, G. Reinaudi, B. Georgeot, and D. Guéry-Odelin. Optically guided beam splitter for propagating matter waves. *Phys. Rev. Lett.*, 109, 030403, 2012.
- [28] Luis Santos and Luis Roso. Multilayer “dielectric” mirror for atoms. *Phys. Rev. A*, 58, 2407–2412, 1998.
- [29] C. M. Fabre, P. Cheiney, G. L. Gattobigio, F. Vermersch, S. Faure, R. Mathevet, T. Lahaye, and D. Guéry-Odelin. Realization of a distributed Bragg reflector for propagating guided matter waves. *Phys. Rev. Lett.*, 107, 230401, 2011.
- [30] C. M. Fabre and D. Guéry-Odelin. A class of exactly solvable models to illustrate supersymmetry and test approximation methods in quantum mechanics. *Am. J. Phys.*, 79(7), 755–761, 2011.
- [31] F. Vermersch, C. M. Fabre, P. Cheiney, G. L. Gattobigio, R. Mathevet, and D. Guéry-Odelin. Guided-atom laser : Transverse mode quality and longitudinal momentum distribution. *Phys. Rev. A*, 84, 043618, 2011.
- [32] P. Cheiney, O. Carraz, D. Bartoszek-Bober, S. Faure, F. Vermersch, C. M. Fabre, G. L. Gattobigio, T. Lahaye, D. Guéry-Odelin, and R. Mathevet. A Zeeman slower design with permanent magnets in a Halbach configuration. *Review of Scientific Instruments*, 82(6), 063115, 2011.
- [33] P. Cheiney, C. M. Fabre, F. Vermersch, R. Mathevet, T. Lahaye, and D. Guéry-Odelin. Matter wave scattering on a modulated optical lattice. *soumis à Phys. Rev. Lett.*, *arXiv : . 1206.3687v1*, 2012.
- [34] Antoine Couvert. *Production et étude de lasers à atomes guidés, et de leur interaction avec des défauts contrôlés*. PhD thesis, Université Paris VI - Pierre et Marie Curie, 2009.
- [35] Steven Chu, J. E. Bjorkholm, A. Ashkin, and A. Cable. Experimental observation of optically trapped atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 57, 314–317, 1986.
- [36] Thierry Lahaye. *Refroidissement par évaporation d’un jet atomique guidé magnétiquement*. PhD thesis, Université Paris VI - Pierre et Marie Curie, 2005.
- [37] Wolfgang Ketterle, Kendall B. Davis, Michael A. Joffe, Alex Martin, and David E. Pritchard. High densities of cold atoms in a *dark* spontaneous-force optical trap. *Phys. Rev. Lett.*, 70, 2253–2256, 1993.
- [38] R. Grimm, M. Weidemüller, and Y. B. Ovchinnikov. Optical dipole traps for neutral atoms. *Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics*, 42, 95–170, 2000.
- [39] D.A. Steck. Rubidium 87 D line data. Technical report, Available online at <http://steck.us/alkalidata>, 2009.

- [40] S. J. M. Kuppens, K. L. Corwin, K. W. Miller, T. E. Chupp, and C. E. Wieman. Loading an optical dipole trap. *Phys. Rev. A*, 62, 013406, 2000.
- [41] T. Lauber, J. Küber, O. Wille, and G. Birkl. Optimized Bose-Einstein condensate production in a dipole trap based on a 1070-nm multifrequency laser : Influence of enhanced two-body loss on the evaporation process. *Phys. Rev. A*, 84, 043641, 2011.
- [42] Christian Miniatura, Leong-Chuan Kwek, Martial Ducloy, Benoît Grémaud, Berthold-Georg Englert, Leticia Cugliandolo, Artur Ekert, and Kok Khoo Phua. *Ultracold Gases and Quantum Information*. Oxford University Press, 2011.
- [43] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari. Condensate fraction and critical temperature of a trapped interacting Bose gas. *Phys. Rev. A*, 54, R4633–R4636, 1996.
- [44] S. Pilati, S. Giorgini, and N. Prokof'ev. Critical temperature of interacting Bose gases in two and three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 100, 140405, 2008.
- [45] A. Couvert, M. Jeppesen, T. Kawalec, G. Reinaudi, R. Mathevet, and D. Guéry-Odelin. A quasi-monomode guided atom laser from an all-optical Bose-Einstein condensate. *EPL (Europhysics Letters)*, 83(5), 50001, 2008.
- [46] W. Gerlach and O. Stern. über die richtungsquantelung im magnetfeld. *Annalen der Physik*, 379, 673–699, 1924.
- [47] Daniel E. Platt. A modern analysis of the Stern-Gerlach experiment. *American Journal of Physics*, 60(4), 306–308, 1992.
- [48] Giovanni Cennini, Gunnar Ritt, Carsten Geckeler, and Martin Weitz. All-optical realization of an atom laser. *Phys. Rev. Lett.*, 91, 240408, 2003.
- [49] J. Struck, C. Ölschläger, R. Le Targat, P. Soltan-Panahi, A. Eckardt, M. Lewenstein, P. Windpassinger, and K. Sengstock. Quantum simulation of frustrated classical magnetism in triangular optical lattices. *Science*, 333(6045), 996–999, 2011.
- [50] G. Grynberg, B. Lounis, P. Verkerk, J.-Y. Courtois, and C. Salomon. Quantized motion of cold cesium atoms in two- and three-dimensional optical potentials. *Phys. Rev. Lett.*, 70, 2249–2252, 1993.
- [51] Olaf Mandel, Markus Greiner, Artur Widera, Tim Rom, Theodor W. Hänsch, and Immanuel Bloch. Coherent transport of neutral atoms in spin-dependent optical lattice potentials. *Phys. Rev. Lett.*, 91, 010407, 2003.
- [52] P. Soltan-Panahi, J. Struck, P. Hauke, A. Bick, W. Plenkers, G. Meineke, C. Becker, P. Windpassinger, M. Lewenstein, and K. Sengstock. Multi-component quantum gases in spin-dependent hexagonal lattices. *Nature Physics*, 7, 434–440, 2011.

- [53] G. Roati, C. D'Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno and M. Modugno, and M. Inguscio. Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate. *Nature*, 453, 895–898, 2008.
- [54] G. Roati C. D'Errico M. Fattori M. Modugno G. Modugno B. Deissler, M. Zaccanti and M. Inguscio. Delocalization of a disordered bosonic system by repulsive interactions. *Nature Physics*, 6, 354–358, 2010.
- [55] H. Lignier, C. Sias, D. Ciampini, Y. Singh, A. Zenesini, O. Morsch, and E. Arimondo. Dynamical control of matter-wave tunneling in periodic potentials. *Phys. Rev. Lett.*, 99, 220403, 2007.
- [56] C. Mennerat-Robilliard, D. Lucas, S. Guibal, J. Tabosa, C. Jurczak, J.-Y. Courtois, and G. Grynberg. Ratchet for cold rubidium atoms : The asymmetric optical lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 82, 851–854, 1999.
- [57] Tobias Salger, Sebastian Kling, Tim Hecking, Carsten Geckeler, Luis Morales-Molina, and Martin Weitz. Directed transport of atoms in a hamiltonian quantum ratchet. *Science*, 326(5957), 1241–1243, 2009.
- [58] P. L. Kapitza and P. A. M. Dirac. The reflection of electrons from standing light waves. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 29(02), 297–300, 1933.
- [59] S. Altshuler, L. M. Frantz, and R. Braunstein. Reflection of atoms from standing light waves. *Phys. Rev. Lett.*, 17, 231–232, 1966.
- [60] Philip E. Moskowitz, Phillip L. Gould, Susan R. Atlas, and David E. Pritchard. Diffraction of an atomic beam by standing-wave radiation. *Phys. Rev. Lett.*, 51, 370–373, 1983.
- [61] Phillip L. Gould, George A. Ruff, and David E. Pritchard. Diffraction of atoms by light : The near-resonant Kapitza-Dirac effect. *Phys. Rev. Lett.*, 56, 827–830, 1986.
- [62] Peter J. Martin, Bruce G. Oldaker, Andrew H. Miklich, and David E. Pritchard. Bragg scattering of atoms from a standing light wave. *Phys. Rev. Lett.*, 60, 515–518, 1988.
- [63] G. Timp, R. E. Behringer, D. M. Tennant, J. E. Cunningham, M. Prentiss, and K. K. Berggren. Using light as a lens for submicron, neutral-atom lithography. *Phys. Rev. Lett.*, 69, 1636–1639, 1992.
- [64] C. V. Raman and N. S. N. Nath. *Proc. Indian Acad. Sci.*, 2, 406, 1936.
- [65] C. Keller, J. Schmiedmayer, A. Zeilinger, T. Nonn, S. Dürr, and G. Rempe. Adiabatic following in standing-wave diffraction of atoms. *Applied Physics B : Lasers and Optics*, 69, 303–309, 1999.

- [66] C. Salomon, J. Dalibard, A. Aspect, H. Metcalf, and C. Cohen-Tannoudji. Channeling atoms in a laser standing wave. *Phys. Rev. Lett.*, 59, 1659–1662, 1987.
- [67] V. I. Balykin, V. S. Letokhov, Yu. B. Ovchinnikov, A. I. Sidorov, and S. V. Shul’ga. Channeling of atoms in a standing spherical light wave. *Opt. Lett.*, 13(11), 958–960, 1988.
- [68] J. H. Huckans, I. B. Spielman, B. Laburthe Tolra, W. D. Phillips, and J. V. Porto. Quantum and classical dynamics of a Bose-Einstein condensate in a large-period optical lattice. *Phys. Rev. A*, 80, 043609, 2009.
- [69] Claude Cohen-Tannoudji and David Guéry-Odelin. *Advances in atomic physics - An overview*. World Scientific, 2011.
- [70] R. Delhuille, C. Champenois, M. Büchner, L. Jozefowski, C. Rizzo, G. Tréneç, and J. Vigué. High-contrast Mach-Zehnder lithium-atom interferometer in the Bragg regime. *Applied Physics B : Lasers and Optics*, 74, 489–493, 2002.
- [71] Niel W. Ashcroft and N. David Mermin. *Physique des solides*. EDP Sciences, 2002.
- [72] Maxime Ben Dahan. *Transport et relaxation d’atomes de césium : oscillations de Bloch et résonance de diffusion*. PhD thesis, Université Paris VI, 1997.
- [73] Emile Mathieu. Mémoire sur le mouvement vibratoire d’une membrane de forme elliptique. *Journal des Mathématiques Pures et Appliquées*, pages 137–203, 1868.
- [74] T. A. Pasquini, Y. Shin, C. Sanner, M. Saba, A. Schirotzek, D. E. Pritchard, and W. Ketterle. Quantum reflection from a solid surface at normal incidence. *Phys. Rev. Lett.*, 93, 223201, 2004.
- [75] Jean-Philippe Poizat, Tiejun Chang, Olivier Ripoll, and Philippe Grangier. Spatial quantum noise of laser diodes. *J. Opt. Soc. Am. B*, 15(6), 1757–1761, 1998.
- [76] T Lauber, P Massignan, G Birkl, and A Sanpera. Atomic wave packet dynamics in finite time-dependent optical lattices. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 44(6), 065301, 2011.
- [77] Bryce Gadway, Daniel Pertot, Jeremy Reeves, and Dominik Schneble. Probing an ultracold-atom crystal with matter waves. *Nature Physics*, 8, 544–549, 2012.
- [78] M. Olshanii. Atomic scattering in the presence of an external confinement and a gas of impenetrable bosons. *Phys. Rev. Lett.*, 81, 938–941, 1998.
- [79] T. Bergeman, M. G. Moore, and M. Olshanii. Atom-atom scattering under cylindrical harmonic confinement : Numerical and analytic studies of the confinement induced resonance. *Phys. Rev. Lett.*, 91, 163201, 2003.
- [80] Erwin Schrödinger. *Proc. Roy. Irish Acad.*, A46, 9, 1940.

-
- [81] Edward Witten. Dynamical breaking of supersymmetry. *Nuclear Physics B*, 188(3), 513–554, 1981.
- [82] L. Landau and E. Lifchitz. *Physique Théorique Tome 3 Mécanique Quantique*. Mir, Moscou, 1966.
- [83] F. Cooper, A.Khare, and U. Sukhatme. Supersymmetry and quantum mechanics. *Physics Reports*, 251, 267–385, 1995.
- [84] C. G. Aminoff, A. M. Steane, P. Bouyer, P. Desbiolles, J. Dalibard, and C. Cohen-Tannoudji. Cesium atoms bouncing in a stable gravitational cavity. *Phys. Rev. Lett.*, 71, 3083–3086, 1993.
- [85] C. Henkel, C. I. Westbrook, and A. Aspect. Quantum reflection : atomic matter-wave optics in an attractive exponential potential. *J. Opt. Soc. Am. B*, 13, 233–243, 1996.
- [86] M.Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, New York, 1964.
- [87] P. Ramond. Dual theory for free fermions. *Phys. Rev. D*, 3, 2415 – 2418, 1971.
- [88] Edward Witten. Constraints on supersymmetry breaking. *Nuclear Physics B*, 202(2), 253–316, 1982.
- [89] Fred Cooper and Barry Freedman. Aspects of supersymmetric quantum mechanics. *Annals of Physics*, 146(2), 262–288, 1983.
- [90] L. Infeld and T. E. Hull. The factorization method. *Rev. Mod. Phys.*, 23(1), 21–68, 1951.
- [91] J. Goldstein, C. Lebedzik, and R. W. Robinett. Supersymmetric quantum mechanics : Examples with Dirac delta functions. *American Journal of Physics*, 62(7), 612–618, 1994.
- [92] T. Uchino and I. Tsutsui. Supersymmetric quantum mechanics under point singularities. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 36(24), 6821, 2003.
- [93] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics*. John Willey and Sons, Inc., New York, 1998.
- [94] D. T. Barclay, R. Dutt, A. Gangopadhyaya, Avinash Khare, A. Pagnamenta, and U. Sukhatme. New exactly solvable hamiltonians : Shape invariance and self-similarity. *Phys. Rev. A*, 48(4), 2786–2797, 1993.
- [95] A. Messiah. *Mécanique Quantique Tome 1 et 2*.
- [96] Hiroshi Ezawa. Constructive proof of the existence of bound state in one dimension. *Foundations of Physics*, 27, 1495–1509, 1997.

- [97] Richard J. Cook and Richard K. Hill. An electromagnetic mirror for neutral atoms. *Optics Communications*, 43(4), 258–260, 1982.
- [98] L. Brillouin. Remarques sur la mécanique ondulatoire. *J. Phys. Radium*, 7, 353–368, 1926.
- [99] H. A. Kramers. Wellenmechanik und halbzahlige quantisierung. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 39, 828–840, 1926. 10.1007/BF01451751.
- [100] Gregor Wentzel. Eine verallgemeinerung der quantenbedingungen für die zwecke der wellenmechanik. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 38, 518–529, 1926. 10.1007/BF01397171.
- [101] A. Einstein. Zum quantensatz von sommerfeld und epstein. *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, 19, 82–92, 1917.
- [102] Joseph B. Keller. Corrected Bohr-Sommerfeld quantum conditions for nonseparable systems. *Annals of Physics*, 4(2), 180–188, 1958.
- [103] M. V. Berry. Singularities in waves. In M Kléman R. Balian and J-P Poirier, editors, *Les Houches Lecture Series Session XXXV*, pages 453–543, North-Holland, Amsterdam, 1981.
- [104] Lorenzo J. Curtis and David G. Ellis. Use of the Einstein-Brillouin-Keller action quantization. *Am. J. Phys*, 72(12), 1521–1523, 2004.
- [105] Bruno Eckhardt. Maslov-WKB theory for supersymmetric hamiltonians. *Physics Letters B*, 168(3), 245–247, 1986.
- [106] Harold Jeffreys. On certain approximate solutions of linear differential equations of the second order. *Proceedings of the London Mathematical Society*, s2-23(1), 428–436, 1925.
- [107] Sidney M. Kirschner and Robert J. Le Roy. On the application, breakdown, and near-dissociation behavior of the higher-order JWKB quantization condition. *The Journal of Chemical Physics*, 68(7), 3139–3148, 1978.
- [108] Ranabir Dutt, Avinash Khare, and Uday P. Sukhatme. Supersymmetry inspired WKB approximation in quantum mechanics. *Am. J. Phys*, 59(8), 723–727, 1991.
- [109] Ranabir Dutt, Avinash Khare, and Uday P. Sukhatme. Exactness of supersymmetric WKB spectra for shape-invariant potentials. *Physics Letters B*, 181(3-4), 295–298, 1986.
- [110] Alain Comtet, André D. Bandrauk, and David K. Campbell. Exactness of semiclassical bound state energies for supersymmetric quantum mechanics. *Physics Letters B*, 150(1-3), 159–162, 1985.

-
- [111] Cheng Yin, Zhuangqi Cao, and Qishun Shen. Why SWKB approximation is exact for all SIPs. *Annals of Physics*, 325(3), 528–534, 2010.
- [112] G. F. Gribakin and V. V. Flambaum. Calculation of the scattering length in atomic collisions using the semiclassical approximation. *Phys. Rev. A*, 48(1), 546–553, 1993.
- [113] C. Boisseau, E. Audouard, and J. Vigué. Quantization of the highest levels in a molecular potential. *Europhys. Lett.*, 41(4), 349–354, 1998.
- [114] C. Boisseau, E. Audouard, J. Vigué, and V.V. Flambaum. Analytical correction to the WKB quantization condition for the highest levels in a molecular potential. *Eur. Phys. J. D*, 12(2), 199–209, 2000.
- [115] Akbar Safari D.W.L. Sprung and Nicolas Sator. Comment on "exactly solvable models to illustrate supersymmetry and test approximation methods in quantum mechanics", *am. j. phys.* 79 (2011) 755-761. *American Journal of Physics*, 2012.
- [116] M. Goldstein and R. M. Thaler. Bessel functions for large argument. *Math. Comp.*, 12, 18–26, 1958.
- [117] H. Friedrich and J. Trost. Phase loss in WKB waves due to reflection by a potential. *Phys. Rev. Lett.*, 76, 4869–4873, 1996.
- [118] H. Friedrich and J. Trost. Nonintegral maslov indices. *Phys. Rev. A*, 54, 1136–1145, 1996.
- [119] T. Sil, A. Mukherjee, R. Dutt, and Y.P. Varshni. Supersymmetric WKB approach to tunneling through a one-dimensional barrier. *Physics Letters A*, 184(2), 209 – 214, 1994.