MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

Université des Sciences et de La Technologie d'Oran- Mohamed Boudiaf

Faculté des Sciences

Département de Physique

Spécialité: Physique des Plasmas et des Matériaux

Afifa YEDJOUR

Soutiendra une Thèse

pour l'Obtention du Diplôme de Doctorat en Sciences

Intitulée:

Etude de l'effet d'une perturbation extérieure dans un alliage binaire et l'effet de l'influence de la distribution sur les propriétés électroniques : Application sur les alliages binaires et ternaires

Soutenue le / devant le jury composé de

Président	M. ABDELOUAHAB Mohamed	Maitre de conférence (A)	USTO
Rapporteur	Mme HAMDACHE Fatima	Professeur	USTO
Co-rapporteur	M. VAN TIGGELEN Bart	Directeur de recherche	CNRS Grenoble
Examinateur	M. KADRI Abdrrahmane	Professeur	U. d'Oran
Examinateur	M. FERHAT Mohamed	Professeur	USTO
Examinateur	M. SENOUCI Khaled	Professeur	U. Mostaganem
Examinateur	M. AMRANI Bouhalouane	Maitre de conférence (A)	U. d'Oran

Année universitaire 2010/2011

Remerciments

Ces travaux de thèse ont été réalisés au laboratoire de physique des plasmas et des Matériaux conducteurs et leurs applications dans le groupe de sciences des matériaux et au laboratoire de physique et modélisation des milieux Condensés au CNRS de Grenoble dans le cadre d'une bourse Franco-Algérienne.

Je tiens particulièrement à remercier ma directrice de thèse le Professeur Hamdache Fatima de m'avoir accueilli dans son groupe et de m'avoir permis d'évoluer dans un cadre scientifique agréable.

Je remercie vivement mon codirecteur de thèse Bart VAN TIGGELEN Directeur de recherche au CNRS de Grenoble pour m'avoir fait confiance pendant dix huit mois et avoir su compléter ma formation.

Tout l'honneur va à mon institution et au ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique qui m'ont permis de bénéficier du programme BAF.

J'exprime mes sincères remerciments aux personnes qui m'ont soutenu en dépit de nombreuses contraintes afin de réaliser cette thèse, et plus particulièrement le responsable du programme inter-universitaire franco-algérienne PROFAS/CMEP.

Toute ma gratitude va à Monsieur ABDELOUAHAB Mohamed, Doyen de la faculté des sciences (USTO) d'avoir accepter de présider ce jury de thèse.

Je remercie notre enseignant Monsieur KADRI Abderrahmane, professeur à l'université d'Oran es-sénia d'avoir accepté de juger ce travail.

Mes remerciements vont également à Monsieur FERHAT Mohamed, Professeur à l'université des sciences et technologie USTO d'avoir accepter d'examiner ce travail.

Je remercie également Monsieur SENOUCI Khaled, Professeur à l'université de Mostaganem, pour avoir manifesté de l'intérêt pour ce travail.

J'exprime ma sincère reconnaissance à Monsieur AMRANI Bouhalouane, Docteur à l'université d'Oran d'avoir accepter de juger ce travail.

Je remercie tous les membres du laboratoire algérien et français qui m'ont aidé à réaliser ce travail.



.

Dans la création des Cieux et de la Terre, dans l'alternance de la nuit et du jour, dans les vaisseaux qui sillonnent la mer, chargés de tout ce qui peut être utile aux hommes; dans l'eau que Dieu précipite du ciel pour vivifier la terre, après sa mort, et dans laquelle tant d'êtres vivants pullulent; dans le régime des vents et dans les nuages astreints à évoluer entre ciel et terre; dans tout cela n'y a-t-il pas autant de signes éclatants pour ceux qui savent réfléchir?

Sourate 2. La vache Albaqarat verset 163.

Table des matières

1	Diff	usion	et interférences	10	
	1.1	Introduction			
	1.2	Interfé	érences et effet du désordre	10	
	1.3	3 Diffusion			
		1.3.1	Diffusion d'onde dans un milieu désordonné	12	
		1.3.2	Régimes de propagation	15	
	1.4	Critèr	e de localisation	17	
		1.4.1	Critère de Ioffe-Regel	17	
		1.4.2	Critère de Thouless	17	
	1.5	Une ic	lée de la transition métal-isolant	18	
	1.6	Génér	alités sur les condensations de Bose-Einstein	18	
		1.6.1	Cas du gaz piégé dans un potentiel harmonique	18	
		1.6.2	Quelques résultats expérimentaux concernant la localisation d'An-		
			derson	20	
		1.6.3	Conclusion	22	
2	Effe	et de la	corrélation et du champ électrique sur les systèmes désordonn	és:	
	Mo	dèle de	e dimer aléatoire	23	
	2.1	Introd	uction	23	
	2.2	Trans	port électronique dans les systèmes désordonnés en 1D	23	
	2.3	Intera	ctions et corrélations dans le désordre	24	
		2.3.1	Effet des interactions non-linéaires sur le transport	25	
		2.3.2	Désordre corrélé	25	
		2.3.3	Intéractions non-linéaires	26	
		2.3.4	Effet du champ électrique sur les fonctions d'ondes	27	
	2.4	Propri	iétés de transmission des ondes dans les systèmes désordonnés en 1D	27	
	2.5	Modèl	e physique	28	
	2.6	Résult	ats numériques	30	
	2.7	Influei	nce du potentiel désordonné sur les états électroniques	31	

	2.8	L'effet	du champ électrique sur les dimers aléatoires	32
	2.9	Résista	ance	34
	2.10	Différe	nts formes des états électroniques	34
	2.11	L'estin	nation de l'exposant de Lyapunov	35
	2.12	Conclu	sion	36
3	Etue	de stat	tistique de transport d'un condensat de Bose-Einstein dans	
	un c	hamp	de tavelures	38
	3.1	Introd	uction	38
	3.2	Effets	ondulatoires en présence de désordre	38
		3.2.1	Aspect théorique	39
		3.2.2	Lien entre l'amplitude de diffusion et la matrice de diffusion	40
		3.2.3	Longueur de diffusion	41
	3.3	Equati	on de Gross-Pitaevskii	42
	3.4	Conde	nsat de Bose-Einstein dans un piège	45
		3.4.1	Définitions des longueurs caractéristiques	46
		3.4.2	Comparaison des longueurs caractéristiques	47
	3.5	Conde	nsat de Bose-Einstein en dehors du piège harmonique	48
		3.5.1	Atomes dans un champ de tavelures (speckle)	49
		3.5.2	Interprétation de la fonction de corrélation	50
	3.6	Théori	e de la diffusion multiple pour un ensemble de diffuseurs identiques	
		aléatoi	rement disposés dans l'espace	51
		3.6.1	L'opérateur de diffusion pour un ensemble de n diffuseurs en milieu	
			absorbant	52
		3.6.2	Moyenne de l'opérateur de diffusion : écriture développée	53
		3.6.3	L'opérateur de masse pour un ensemble de diffuseurs identiques	
			aléatoirement disposés dans l'espace	54
		3.6.4	Formalisme de l'opérateur de masse	55
		3.6.5	développement de la self-énergie	55
	3.7	Self-én	ergie dans l'approximation de Born au premier ordre	57
		3.7.1	Comportement de la self-énergie à basse énergie	60
		3.7.2	Self énergie pour une impulsion nulle	61
	3.8	L'appr	oximation de Born auto-consistante	62
		3.8.1	Comportement à basse énergie	64
		3.8.2	Atome à impulsion nulle	64
	3.9	Conclu	usion	66

4	Fon	Fonction spectrale et distribution des énergies			
	4.1	.1 Introduction			
	4.2	Distribution de l'énergie			
	4.3	3 Calcul de la fonction spectrale dans l'approche de Born au premier ord		68	
		4.3.1	Distribution de l'énergie dans un speckle à longue portée	68	
		4.3.2	Comparaison entre le calcul numérique et le calcul analytique de la		
			fonction spectrale dans FBA	70	
		4.3.3	Calcul auto-consistant de la fonction spectrale	70	
		4.3.4	Influence du vecteur d'onde atomique	72	
		4.3.5	Influence de l'amplitude de désordre sur le nuage atomique	72	
		4.3.6	Spectre des atomes froids dans le speckle optique	73	
		4.3.7	Densité d'états	74	
	4.4	4 Conclusion		76	

Introduction

La localisation est un phénomène qui peut apparaître lorsqu'une onde se propage dans un milieu désordonné. Par milieu désordonné on entend un milieu inhomogène où les hétérogénéités sont réparties de façon aléatoire. Ce phénomène a été découvert par Anderson en 1958 pour expliquer la transition métal-isolant est de nature purement ondulatoire. Les ondes pouvant être des ondes de matière ou des électrons qui sont à l'origine de cette description, mais également des ondes lumineuses ou acoustiques. Cette idée de la localisation a eu des répercussions dans des domaines aussi variés que la physique atomique, le transport radiatif, la sismologie. Cette approche a initié une nouvelle physique mésoscopique, qui a permis la découverte de phénomènes nouveaux tels que la localisation faible, la rétrodiffusion cohérente et les fluctuations universelles de conductance Ce qui a ouvert les portes d'une physique des ondes en milieu désordonné très riche, avec des applications concrètes actuelles dans de nombreux domaines concernant entre autres les polymères, les télécommunications, l'acoustique, les atomes froids et l'imagerie médicale. Dans ce cadre, nous proposons une présentation générale de la physique des ondes dans les milieux désordonnés introduisant les pricipaux concepts nécessaires. Ensuite nous préciserons la problématique de la thèse, en empruntant de nombreux exemples au domaine de la physique de la matière condensée, car très illustratifs. Dans un milieu désordonné quelconque, l'onde est multiplement diffusée par les hétérogénéités et on perd l'idée de propagation balistique. C'est en utilisant les corrélations, le champ électrique et les tavelures qu'on pourra extraire des informations significatives des ondes dans le régime de diffusion multiple.

Dans un premier temps, nous nous intéressons plus particulièrement à la propagation de l'onde électronique dans un milieu désordonné en présence de corrélation. Nous utilisons le modèle de Kronig-Penney avec un défaut de dimers placés aléatoirement le long d'une chaine linéaire de taille finie. La confrontation de ces calculs avec la théorie démontre un excellent accord, nous avons donc décider d'introduire l'effet d'un champ électrique pour étudier le comportement de l'onde électronique.

Aprés avoir décrit le modèle choisi pour engendrer le transport de l'onde dans un milieu désordonné avec corrélation, nous présentons les résultats de la localisation induite par le champ électrique, ce qui va nous permettre de mettre en évidence de nouveaux états électroniques.

Dans un second temps, nous présenterons le potentiel aléatoire que nous avons décidé d'utiliser à savoir un champ de tavelures (speckle). Après avoir rappelé les grandes lignes de l'interaction lumière-atomes dans un nuage gazeux, nous présenterons en détail certaines propriétés d'un champ de tavelures. Nous nous intéresserons aussi à la propagation d'un ensemble d'atomes froids qui sont multiplement diffusés par le speckle et qui sont

disposés aléatoirement dans un espace infini, le transport est décrit par l'approximation de diffusion.

L'opérateur de masse Σ est une conséquence de l'équation de diffusion. On se restreindra au premier terme du développement perturbatif de l'équation de diffusion en prenant la fonction de Green du champ moyen. Nous calculerons la self énergie dans l'approximation de Born au premier ordre, les résultats sont satisfaisants et encourageants en bonne cohérence avec ceux de la théorie. Nous étenderons ensuite nos calculs à l'ordre supérieur de l'approximation de Born self consistant. Le calcul numérique étendu à un ordre supérieur donne autres conditions aux bords du spectre des atomes froids, différentes comparativement à celles obtenues dans l'approximation au premier ordre.

Enfin, nous passerons au calcul de la fonction spectrale, après avoir vu de façon quantitative l'influence de la corrélation sur les limites de la self-énergie, il est utile de poursuivre le calcul de la fonction de distributions des énergies pour savoir combien d'atomes vont être diffusés par le champ de tavelures. Nous utiliserons dans le calcul numérique des paramètres physiques expérimentaux qui sont utilisés au laboratoire d'optique à Orsay mais à 1D, ces derniers ont pu voir à l'œil nu la transition d'Anderson. Nous exploiterons ces paramètres pour les systèmes désordonnés en 3D.

Chapitre 1

Diffusion et interférences

1.1 Introduction

L'objet de ce premier chapitre est de présenter des notions générales sur la diffusion multiple d'une onde dans un milieu désordonné et le lien entre la cohérence et le désordre. On introduit les conséquences de la localisation, et celui du milieu diffusant en rapport. Nous discutons la problématique de la présence de désordre, des interactions dans les systèmes quantiques dans lesquels le caractère ondulatoire de la matière joue un rôle spectaculaire qui sera traité en détail aux chapitres suivants. Ensuite, le transport d'ondes en milieu désordonné sera brièvement présenté, en insistant sur le phénomène de localisation : de manière intuitive le désordre ne brouille pas les interférences. Celles-ci réduisent, voir annulent le transport d'ondes. Nous passerons après sur l'intérêt d'une étude du lien entre onde et désordre avec les systèmes d'atomes froids. Enfin, nous terminerons ce chapitre par des propriétés générales caractérisant le désordre, étoffés de quelques résultats expérimentaux observés récemment avec les atomes froids.

1.2 Interférences et effet du désordre

La figure de diffraction par les fentes de Young est certainement l'exemple le plus simple qui mette en évidence une figure d'interférence en optique. Elle fait apparaître, sur un écran au champ lointain, une succession d'anneaux concentriques qui résultent des interférences constructives ou destructives des ondes provenant de l'obstacle. Pour illustrer notre propos nous commençons par écrire l'amplitude complexe d'une onde scalaire sans interactions diffusée dans un milieu aléatoire, puis nous mettons des interactions. Nous allons dans un premier temps rappeler les caractéristiques principales du phénomène de diffusion classique. Une telle approche permet de décrire correctement la transmission ou la constante de diffusion moyenne de la lumière de conductance électronique moyenne dans les milieux aléatoires. Dans un second temps, nous prendrons en compte la présence des interférences et nous montrerons que leur présence conduit à un phénomène quantique

dit "localisation". Selon le milieu qualifié nous nous plaçons dans le cas de localisation faible. Enfin, nous présenterons à partir de cette situation les effets d'un désordre plus fort qui conduit à un phénomène de localisation forte où la constante de diffusion s'annule. Nous nous sommes "inspirés" pour écrire ce paragraphe du livre [1, 2].

Dans un milieu périodique, les effets d'interférences jouent un rôle essentiel pour la propagation d'une onde. La diffraction de la lumière par un réseau, ou la théorie de Bloch d'un électron dans un cristal parfait en sont des exemples bien connus.

Lorsque le milieu devient désordonné, le problème devient complexe. Dans la plus part des cas, l'accès à la connaissance détaillée du milieu est tellement difficile que les physiciens se contentent d'en décrire les propriétés statistiques. Cela revient à étudier l'influence en moyenne des diffuseurs sur l'onde : le modèle physique inclut les diffuseurs et leurs propriétés intrinsèques. La moyenne sur toutes les positions des diffuseurs revient à faire disparaitre les interférences, car on superpose alors des figures d'interférences avec des franges différentes. Ce qui conduit à des théories de transport dans lesquelles les effets d'interférences sont négligés. Par exemple le modèle de Drude pour la conduction électronique, ou la théorie du transfert radiatif pour le transport de l'intensité lumineuse rendent compte avec succés d'un grand nombre d'observations [8, 4, 5]. À la suite de ces observations les effets cohérents liés à la présence d'interférence dans les phénomènes de diffusions multiples en présence de désordre ne doivent plus subsister à un calcul de moyenne d'ensemble.

Paradoxalement l'expérience ondulatoire qui a remis en cause cet état de la pensée est venue d'une onde dont la description était rendue délicate en raison de la présence d'interactions : onde électronique à partir d'une expérience sur l'effet Aharonov-Bohm et al ont montrée expérimentalement la subsistance d'un effet cohérent dans une situation où une moyenne d'ensemble sur le milieu aléatoire diffusant effectuée [6]. Cette observation a marqué le début d'une série d'expériences qui ont remis en cause l'idée selon laquelle les effets de cohérence disparaissaient après une moyenne d'ensemble. De nombreuses expériences avec des ondes lumineuses ou acoustiques par exemple ont par la suite confirmé cette persistance de la cohérence. Nous en citerons quelques unes dans les paragraphes qui suivent.

1.3 Diffusion

La diffusion dans un milieu désordonné peut être écrite à trois niveaux. Le premier, le plus familier, est le niveau macroscopique. Dans une bonne approximation, l'intensité associée à l'onde effectue un mouvement diffusif. Au niveau mésoscopique, on tient compte des interférences entre chemins de diffusion mais toujours dans une description à l'échelle macroscopique. Les deux éléments importants qui entrent en jeu sont la diffusion de

l'onde par un diffuseur qui seront présentés par des atomes dans le cadre de notre travail, et la propagation entre n diffuseurs. Enfin, au niveau microscopique, le comportement de l'onde est entièrement décrit par son interactions avec les composantes élémentaires du milieu diffusant. Dans cette thèse, la démarche suivi consiste à s'appuyer sur les propriétés microscopiques de l'onde et du milieu diffusant pour obtenir une description macroscopique de la propagation de l'onde. Ces phénomènes de diffusion d'ondes dans un milieu désordonné ont fait l'objet de nombreux travaux de revue[9, 10, 11]

1.3.1 Diffusion d'onde dans un milieu désordonné

Lorsqu'une onde se propage dans un milieu matériel, elle interagit avec lui et son comportement sera modifié. Cette interaction peut être décrite en terme de diffusion : l'onde rencontre un constituant élémentaire du milieu (atome, grain d'une poudre, impureté ou défaut du réseau cristallin, variation de densité..) appelé diffuseur, Si l'onde incidente rencontre plusieurs diffuseurs, l'onde sortante résulte de l'interférence de toutes les ondes diffusées. L'onde sortante peut être alors écrite comme la somme d'ondes partielles. Pour chacune de ces ondes partielle, on peut distinguer le nombre de diffuseurs qu'elle a rencontré voir figure 1.1 . On représente une onde $\psi(\mathbf{r},t)$ dans un milieu désordonné par une

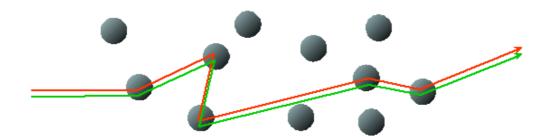


Fig. 1.1 – Représentation schématique d'un processus de diffusion multiple

somme partielle des fonctions d'ondes de chaque diffuseurs avec des chemins différents dans le milieu.

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_{n} \psi_n(\mathbf{r},t) \tag{1.1}$$

Considérons un milieu composé de diffuseurs ponctuels, élastiques, répartis aléatoirement suivant la position $\mathbf{r_i}$ dans lequel une onde plane monochromatique de vecteur d'onde \mathbf{k} se propage. L'amplitude complexe de l'onde diffusée avec le vecteur d'onde \mathbf{k}' se met sous la forme :

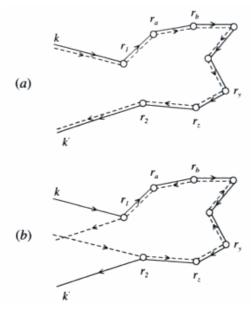
$$A(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_2)}$$
(1.2)

où $f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ est l'amplitude complexe associée à la propagation sur un chemin de diffusions multiples entre les points \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 , l'intensité associée s'écrit alors :

$$|A(\mathbf{k}, \mathbf{k'})|^{2} = \sum_{\mathbf{r}_{1}, \mathbf{r}_{2}} \sum_{\mathbf{r}_{3}, \mathbf{r}_{4}} f(\mathbf{r}_{1}, \mathbf{r}_{2}) f^{*}(\mathbf{r}_{3}, \mathbf{r}_{4}) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{1} - \mathbf{k'} \cdot \mathbf{r}_{2})} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{3} - \mathbf{k'} \cdot \mathbf{r}_{4})}$$
(1.3)

Le produit des amplitudes $f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) f^*(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)$ fait intervenir un terme de phase qui est égal à la différence de phase entre les deux chemins $\mathbf{r}_1 \to \mathbf{r}_2$ et $\mathbf{r}_3 \to \mathbf{r}_4$. Cette différence de phase varie aléatoirement suivant des chemins aléatoires. Ces deux chemins correspondent à une propagation de l'onde suivant un chemin donné selon le même sens de propagation ou en sens opposé comme l'illustre la figure Fig.1.2. L'intensité diffusée moyenné sur les

Fig. 1.2 — Représentation schématique des deux types de chemins de diffusion qui contribuent à l'intensité du champ lumineux diffusé : a) chemins parcourus en sens identique qui correspondent à la diffusion classique ; b) chemins parcourus en sens opposés qui sont à l'origine de la rétro-diffusion.



réalisations du désordre $\langle ... \rangle$ représente une moyenne sur les différentes réalisations du désordre.

$$\langle |A(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \rangle = \langle \sum_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2} |f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 [1 + e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}] \rangle$$
(1.4)

L'équation (1.4) fait intervenir la somme de deux termes. Le premier terme de phase nulle correspond à la propagation en sens identique. Il s'agit du terme de diffusion sans interférence, égal à la somme des intensités diffusées sur chaque diffuseur ce qu'on appelle la diffusion classique. Le second terme a une phase non nulle il correspond à la présence d'interférences et à des chemins en sens opposés. C'est la prise en compte de ce second terme qui conduit à l'existence d'effets importants dus aux interférences lors de la diffusion dans un milieu désordonné. Dans un premier temps nous rappelons quelques résultats liés à la seule prise en compte du terme classique dans la diffusion. Nous discuterons après des effets des interférences dus à la présence du second terme.

Diffusion classique

L'approche de Boltzmann a permis la description du transport électronique. Cette théorie, ne prenant pas en compte les interférences a permis la description d'un grand nombre de phénomènes. La théorie de la diffusion classique de la lumière dans les milieux désordonnés, a été notamment établie pour décrire la variation de la transmission T en fonction du libre parcours moyen ℓ et de la taille du milieu diffusant L, $\langle T \rangle \propto \ell/L$, connue sous le nom de la loi d'Ohm.

Localisation faible

Un régime où les interférences sont relativement faciles inclure est celui dit de localisation faible caractérisé par

$$k\ell >> 1 \tag{1.5}$$

avec k est le vecteur d'onde : $k = 2\pi/\lambda$ Sous cette condition, les interférences ne sont pas toutes détruites par une moyenne d'ensemble sur le désordre (voir l'équation (1.4)) : les chemins de diffusion visitant les mêmes diffuseurs dans l'ordre inverse continuent d'interférer. En effet, la différence de phase entre deux tels chemins est :

$$\delta\phi = (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2).(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \tag{1.6}$$

où \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 sont les vecteurs position du premier et du dernier diffuseur, et \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 sont les vecteurs d'onde incident et sortant. Si les deux chemins sont fermés $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ il n'y a aucune source de déphasage entre eux. Ils interférent constructivement et contribuent à l'augmentation cohérente de la probabilité de retour à l'origine qui se traduit par une diminution de la constante de diffusion et par conséquent de la transmission vers l'avant d'où le nom de localisation faible. La condition pour que les interférences aient lieu est que la taille du milieu L soit inférieure à la longueur de cohérence ou la longueur d'absorption de l'onde, par contre dans un milieu absorbant, cette longueur est la même dans les deux chemins. Ce phénomène qualifié de localisation faible est à l'origine de modification de transport des électrons notamment la transition de phase métal-isolant induit par le désordre. Il a vu le jour expérimentalement au début des années 1980 après un grand nombre de travaux théoriques, leur interprétation est aujourd'hui très claire et mis en évidence dans de nombreuses expériences [13, 14, 15].

Localisation d'Anderson

Le régime de la localisation forte d'une onde dans un potentiel aléatoire est un sujet originalement proposé par P. W. Anderson en 1958 dans un article intitulé "Absence of Diffusion in Certain Random Lattices" [10]. IL propose l'étude d'un modèle de diffusion sur un réseau dont l'énergie potentielle de chaque site est une variable aléatoire qui

suit une certaine loi de distribution. Dans un milieu suffisamment désordonné, les effets d'interférences peuvent être tellement forts qu'ils empêchent la propagation de l'onde : celle-ci est localisée dans certaines régions à l'intérieur du milieu, et à l'extérieur sa transmission décroit exponentiellement avec la taille du milieu diffuseur, $\langle T \rangle \simeq \exp(-L/\ell)$. Les interférences sont destructives presque partout sauf autour de la position initiale de l'électron. Il y'a localisation dans un certain intervalle d'énergie $\delta \varepsilon$ pour toute réalisation du potentiel aléatoire. Anderson montre que la décroissance de la fonction d'onde ainsi localisée dans une région finie décroit trés rapidement avec la distance du point considéré à la position initiale. Le comportement de décroissance spatiale exponentielle de la fonction d'onde à partir de son centre de localisation est emblématique de la localisation d'Anderson. Pour les systèmes tridimensionnels, l'apparition d'états localisés est donnée par le critère de Ioffe-Regel [16] :

$$k\ell \simeq 1 \tag{1.7}$$

Cela signifie que la localisation d'Anderson se produit lorsque le libre parcours moyen est comparable à la longueur d'onde

$$\lambda = 2\pi/k \tag{1.8}$$

L'idée géniale d'Anderson est devenue un véritable casse tête pour les physiciens. Il leur faillait une théorie moderne qui couvre l'essentiel des propositions d'Anderson tout en incluant les possibilités expérimentales. En plus, il a été découvert en 1980 que la localisation d'Anderson ne se limite pas aux électrons, mais s'applique aussi aux ondes "classiques" comme la lumière, les micro-ondes, les ondes acoustiques et plus récemment les ondes de matière [17, 18, 19]. Sergey Skipetrov [20], en collaboration avec l'université de Manitoba, ont employé des ondes acoustiques pour réaliser l'expérience. L'expérience consiste à envoyer des ultrasons dans un milieu désordonné à 3D

1.3.2 Régimes de propagation

Différentes échelles spatiales interviennent dans la description du transport d'une onde dans un milieu diffuseur de taille finie : la longueur d'onde λ , la taille du milieu diffuseur L, le libre parcours moyen ℓ et enfin, le libre parcours de transport ℓ^* .

Libre parcours moyen

Une grandeur très importante pour décrire la propagation d'une onde dans un milieu diffusant est le libre parcours moyen de diffusion ℓ : c'est la distance moyenne parcourue par l'onde entre deux événements de diffusion. Si η_d est la densité volumique des diffuseurs, et σ_d leur section efficace de diffusion, alors

$$\ell = \frac{1}{\eta_d \sigma_d} \tag{1.9}$$

La notion de libre parcours moyen s'effondra si η_d varie significativement à l'échelle des longueurs d'ondes. Lorsque la taille L du milieu diffusant est grand devant ℓ , l'onde peut subir de nombreux événements de diffusions : on se trouve alors dans le régime de diffusion multiple.

Libre parcours moyen de transport

Le libre parcours moyen de transport correspond à la distance moyenne que doit parcourir l'onde pour perdre la mémoire de sa direction de propagation incidente. Cela nécessite de prendre en compte le fait que dans la suite de plusieurs événements de diffusion successives, chaque événement doit être caractérisé par les directions incidentes et diffusées. Il apparait ainsi une seconde longueur caractéristique, appelée le libre parcours moyen de transport et notée ℓ^* , qui décrit le comportement de chaque événement de diffusion à un temps τ_e comme le montre la figure 1.3 , on a une modification du processus

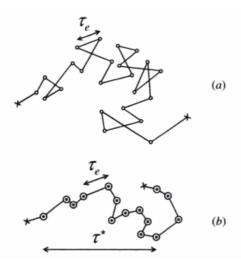


Fig. 1.3 – Représentation schématique d'un processus de diffusion multiple sur des impuretés lorsque les collisions sont soit isotropes (a) soit anisotrope(b)[1].

de diffusion. Soit θ l'angle entre le vecteur d'onde incident et le vecteur d'onde diffusé, alors on définit ℓ^* par

$$\ell^* = \frac{\ell}{1 - \langle \cos \theta \rangle} \tag{1.10}$$

où $\langle cos\theta \rangle$ est la valeur moyenne du cosinus de l'angle que font les vecteurs d'ondes avant et aprés un événement de diffusion.

1.4 Critère de localisation

La localisation est un phénomène qui peut apparaître lorsqu'une onde se propage dans un milieu désordonné (inhomogène) où les hétérogénéités sont réparties de façon aléatoire. Ce phénomène a été découvert par Anderson pour expliquer la transition métal-isolant. Cette idée de localisation a initié une nouvelle physique mésoscopique qui a permet la découverte de nouveaux phénomènes et cela aussi a ouvert la voie d'une physique très riche des ondes en milieu désordonné. Il est utile donc d'avoir des idées claires qui permettent de comprendre les caractéristiques de la localisation.

1.4.1 Critère de Ioffe-Regel

Dans un milieu diffusant 3D, il existe le critère de Ioffe-Regel, communément considéré comme nécessaire pour l'obtention des effets prépondérants des interférences. Ce critère, [16, 22], stipule que la longueur d'onde doit être supérieure au libre parcours moyen,

$$k\ell < 1$$

Lorsque ce critère est respecté, de nombreuses diffusions ont lieu sur une longueur d'onde et le phénomène de localisation forte a une grande probabilité d'avoir lieu.

1.4.2 Critère de Thouless

En 1974, D. J. Thouless [23] considérait un système désordonné de taille $L \ll \ell$ dans le régime étendu (non localisé). Selon l'équation de diffusion le temps caractéristique pour qu'une onde traverse un milieu est $t_D = \frac{L^2}{D}$, où D est le coefficient de diffusion. Par conséquent les états propres du système ont une largeur en moyenne $\delta E = \frac{D}{L^2}$ appelée énergie de Thouless. On peut comparer cette largueur avec l'écart moyen entre les niveaux ΔE donné approximativement par l'inverse de la densité d'états $\Delta E = \frac{1}{\rho(E)D(E)L^d}$. On définit alors g comme

$$g = \frac{\delta E}{\Delta E} = \rho(E)D(E)L^{d-2}$$

où $\rho(E)$ est la densité d'états et L^d est le volume du système avec la dimension d. g est la variable sans dimension appelé conductance. Si g < 1, le régime est donc métallique. Dans le cas contraire, lorsque g < 1, il n'y a pas de diffusion car il n'y a plus le recouvrement entre les niveaux. On est donc dans le régime localisé. Le critère de localisation devient alors

$$g \simeq 1$$

Ce critère est universel, il est bien utilisé comme un critère approximatif pour la localisation.

1.5 Une idée de la transition métal-isolant

Nous avons donnée une idée générale au paragraphe précédent sur les modifications du transport d'une onde apportées par la prise en compte des interférences lorsque la diffusion a lieu dans milieu désordonné. Cette description nous conduit notamment à la question de l'existence d'états localisés d'une onde de matière. Par ailleurs, le comportement d'une onde de matière conduit à des phénomènes qui sont aujourd'hui bien connus et pour lesquelles les corrélations jouent un rôle central telque la superfluidité, supraconductivité et condensation de Bose-Einstein. Ces comportements quantiques apparaissent lorsque la matière se trouve dans des états quantiques spéciales. Se pose alors la question de l'existence et de la persistance de telles états en présence de désordre [24, 25, 26].

1.6 Généralités sur les condensations de Bose-Einstein

L'apparition d'un condensat de Bose-Einstein est liée à la notion d'indiscernabilité d'un gaz de particules soumis à une très basse température. Einstein qui approfondit la notion d'indiscernabilité des particules que Bose avait appliqué aux photons pour décrire la loi de Planck pour le rayonnement du corps noir. Il montra que si la densité spatiale n est plus grande que la valeur critique donné par :

$$n = \frac{0.166}{\hbar^3} \left(m \ k_B \ T \right)^{3/2} \tag{1.11}$$

où m est la masse des particules, alors une fraction macroscopique des atomes se condense dans l'état d'énergie le plus bas.

Ainsi la température de condensation semble trés basse même pour des densités élevées. Par exemple si l'on prend l'exemple de l'hélium on obtient $T_c \simeq 3.2 K$ pour $n = 1.310^{27}$ atomes/ m^3 [27, 28, 29]. On s'est référé à l'ouvrage de référence de I.M. Lifshits et al pour décrire le phénomène de condensation de Bose-Einstein [30].

1.6.1 Cas du gaz piégé dans un potentiel harmonique

Considérons maintenant, la situation plus réaliste où le gaz de bosons idéal est piégé dans un potentiel harmonique isotrope sous la forme :

$$V_{ext}(x,y;z) = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$$
(1.12)

Les bosons sont alors répartis sur différents niveaux individuels caractérisés par trois nombres quantiques (n_x, n_y, n_z) , la valeur propre ε_n à :

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(n_x + (n_y + (n_z + 3/2)) = n\hbar\omega + \varepsilon_0$$
(1.13)

avec

$$n \equiv n_x + n_y + n_z \tag{1.14}$$

et

$$\varepsilon_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega \tag{1.15}$$

Si l'on prend alors pour zéro l'énergie de l'état fondamental, les valeurs propres de l'hamiltonien à une particule valent $\varepsilon_n=n\hbar\omega$ et le nombre moyen de particules n_k occupant un état individuel à une particule associée au niveau d'énergie ε_n peut alors s'écrire en prenant $\mu=\varepsilon_0=0$:

$$n_k = \left\langle \frac{1}{z^{-1} e^{\beta n\hbar\omega} - 1} \right\rangle \tag{1.16}$$

avec

$$z = e^{\beta \mu} \tag{1.17}$$

et

$$\frac{\hbar\omega}{k_BT} << 1 \tag{1.18}$$

où z est la fugacité.

Le nombre moyen de bosons piégés dans le potentiel est alors :

$$N = N_0 + N_T = \frac{z}{1 - z} + N_T$$

 N_0 est le nombre de particules dans l'état fondamental (la limite où ce nombre est macroscopique correspond à une situation où $\mu \longrightarrow 0$, c'est à dire $z \longrightarrow 1$.

Concernant le nombre d'atomes non-condensés N_T , on peut montrer, plus précisément que celui-ci, s'écrit comme :

$$N_T = \left(\frac{K_B T}{\hbar \omega}\right)^3 g_3(z) \tag{1.19}$$

avec $g_3(z) = \zeta(3)$ (dans la limite où z = 1) où ζ est la fonction de Riemann. L'équation (1.37) peut alors s'écrire :

$$N \simeq N_0 + \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega}\right) g_3(1) \tag{1.20}$$

On en déduit finalement que la fraction $\frac{N_0}{N}$ condensée dans l'état fondamental est donné par la relation

$$\frac{N_0}{N} \simeq 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \quad pourT \le T_c \tag{1.21}$$

avec T_c définie par

$$k_B T_c \simeq \hbar \omega \left(\frac{N}{q_3(1)}\right)^{1/3} \tag{1.22}$$

Dans la plupart des pièges actuels, le nombre d'atomes est de quelques milliers à plusieurs millions de sorte que k_BT_c est deux ordre de grandeurs autour de $\hbar\omega$. La quantité $\hbar\omega$ est fixée expérimentalement. Celle-ci valait 9 nK ce qui donne une température critique

de 300nK pour 40000 atomes dans le piège [30]. Beaucoup de travaux pour obtenir des condensats gazeux ont pris leur développement rapide au niveau des années 80, utilisant des atomes d'hydrogène mais ont échoué en raison de la recombinaison des atomes pour former des molécules. Or dans ces mêmes années ont été mises an point des technique de refroidissement par évaporation qui ont permis d'atteindre les températures nécessaires à l'obtention du phénomène.

Ainsi, la condensation de Bose-Einstein a été observée pour la première fois en 1995 dans différentes expériences, d'une part utilisant des vapeurs de Rubidium et d'autre part avec des atomes de Sodium refroidis à des températures de l'ordre de la fraction de micro-Kelvin.

1.6.2 Quelques résultats expérimentaux concernant la localisation d'Anderson

Aprés un demi siècles, la théorie de la localisation d'Anderson vient enfin d'être vérifiée de façon convaincante. Nous allons citer quelques expériences très récentes concernant l'expansion des condensats de Bose-Einstein dans les potentiels désordonnés en 1D, ainsi que la propagation des impulsions ultrasonores dans des milieux désordonnés en 3D.

Observation de la localisation avec des ondes de matière

Nous présentons sur la figure 1.4 les résultats récents sur la localisation d'un condensat

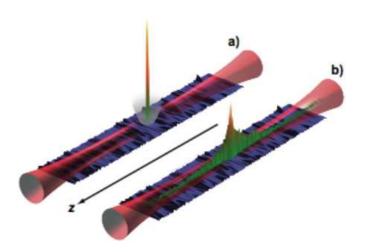


FIG. 1.4 – Cette image représente la densité atomique de rubidium dans les expériences d'Anderson, prise en coupant le piège et en laissant s'étendre le condensat. L'expérience a été réalisée avec les atomes froids en mars 2008 [21]

de Bose-Einstein en expansion dans un potentiel optique désordonné (champ de tave-

lures) à 1D. Dans le régime de faible désordre, la transmission de l'onde de matière à travers une modulation unique du potentiel aléatoire est proche de l'unité. Après un temps d'expansion suffisamment long au bout duquel les interactions sont négligeables, le scénario proposé par Anderson est possible. Sanchez et al ont pu identifier le domaine de paramètres où la localisation d'Anderson peut être obtenue [21, 31, 32]. Cette étude a mis en évidence que les potentiels induits par des tavelures optiques (speckle) ont des propriétés très particulières qui peuvent produire une transition effective d'un régime de localisation exponentielle à un régime de localisation en puissance.

Dans le cadre de notre travail, nous utilisons un champ de tavelures à trois dimensions dans un condensat en expansion à fin de connaître le nombre d'atomes localisés. Nous réalisons une analyse théorique en utilisant des méthodes approchées de la physique mésocopique. L'enjeu de notre travail consiste à apporter des éléments de réponse à ces questions, ce qui sera présenté en détail dans le quatrième chapitre.

Phénomène optique observé à 3D

Cependant, le champ d'application du modèle d'Anderson s'étend bien au-delà de son domaine initial. Le laboratoire de recherche des ultrasonores au Canada vient de démontrer l'existence de la « localisation d'Anderson » en trois dimensions. Cette fois-ci, l'expérience à été réalisée par des ondes acoustiques à température ambiante figure 1.5. Ils ont montré que les ondes élastiques peuvent être localisées par le désordre dans un

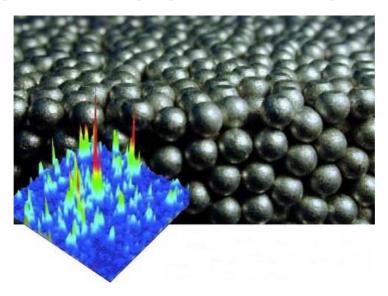


FIG. 1.5 – Cette image représente la distribution spatiale du son transmis à travers un échantillon de billes d'aluminium. La signature de la localisation d'Anderson est caractérisée par des pics. l'expérience à été réalisée par des ondes acoustiques en octobre 2008 [20]

échantillon constitué de billes d'aluminium. Pour prouver la localisation, ils ont effectué et ont analysé théoriquement trois expériences différentes : la localisation transverse en

3D, la transmission dynamique, et les mesures de la statistique des fluctuations du speckle élastique. Ce travail paru dans "Nature physics" a conduit à faire découvrir une nouvelle fois la physique de la matière condensée [20], qui est à la fois une source inépuisable de sujets de recherche fondamentale. Toutefois le résultat est encourageant et reste toujours une porte ouverte dans ce domaine riche dont les applications semblent illimitées.

1.6.3 Conclusion

Le jeu subtil des interférences en présence de désordre a donné lieu à de nombreux travaux expérimentaux et théoriques dans des domaines de la physique de la matière condensée. Les effets du désordre sur les ondes conduisent à des phénomènes de localisation et à l'apparition de nouveaux états de la matière. En particulier, l'étude de la transition métal-isolant induite par le désordre l'un des sujets de recherche les plus actifs aujourd'hui. Ainsi le désordre présente des interférences quantiques constructives en introduisant la corrélation ou en excitant le système par un champ électrique. Les condensats de Bose-Einstein gazeux représentent aussi un outil d'investigation formidable de ces effets cohérents et permettent de résoudre un grand nombre de questions.

Chapitre 2

Effet de la corrélation et du champ électrique sur les systèmes désordonnés : Modèle de dimer aléatoire

2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons les effets combinés de la corrélation et du champ électrique dans les systèmes unidimensionnels. Notre motivation vient du fait que ces effets pourraient être à l'origine de la transition métal-isolant. Le transport des électrons décrit par l'équation de Schrödinger montre que la combinaison du désordre corrélé et du champ électrique peut mener à des phénomènes de localisation alors que, pris séparément, désordre corrélé et champ électrique ont tous deux tendance à délocaliser les électrons.

2.2 Transport électronique dans les systèmes désordonnés en 1D

Depuis l'avènement de la mécanique quantique, les matériaux cristallins et plus particulièrement leurs propriétés de conduction électrique ont été largement étudiées. Ces systèmes ordonnés se caractérisent par leurs invariances par rapport aux transformations de translations. Bloch établit que les états propres d'un électron , mis dans un potentiel périodique, sont invariants, par translation [33]. Eckart a utilisé le modèle de Kronig et Penney pour montrer la théorie générale des propriétés des ondes électroniques dans une structure cristalline parfaite à une dimension. Dans un tel potentiel, le spectre énergétique de l'électron est constitué de bandes permises séparées par des bandes interdites. Les fonctions d'ondes sont les fonctions de Bloch étendues sur l'ensemble du cristal [34]. le modèle de Kronig-Penney pour les super-réseaux est un outil judicieux pour l'étude des propriétés de transport électronique. Une légère déviation de la périodicité du système

pose un problème énorme et ne peut avoir de solutions que dans des cas bien particuliers. Ainsi à une dimension, les conditions aux limites ont été considérées par James qui a observé que l'état électronique dans chaque bande aux bords de chaque limite de chaque cellule, s'apparente aux fonctions de Wannier. Ailleurs ce sont les fonctions de Bloch qui gèrent le système. Le système perturbé a été étudié par James en introduisant une impureté dans un arrangement périodique. Les fonctions d'ondes dans de tels systèmes dépendent évidemment de la nature du potentiel et de la nature de l'impureté [35]. Cependant les matériaux désordonnés présentent généralement des caractéristiques instables ce qui explique pourquoi l'étude du désordre reste une source d'effets spectaculaires. Dans les matériaux désordonnés le concept de symétrie de translation est brisé. Il devient donc difficile de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger.

Anderson a étudié le phénomène de localisation pour la compréhension du transport électronique. Il trouve en particulier pour les systèmes à trois dimensions un front de mobilité séparant les états localisés (situés en queue de bande) des états étendus (situés prés du centre de bande). D'après le modèle des liaisons fortes, (tight bending), il existe deux fronts de mobilité d'énergie respectives E_m et $-E_m$. Ces deux fronts se déplacent vers le centre de bande lorsque le désordre augmente. Pour une valeur critique du désordre, les deux fronts se rencontrent au centre de la bande d'énergie et tous les états électroniques deviennent localisés. Ces études ont été marquées par l'approche de Mott selon laquelle, il existe en queue de bande une transition d'états localisés à états étendus. Mott a été à l'origine de l'hypothèse de la conductivité métallique qui est rejetée à cause de la nature continue de la transition [36]. Vingt ans après le travail d'Anderson, Abraham et al. ont émis la fameuse hypothèse d'échelle selon laquelle il n'existe pas de front de mobilité en dessous de la dimension critique $d_c = 2$ [37]. Dans ces conditions tous les états sont localisés indépendamment du degré de désordre. Les phénomènes de localisation sont dus aux interférences quantiques destructives des ondes électroniques. Cependant, ces dernières années certains modèles proposés à une dimension, par exemple des modèles avec effet de la corrélation, effet de la non-linéarité présentent des interférences constructives conduisant à la destruction de la localisation [38, 39]. Nous allons présenter le cas d'un alliage binaire aléatoire à 1-D.

2.3 Interactions et corrélations dans le désordre

La plus grande difficulté dans l'étude des matériaux réside dans la description des interactions, c'est-à-dire dans le choix du potentiel qui apparait dans l'équation de Schrödinger. Le potentiel tient compte des interactions électron-électron et électron-phonon. Ces interactions permettent de construire un modèle pertinent de prédiction de phénomène de transport. Malgré les nombreux travaux sur cette thématique et les résultats accumulés,

beaucoup reste à faire pour réellement comprendre les effets des corrélations et les effets des interactions dans les systèmes désordonnés. Ceci traduit l'engoument des chercheurs pour l'étude des corrélations électroniques dans les systèmes mésoscopiques.

2.3.1 Effet des interactions non-linéaires sur le transport

L'effet des interactions électron-électron et électron-phonon qui représentent des interactions non-linéaires nous permettra de statuer sur la transition métal-isolant à une dimension. En absence d'interactions, la théorie d'échelle de la localisation prédit qu'un désordre infinitésimal suffit à localiser la fonction d'onde électronique et donc à rendre le système isolant. A travers un Hamiltonien tight binding, Molina et al ont étudié l'effet de la non-linéarité, leurs résultats traduisent que les intéractions nonlinéaires conduisent à des états qui ne sont pas de type de Bloch [40, 41].

Nous rappelons que la non linéarité positive correspondant à une forte interaction coulombienne sur le site tend à élargir le gap tandis que la non linéarité négative tend à le supprimer. L'approche retenue dans cette thèse consiste à faire un traitement numérique amélioré par rapport à ceux de la littérature.

2.3.2 Désordre corrélé

De nombreux travaux basés sur le modèle des liaisons fortes suggèrent que l'apparition d'une corrélation dans le désordre introduit un ordre à courte distance entraînant un nouveau phénomène dans le système aléatoire unidimensionnel, la compétition entre le désordre à longue distance et le désordre à courte distance fait apparaître la délocalisation des états électroniques [42, 43, 44, 45].

Dunlap et Wu ont étudié un modèle de liaisons fortes à dimer aléatoire RDM (Random Dimer Model) dans lequel l'énergie du site prend deux valeurs possibles respectivement : λ et λ' , dont une énergie est assignée aléatoirement à des paires de sites du réseau [46, 47] . Leurs résultats traduisent qu' à une certaine valeur d'énergie le coefficient de réflexion s'annule en raison de l'effet tunnel résonnant. Cette résonance est préservée quelque soit la concentration . Une analogie peut être faite avec les travaux de Shanchez et al. Leurs résultats indiquent que dans chaque bande permise et pour une certaine valeur d'énergie il existe une transmission maximale des électrons ce qui traduit que le mouvement des électrons est permis avec un forte probabilié malgré la présence du désordre. Cette résonance correspond à la délocalisation des états électroniques dont le nombre égal à \sqrt{N} avec N qui représente le nombre de sites. Le nombre des états étendus a été calculé numériquement par Evengelou [48, 49] et il a été vérifié expérimentalement par Bellani dans les systèmes désordonnés avec corrélations [50]. Leurs résultats ont été comfirmés

par les spectres de transmission des micro-ondes pour des diffuseurs corrélés.

Sanchez et al [51] se sont intéressés au même problème mais en utilisant le modèle de Kronig - Penney avec des dimers placés aléatoirement. Ils ont montré que le nombre d'états étendus étant fini figure Fig.2.1.

Nous mentionnons aussi que le phénomène de la non-linéarité s'est révélé être un bon

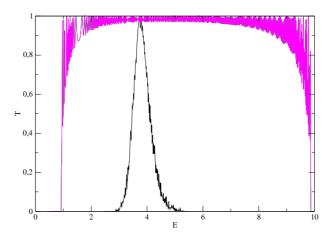


Fig. 2.1 – Pic résonant se trouve dans la première bande permise.

candidat pour l'amélioration du transport puisque les excitations non linéaires existent en présence du désordre.

2.3.3 Intéractions non-linéaires

La prise en compte des interactions électron-électron et électron-phonon dans les systèmes désordonnés permet d'envisager une modification dans la fonction de distribution des électrons. Molina et al [52, 53] ont étudié avec le modèle des liaisons fortes l'équation de Schrödinger non linéaire discrète dont le désordre est décrit complètement dans la non-linéarité. Leurs résultats montre que lorsque l'interaction électron-électron est prédominante par rapport à l'interaction électron-phonon la probabilié de transition est différente de celle obtenue pour le transport avec une intéraction electron-phonon. La localisation/délocalisation des fonctions d'ondes des électrons est induite selon le type de l'intéraction et selon la nature du potentiel (puits ou barrières). L'interaction répulsive qui correspond à une forte interaction coulombienne sur le site, délocalise les états électroniques dans les structures en puits de potentiel, tandis que l'interaction attractive délocalise les états électroniques dans les structures en barrières de potentiel.

2.3.4 Effet du champ électrique sur les fonctions d'ondes

Le champ électrique accélère les électrons dans le vide, il aide les électrons à se déplacer rapidement. Lorsque l'énergie électrostatique pour un champ critique est égale à l'énergie de l'électron, ce dernier à tendance être délocalisé. Les fonctions d'ondes suivent alorsun comportement décroissant en puissance figure 2.2. Pour un champ fort, les états

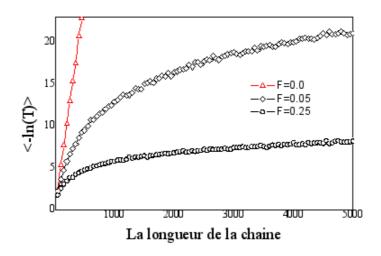


Fig. 2.2 – Les fonctions d'onde sont affectées par le champ électrique.

électroniques deviennent étendus, Dans ce régime, la longueur de la localisation est plus grande que la longueur de l'échantillon. Ainsi Soukoulis et Economou [54, 55] ont montré que les états étendus et localisés peuvent coexister et que même à une dimension il est possible d'avoir un front de mobilité. L'effet du champ électrique sur les systèmes désordonnés dépend de la nature du potentiel. Si le potentiel est en puits, les états électroniques sont fortement localisés.

2.4 Propriétés de transmission des ondes dans les systèmes désordonnés en 1D

Le modèle de Kronig-Penney est utilisé en raison de sa structure simplifiée afin d'étudier les propriétés de transports dans les systèmes désordonnés. Pour un système unidimensionnel, deux types de désordre ont été proposés : un désordre substitutionnel avec un paramètre de réseau constant, et un désordre spatial avec un potentiel constant. Le coefficient de transmission est une grandeur intéressante pour déterminer les propriétés de transport. Seulement pour des échantillons désordonnés, le logarithme étant statistiquement mieux obtenu que T, on utilisera préférentiellement $\langle lnT \rangle$ dans le cadre de notre travail.

Avec $\langle \rangle$: est la valeur moyenne.

La transition d'un état localisé vers un état délocalisé est reliée à un changement de l'amplitude de la fonction d'onde ainsi que le coefficient de transmission qui lui est associée. Lorsque le désordre est faible, les états propres électroniques restent délocalisés, alors que lorsqu'il excède une certaine valeur critique, les fonctions d'onde deviennent exponentiellement localisées autour d'une origine r_0 sur une longueur de localisation $\ell_c: \psi \propto e^{\frac{|r-r_0|}{\ell_c}}$. Landauer a permis de relier le coefficient de transmission à la résistance par [56].

$$R = T^{-1} - 1$$

A basse température, la résistance s'écrit comme

$$R = e^{-\alpha L} - 1$$

Où α joue le rôle de l'inverse de la longueur de localisation et dépend du type de potentiel aléatoire à l'intérieur de la région désordonnée. A haute température la localisation des états électroniques disparaît en raison des vibration phononiques.

L'exposant de Lypunov γ représente l'un des principaux outils dans l'étude des systèmes désordonnés, il est obtenu à partir du formalisme de la matrice de transfert et permet de déterminer, par exemple, la longueur de localisation ℓ_c . Il est défini comme

$$\gamma = -\frac{1}{2L}lnT$$

Ce paramètre est toujours positif et décrit les propriétés d'échelle spatiale d'un système désordonné. .

2.5 Modèle physique

Le modèle de Kronig-Penney est une méthode idéale dans le calcul des bandes d'énergie dans les solides. Il a été proposé par R.L.Kronig et W.G.Penney en 1931, Ils ont considéré un potentiel en créneaux formé d'une alternance régulière de puits et de barrières rectangulaires finis. Ce potentiel constitue une répétition périodique unidimensionnelle et il a été appliqué pour la première fois aux matériaux semi-conducteurs, pour une étude qualitative de leur structure de bande. Les premiers efforts théoriques dans la description des super réseaux ont été faite à partir de ce modèle figure 2.3. En utilisant le modèle de Kronig-Penney et la représentation de Poincaré qui permet la discrétisation de l'équation de Schrödinger, Nous montrons que la présence d'une paire d'impureté dans un système désordonné en 1D présente une infinité d'états délocalisés (une valeur maximale de transmission). En effet, nous choisissons un potentiel en pics delta régulièrement espacé avec un paramètre du réseau a, l'amplitude du potentiel prend deux valeurs possibles λ, λ' .

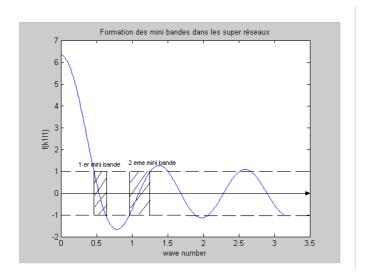


Fig. 2.3 – Modèle de Kronig et Penney est un modèle à multi bandes

Ces deux valeurs sont distribuées aléatoirement le long de la chaine où l'amplitude λ' apparait en paire. Puis, nous connecterons les deux extrémités de la chaine à un conducteur parfait maintenu à une différence de potentiel constante V=FL:F est le champ électrique et L est la taille de la chaine. Dans cette situation l'équation de Schrödinger s'écrit comme

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{n} \lambda_n \delta(x - n) - Fx\right] \psi(x) = E\psi(x)$$
 (2.1)

où E : est l'énergie de l'électron mesurée en unité de $\frac{\hbar^2}{2m}$.

L'échantillon désordonné est étendu de x = 0 à x = L = Na.

La charge de l'électron e et le paramètre du réseau a sont pris comme unités.

On utilisera également l'approximation nommée «échelle», cette approximation est considérée à la limite être valide dans les faibles champs électriques $Fa \ll E$. Ainsi les solutions de l'équation Eq. (2.1) dans le cas d'un potentiel en pics δ sont particulièrement simples : ce sont des ondes planes.

En utilisant la technique de la matrice de transfert, précisément la matrice de propagation et la matrice de transfert à travers des pics delta. La matrice de transfert à travers un potentiel de type delta situé au site n est notée $del(v_n, k_n)$, la fonction d'onde doit satisfaire deux conditions à l'origine, elle doit être continue et sa dérivée doit présenter une discontinuitée.

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = del(v_n, k_n) \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix}$$

Ensuite on déplacera la discontinuitée à l'origine dans un nouveau système à travers la matrice de propagation p(V, a). Le produit des deux matrices nous donne la matrice de

transfert. Cette matrice permet d'enchaîner d'une manière itérative les amplitudes des différentes régions voir la démonstration dans les références [57].

$$\left(\begin{array}{c} A'\\ B' \end{array}\right) = p(V, a) \ \left(\begin{array}{c} A\\ B \end{array}\right)$$

On trouve une relation reliant les amplitudes de transmission des trois sites consécutifs n-1, n, n+1.

$$A_n = \left(\alpha_n + \frac{\alpha^* \beta_n}{\beta_{n-1}}\right) A_{n-1} - \left(\frac{\beta_n}{\beta_{n-1}}\right) A_{n-1} \tag{2.2}$$

avec

$$\alpha_j = \left[1 - i\left(\frac{1}{2q_n}\right)\lambda_j\right]; \beta_j = -i\left(\frac{1}{2q_n}\right)\lambda_j e^{-iq_n}$$
(2.3)

Eq. (2.2) nécessite deux conditions initiales $A_0 = 1$ et $A_1 = \alpha_1$ afin de determiner l'amplitude complete.

 q_n : est la quantité de mouvement au site n, sa valeur égale à $q_n = \sqrt{E + nF}$. Finalement le coefficient de transmission peut être calculer pour une chaine linéaire sous à un champ électrique constant à travers la relation suivante

$$T = \frac{q_0}{q_n} \frac{1}{|t_N|^2} \tag{2.4}$$

Si nous mettons F = 0 dans Eq. (2.2), après des substitutions nous trouvons la relation qui vérifie la condition de résonance : $|2q\cos q + \lambda \sin q| \le 1$ [57].

2.6 Résultats numériques

Nous avons réalisé un code numérique dont le but est la résolution de manière itérative les équations Eq. (2.4), Eq. (2.2). Il est cependant possible d'améliorer considérablement la précision de nos résultats en calculant la valeur moyenne de T. Le calcul de $\langle T \rangle$ permet alors de trouver la fonction ρ ainsi que la longueur caractéristique ℓ_c . Tous d'abord, nous commençons par l'effet de la corrélation sur le désordre, le calcul donne pour un certain nombre de défauts placés sur une chaine unidimensionnelle et en absence de champ électrique une résonance dans chaque bande permise. Le coefficient de transmission atteint l'unité ce qui concorde avec l'observation expérimentale [40, 58]. Les fonctions d'ondes obtenues ne sont pas des ondes de type de Bloch mais l'enveloppe des fonctions d'ondes est périodique [41]. Comme il est indiqué sur Fig.2.4, la présence de la corrélation provoque l'apparition des états délocalisés autour de l'énergie de résonance. Dans cette situation, le transport est favorable. Nous remarquons aussi que la variation de la concentration des défauts (dimers), n'influe que sur l'allure de la courbe de transmission autour de ε_r . La bande d'énergie devient plus étroite si nous augmentons la concentration des dimers. En dehors de la résonance, l'onde incidente se retrouve affectée par le désordre jusqu'à atteindre des transmissions quasi nuls aux bords de la bande.

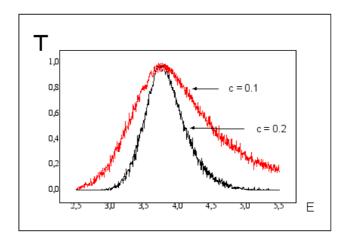


FIG. 2.4 – Coefficient de transmission en fonction de l'énergie (en unité de $\frac{\hbar^2}{2m}$) pour deux concentrations différentes c=0.1, et c=0.2

2.7 Influence du potentiel désordonné sur les états électroniques

L'application d'un champ électrique F à un système quelconque affecte les états électroniques. Cet effet est différent suivant l'intensité du champ et la taille du système. En absence de champ électrique < lnT> suit une ligne droite avec la taille de la chaîne. Cette droite change selon la nature du potentiel, nous distinguons cette différence en traçant la courbe suivante 2.5 . Les systèmes dont le potentiel est en puits présentent des

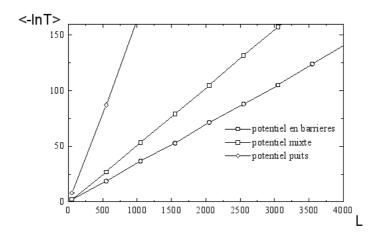


Fig. 2.5 – Logarithme du coefficient de transmission en fonction de la taille de la chaîne pour entre différents cas de potentiels pour F=0 et E=5

états plus localisés que les systèmes à barrières de potentiel. Ceci est du à la forte attraction des puits de potentiels, dans les systèmes à barrières de potentiel la transmission se fait plus facile en raison de l'effet tunnel. Evidement, pour les systèmes mixtes, l'attrac-

tion forte du puits est compensée avec l'effet tunnel dans les systèmes en barrières. Ces résultats sont confirmés par le calcul de la longueur de localisation voir la référence [54]. Par contre, une simple petite valeur de champ électrique suffira de chager complètement l'allure de la courbe, la droite subit une légère brisure. Ce comportement montre que les états sont super-localisés voir Fig. 2.6.

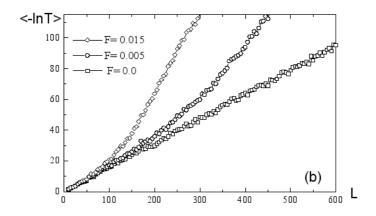


Fig. 2.6 – Logarithme du coefficient de transmission en fonction de la taille de la chaîne pour différents champs électriques d'un système avec potentiel en barrières .

2.8 L'effet du champ électrique sur les dimers aléatoires

Dans cette section, nous présentons les résultats numériques de l'effet du champ électrique sur la résonance des dimers aléatoires. Le milieu contient 10000 diffuseurs avec une concentration en impuretés égale à 0.2. Nous nous limiterons dans nos calculs à un intervalle fini de champ électrique pour rester dans l'approximation des ondes planes. Nous observons alors sur la figure (Fig. 2.7) que le coefficient de transmission décroît en fonction du champ électrique. Cette décroissance est liée à la valeur de l'énergie potentielle due à la présence des dimers alétoires. Au fur et à mesure que la force du potentiel électrique augmente l'énergie de l'onde incidente s'éloigne de la résonance. La modification du spectre énergétique induit par le champ électrique influe sur la vitesse de propagation des électrons, si nous traçons l'énergie de résonance en fonction du champ électrique nous trouvons une décroissance linéaire selon la loi suivante : $-3697,60 \ F + 3,7502 \ Fig. 2.8$. Ainsi dans cette situation, le champ électrique décélère les électrons. Pour un champ électrique égale à l'énergie de résonance $F = E_r/L$, ce dernier devient localisé.

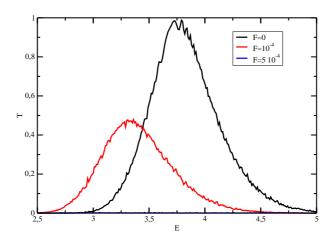


Fig. 2.7 – Cette figure représente le spectre énergétique dans le RDM avec c=20 % et trois différentes valeurs de F.

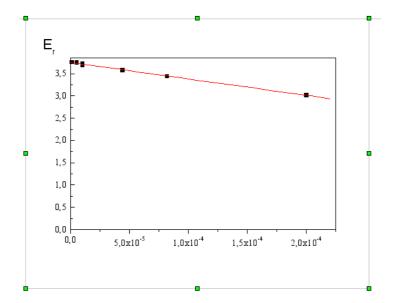


Fig. 2.8 – La figure montre la variation de l'énergie de la résonance avec le champ électrique.

2.9 Résistance

Le comportement d'une onde incidente le long d'un milieu peut être décrit par la résistance de Landauer. Cette résistance est définie à partir des réponses de la transmission. Celle-ci permet de traduire les effets de la diffusion de l'onde électronique à travers le milieu de propagation. La Fig. 2.9 montre qu'une modification dans les courbes quand

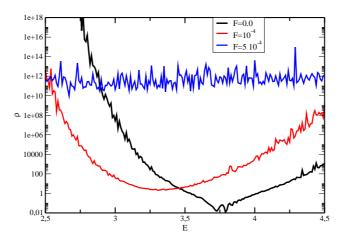


Fig. 2.9 – La figure donne la résistance ρ en fonction de l'énergie dans RDM, avec $L=10^4$. Effet du champ électrique F sur la chaine linéaire.

le champ électrique change. En absence de champ électrique, le milieu devient faiblement résistif, la résistance converge vers une valeur minimale, ce minimum disparait au fur à mesure qu'on augmente le champ électrique. Elle se stabilise lorsque le champ électrique devient relativement fort $(F=510^{-4})$. Par ailleurs, il apparait une sensibilité de la résistance à la taille du système. La figure Fig. 2.10 traduit clairement un changement de comportement des courbes, pour F=0, l'effet de bande est obtenu le long de la chaine, le transport est donc quasi-balistique à l'énergie de résonance. En présence de champ électrique, cet effet a tendance à disparaitre, de plus quand la taille du système augmente les fluctuations ont tendance à devenir plus importante, la résistance donc augmente ce qui traduit un effet de localisation. Les électrons se retrouvent à nouveau piégés dans leurs sites de départ.

2.10 Différents formes des états électroniques

Le comportement des fonctions d'ondes est observé dans les courbes <-lnT> en fonction de la taille du système. La figure Fig. 2.11 permet de décrire qualitativement la fonction enveloppe de l'onde électronique. À la résonance E_r , le comportement logarith-

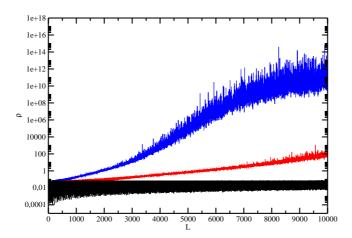


FIG. 2.10 – La figure montre la variation de ρ en fonction de L. Pour F = 0 (noir), $F = 10^{-4}$, a (rouge) et pour $F = 510^{-4}$ (bleu)

mique de la transmission devient similaire à une onde de Bloch. Pour une valeur de champ égale à 10^{-4} , on voit que l'effet de champ augmente la valeur de <-lnT> lorsque la longueur devient supérieur à 2000. En effet, La localisation est accentuée. Une valeur plus élevée de champ (510^{-4}), les états sont super-localisés. Dans ce cas, le champ éléctrique rétablit la localisation induite par le désordre.

Pour confirmer le comportement de la fonction d'onde nous pensons à faire une estimation du Lyapunov.

2.11 L'estimation de l'exposant de Lyapunov

Pour illustrer les résultats trouvés dans le paragraphe précédent, on propose une représentation graphique Fig. 2.12 pour l'exposant de Lyapunov. L'effet de moyenne statistique de T à un rythme exponentiel décroissant suggère alors de trouver un nombre réel défini comme

$$\gamma = -\lim_{L \to \infty} \frac{1}{2L} lnT \tag{2.5}$$

 γ est appelé exposant de Lyapunov. Pour une fonction d'onde étendue (non localisée), la longueur de localisation est infinie (c'est le cas pour une onde plane en absence de potentiel aléatoire). Il est alors plus commode de définir un coefficient γ égal à l'inverse de cette longueur de localisation ℓ_c . Dans le cas d'une onde non localisée, l'exposant de Lyapunov tend vers zéro, $\gamma \to 0$. Si la longueur de localisation est finie, γ est différent de zéro. γ est défini par le comportement de l'enveloppe de la fonction d'onde localisée [61]. Si ce nombre est négatif, on perd de l'information sur les trajectoires des électrons dans

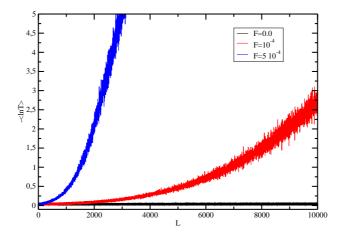


FIG. 2.11 – La figure présente – < lnT > en fonction de L pour différentes valeurs de champ électrique $F: F = 0 \text{ (noir)}, F = 10^{-4} \text{ (rouge)}$ et $F = 510^{-4} \text{ (bleu)}$.

le milieu.

La figure Fig. 2.12 montre la variation de l'exposant de Lyapunov en fonction de l'énergie, on constate qu'autour de l'énergie de résonance, $\gamma < 10^{-4}$, par contre, au delà de la résonance, $\gamma > 10^{-4}$, le résultat est satisfaisant au sens de la définition [61]. Lorsque le champ électrique augmente, le minimum qui apparait sur la courbe tend à disparaître progressivement et converge vers une valeur constante égale à $\gamma = 10^{-3}$. Dans ce cas, la longueur caractéristique ℓ_c devient inférieur à la taille du système. Cela signifie que le champ électrique augumente progressivement la longueur de la localisation ainsi le système redevient totalement désordonné [62].

2.12 Conclusion

l'étude analytique et nos calculs numériques traduisent que l'effet de la corrélation conduit à un nombre fini d'états étendus, et que l'application d'un champ électrique va supprimer l'effet de la corrélation.

Nous avons juqé intéressant de noter les points suivants :

- Pour ce type de système, Une étude statistique s'impose dans le but de discuter les propriétés de transport d'une onde électronique.
- La résistance et le coefficient de transmission ont été utilisés afin d'analyser les propriétés de transports, la présence de la corrélation et du champ électrique ensemble dans les systèmes désordonnés font décroître le coefficient de transmission produisant

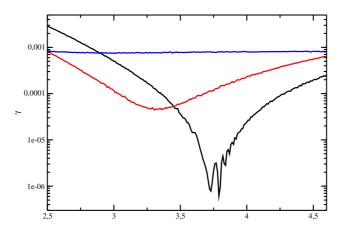


FIG. 2.12 – Exposant de Lyapunov en fonction de l'énergie pour $L=10^4$ et pour différentes valeurs de F: F=0 (noir), $F=10^{-4}$ (rouge) and F=5 10^{-4} (bleu).

ainsi une forte divergence dela résistance.

- Quand le champ électrique excède une certaine valeur critique, le mouvement des électrons est ralenti par ailleurs, les fonctions d'onde deviennent super-localisées, cette transition est reliée à la valeur du champ électrique et à la taille du système.
- Les interférences ainsi que le champ électrique jouent un rôle déterminant pour le transport. Lorsque $FL > E_r$ les interférences entre les diverses trajectoires de propagation d'un électron sont destructrices. Et c'est là que le comportement super-localisés des fonctions d'ondes trouve son origine.

Stretched-exponential Localization Induced by Electric Field in Disordered System with Correlated

A. Yedjour and F. Hamdache Laboratoire de Physique Des Plasmas Matériaux Conducteurs et Leurs Applications,

Department of Physics, Faculty of Science, Mohamed Boudiaf USTO,
University of Science and Technology of Oran Mohammed Boudiaf USTO,
P.O. Box 1505, El Menaour, Oran, Algeria

Abstract: The purpose of this study was to investigate the transport properties of a random dimer model in 1D. A Kronig-Penney model with δ -peak potentials is used to examine how the resonance energy is affected by the electric field. We discussed the influence of an electric field on the nature of the electronic states and compared the result to the case without field. We found that there are important differences, mainly for a large system size L. Localized wave functions have been obtained at particular energies which make transition between extended and stretched-exponential localized states. The most important conclusion so obtained is that the electric field applied to such systems suppresses progressively the effect of the correlation, the transmission coefficient decreases leading to the absence of transport in this kind of electrified chains.

Key words: Disordered system, random potential, electric field, localization, electronic states

INTRODUCTION

There is a growing interest for questions pertaining to wave spread in disordered lattices, which are related to the search of optical or acoustic localization and recently of cold atom localization (Economou and Alkire, 1988; (John and Stephen, 1983; Skipetrov et al., 2008). The well-studied case of electronic systems with independent site disorder does not fully cover all cases of such wavelike excitations in complex media. A well-known result of the Anderson model for the site energy is the absence of long- range transport in one dimensional system. All electronic states in one dimension are exponentially localized regardless of the amount of disorder (Anderson, 1958).

Much attention has been paid to special disorder correlations for which new phenomena are expected to appear. For instance, although Anderson localization occurs in one dimension, one finds partial delocalization even for an infinitesimal amount of disorder in the presence of correlations (Datta et al., 1993; Sanchez et al., 1994). A number of recent works dealing with tight-binding Hamiltonian strongly suggest that the occurrence of correlations in neighbour random parameters are not independent with a correlation length (Evengelou, 1990),

(Dunlap et al., 1990; Wu and Phillips, 1991). Furthermore, the existence of a mobility edge between extended and localized states was found for 1D random system with weak long-range correlated disorder) (Molina, 2005; Esmailpour et al., 2006). Long-range disorder induces the appearance of delocalization and long range transport.

The Random Dimer Model (RDM) can be shown to be an example of the correlated disordered system. In this 1D random model, the site energy takes one out of two possible values, one of which is distributed at random to pairs along the chain, so that the correlation length coincides with lattice spacing. On the basis of this interest the authors claimed that the RDM has \sqrt{N} states which are extended over the whole sample, with N the number of sites in the system. A discrete number of extended states was found numerically (Evengelou and Wang, 1993), (Evengelou and Economou, 1993) and was observed recently in the experiment with semiconductor random superlattices (Bellani et al., 1999). In Kronig Penney model, the electronic field delocalizes the eigenstates where the wave functions decay with a power (Soukoulis et al., 1983; Cota et al., 1985), in this regime, the resistance was checked experimentally. For sufficiently large field strengths, the eigenstates become extended (Markos and Kramer, 1993; Markos and

Corresponding Author: Afifa Yedjour, Laboratoire de Physique Des Plasmas Matériaux Conducteurs et Leurs Applications,
Department of Physics, Faculty of Science, Mohamed Boudiaf USTO,
Halianaire of Science and Tarken Learner form Mahamed Boudiaf USTO,

University of Science and Technology of Oran Mohammed Boudiaf USTO, P.O. Box 1505,

El Menaour, Oran, Algeria

Henneke, 1994). When the electric field vanishes, it is well-known that the spectrum is then pure and dense), (Abrahams *et al.*, 1979; Landauer, 1970). The wave functions are exponentially localized, with a localization length that decreases with increasing disorder (Mott, 1968). The transmission coefficient has been used successfully to analyze the nature of the electronic states. The effect of exponentially localized eigen-states can be observed in the exponential decreases of the transmission coefficient with the length of the system (Anderson *et al.*, 1980; Thouless, 1974). Moreover, the connection between resistance, or more precisely, conductance and transmission coefficient can be carried out via Landauer formula (Landauer, 1970). One find:

$$\ln(1+\rho) = -\frac{\ln T}{L}$$

with ρ the resistance. Such a behaviour can be expected from the self-averaging of the Lyapunov exponent γ which is the inverse of the localisation length in 1D systems. This characteristic length l is defined as:

$$I_{c}^{-1} = -\frac{1}{2I} \ln T$$

This parameter is always positive and describes the spatial scaling properties of a disordered system (Soukoulis and Economou, 1981; Liffshitz *et al.*, 1988).

In this study, we first discussed the delocalization induced by correlations in the Kronig Penney model. Here, we used an array of δ -function potentials with independent random strengths and study numerically the transmission properties for a finite length of the lattice. We derived exact results for the main characteristics of the model using a transfer matrix combined with a Poincaré map approach. Secondly, we examined the size dependence of the transmission coefficient of a linear RDM chain subject to electric field. When F = 0, the transmission coefficients at particular energy close to 1 and a deep minimum around the resonant energy in the resistance is found, indicating that the localization length of those states is large. For F ≠ 0, we observed that the transmission decreases with increasing F where F is the electric strength. However, this minimum disappears and the values of resistance become extremely large. As soon as F is present, the electron gains the energy V(x): V(x) =-Fx. This electrical potential suppresses the resonance energy induced by correlation. That induces a transition between extended and localized behaviour. Finally, we discussed our calculations of the Lyapunov exponent that indicate that all states around the resonance in the presence of the electric field have a localization length smaller than the system size. We expected from this result a mobility edge that depends on the strength of the field in the RDM.

MODEL

Here we considered a 1D Kronig-Penney model with random δ -function potentials subject to an applied electric field. The problem is defined by the Schrödinger:

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \sum_{n=0}^{L} \lambda_n \delta(x-n) - \mathrm{Fx} \right] \Psi(x) = \mathrm{E}\Psi(x) \tag{1}$$

where, λ_n is a set of independent random variables that measures the strength of the δ -potentials. Here E is the energy of the electron measured in atomic units and Ψ is the wave function. We proceed with the problem of the disordered lattice containing a certain number of pair impurities placed randomly. We kept the positions of the δ -functions to be regularly spaced $\{x_n = n\}$ but we introduced a correlated disorder, for which λ_n takes only two values: λ and λ' , where appears only in pairs of neighbouring sites (dimer impurities). The electronic potential V(x) is given by -Fx term in Eq. 1 with Fdenoting the electric field strength..

In this section, we presented a numerical study of the transmission coefficient of this model. Our approach is inspired by Soukoulis *et al.* (1983), Flores *et al.* (1989) who investigated the transmission coefficient and the nature of the electronic states in 1D disordered systems. They found that the transmission coefficient behaves as, with $f \approx \frac{1}{F}$. This reveals power-law localization.

Here, we calculated the transmission coefficient Tin the above model (RDM) using the transfer matrix approach. We took an electron impinging from the left of a set of δ -function potentials with wave function $\Psi_0(x) = e^{iq_0x} + rne^{-iq_0x}$. The energy of the electron is $E = q^2_0$ with q_0 the momentum of the incident electron. The wave function in the right-hand side of the sample of length L is $\Psi(r) = T_N e^{iq_nx}$. Here $q_r = \sqrt{E+FL}$ with L = N+2; q_r denotes the momentum of the emerging wave. t_N and t_n are the transmission and the reflection amplitudes of the RDM with N scatterers respectively between two impurities, we will replace V(x) by a constant value so that the solution between two impurities are plane wave functions (Soukoulis et al., 1983; Cota et al., 1985).

However, this is valid only when the electric potential between the ends of a sample is infinitesimally small.

The solution of Eq. 1 can be computed recursively for both transmission and reflection amplitude using well-known transfer-matrix technics (Kirilov and Trott, 1994). Then, the transmission amplitude can be written as:

$$A_{n} = \left(\alpha_{n} + \frac{\alpha \beta_{n}}{\beta_{n-1}}\right) A_{n-1} - \left(\frac{\beta_{n}}{\beta_{n-1}}\right) A_{n-1}$$
 (2)

where $A_n \equiv t_n$ and:

$$\alpha_{j} = \left[1 - i\left(\frac{1}{2q_{n}}\right)\lambda_{j}\right] \beta_{j} = -i\left(\frac{1}{2q_{n}}\right)\lambda_{j}e^{-iq_{n}}$$
 (3)

Equation 2 supplied two boundary conditions, $A_0 = 1$ and $A_1 = 1$ to determine the amplitudes completely. q_n is the momentum of the electron at the site n. Finally, the transmission coefficient can be calculated for each chain from:

$$T = \frac{q_0}{q_r} \frac{1}{|t_N|^2}$$
 (4)

RESULTS AND DISCUSSION

We first discussed our numerical results on the transmission coefficient for a RDM and investigated what changes occur when the electric field is applied along the lineair chain.

We choose for convenience the length L=1000 and a dimer concentration equal to 20\%. We fixed $\lambda=1$ for the values of potential strength of the host lattice and $\lambda'=1.5$ for the dimer impurities.

Present results are similar to the ones obtained in by Sanchez *et al.* (1994), Dunlap *et al.* (1990), where a unique energy was found in the allowed band (recall their model is a single band) and where a perfect transmission T = 1 was see in the RDM. In such case, the system of electronic transport becomes ballistic. Thus, nondecreasing transmission coefficient for particular energy shows the existence of extended states arrown this one.

In Fig. 1, we showed the transmission coefficient versus energy for intervals near the first resonance. The spectrum of the Kronig Penney model follows the equation $|2q\cos q+\lambda\sin q|\le 1$ (this is the condition to be able to move in the perfect lattice) when λ is fixed. Here, we have averaged the transmission coefficient for 1000 realizations with an accuracy of 1\%. We found that around the first resonance $E_r=3.75$ the transmission coefficient reaches values very close to 1. All realizations show the same peak around E_r . It is clear from Fig. 1 that

the states close to the resonant energy have good transmission properties, similar to those of the resonant energy.

When F \neq 0, there are some important differences with respect to the case F = 0. For the same concentration of dimer impurities, we observe that the transmission coefficient decreases for a field as small as 5.10^{-4} . In this case, the small F will only slightly shift the resonant energy and the transmission coefficient will completely vanish.

We showed in Fig. 2, the resistance of a RDM in both the presence and the absence of an electric field with the same concentration of impurities. The lower curve, corresponding to a dimer model with F = 0, exhibits a minimum resistance about ten orders of magnitude below the resistance for 10⁻⁴ (the middle curve). For the F considered in Fig. 2, the curve saturates to essentially a constant value with energy. However, the resistance becomes extremely big compared to the same RDM

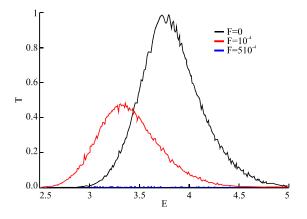


Fig. 1: Plot of resistance versus energy in RDM, with L = 10⁴ for different values of the electric field

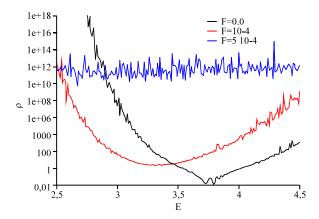


Fig. 2: Plot of resistance versus energy in RDM, with $L = 10^4$ for different values of the electric field

without electric field. Such as the localization scenario is quite different in the presence of an electric field.

The dependence of the resistance with system size is useful to study the spatial structure of the electronic states. Exponentially localized states lead to a nonohmic behaviour of the resistance, which increases exponentially with the system size.

In Fig. 3, around the resonance, the resistance has a constant value which indicates that the band of state exist with very good transport for a dimer model without field. In this case, the effect of the correlation in the random dimer potential is dominant, the electron gains more kinetic energy behaving essentially as a free particle in a potential well.

Not only the resonant energy has a low resistance for any length of the chain (lower curve), but also when F is far from zero F = 10, the plot shows a relatively small resistance, exhibits a good behaviour (middle curve). For $F = 5.10^{-4}$ and for large L the resistance rises quickly to large values.

To investigate the nature of electronic states around the resonance, we have analyzed the average scaling of In T with the system size.

In Fig. 4, we showed the results for $\langle \text{In T} \rangle$ versus L for a fixed value of the energy and for different values of field. First, as was done for the resistance, we compared our results to the size dependence of transmission

coefficient when the electric field is present. We saw that for F=0 the curve is flat and $\langle \text{In T} \rangle$ reaches a constant value. We concluded that the states are extended. These extended states are not of the Block-type encountered in periodic solids (Hilke and Flores, 1997; Xiuqing and Xintian, 1997).

When F=0 on the other hand, we observed three things. For small L<2000 we obtained similar behaviour as for F=0 However, for increasing F, the value of <In T>changes considerably for relatively small changes of F which suggests exponential decreasing for transmission coefficient, with an exponent that depends on F. For L>700, the electronic states are stretched exponential-localized. This means that this phase has a zero measure in the thermodynamic limit. For $F=5.10^{-4}$ this phase, will diverge for large L. Here, the system will be return to equilibrium.

We investigated the Lyapunov coefficient which represents the inverse of the localization length l_c . As is shown in Fig. 5, when F = 0, energies close to the resonant energy E_r have $\gamma < 10^{-4}$. This is in agreement with the notion that delocalization of the electronic states occurs $l_c > 10^4$.

When we increased F, we observed an increase of the Lyapunov exponent that stays much smaller than one. This effect coincides with the standard definition of γ) (Liffshitz *et al.*, 1988). The localization can be explained by

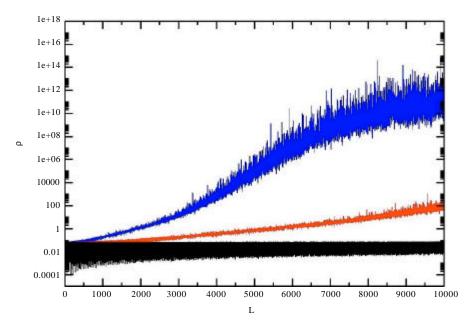


Fig. 3: Plot of the resistance ρ versus length L at the resonant energy $E_r For F = 0$ (dark) a band of state exist with very good transport. For F = 0, a good transport exist for L>700 (red). If $F = 5.10^{-4}$ (blue) the resistance converges to a large value

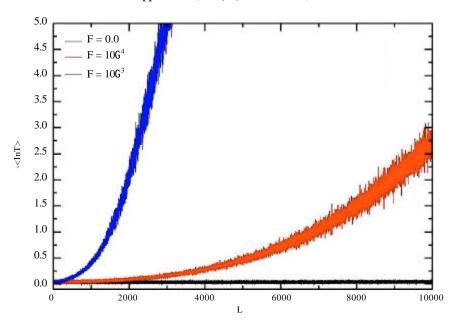


Fig. 4: Plot of $\langle \ln T \rangle$ versus length L at the resonant energy E_r for different values of F F = 0 (dark), F= 10^{4} (red) and F = 5.10^{-4} blue)

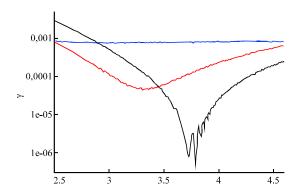


Fig. 5: Plot of Lyapunov exponent versus energy with $L = 10^4$ and for different values of strength of field F = 0 (dark), $F = 10^{-4}$ (red) and $F = 5.10^{-4}$ (blue)

the fact that when the electric field strength is increased, the effective potential component as FN>E_r indicating that the states decay as exponential-law. We concluded that the delocalization-localization can be observed in dimer systems such as the electric field suppresses progressively the effect of the correlation.

CONCLUSION

We have studied the effect of electric field on a linear chain with correlated disorder. To analyze the properties of electronic transport, we have used the Kronig-Penny model. Based on the results, we have noted that the electric field impedes the movement of the electrons in the presence of correlation. For relatively small field, we notice that the transmission is stretched exponential-law decaying with the length. This decaying depends on the strength of the electric field.

The electric field has an effect on the resonance energy that carries with it a variation of transmission coefficient which influences the nature of the electronic states. The Lyapunov exponent was also used to analyze the localization length, we have found out that when the electronic field increases, the Lyapunov exponent is saturated by a constant value that is lower then the system's size, which indicates a localization of the electronic states.

REFERENCES

Abrahams, E., P.W. Anderson, D.C. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, 1979. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. Phys. Rev. Lett., 42: 673-676.

Anderson, P.W., 1958. Absence of diffusion in certain random lattices. Phys. Rev., 109: 1492-1505.

Anderson, P.W., D.J. Thouless, E. Abrahams and D.S. Fisher, 1980. New method for a scaling theory of localization. Phys. Rev. B, 8: 3519-3526.

Bellani, V., E. Diez, R. Hey, L. Toni and L. Tarricone et al., 1999. Experimental evidence of delocalized states in random dimer superlattices. Phys. Rev. Lett., 82: 2159-2162.

- Cota, E., J.V. Jose and M.Y. Azbel, 1985. Delocalization transition in random electrified chains with arbitrary potentials. Phys. Rev. B, 32: 6157-6165.
- Datta, P.K., D. Giri and K. Kundu, 1993. Nonscattered states in a random-dimer model. Phys. Rev. B, 47: 10727-10737.
- Dunlap, D.H., H.L. Wu and P. Phillips, 1990. Absence of localization in a random-dimer model. Phys. Rev. Lett., 65: 88-91.
- Economou, E.N. and R. Alkire, 1988. Effect of potential field on ion deflection and shape evolution of trenches during plasma-assisted etching. J. Electrochem. Soc., 135: 941-949.
- Esmailpour, A., M. Esmaeilzadeh, E. Faizabadi, P. Carpena and M. Reza Rahimi, 2006. Metal-insulator transition in random Kronig-Penney superlattices with long-range correlated disorder. Phys. Rev. B, 74: 024206-024206.
- Evengelou, S.N., 1990. Scaling exponents at the mobility edge. Phys. A, 167: 199-214.
- Evengelou, S.N. and A. Z. Wang, 1993. Localization in paired correlated random binary alloys. Phys. Rev. B, 47: 13126-13136.
- Evengelou, S.N. and E.N. Economou, 1993. Reflectionless modes in chains with large-size homogeneous impuriti. Phys. A Math, Gen., 26: 2803-2803.
- Flores, C., J. V. Jose and G. Monsiavais, 1989. Statistical properties of disordered 1-D model in a field. J. Phys. Soc., 27: 369-369.
- Hilke, M. and J.C. Flores, 1997. Delocalization in continuous disordered systems. Phys. Rev. B, 55: 10625-10630.
- John, S. and M.J. Stephen, 1983. Wave propagation and localization in a long-range correlated random potential. Phys. Rev. B, 28: 6358-6368.
- Kirilov, M. and M. Trott, 1994. K-space treatment of reflection and transmission at a potential step. Am. J. Phys., 62: 553-558.

- Landauer, R., 1970. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. Philosophical Mage., 21: 863-867.
- Liffshitz, I.M., S.A. Gredeskul and L.A. Pasture, 1988. Introduction to Theory of Disordered Systems. Wiley, New York.
- Markos, P. and B. Kramer, 1993. Statistical properties of the Anderson transition numerical results. Philosophical Magazine Part B, 68: 357-379.
- Markos, P. and M. Henneke, 1994. Metal-insulator transition in the four-dimensional Anderson model. J. Phys. Condens. Matter, 6: L765-L765.
- Molina, M.I., 2005. Nonlinear surface impurity in a semi-infinite lattice. Phys. Rev. B, 71: 035404-035404.
- Mott, N.F., 1968. Conduction in glasses containing transition metal ions. J. Non-Crystal. Solids, 1: 1-17.
- Sanchez, A., E. Macia and F. Dominguez-Adame, 1994. Suppression of localization in Kronig-Penney models with correlated disorder. Phys. Rev. B, 49: 147-157.
- Skipetrov, S.E., A. Minguzzi and B. Shapiro, 2008. Anderson, localization of a Bose-Einstein condensate in a 3D random potential. Phys. Rev. Lett., 100: 165301-165301.
- Soukoulis, C.M. and E.N. Economou, 1981. Static conductance and scaling theory of localization in one dimension. Phys. Rev. Lett., 46: 618-621.
- Soukoulis, C.M., J.V. Jose, E.N. Economou and P. Sheng, 1983. Localization in one-dimensional disordered systems in the presence of an electric field. Phys. Rev. Lett., 50: 764-767.
- Thouless, D.J., 1974. Electrons in disordered systems and the theory of localization. Phis. Rep., 13: 93-142.
- Wu, H.L. and P. Phillips, 1991.. Polyaniline is a randomdimer model: A new transport mechanism for conducting polymers. Phys. Rev. Lett., 66: 1366-1369.
- Xiuqing H. and W. Xintian, 1997. Periodic wave functions and number of extended states in random dimer systems. Phys. Rev. B, 55: 11018-11021.

Chapitre 3

Etude statistique de transport d'un condensat de Bose-Einstein dans un champ de tavelures

3.1 Introduction

Afin d'étudier les propriétés statistiques et dynamiques d'un condensat de Bose-Einstein dans un potentiel de champ de tavelures (speckle) nous décrivons dans un premier temps la diffusion d'une onde atomique avec un diffuseur. En particulier, nous nous intéressons à sa diffusion avec le champ de tavelures. Ensuite, nous déterminerons quelques longueurs qui caractérisent le modèle que nous avons choisi : il s'agit d'un potentiel optique en 3D dans un condensat en dehors d'un piège harmonique. Dans un second temps, nous calculerons la self-énergie, avec elle nous montrerons comment la propagation des ondes est affectée par la présence des diffuseurs. Enfin nous utiliserons les paramètres nécessaires (amplitude de désordre, interactions, nombres de diffuseurs) afin d'étudier le transport d'un condensat de Bose-Einstein sans interactions en présence de désordre.

3.2 Effets ondulatoires en présence de désordre

Nous introduisons dans cette partie un formalisme ondulatoire plus général qui est également en mesure de décrire la diffusion multiple d'une onde de matière. Nous allons présenter les objets et les équations de base de cette théorie, à savoir

- la fonction de Green moyenne, qui permet de calculer la fonction d'onde moyenne et qui verifié l'équation de Dyson.
- dans l'approximation de Born, l'opérateur de masse Σ fournit seulement l'amplitude de diffusion. En allant au-delà de l'approximation de Born, le développement itérative fait apparaître les fonctions de corrélations d'ordre arbitrairement élevé.
- les pôles de la fonction de Green fournissent l'equation de dispersion qui permet de

calculer les nouveaux modes dans le milieu désordonné.

3.2.1 Aspect théorique

On considère ici la diffusion élastique d'un atome par un potentiel $V(\overrightarrow{\mathbf{r}})$.

L'équation de Schrödinger correspondant pour l'atome de masse m et de vecteur position $\overrightarrow{\mathbf{r}} = \overrightarrow{\mathbf{r}'} - \overrightarrow{\mathbf{r}''}$ s'écrit comme

$$H\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\overrightarrow{\mathbf{r}}) \right] \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = E\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})$$
 (3.1)

où $V(\overrightarrow{\mathbf{r}})$ est l'intéraction de diffusion.

On cherche une solution à cette équation, tel que ψ_0 est un état propre de H_0 de même énergie que ψ .

La solution est de la forme

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V |\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})\rangle$$
 (3.2)

C'est l'équation de Lippmann-Schwinger. En appliquant $\langle \overrightarrow{\mathbf{r}} |$ à gauche, on obtient :

$$\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = \phi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) + \int d\overrightarrow{\mathbf{r}}' \langle \overrightarrow{\mathbf{r}} | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V | \overrightarrow{\mathbf{r}}' \rangle \langle \overrightarrow{\mathbf{r}}' | V | \psi \rangle$$
(3.3)

La fonction de Green de l'équation de Schrödinger libre est

$$\langle \overrightarrow{\mathbf{r}'} | \widehat{G}_0 | \overrightarrow{\mathbf{r}'} \rangle = \langle \overrightarrow{\mathbf{r}'} | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} | \overrightarrow{\mathbf{r}'} \rangle = -\frac{2m^*}{4\pi} \frac{e^{i\mathbf{k}|\overrightarrow{\mathbf{r}'} - \overrightarrow{\mathbf{r}'}|}}{|\overrightarrow{\mathbf{r}'} - \overrightarrow{\mathbf{r}'}|}$$
(3.4)

Avec $\mathbf{k} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, donc

$$\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = e^{i\overrightarrow{\mathbf{k}}.\overrightarrow{\mathbf{r}}} - \frac{2m^*}{4\pi} \int d\overrightarrow{\mathbf{r}}' \frac{e^{i\mathbf{k}|\overrightarrow{\mathbf{r}}-\overrightarrow{\mathbf{r}'}|}}{|\overrightarrow{\mathbf{r}}-\overrightarrow{\mathbf{r}'}|} V(\overrightarrow{\mathbf{r}'}) \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}'})$$
(3.5)

On s'interesse à l'approximation de Fraunhoffer, lorsque ${\bf r} \longrightarrow \infty$

$$|\mathbf{k}|\overrightarrow{\mathbf{r}} - \overrightarrow{\mathbf{r}'}| = |\mathbf{k}||\mathbf{r}| \left(1 + (\frac{\mathbf{r}'}{\mathbf{r}})^2 - \frac{2\overrightarrow{\mathbf{r}}.\overrightarrow{\mathbf{r}'}}{\mathbf{r}^2}\right)^{1/2} \simeq |\mathbf{k}||\mathbf{r}| - \overrightarrow{\mathbf{k}'}.\overrightarrow{\mathbf{r}'}$$

où $\overrightarrow{\mathbf{k}'} = |\mathbf{k}| \frac{\overrightarrow{\mathbf{r}}}{\mathbf{r}}$ nous obtenons ainsi

$$\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = e^{i\overrightarrow{\mathbf{k}} \cdot \overrightarrow{\mathbf{r}}} + \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$$
(3.6)

avec $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ donnée par

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{2m^*}{4\pi} \int d\overrightarrow{\mathbf{r}'} e^{i\overrightarrow{\mathbf{k}'} \cdot \overrightarrow{\mathbf{r}'}} V(\overrightarrow{\mathbf{r}'}) \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}'})$$
(3.7)

qui résulte d'une onde plane se diffusant sur un potentiel V.

3.2.2 Lien entre l'amplitude de diffusion et la matrice de diffusion

D'aprés le paragraphe précedent, la fonction d'onde ψ s'écrit comme

$$\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = \phi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) + \int d\overrightarrow{\mathbf{r}}' G_0(\overrightarrow{\mathbf{r}}, (\overrightarrow{\mathbf{r}}') V(\overrightarrow{\mathbf{r}}') \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}'))$$
(3.8)

La matrice t est définie par la relation :

$$\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = \phi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) + \int \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} d\overrightarrow{\mathbf{r}''} G_0(\overrightarrow{\mathbf{r}}, \overrightarrow{\mathbf{r}'}) \ t(\overrightarrow{\mathbf{r}'}, \overrightarrow{\mathbf{r}''}) \ \phi(\overrightarrow{\mathbf{r}''})$$
(3.9)

On peut formellement développer cette expression en série de Taylor et la réécrire sous la forme

$$t(\overrightarrow{\mathbf{r}}, \overrightarrow{\mathbf{r}'}) = V(\overrightarrow{\mathbf{r}})\delta(\overrightarrow{\mathbf{r}} - \overrightarrow{\mathbf{r}'}) + V(\overrightarrow{\mathbf{r}})G_0(\overrightarrow{\mathbf{r}}, \overrightarrow{\mathbf{r}'})V(\overrightarrow{\mathbf{r}'}) + \int d\overrightarrow{\mathbf{r}''}V(\overrightarrow{\mathbf{r}})G_0(\overrightarrow{\mathbf{r}}, \overrightarrow{\mathbf{r}''})V(\overrightarrow{\mathbf{r}''})G_0(\overrightarrow{\mathbf{r}''}, \overrightarrow{\mathbf{r}'})V(\overrightarrow{\mathbf{r}'}) + \dots$$
(3.10)

qu'on l'introduit de façon plus formelle, on écrivant :

$$|\psi\rangle = |\overrightarrow{\mathbf{k}}\rangle + \widehat{G}_0 \widehat{t}|\overrightarrow{\mathbf{k}}\rangle$$
 (3.11)

On voit de suite

$$\widehat{t} = \widehat{V} + \widehat{V} \ \widehat{G}_0 \ \widehat{t} \tag{3.12}$$

et analogie avec l'équation de Lippman-Schwinger

$$|\psi\rangle = |\overrightarrow{\mathbf{k}}\rangle + \widehat{G}_0\widehat{V}|\mathbf{k}\rangle$$
 (3.13)

si on prend $|\phi\rangle = |\mathbf{k}\rangle$ dans l'équation (4.8)

 \widehat{G}_0 est la fonction de Green "libre", et $|\overrightarrow{\mathbf{k}}\rangle$ est une onde plane.

On définit alors la matrice de diffusion \hat{t} par la relation suivante :

$$t(\overrightarrow{\mathbf{k}}', \overrightarrow{\mathbf{k}}) = \langle \overrightarrow{\mathbf{k}}' | \widehat{t} | \overrightarrow{\mathbf{k}} \rangle$$
 (3.14)

avec $\langle \overrightarrow{\mathbf{k}'} | \widehat{t} | \overrightarrow{\mathbf{k}} \rangle$ sont les élements de l'opérateur \widehat{t} .

Si on applique aussi dans cette expression $\langle \overrightarrow{\mathbf{r}}|$ à gauche on trouve

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \overrightarrow{\mathbf{r}} | \overrightarrow{\mathbf{k}} \rangle + \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} \langle \overrightarrow{\mathbf{r}} | \widehat{G}_0 | \overrightarrow{\mathbf{r}} \rangle \langle \overrightarrow{\mathbf{r}} | \widehat{t} | \overrightarrow{\mathbf{k}} \rangle$$
 (3.15)

avec

$$\langle \overrightarrow{\mathbf{r}} | \overrightarrow{\mathbf{k}} \rangle = \frac{e^{i \overrightarrow{\mathbf{k}} \cdot \overrightarrow{\mathbf{r}}}}{(2\pi)^{3/2}}$$

De même, dans l'approximation de Fraunhoffer,

$$G_0(\overrightarrow{\mathbf{r}}, \overrightarrow{\mathbf{r}'}) \simeq \frac{2m^*}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} e^{i\overrightarrow{\mathbf{k}'} \cdot \overrightarrow{\mathbf{r}'}}$$

En utilisant la relation de fermeture

$$\int d \overrightarrow{\mathbf{r}'} | \overrightarrow{\mathbf{r}'} \rangle \langle \overrightarrow{\mathbf{r}'} | = 1$$

on trouve

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\overrightarrow{\mathbf{k}}.\overrightarrow{\mathbf{r}'}}}{(2\pi)^{3/2}} + \frac{e^{ikr}}{r} \left(\frac{-2m^*}{4\pi}\right) \langle \overrightarrow{\mathbf{k}'} | \widehat{t} | \overrightarrow{\mathbf{k}} \rangle$$
(3.16)

Ainsi, le lien entre la matrice \hat{t} et l'amplitude de diffusion $f(\overrightarrow{\mathbf{k}}, \overrightarrow{\mathbf{k}'})$ nous permet d'écrire.

$$f\left(\overrightarrow{\mathbf{k}}, \overrightarrow{\mathbf{k}'}\right) = \frac{2m^*}{4\pi} \langle \overrightarrow{\mathbf{k}'} | \widehat{t} | \overrightarrow{\mathbf{k}} \rangle \tag{3.17}$$

Nous verrons plus tard que pour n particules (atomes), cette amplitude de diffusion liée à la matice \hat{t} décrit toute la diffusion multiple.

3.2.3 Longueur de diffusion

On définit la longueur de diffusion d'un seul diffuseur (a) par la relation,

$$a = -\lim_{\mathbf{k} \to 0} f\left(\overrightarrow{\mathbf{k}}, \overrightarrow{\mathbf{k}'}\right) \tag{3.18}$$

Dans la suite, on suppose que l'atome et le diffuseur ont la même masse m, cela revient à dire que $m^* = \frac{m}{2}$. Au fait, dans l'approximation de Born, on se restreint au premier terme du développement perturbatif de l'amplitude de diffusion

$$a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} V(\overrightarrow{\mathbf{r}}) \tag{3.19}$$

Aussi, dans l'approximation de Fraunhofer la longueur de diffusion est définie comme

$$a \simeq \frac{m}{4\pi\hbar^2} t(\overrightarrow{\mathbf{k}}' = \overrightarrow{0}, \overrightarrow{\mathbf{k}} = \overrightarrow{0})$$
 (3.20)

On peut obtenir cette relation à partir de l'équation (3.8).

Soit

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\overrightarrow{\mathbf{k}}\cdot\overrightarrow{\mathbf{r}}}}{(2\pi)^{3/2}} + \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k'}} G_0(\overrightarrow{\mathbf{k'}}) e^{i\overrightarrow{\mathbf{k'}}\cdot(\overrightarrow{\mathbf{r}}-\overrightarrow{\mathbf{r'}})} \langle \overrightarrow{\mathbf{r'}} | \widehat{t} | \overrightarrow{\mathbf{k}} \rangle$$
(3.21)

avec

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{i \, \mathbf{k} \cdot \overrightarrow{\mathbf{r}}}}{(2\pi)^{3/2}} + \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{k'} G_0(\overrightarrow{\mathbf{k}}') \langle \overrightarrow{\mathbf{k}}' | \widehat{t} | \overrightarrow{\mathbf{k}} \rangle e^{i \overrightarrow{k}' \cdot \overrightarrow{r}}$$
(3.22)

on remplace $G_0(\overrightarrow{\mathbf{k}'})$ par son expression

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{r}'}}}{(2\pi)^{3/2}} + \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{k'} \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 \mathbf{k'}^2}{m} + i0} t(\vec{\mathbf{k}}, \vec{\mathbf{k'}}) e^{i\vec{k'}\cdot\vec{r'}}$$
(3.23)

Pour $\overrightarrow{k} = \overrightarrow{0}$, l'approximation de Fraunhofer nous autorise à écrire

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\overrightarrow{\mathbf{k}}.\overrightarrow{\mathbf{r}'}}}{(2\pi)^{3/2}} + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\overrightarrow{\mathbf{k}'} - \frac{m}{\hbar^2 \mathbf{k}'^2} t(\overrightarrow{0}, \overrightarrow{0}) e^{i\overrightarrow{k'}.\overrightarrow{r}'}$$
(3.24)

on trouve

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\overrightarrow{\mathbf{k}}.\overrightarrow{\mathbf{r}}}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{m}{4\pi\hbar^2\mathbf{r}}t(\overrightarrow{0}, \overrightarrow{0}) = \phi(\mathbf{r}) - \frac{a}{\mathbf{r}}$$
(3.25)

Ainsi dans l'approximation de Fraunhofer et dans l'approximation de Born on obtient

$$a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} V(\overrightarrow{\mathbf{r}}) \tag{3.26}$$

3.3 Equation de Gross-Pitaevskii

L'équation de Gross-Pitaevskii repose sur les hypothèses suivantes : Pour un condensat dilué, la distance entre atomes est trés grande par rapport à la longueur de diffusion a ($\sim 100a_0$). Pour les alcalins, avec a_0 est l'extension spatiale du condensat en l'absence d'interactions. $V(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = U_0 \delta(\overrightarrow{\mathbf{r}} - \overrightarrow{\mathbf{r}'})$ décrit le potentiel d'interactions entre atomes. Les atomes sont suffisamment froids pour que l'approximation à basse énergie s'applique. U_0 est choisi de sorte que à l'approximation de Born, la longueur de diffusion a qui lui est associé est la même que la longueur de diffusion. En remplaçant dans la formule (Eq.3.26), on trouve

$$a = \frac{mU_0}{4\pi\hbar^2}$$

On supposera dans la suite que les interactions sont répulsives, de sorte que U_0 et a soient positifs. L'idée du potentiel effectif, c'est qu'on utilise la théorie de diffusion qui dit que si $r \gg R_B$, avec R_B n'est autre que la portée du potentiel effectif, on peut remplacer le vrai potentiel microscopique par n'importe quel potentiel effectif ayant la même longueur de diffusion a, on décrit alors la même fonction d'onde $\psi(\overrightarrow{r}) = 1 - \frac{a}{r}$. On part de l'Hamiltonien de l'équation de Schrödinger à N particules en première quantification :

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{\widehat{p_i^2}}{2m} + V_{ext}(\overrightarrow{r_i}) \right] + \sum_{i < j} U\left(\overrightarrow{\mathbf{r}_i} - \overrightarrow{\mathbf{r}_j}\right)$$
(3.27)

Le potentiel dans ce cas est le potentiel effectif $U_0\delta\left(\overrightarrow{\mathbf{r}_i}-\overrightarrow{\mathbf{r}_j}\right)$. On exige $R_B\ll n^{-1/3}$ où $n^{-1/3}$ est la distance typique (moyenne) entre atomes.

On calcule l'énergie de l'état $|\psi_0\rangle$ du condensat, avec

$$|\psi_0\rangle = \prod_{i=1}^N |\phi_i\rangle$$

où $|\psi_0\rangle$ est supposé normée

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$$

 $|\phi\rangle$ présente un état propre à une particule à la même d'énergie que $|\psi_0\rangle$ tel que

$$H_0|\phi\rangle = \varepsilon|\phi\rangle$$

Pour chercher l'énergie propre de l'Hamiltonien \widehat{H} , il suffit de calculer les éléments de la matrice de l'Hamiltonien H, $\langle \psi_0 | \widehat{H} | \psi_0 \rangle$. Le premier terme des éléments de la matrice de \widehat{H} donne le terme cinétique.

Energie cinétique du condensat

$$\varepsilon_{k} = \langle \psi_{0} | \sum_{i=1}^{N} \frac{\widehat{p_{i}^{2}}}{2m} | \psi_{0} \rangle = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m} \langle \psi_{0} | \widehat{p_{i}^{2}} | \psi_{0} \rangle$$

$$\varepsilon_{k} = \int d \overrightarrow{\mathbf{r}} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m} \langle \psi_{0} | \widehat{p_{i}} | \overrightarrow{\mathbf{r}} \rangle \langle \overrightarrow{\mathbf{r}} | \widehat{p_{i}} | \psi_{0} \rangle$$

$$\varepsilon_{k} = \sum_{i=1}^{N} \int d \overrightarrow{\mathbf{r}} \frac{1}{2m} |\langle \phi | \widehat{p_{i}} | \overrightarrow{\mathbf{r}} \rangle|^{2} \langle \phi_{1} \langle \phi_{2} | \phi \rangle_{1} ... |\phi_{2} \rangle ...$$

avec l'opérateur $\widehat{p} = -i\hbar \overrightarrow{\nabla}$

$$\varepsilon_k = \sum_{i=1}^N \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} \frac{\hbar^2}{2m} |\overrightarrow{\nabla} \phi_i(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2.$$

L'énergie cinétique est donc

$$\varepsilon_k = \langle \psi_0 | \sum_{i=1}^N \frac{\widehat{p_i^2}}{2m} | \psi_0 \rangle = N \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} \frac{\hbar^2}{2m} |\overrightarrow{\nabla} \phi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2$$

Potentiel extérieur

$$\varepsilon_{ext} = \langle \psi_0 | \sum_{i=1}^N V_{ext}(\overrightarrow{r_i}) | \psi_0 \rangle$$

$$\varepsilon_{ext} = \sum_{i=1}^{N} \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} \delta\left(\overrightarrow{\mathbf{r}} - \overrightarrow{\mathbf{r}_i}\right) V_{ext}(\overrightarrow{r}) \psi_0(\overrightarrow{r}) \psi_0^*(\overrightarrow{r_i})$$

On remplace la densité locale par son expression : $n(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\overrightarrow{\mathbf{r}} - \overrightarrow{\mathbf{r}_i})$

$$\varepsilon_{ext} = \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} n(\overrightarrow{\mathbf{r}}) V_{ext}(\overrightarrow{r})$$

idem,

$$\varepsilon_{ext} = \sum_{i=1}^{N} \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} |\phi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2 V_{ext}(\overrightarrow{r}).$$

on obtient

$$\varepsilon_{ext} = N \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} |\phi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2 V_{ext}(\overrightarrow{r})$$

potentiel d'intéraction

$$\begin{split} \varepsilon_{int} &= \langle \psi_0 | \sum_{i < j} U_0 \delta \left(\overrightarrow{\mathbf{r}_i} - \overrightarrow{\mathbf{r}_j} \right) | \psi_0 \rangle \\ \varepsilon_{int} &= \frac{U_0}{2} \sum_{i < j} \langle \psi_0 | \delta \left(\widehat{\mathbf{r}}_n - \widehat{\mathbf{r}}_m \right) | \psi_0 \rangle \\ \varepsilon_{int} &= \frac{U_0}{2} \sum_{i < j} \int d(\overrightarrow{\mathbf{r}_1}, \dots \overrightarrow{\mathbf{r}_n}) \langle \psi_0 | \{ \overrightarrow{\mathbf{r}_1}, \dots \overrightarrow{\mathbf{r}_n} \} \rangle \langle (\overrightarrow{\mathbf{r}_1}, \dots \overrightarrow{\mathbf{r}_n}) \delta \left(\widehat{\mathbf{r}_n} - \widehat{\mathbf{r}_m} \right) | \psi_0 \rangle \\ \varepsilon_{int} &= \frac{U_0}{2} \sum_{i < j} \int d(\overrightarrow{\mathbf{r}_1}, \dots \overrightarrow{\mathbf{r}_n}) | \langle \psi_0 | \{ \overrightarrow{\mathbf{r}_1}, \dots \overrightarrow{\mathbf{r}_n} \} \rangle |^2 \delta \left(\overrightarrow{\mathbf{r}_n} - \overrightarrow{\mathbf{r}_n} \right) \\ \varepsilon_{int} &= \frac{U_0}{2} \sum_{i < j} \int d(\overrightarrow{\mathbf{r}_1}, \dots \overrightarrow{\mathbf{r}_n}) | \phi \left(\overrightarrow{\mathbf{r}_1} \right) |^2 \dots | \phi \left(\overrightarrow{\mathbf{r}_n} \right) |^2 \delta \left(\overrightarrow{\mathbf{r}_n} - \overrightarrow{\mathbf{r}_n} \right) \\ \text{on trouve} \\ \varepsilon_{int} &= \frac{U_0}{2} \sum_{i < j} \int d\overrightarrow{\mathbf{r}_n} . | \phi \left(\overrightarrow{\mathbf{r}_n} \right) |^2 \int d\overrightarrow{\mathbf{r}}_{\{i \neq n\}} | \phi \left(\overrightarrow{\mathbf{r}_i} \right) |^2 \\ \varepsilon_{int} &= \frac{U_0}{2} N(N-1) \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} | \phi \left(\overrightarrow{\mathbf{r}} \right) |^4 \end{split}$$

Ainsi,

$$\frac{\langle \psi_0 | \widehat{H} | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} = N \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\overrightarrow{\nabla} \phi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2 + V_{ext}(\overrightarrow{r}) |\phi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2 + \frac{(N-1)}{2} U_0 |\phi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^4 \right]$$

On introduit la fonction d'onde du condensat, on suppose que N >> 1 et on normalise la fonction d'onde $\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})$ par un volume χ , avec $\chi = 1/\sqrt{N}$ dans ce cas on trouve

$$\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = \sqrt{N}\phi(\overrightarrow{\mathbf{r}})$$

$$E = \frac{\langle \psi_0 | \widehat{H} | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} = \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\overrightarrow{\nabla} \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2 + V_{ext}(\overrightarrow{r}) |\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2 + \frac{U_0}{2} |\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^4 \right].$$

Dans la suite, on note le paramètre d'intéraction g:

$$g = U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$$

En effet, on cherche à trouver l'équation d'onde à laquelle obéit la fonction d'onde $\psi(\overrightarrow{r})$, alors on peut utiliser le principe de l'action stationnaire :

$$\delta S(\psi, \psi^*) = 0 \tag{3.28}$$

où l'action est donnée par :

$$S(\psi, \psi^*) = \int L(\psi, \psi^*) dt = \int (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H) dt$$
 (3.29)

L est le lagrangien définit par L = T - V

$$L(\psi, \psi^*) = \langle \psi_0 | L | \psi_0 \rangle = \int d\overrightarrow{\mathbf{r}} \left[i\hbar \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t) \right] - E(\psi, \psi^*)$$
(3.30)

$$\delta S(\psi, \psi^*) = \delta \iint d\overrightarrow{\mathbf{r}} dt \left[i\hbar \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t) - \right]$$
(3.31)

$$\delta S(\psi, \psi^*) = \delta \left[\iint \frac{\hbar^2}{2m} |\overrightarrow{\nabla} \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2 + V_{ext}(\overrightarrow{r}) |\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2 + \frac{g}{2} |\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^4 \right] d\overrightarrow{\mathbf{r}} dt$$
(3.32)

$$\frac{\partial S(\psi, \psi^*)}{\partial \psi^*} = \iint d\overrightarrow{\mathbf{r}} dt
+ \left[\hbar \frac{\partial \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \overrightarrow{\nabla} \cdot (\overrightarrow{\nabla} \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t) - V_{ext}(\overrightarrow{\mathbf{r}}) \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t) - g |\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t)|^2 \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t) \right]$$

l'action stationnaire est déterminée par

$$\frac{\partial S(\psi, \psi^*)}{\partial \psi^*} = 0 \tag{3.33}$$

on trouve à la fin l'équation de Gross-Pitaevskii

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2 m} \nabla^2 + V_{ext}(\overrightarrow{\mathbf{r}}) + g|\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t)|^2 \right] \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t). \tag{3.34}$$

Le dernier terme dans l'équation (Eq.3.34) est le terme non linéaire dû aux interactions atomiques, en se restreignant à des solutions vérifiant certaines conditions de symétrie afin de simplifier le problème. Nous verrons à la suite plusieurs cas limites de l'équation de Gross-Pitaevskii qui nous permettront de définir le modèle que nous avons choisi.

3.4 Condensat de Bose-Einstein dans un piège

On considère un condensat de Bose-Einstein dans un état gazeux. On suppose que le gaz soit dilué de sorte que $na^3 \ll 1$. Par exemple pour un nombre typique d'atomes $n=10^{15}cm^{-3}$, la distance typique entre deux atomes $n^{-1/3} \simeq 10^3 A^0$ qui est trés grande par rapport à R_B .

À t=0, le condensat est dans un piège harmonique $V_{ext}(r)=\frac{1}{2}m\omega_0^2r^2$. La densité de l'ensemble des atomes dans le nuage gazeux est donée par :

$$n(\overrightarrow{\mathbf{r}},t) = |\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t)|^2$$

Le condensat de Bose-Einstein obeit à l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire dans le piège.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) + V_{ext}(\overrightarrow{\mathbf{r}})\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) + g|\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2 = \mu\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})$$
(3.35)

La fonction d'onde dans le piège est normalisée

$$N = \int d^3 \overrightarrow{\mathbf{r}} |\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2$$

Dans ce cas $\psi(r)$ est le produit de trois oscillateurs harmoniques.

3.4.1 Définitions des longueurs caractéristiques

Nous supposons "ici" que les interactions sont négligeables dans le piège.

À l'état fondamental

$$\overrightarrow{\nabla}\psi \simeq \frac{1}{a_0}\psi$$

donne

$$r^2\psi \simeq a_0^2\psi$$

aussi, on a

$$\varepsilon_k = \varepsilon_{pot}$$

à partir de ces deux égalitées on peut tirer la valeur de l'extension spatiale du condensat en absence d'interactions :

$$a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \tag{3.36}$$

Cette relation permet de déterminer l'échelle spatiale caractérisant l'état d'un condensat de Bose-Einstein dans le piège, cette extension dépend seulement de la masse des atomes qui forment le nuage.

Régime de Thomas-Fermi

On parle du régime de Thomas-Fermi (ou de couplage fort) lorsque l'énergie cinétique est négligeable devant l'énergie d'intéraction entre les atomes, c'est l'opposé du régime ci-dessus.

L'état fondamental est défini par l'équation de Gross-Pitaevski

$$V_{ext}(\overrightarrow{\mathbf{r}}) + g|\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t)|^2 = \mu \tag{3.37}$$

on peut la réécrire

$$\frac{\mu - V_{ext}(\overrightarrow{\mathbf{r}})}{q} = 0 \tag{3.38}$$

aux bords du piége, on a

$$\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) \simeq 0 \Rightarrow \frac{1}{q}(\mu - V_{ext}(R_0)) = 0.$$

Cette égalitée donne l'extension spatiale du condensat dans le régime de fort couplage :

$$R_0 = \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega_z}}. (3.39)$$

Nous remplaçons le potentiel harmonique par un mur infranchissable : $\psi(r)$ s'annule aux bord du piège en r=0. Cette annulation se fait sur une distance typique ξ_{in} . Au bord, l'état fondamental est gouverné par l'équilibre : $\varepsilon_{ci} = V_{in} \iff \frac{p^2}{2m} = V_{in}$. Selon le principe d'incertitude $p \triangle \mathbf{r} = \hbar$ ici $\Delta \mathbf{r} = \xi_{in}$. Le terme nonlinéaire s'écrit de la forme suivante :

$$g|\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t)|^2 = gn(\overrightarrow{\mathbf{r}})$$

Or dans la bulk (loin du bord), on est dans le régime de Thoma Fermi : $\varepsilon_{ci} \ll V_{in}$ l'équation de Gross-Pitaevskii devient égale à

$$g(n(\overrightarrow{\mathbf{r}})) = \mu$$

en grosso-modo,

$$\xi_{in} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m\mu}} \tag{3.40}$$

En résumé, ξ_{in} est la longueur d'extinction ("healing length" en anglais) définie comme une longueur typique d'annulation de la fonction d'onde du condensat prés du bord. On peut dire aussi c'est la plus petite échelle spatiale sur laquelle la densité atomique peut suivre les modulations d'un potentiel extérieur. Si le potentiel extérieur varie spatialement plus rapidement que la longueur d'extinction, alors le condensat ne se trouve plus dans l'approximation de Thomas-Fermi.

3.4.2 Comparaison des longueurs caractéristiques

A partir des équations précedentes on aura cinq longueurs à comparer : $a, a_0, \xi_{in}, R_0, r_s$.

- -a est la longueur de diffusion.
- $-a_0$ représente l'extension spatiale en absence d'interactions
- $-\xi_{in}$ est la distance typique d'annulation de la fonction d'onde prés du bord
- $-R_0$ est l'extension spatiale dans le régime de Thomas-Fermi en présence d'interactions.
- $-r_s$ est le volume moyen par atome

En présence des interactions, on peut écrire

$$\frac{\hbar^2}{2mng} = \frac{1}{8\pi na} \quad avec \quad n = \frac{1}{(4\pi n/3)r_s^3}$$
(3.41)

on obtient facilement

$$\xi_{in}^2 \frac{r_s^3}{6a} = r_s^2 (\frac{r_s}{6a}) = a^2 \cdot \frac{1}{8\pi (na^3)}$$
 (3.42)

Dans un gaz dilué : $na^3 \ll 1$ et $r_s \gg a$. Ceux-ci donnent $\xi_{in} \gg a$

Dans le régime de forte couplage dans le piège, les interactions sont répulsives donc elles font "grossir" le condensat par rapport à la situation où il n'y a pas d'interactions. On s'attend donc à

$$R_0 \gg a_0$$

Nous le prouvons par la suite.

Dans le piège on a déja vérifié que l'énergie moyenne par atome dans un gaz est de l'ordre

du potentiel chimique

$$\mu = \frac{\hbar^2}{2m\xi_{in}^2} \tag{3.43}$$

dans le régime de Thomas-Fermi

$$\mu = \frac{1}{2}m\omega_0^2 R_0^2 \tag{3.44}$$

en faisant le rapport.

$$\frac{\xi}{R_0} = \left(\frac{\hbar^2/2m\mu^2}{2\mu/m\omega_0^2}\right)^{1/2} = \frac{\hbar\omega_0}{2\mu}$$
 (3.45)

On a $R_0 \gg \xi_{in}$ c'est une condition nécessaire puisque dans le bulk l'énergie d'intéraction est plus importante que l'énergie cinétique.

Donc $\mu \gg \hbar \omega_0$ de plus toujours dans ce régime et dans le bulk (loin du bord)

$$R_0 = \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega_0}} \simeq \sqrt{\frac{2ng}{m\omega_0^2}} = \left(\frac{2g}{m\omega_0^2} \frac{N}{R^3}\right)^{1/2}$$

En utilisant les équations (Eq.3.42) et (Eq.3.45) on trouve $R_0 = a_0 \left(\frac{Na}{a_0}\right)^{1/5}$, avec $\left(\frac{Na}{a_0}\right)^{1/5}$, avec $\left(\frac{Na}{a_0}\right)^{1/5}$. Le rapport entre ces deux extensions spatiales nous donne

$$\frac{a_0}{R_0} = \left(\frac{\frac{\hbar}{m\omega_0}}{\frac{2\mu}{m\omega_0^2}}\right)^{1/2} \qquad \sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{2\mu}} \qquad \ll 1 \tag{3.46}$$

d'autre part

$$\frac{\xi}{a_0} = \left(\frac{\frac{\hbar^2}{2m\mu}}{\frac{\hbar}{m\omega_0}}\right)^{1/2} = \frac{\hbar\omega_0}{2\mu} = \frac{a_0}{R_0} \ll 1 \tag{3.47}$$

En réalité, dans le régime de TF, un condensat Bose-Einstein dans un piège est caractérisé par ces inégalités : soit $\mu \gg \hbar \omega_0$, ou bien $R_0 \gg a_0$, sinon, $\frac{Na}{a_0} \gg 1$ À la fin, on obtient

$$a \ll r_s \ll \xi_{in} \ll a_0 \ll R_0$$

En pratique [63, 64], les valeurs sont :

$$a = 5nm$$
, $\xi_{in} = 0.1\mu m$, $a_0 = 1\mu m$ et $R_0 = 10\mu m$

3.5 Condensat de Bose-Einstein en dehors du piège harmonique

Dans ce paragraphe, nous nous plaçons dans une géométrique 3D. On considère un condensat de Bose-Einstein coincé dans un piège harmonique. Dans le condensat, la fonction d'onde de l'ensemble du condensat obéit à l'équation de Gross-Pitaevskii :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2 m} \nabla^2 + V(\overrightarrow{\mathbf{r}}) + g|\psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2 \right] \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = \mu \psi(\overrightarrow{\mathbf{r}})$$
 (3.48)

Les interactions dominantes sur l'énergie cinétique (régime de Thomas-Fermi $\mu \gg \hbar \omega$):

$$\mu\phi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = \left[V(\overrightarrow{\mathbf{r}}) + N g |\phi(\overrightarrow{\mathbf{r}})|^2 \right] \phi(\overrightarrow{\mathbf{r}})$$
(3.49)

$$\Longrightarrow \phi(\overrightarrow{\mathbf{r}}) = \sqrt{\frac{\mu - V(\overrightarrow{\mathbf{r}})}{Ng}} \tag{3.50}$$

En supprimant le piège, l'évolution du condensat de Bose-Einstein en fonction du temps est décrite par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \phi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2 m} \nabla^2 + g |\phi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t)|^2 \right] \phi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t). \tag{3.51}$$

On ne peut plus supprimer l'énergie cinétique car l'énergie potentiel sera convertie en énergie cinétique pendant l'expansion.

On fait une transformation qui élimine le terme d'énergie cinétique, et qui permet une généralisation du régime de Thomas-Fermi pendant l'évolution temporelle.

$$V(\overrightarrow{\mathbf{r},t}) = \frac{1}{2}m\omega^2(t)z^2 \tag{3.52}$$

 $\omega(t)=\omega$ est la fréquence de l'onde atomique avant la coupure du piège, on dit définie alors le temps $t=t_0$ est le temps où le piège s'éteint le condensat s'étend alors sous l'effet des interactions, nous obtenons ainsi un nuage atomique à 3D.

À $t \gg t_0$ la fonction d'onde au cours du temps est : $\phi(\overrightarrow{\mathbf{r}}, t)$ et sa transformée de Fourier nous donne une distribution en impulsion des ondes planes formant le nuage en expansion. En particulier, à la fin de l'expansion, l'énergie cinétique domine l'énergie potentielle du condensat, ici il n'y a plus de discussion sur le régime de Thomas-Fermi en l'absence d'interactions. La longueur carectéristique ξ_{in} n'a rien à voir avec une longueur d'extinction du nuage en expansion. Nous étudierons plus tard l'inégalité ($\xi_{in} > \xi$ et $\xi_{in} < \xi$) qui est cruciale à discuter dans le cas d'un condensat en expansion afin d'avoir une diffusion multiple efficace de tous les atomes en expansion dans le potentiel désordonné.

3.5.1 Atomes dans un champ de tavelures (speckle)

Lorsqu'un faisceau de laser est diffusé par un milieu désordonné, la distribution de l'intensité diffusée est aléatoire et on l'appelle "figure de tavelure". Malgré leur apparence aléatoire les figures de tavelures ne le sont pas complètement mais possèdent certaines corrélations spatiales. Par ailleurs chaque désordre donne lieu à une figure différente bien que de structure et d'apparence similaires. C'est en utilisant les corrélations et la dynamique des tavelures qu'on pourra extraire des informations significatives des ondes dans le régime de diffusion multiple [63, 64, 65].

Il s'agit maintenant de formuler le problème du mouvement d'un ensemble d'atomes dans un milieu aléatoire. Avant d'entreprendre cette étude, nous précisons un modèle pour le milieu aléatoire tel qu'il apparaît pour le déplacement lumineux dans un champ de tavelures lumineux.

Nous supposons les atomes placés dans un champ de speckle. Nous nous restreignons à un champ lumineux monochromatique dont la fréquence est désaccordée par rapport à une fréquence de résonance de l'atome. Le couplage entre l'atome et le faisceau électromagnétique donne à l'atome une énergie dipolaire égale à $E_{dip}(\vec{\mathbf{r}}) = \overrightarrow{P}.\overrightarrow{E}$, avec \overrightarrow{P} le moment dipolaire électrique de l'atome entre l'état fondamental et l'état exité (nous nous limitons à un atome avec un seul niveau interne dans l'état fondamemental, donc à une transition atomique entre $J = 0 \longmapsto 1$). Puisque $\overrightarrow{P} = \alpha(\omega) \overrightarrow{E}$, le champ électrique $E(\mathbf{r})$ possède une amplitude complexe donne lieu à un potentiel lumineux proportionnel au carré du champ $E_{dip}(\mathbf{r}) = \alpha(\omega)E(\mathbf{r})^2$. Dans cette expression $\alpha(\omega)$ indique la polarisabilité de l'atome à la fréquence ω . Une écriture alternative du champ électromagnétique fait directement intervenir l'intensité lumineuse $I(\mathbf{r}) = |E(\mathbf{r})|^2$. Ceux-ci donne une diffusion aléatoire de l'intensité diffusée. Cette intensité aléatoire que nous obtenons est résponsable de la diffusion multiple des atomes dans le gaz atomique. Le potentiel aléatoire $V(\mathbf{r})$ prend alors la forme

$$V(\mathbf{r}) = \alpha(\omega)I(\mathbf{r}) \tag{3.53}$$

Sous cet éclairage, nous nous intéressons à des propriétés moyennes des atomes lorsque l'on igore presque tout du potentiel aléatoire, sauf sa valeur moyenne et sa fonction de corrélation $\langle V(\overrightarrow{\mathbf{r}})V(\overrightarrow{\mathbf{r}}+\overrightarrow{x})\rangle$, où \overrightarrow{x} est la distance entre deux taches de tavelures : $\overrightarrow{x}=\Delta\overrightarrow{\mathbf{r}_{p+1}}-\Delta\overrightarrow{\mathbf{r}_p}$.

Nous prenons un exemple particulier de fonction de corrélation pour un champ de tavelures donné par :

$$\langle V(\overrightarrow{\mathbf{r}}) V(\overrightarrow{\mathbf{r}} + \overrightarrow{x}) \rangle = 4\pi U \operatorname{sinc}^2 \frac{x}{\xi}$$
 (3.54)

Dans cette équation (Eq.3.54) la corrélation résulte d'une somme aléatoire des ondes planes électromagnétiques. Nous interpréterons les termes qui apparaissent dans cette relation dans le paragraphe (3.5.2)

3.5.2 Interprétation de la fonction de corrélation

Nous introduisons la fonction de structure qui est la transformée de Fourier de la fonction de corrélation du potentiel aléatoire :

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}'} \left(\frac{\sin\frac{x}{\xi}}{\frac{x}{\xi}}\right)^2 exp^{i(\overrightarrow{\mathbf{k}} - \overrightarrow{\mathbf{k}'}).\overrightarrow{x}}$$
(3.55)

Dans cette définition, nous supposons que le potentiel aléatoire est statiquement homogène, c'est à dire que sa fonction de corrèlation en deux points $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ne dépend que de la différence $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. La portée de la fonction de corrélation dans le réseau réciproque

en fonction du vecteur d'onde q est de l'ordre de l'inverse de la longueur de corrélation $(1/\xi)$. Cette variable q nous informe sur la nature du changement de vitesse à l'intérieur des diffuseurs par rapport à la longueur de corrélation. À l'intérieur d'un diffuseur le vecteur d'onde \overrightarrow{q} s'écrit comme

$$\overrightarrow{q} = \overrightarrow{\mathbf{k}} - \overrightarrow{\mathbf{k}}'$$

Avec $\overrightarrow{\mathbf{k}}$ est le vecteur d'onde de l'atome à l'extérieur des diffuseurs d'énergie $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, et k' est le vecteur d'onde diffusé par un seul diffuseur d'énergie $\frac{\hbar^2 k'^2}{2m}$.

La diffusion étant élastique, l'onde conserve la même énergie tout au long du chemin sans changement de direction. On utilise l'approximation de diffusion dans laquelle on suppose que les atomes diffusés voyagent dans l'échantillon selon une marche aléatoire caractérisée par la longueur moyenne de transport ℓ^* et la vitesse de l'énergie $v(\varepsilon)$. Dans cette partie, on considère que le milieu est isotrope, un seul chemin de marche aléatoire de n+2 pas et donc une distance de ((n+2)+1)l. La contribution de ce chemin à la décroissance de la fonction de corrélation est déterminée par le déphasage du mouvement de tous les diffuseurs sur le chemin. Si on calcule le déphasage entre t et $t+\tau$. On aura un déphasage du champs aléatoire qui s'écrit comme

$$\Delta \phi^n = \sum_{j=0}^{n+2} (\overrightarrow{\mathbf{k}} - \overrightarrow{\mathbf{k}}_j).\overrightarrow{\mathbf{x}}$$
(3.56)

Cette fonction est obtenue en moyennant sur tous les chemins de n diffuseurs, puis en sommant sur les longueurs n du chemin aléatoire.

En effet, la fonction de structure $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ représente la section efficace différentielle qui décrit comment une onde plane atomique \mathbf{k} est en moyenne diffractée par le speckle dans la direction \overrightarrow{k} . Son amplitude est une fonction décroissante avec $|\overrightarrow{\mathbf{k}} - \overrightarrow{\mathbf{k}}'|$ Dans l'équation (Eq.3.54), le facteur $sinc^2\frac{x}{\xi}$ est la fraction d'intensité diffusée dans tous les chemins de diffusion par deux tavelures de distance $\overrightarrow{\mathbf{x}}$.

3.6 Théorie de la diffusion multiple pour un ensemble de diffuseurs identiques aléatoirement disposés dans l'espace

Une des premières approches théoriques pour étudier la diffusion multiple de façon microscopique (quantique) remonte aux travaux de Foldy qui a évalué l'intensité moyenne de la fonction d'onde à partir de l'équation de Schrödinger. Vient en suite une série de papiers pour retrouver l'expression de la conductivité classique à partir de l'équation de Boltzmann. Cette théorie décrit correctement le régime diffusif dans lequel la longueur d'onde est trés inférieure au libre parcours moyen, celui-ci est inversement proportionnel à la densité des diffiseurs. Cette approche néglige les interférences puisque les équations de Boltzmann n'utilisent pas l'amplitude de l'onde mais seulement son module au carré. Edwards retrouve l'expression de la conductivité classique, il montre en particulier qu'il est nécessaire de resommer une certaine classe de diagrammes, appelés diagrammes d'échelle (ladder diagrams) pour y arriver [66, 67, 68, 69].

Une approche plus formelle est donnée par le développement de la matrice de diffusion sous la forme d'une série infinie de diagrammes irréductibles (qui ne se scindent pas en deux par la coupure d'une seule ligne). Dans de nombreux cas cette série ne converge pas. C'est une série dite "assymptotiquement convergente". On se base sur les livres de E. Akkermans et I.M. Lifshits pour écrire le paragraphe suivant [1, 30].

3.6.1 L'opérateur de diffusion pour un ensemble de n diffuseurs en milieu absorbant

La théorie présentée dans la suite n'est pas limitée aux particules trés petites devant la longueur d'onde. Elle pourra s'appliquer aux particules fortement diffusantes, c'est a dire ayant un rayon proche de l'ordre de la longueur d'onde, condition nécessaire pour que la diffusion soit efficace.

Similairement au cas d'un milieu contenant un seul diffuseur vu déja dans la section précedente, l'opérateur \hat{t} pour un ensemble de diffuseurs pour la i^{eme} particule se définit par :

$$\widehat{t}_i = \widehat{V}_i + \widehat{V}_i \widehat{G}_0 \widehat{V}_i + \widehat{V}_i \widehat{G}_0 \widehat{V}_i \widehat{G}_0 \widehat{V}_i + \widehat{V}_i \widehat{G}_0 \widehat{V}_i \widehat{G}_0 \widehat{V}_i \widehat{G}_0 \widehat{V}_i + \dots$$

$$(3.57)$$

L'operateur \hat{t}_i est défini pour une particule centré en R_i . Comme \hat{t}_i est défini pour une particule centre à l'origine, on a la relation :

$$t_i(r, r') = t(r - R_i, r' - R_i)$$
(3.58)

l'opérateur de diffusion peut s'exprimer uniquement en fonction de t_i

$$\widehat{t} = \sum_{i}^{N} \widehat{t}_{i} + \sum_{i \neq J}^{N,N} \widehat{t}_{i} \widehat{G}_{0} \widehat{t}_{J} + \sum_{i \neq j \neq k}^{N,N,N} \widehat{t}_{i} \widehat{G}_{0} \widehat{t}_{J} G_{0} \widehat{t}_{k} + \sum_{i \neq j \neq k \neq l}^{N,N,N,N} \widehat{t}_{i} \widehat{G}_{0} \widehat{t}_{J} \widehat{G}_{0} \widehat{t}_{k} G_{0} \widehat{t}_{l} + \dots$$

$$(3.59)$$

où les indices i, j, k, l successifs doivent être différents.

La premiere sommation dans (Eq.3.59) représente la somme de tous les évenements de diffusion simple. En d'autre termes le champ incident n'est diffusé qu'une seule fois par chacune des particules jusqu'au point d'observation. La seconde et la troisième sommation représentent réspectivement les évenements de diffusion double et triple entre la source de l'onde incidente et le point d'observation.

3.6.2 Moyenne de l'opérateur de diffusion : écriture développée

Nous calculons maintenant l'expression de la moyenne de l'opérateur $\langle \hat{t} \rangle$,

$$\langle \widehat{t} \rangle = \langle \sum_{i}^{N} \widehat{t}_{i} \rangle + \sum_{i \neq \lambda}^{N,N} \langle \widehat{t}_{i} \widehat{G}_{0} \widehat{t}_{J} \rangle$$
(3.60)

Nous éxplicitons les deux premiers termes de cette série :

- le premier terme représente les diffusions simple

$$\langle \sum_{i}^{N} \widehat{t_i} \rangle = \sum_{i}^{N} \langle t_i \rangle \tag{3.61}$$

$$\langle \sum_{i}^{N} \widehat{t}_{i} \rangle = \sum_{i}^{N} \int t(r - R_{i}, r' - R_{i}) P_{1}(R_{i}) \ d^{3}R_{i}$$
 (3.62)

Nous supposons que le milieu est trés dilué où les positions des diffuseurs sont supposées décorrélées, sous cette approximation la densité de probabilité s'écrit comme

$$P_N(R_1, R_1, R_1...R_N) = P_1(R_1)P_1(R_2)P_1(R_3)....P_1(R_N)$$
(3.63)

aussi, la probabilité de présence dans le volume autorisé est uniforme et identique quelque soit la particule, on peut écrire

$$P_1(R_i) = \frac{1}{V} (3.64)$$

on trouve

$$\langle \sum_{i}^{N} \widehat{t}_{i} \rangle = \frac{N}{V} \int t(r - R, r' - R) d^{3}R$$
 (3.65)

 le seconde terme contient la fonction de corrélation, il représente les diffusions doubles

$$\langle \sum_{i \neq J}^{N,N} \widehat{t}_i \widehat{G}_0 \widehat{t}_J \rangle = \sum_{i \neq J}^{N,N} \langle \widehat{t}_i \widehat{G}_0 \widehat{t}_J \rangle =$$
(3.66)

$$\sum_{i \neq J}^{N,N} \int t(r - R_i, r_1 - R_i) G_0(r_1 - r_2) t(r_2 - R_j) (r' - R_j) P_2(R_i - R_j) d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 R_i d^3 R_j$$
(3.67)

 $P_2(R_i - R_j)$ peut se décomposer de la manière suivante :

$$P_2(R_i - R_j) = P_1(R_i)P_1(R_j)\left[1 + g_2(R_i, R_j)\right]$$
(3.68)

le seconde terme de l'expression (Eq.3.60) est égal à

$$\frac{N(N-1)}{V^2} \int t(r-R_1, r_1-R_1) G_0(r_1-r_2) t(r_2-R_2, r'-R_2) \left[1 + g_2(R_1, R_2) d^3r_1 d^3r_2 d^3R_1 d^3R_2\right]$$
(3.69)

Cette relation introduit la fonction de corrrélation g_2 [70, 71]. $g_2(R_i, R_j)$ est la fonction de corrélation qui ne dépend que de la distance séparant deux diffuseurs. L'effet de ces corrélations n'intervient que de manière perturbative par rapport au premier ordre qui est décorrélé. Le cas des fortes fractions volumiques nécessitera de toute façon de prendre en compte les fonctions de corrélations d'ordre plus élevé.

3.6.3 L'opérateur de masse pour un ensemble de diffuseurs identiques aléatoirement disposés dans l'espace

Nous nous intéresserons ici plus particulièrement à la propagation d'un ensemble d'atomes froids qui sont multiplement diffusés par les speckle et qui sont disposés aléatoirement dans un espace infini, le transport est donc décrit par l'approximation de diffusion [72, 73, 75].

Par définition, la fonction de Green est la solution lorsque la source est ponctuelle en r' et emet à t=0 et ces propriétés permettent d'exprimer une relation entre le champ moyen et la moyenne de l'opérérateur de diffusion \widehat{t} . Dans le paragraphe (3.2.2), l'equation (Eq.3.11) éxprime la relation entre le champ moyen ψ et la moyenne de l'operateur de diffusion moyen \widehat{t} . On peut écrire une équation équivalente pour le tenseur de Green moyen

$$\langle \widehat{G} \rangle = \widehat{G}_0 + \widehat{G}_0 \langle \widehat{t} \rangle \widehat{G}_0 \tag{3.70}$$

avec $\langle \rangle$ désigne la valeur moyenne.

Cette équation peut être mise sous la forme d'une équation integrale appelée équation de Dyson :

$$\langle \widehat{G} \rangle = \widehat{G}_0 + \widehat{G}_0 \Sigma \langle \widehat{G} \rangle \tag{3.71}$$

où Σ est l'opérateur de masse

L'opérateur \hat{t} peut s'exprimer en fonction de l'opérateur de masse Σ . L'équation de Dyson peut se developper par iterations en puissances de $\Sigma \hat{G}_0$:

$$\langle \widehat{G} \rangle = \widehat{G}_0 + \widehat{G}_0 \Sigma \widehat{G}_0 + \widehat{G}_0 \Sigma \widehat{G}_0 \Sigma \widehat{G}_0 + \widehat{G}_0 \Sigma \widehat{G}_0 \Sigma \widehat{G}_0 \Sigma \widehat{G}_0 + \dots$$
 (3.72)

que l'on peut comparer à (Eq.3.11) afin d'identifée à \hat{t} .

$$\langle \hat{t} \rangle = \Sigma + \Sigma \hat{G}_0 \Sigma + \Sigma \hat{G}_0 \Sigma \hat{G}_0 \Sigma + \Sigma \hat{G}_0 \Sigma \hat{G}_0 \Sigma \hat{G}_0 \Sigma + \dots$$
 (3.73)

On peut remarquer que si on prend l'expression diagrammatique ci-dessous pour l'opérateur de masse, alors, on peut retrouver tous les diagrammes contenus dans l'expression de \hat{t} (Eq.3.57) en injectant l'expression diagrammatique de l'opérateur de masse dans l'equation (Eq.3.59). L'opérateur de masse a la particularité d'être la somme de tous les diagrammes qui ne peuvent pas se factoriser. Ce sont ceux qui forment des blocs inséparables connectés entre eux. Il sont facilement reconnaissables car ils sont reliés par des connexions

$$\sum = 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + \cdots$$

$$+ 0 + 0 + \cdots$$

$$Opérateur de masse$$

en pointilles (pour les diffuseurs corrélés) ou par des lignes pleines en dessous de la ligne principale pour les diffuseurs qui sont identiques.

Les diagrammes contenant des diffuseurs identiques qu'ils soient corrélés ou non comme les deux derniérs représentés dans l'expession diagrammatique de l'opérateur de masse sont appelés des diagrammes de diffusion récurrente. Ces diagrammes sont particulièrement importants quand on cherche a prendre en compte des phénomènes de localisation. Les propriétés de réciprocite font que ces boucles de diffusion ont deux sens possibles de propagation. Le rôle de ces boucles recurrentes a été mis en évidence experimentalement par Wiersma, van Albada, van Tiggelen, et Lagendijk [76].

3.6.4 Formalisme de l'opérateur de masse

On introduit dans cette section l'opérateur de masse Σ , tel que vu dans le paragraphe (3.6.3). Ici on fait la moyenne sur le désordre qui restaure la symétrie par translation que l'on écrit comme $\Sigma(\overrightarrow{\mathbf{r}} - \overrightarrow{\mathbf{r}'})$ ou équivalent à $\Sigma = \Sigma(\overrightarrow{\mathbf{p}})$. Elle peut être mise sous la formre suivante

$$\langle \overrightarrow{\mathbf{k}'} | \Sigma(\overrightarrow{\mathbf{k}}, \varepsilon) | \overrightarrow{\mathbf{k}} \rangle = \Sigma(\overrightarrow{\mathbf{k}}, \varepsilon) \delta(\overrightarrow{\mathbf{k}} - \overrightarrow{\mathbf{k}'})$$
(3.74)

Dans l'approximation d'une faible densité de diffuseur, on écrit

$$\Sigma(\overrightarrow{\mathbf{k}},\varepsilon) = n\langle \overrightarrow{\mathbf{k}'}|\widehat{t}|\overrightarrow{\mathbf{k}}\rangle \tag{3.75}$$

Cette expression est une conséquence de l'équation de diffusion. Pour calculer l'expression de la self-énergie, on se restreint au premier terme du développement perturbatif de l'équation de diffusion en prenant la fonction de Green du champ moyen. Le développement itératif fait apparaître la fonction de corrélation

3.6.5 développement de la self-énergie

Le calcul de la self-énergie est en principe une tâche ardue puisque celle-ci contient une infinité de termes. L'approximation la plus simple est l'approximation de Born qui ne considère que le premier terme du développement perturbatif de l'amplitude de diffusion. Cette approximation ne peut être valable que lorsque la contribution du potentiel d'interactions est trés faible devant l'énergie cinétique. Nous verrons plus tard que cette approximation n'est absolument pas suffisante pour obtenir le libre parcours moyen élastique d'un système comportant un nombre arbitrairement grand de diffuseurs.

Les atomes constituent un nuage d'atomes froids dont la taille typique est grand par rapport à la longueur d'onde. Les photons vont intéragir avec l'ensemble de nuage gazeux, on s'attend à ce qu'un atome peut diffuser plusieurs fois par le même diffuseur. Comme le milieu est dilué, il est possible de négliger les chemins de diffusion rencontrant les mêmes diffuseurs c'est à dire l'atome rencontre une seule fois le diffuseur dans le sens inverse. Si les atomes sont supposés ponctuels avec une densité non uniforme la self-énergie Σ dépend de la position des diffuseurs (locale) mais lentement variable. Dans cette situation, le temps moyen entre deux chemins de diffusion est reliée par $t=\frac{l}{v}$ avec $v=\frac{\hbar k}{m}$. La partie imaginaire de Σ est reliée au libre parcours moyen qui est la distance entre deux chemins de diffusion : $Im\Sigma=-\frac{1}{2\ell}$ [77].

Aprés un développement itératif de l'équation (Eq.3.75), l'approximation de Born autocohérente nous donne la self-énergie :

$$\Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon) = \int \frac{d^3 \mathbf{k'}}{(2\pi)^3} U(\mathbf{k} - \mathbf{k'}) G(\varepsilon, \mathbf{k})$$
(3.76)

avec la notation $\sum_{\mathbf{k}'} = \int \frac{d\vec{\mathbf{k}'}}{(2\pi)^3}$

Les éffets de l'intéraction photons-atomes sur G sont entièrement contenus dans $\Sigma(\overrightarrow{\mathbf{k}},\varepsilon)$, le calcul au premier ordre est faisable. En l'absence d'absorption, l'atome reste dans son état fondamental. En fait, il s'agit de laisser intacts les atomes immobiles, on choisit une fréquence de transition atomique et une configuration de faisceaux de telle sorte que l'atome cesse d'intéragir avec le photon dés lors que sa vitesse est nulle afin d'éviter les effets de reculs.

 $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{k})$ est une fonction complexe, sa partie imaginaire est essentiellement un terme d'extinction dû à la diffusion dans les autres directions, ce terme décrit la section efficace du désordre vue par l'onde atomique, plus elle est grande plus les diffuseurs sont efficaces. Le théorème optique quant à lui, est une conséquence de la conservation de l'énergie entre la section efficace et l'amplitude de diffusion [78]. La fonction d'onde étant normalisée, la probabilité de trouver des particules (atomes) diffusés dans tout l'espace doit être égale à 1.

$$-Im\langle \mathbf{k}'|\widehat{t}|\mathbf{k}\rangle = \int d\widehat{\mathbf{k}'} \frac{|\langle \mathbf{k}'|\widehat{t}|\mathbf{k}\rangle|^2}{4\pi}$$
(3.77)

Cette relation est équivalente à

$$\int d\overrightarrow{\mathbf{r}} |\psi_{in} + \psi_s|^2 = 1 \tag{3.78}$$

 ψ_{in} et ψ_{out} sont les fonctions d'onde incidente et diffusée respectivement.

Aprés le moyennage sur le désordre, l'espace est devenue isotrope et la quantité de mouvement $\overrightarrow{\mathbf{k}}$ est conservée.

Si nous prennons la transformée de Fourier de la fonction de corrélation $U_{\overrightarrow{k}\overrightarrow{k'}}$ et nous l'injectons dans l'équation (Eq.3.76) on obtient

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{4\pi U}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{k}' \int d^3 \mathbf{X} \left(\frac{\sin \frac{\mathbf{X}}{\xi}}{\frac{\mathbf{X}}{\xi}}\right)^2 e^{i(\vec{\mathbf{k}} - \vec{\mathbf{k}'}) \cdot \vec{\mathbf{X}}} \frac{1}{\varepsilon - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2}{2m} - \Sigma(\varepsilon, \mathbf{k}')}$$
(3.79)

Nous décomposons le calcul de cette intégrale en deux parties : tout d'abord nous évaluons l'intégrale angulaire portant sur la direction $\overrightarrow{\mathbf{k}'}$, puis nous calculons l'intégrale sur le chemin de diffusion $\overrightarrow{\mathbf{x}}$. nous utilisons les propriétés de symétrie puis, on étend le domaine d'intégration de 0 à $+\infty$. Nous obtenons alors une fonction décroissante, cette fonction est égal à la convolution de deux facteurs. Le premier n'est autre que la fonction sinus qui est bornée et intégrable sur un intervalle fini, il représente l'intensité aléatoire en moyenne. Quant au deuxième facteur donne la phase q qui décrit la variation de vitesse des atomes en moyenne, il décroît aussi d'aprés la formule.

$$\Sigma(\varepsilon, k) = \frac{2U\xi^2}{\pi} \int_0^\infty dX \int_0^\infty dk' k'^2 \sin^2\left(\frac{X}{\xi}\right) \frac{\sin kX}{kX} \frac{\sin k'X}{k'X} \frac{1}{\varepsilon - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - \Sigma(\varepsilon, k')}$$
(3.80)

Les propriétés des intégrales nous permettent de développer les calcules à partir de la fonction Théta "step function" qui s'annule au bord pour des valeurs de $q>2/\xi$ et $q<2/\xi$. Ce sont les conditions de bord imposées par la conservation de l'impulsion. Enfin l'expression finale de $\Sigma(\varepsilon,k)$ prend la forme

$$\Sigma(k,\varepsilon) = \frac{2U\xi^2}{\pi} \int_0^{k+\frac{2}{\xi}} dk' \frac{k'^2 I(k,k')}{\varepsilon - k'^2 - \Sigma(k',\varepsilon)}$$
(3.81)

avec

$$I(k,k') = \frac{\pi}{16 \ kk'} \left[\frac{2}{\xi} - k - k' + 2|k - k'| - |k' - k + \frac{2}{\xi}| \ |k' - k - \frac{2}{\xi}| + |k + k' - \frac{2}{\xi}| \right]$$
(3.82)

En regardant bien la formule (Eq.3.81) nous pouvons tirer les pôles de la fonction de Green $G(\varepsilon, k)$. Ces pôles fournissent l'équation de dispersion dont lequel se propage l'atome :

$$\varepsilon = \varepsilon_{k'} + \Sigma(\varepsilon, k') \tag{3.83}$$

Les singularités de la fonction de Green apparut dans $\Sigma(\varepsilon, k)$ sont associés aux énergies propres du milieu.

Nous verrons dans la suite une étude numérique de la self-énergie dans l'approximation de Born de Born au premier ordre(FBA).

3.7 Self-énergie dans l'approximation de Born au premier ordre

En principe, l'équation (Eq.3.81) doit être résolue de façon auto-cohérente, nous allons d'abord la résoudre en considérant paramètre U comme une perturbation, nous nous

limitons à l'ordre le plus bas (FBA). Nous évaluons la partie réelle de la self-énergie qui mesure le déplacement ε_k et de la partie imaginaire qui fournit la largeur d'un niveau d'énergie ε_k . L'inverse de la partie imaginaire est le temps de vie lors de la diffusion.

Nous traitons l'opérateur de masse $\Sigma(k,\varepsilon)$ qui est l'élement clef de la théorie de diffusion. Pour commencer, nous allons nous réstreindre au premier ordre du développement perturbatif de la self-énergie en se servant de la définition dans l'équation (Eq.3.81). Le calcul de $\Sigma(k,\varepsilon)$ dans l'approximation de Born au premier ordre peut être obtenu suivant les valeurs des énergies ε en mettant $\Sigma(k',\varepsilon)=-i$ ϵ . Lorsque l'énergie de l'atome domine l'énergie cinétique ε_k , la fonction $\Sigma(k,\varepsilon)$ est réelle. Cette fonction s'annule en s'approchant de la valeur de $k=k'+2/\xi$. Dans ce régime balistique l'onde se propage en ligne droite sans voir les diffuseurs. Autrement, la partie réelle de $\Sigma(k,\varepsilon)$ contribue à l'énergie moyenne des atomes diffusés. Les atomes sont donc en mouvement avec une énergie $\varepsilon > \frac{\hbar^2}{2m} \left(k+\frac{2}{\xi}\right)^2$.

Par contre la partie imaginaire de $\Sigma(k,\varepsilon)$ contribue à la diffraction des atomes par le speckle. La diffraction successive des atomes peut nous induire la localisation. Dans le nuage, lorsque l'atome rencontre un diffuseur avec une énergie inférieur à l'énergie potentielle i.e pour des valeurs d'énergie telles que $\varepsilon < \frac{\hbar^2}{2m} \left(k + \frac{2}{\xi}\right)^2$, celle-ci sort du nuage avec une vitesse différente, Ainsi, l'amplitude de diffusion décroît. Pour $k' > k + 2/\xi$, à cet effet, le terme de dispersion dans G est trés petit. Aprés des substitutions, l'équation (Eq.3.81) devient

$$Im\Sigma^{0}(k,\varepsilon) = -U\xi^{2}\sqrt{\varepsilon_{k}}I(k,\sqrt{\varepsilon})$$
(3.84)

avec $I(k,\sqrt{\varepsilon})$ décrit la fonction structure de deux tavelures. Cette fonction s'annule au bord pour les valeurs

$$|k| < \sqrt{\varepsilon} - 2/\xi$$
 $|k| > \sqrt{\varepsilon} + 2/\xi$ (3.85)

Nous branchons le potentiel optique pour suivre son effet sur le nombre des atomes diffractés, et celà ne pourrais se faire que lorsqu' on néglige les interactions. Pour $k\xi < 1$ les atomes énergétique bougent à cause de l'énergie d'interactions.

Pour une longueur d'onde inférieur à la longueur de corrélation $\mathbf{k}\xi > 1$, $\Sigma(k,\varepsilon)$ décroît, les atomes suivent les oscillations du potentiel aléatoire. On aura ici un maximum d'atomes avec un vecteur d'onde k_{max} . Ce k_{max} correspond au maximum de nombre d'ondes qui sont diffractés (voir Fig. 3.1) par le potentiel. Au delà de k_{max} aucun atome ne participe à la diffusion multiple. Nous prenons la partie réelle de la self-énergie de l'équation pricipale (Eq.3.81), le calcul est faisable dans l'approximation de Born au premier ordre.

$$Re\Sigma(\varepsilon, k) = 4\pi U \xi^2 \sum_{k'} \frac{1}{\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} I(k, k')$$
 (3.86)

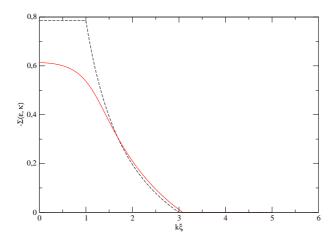


Fig. $3.1 - Im\Sigma^0(k,\varepsilon)$ en fonction de $k\xi$ en premier ordre de l'approximation de Born. Pour alléger les calcules on normalise les longueurs par ξ et les énergies par $\varepsilon_{\xi}: U/\varepsilon_{\xi}^2 = 1$ et $\varepsilon/\varepsilon_{\xi} = 1$). Les courbes pleines sont obtenues à partir d'un calcul numérique et celles qui sont en pointillées correpondent aux calculs analytiques.

La somme des amplitudes associées à tous les chemins devient une intégrale

$$Re\Sigma(\varepsilon,k) = U\xi^2 \frac{(4\pi)^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk' \frac{k'^2}{\varepsilon - k'^2} I(k,k')$$
 (3.87)

aprés des substitutions, on trouve

$$Re\Sigma(\varepsilon,k) = 4\frac{U\xi^2}{32\ k} \{ E_1 + E_2 + E_3 + E_4 + E_5 + E_6 \}$$
(3.88)

avec

$$E_{1} = 2(k - \sqrt{\varepsilon})log|(\sqrt{\varepsilon} - k|)$$

$$E_{2} = 2(k + \sqrt{\varepsilon})log(|\sqrt{\varepsilon} + k|)$$

$$E_{3} = (\sqrt{\varepsilon - k - \frac{2}{\xi}})log(|\sqrt{\varepsilon} + k - \frac{2}{\xi}|)$$

$$E_{4} = (\sqrt{\varepsilon - k + \frac{2}{\xi}})log(|\sqrt{\varepsilon} - k + \frac{2}{\xi}|)$$

$$E_{5} = (\sqrt{\varepsilon - k - \frac{2}{\xi}})log(|\sqrt{\varepsilon} - k - \frac{2}{\xi}|)$$

$$E_{6} = (\sqrt{\varepsilon + k + \frac{2}{\xi}})log(|\sqrt{\varepsilon} + k + \frac{2}{\xi}|)$$

Par ailleurs, dans la limite $k \to 0$, on applique le théorème de l'Hopital, on obtient l'expression suivante

$$log \frac{\varepsilon}{|\varepsilon - \frac{4}{\varepsilon^2}|} Re\Sigma = \frac{U\xi^2}{4}$$
 (3.89)

lorsque $k \to 0$ la partie réelle de la fonction $\Sigma Re\Sigma = \frac{1}{k^2}$. Sur la figure Fig. 3.2, on trouve un comportement similaire avec un facteur prés.

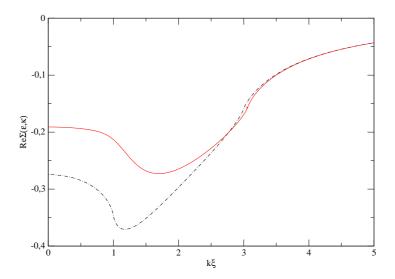


Fig. $3.2 - Re\Sigma^0(\mathbf{k}, \varepsilon)$ en fonction de $k\xi$ en premier ordre de l'approximation de Born avec $U/\varepsilon_{\xi^2} = 1$, $\varepsilon/\varepsilon_{\xi} = 1$. Les calculs numériques nous donnent les courbes pleines et celles qui sont en pointillées sont développées analytiquement

3.7.1 Comportement de la self-énergie à basse énergie

Le comportement à basse énergie est important dans le cadre de notre travail puisque nous voulons que les atomes restent froids au cours de la diffusion. Pour une énergie cinétique faible : $\varepsilon_k \ll \varepsilon_\xi$, la relation (Eq.3.82) devient égale à $\frac{\pi}{4k\xi}$ que nous l'introduisons dans l'expression E(q.3.81), nous obtenons $Im\Sigma^0(\sqrt{\varepsilon},\varepsilon) = -U\xi^4\frac{\pi}{4}$

La Fig. 3.3 montre l'influence de ε sur la self-énergie, précisement sa partie imaginaire $(Im\Sigma)$ puisque celle-ci nous donne la durée de vie des atomes dans le champ lumineux $(Im\Sigma)$ Le cas intéressant correspond à $\varepsilon=0$. Une décroissance plus lente de l'amplitude de diffusion car les interactions sont négligeables dans cette situation, les atomes bougent sous l'effet du potentiel aléatoire. En faisant varier le paramètre d'énergie ε , un déplacement de la position au bord de la courbe aura lieu. Une valeur plus élevée permet d'augmenter la self-énergie et de décaler la courbe sur une autre surface.

On peut calculer ainsi la distance typique entre deux diffusions par la relation : $l = v (Im\Sigma^0)^{-1}$, aussi par définition $v = \frac{\hbar q}{m}$. Au bord du spectre $q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2 m\varepsilon}$. on trouve dans ce cas $l = \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2} 4/\pi U \xi^4$.

Pour valoriser notre travail, et pour s'approcher de la réalité, nous nous sommes servis

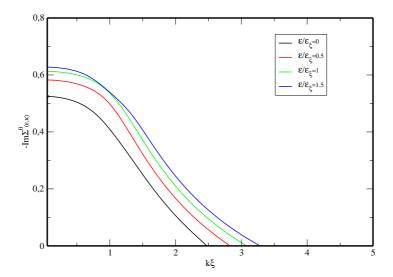


FIG. $3.3 - Im\Sigma^0(\mathbf{k}, \varepsilon)$ en fonction de $k\xi$ en premier ordre de l'approximation de Born avec $\nu/\varepsilon_{\xi} = 1$ et avec différentes valeurs d'énergies, le cas particulier pour $\varepsilon = 0$, $k_{max}\xi = 2.45$.

de l'éxpérience réussite au laboratoire Charles Fabry, Institut d'Optique à Orsay apparût dans l'article "Direct observation of Anderson localization of matter-waves in a controlled disorder". Il ont utilisé un potentiel unidimensionnel, les paramètres physiques sont : $\xi = 26\mu m$, $\mu = 219h~HZ$, l'énergie de corrélation est : $\varepsilon_{\xi} = \frac{\hbar^2}{2m\xi^2}$). Ils ont considéré une condensation de Bose-Einstein d'un gaz de Rubidium en 1D, $m = 2.4410^{-25}Kg$. Nous introduisons ces paramètres physiques dans nos calculs numériques. On trouve dans notre cas où le potentiel est en 3D un paquet d'ondes de matière avec un vecteur d'onde maximal; $k_{max} = (0.17\mu m)^{-1}$ (voir figure (Fig.4.2)). Dans cette situation le paquet d'ondes diffractés par le champ optique se trouvent entre $(0 < k < 0.17)~(\mu m)^{-1}$.

3.7.2 Self énergie pour une impulsion nulle

Nous passons maintenant à une autre étape de calul de la self-énergie afin d'examiner la self énergie pour une impulsion nulle. Nous nous plaçons toujours dans l'approximation de Born au premier ordre.

Dans le cas particulier où k=0, il suffit de prendre la limite $k\to 0$ dans les deux équations (Eq.3.82) et (Eq.3.83) réspectivement en faisant intervenir les approches mathématiques des intégrales, on obtient l'équation correspondante

$$Im\Sigma^{0}(\varepsilon,0) = -2 U\xi^{2} \int_{0}^{2/\xi} dk' \ k'^{2} I(k',0) \delta(\sqrt{\varepsilon} - k')$$
(3.90)

cette equation admet une fonction discontinue en escalier de la forme

$$Im\Sigma^{0}(\varepsilon,0) = -\frac{\pi U \xi^{2}}{4} \Theta(\frac{2}{\xi} - \sqrt{\varepsilon})$$
(3.91)

Dans ce cas particulier, les valeurs non nulles de $Im\Sigma^0(\varepsilon,0)$ sont entre

$$0 \le \Sigma^0(\varepsilon, 0) \le 4/\varepsilon_{\xi}$$

De même, la partie réelle de la self-énergie devient égale :

$$Re\Sigma^{0}(\varepsilon,0) = \frac{2U\xi^{2}}{\pi} \int_{0}^{2/\xi} dk' \ k'^{2} \frac{I(\varepsilon,0)}{\varepsilon - k'^{2}}$$
(3.92)

le développement de l'intégral donne

$$Re\Sigma^{0}(\varepsilon,0) = \frac{U\xi^{2}}{4}log\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon - \frac{4}{\xi^{2}}}\right)$$
 (3.93)

Cette fonction a un minimum en (0) et un maximum en $(4\varepsilon_{\varepsilon})$

La figure (Fig. 3.4) donne un spectre des atomes diffusés par le potentiel et qui sont diffuser sans effet du potentiel.

Dans ce cas particulier et toujours dans l'approximation de Born au premier ordre, la self-énergie satisfait à l'équation suivante :

$$\Sigma^{0}(\varepsilon, \mathbf{k=0}) = \frac{U\xi^{2}}{2} \left[log \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon - \frac{4}{\xi^{2}}} \right) - i\pi\Theta(\frac{2}{\xi} - \sqrt{\varepsilon}) \right]$$
(3.94)

Nous verrons dans la suite les calculs numériques qu'apporte la fonction $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{0})$ dans l'approximation de Born auto-consistant.

3.8 L'approximation de Born auto-consistante

Nous poursuivrons nos calculs à l'ordre supérieur de l'approximation de Born selfconsistant car nous pensons que les contributions d'ordre supérieurs doivent être prises en compte. Malheureusement, le calcul à l'ordre supérieur est extrêmement complexe à cause de la forme compliquée de l'éxpression de $\Sigma(\varepsilon,k)$ qui entraine avec elle des corrélations d'ordre élevé. Notre intuition nous mène à faire un calcul numérique pour trouver la solution approchée. Dans l'approximation de Born auto-consistant, le calcul de $\Sigma(\varepsilon,k)$ apparû dans l'équation (Eq.3.81) est donné directement par itérations, que l'on arréte à partir d'un critère de convergence.

Nous traçons les quatres courbes de la self-énergie en fonction de $k\xi$ nous obtenons ainsi la figure suivante (Fig3.5). Nos résultats montrent que le calcul numérique de $\Sigma(\varepsilon, k)$ converge aprés plusieurs itérations donnant ainsi une solution satisfaisante. les

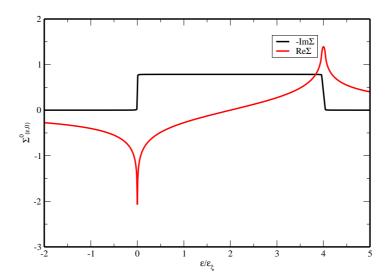


Fig. 3.4 – Partie réelle et partie imaginaire de la self-énergie en fonction de l'énergie dans FBA pour k=0, et $U/^2_\xi=1.$

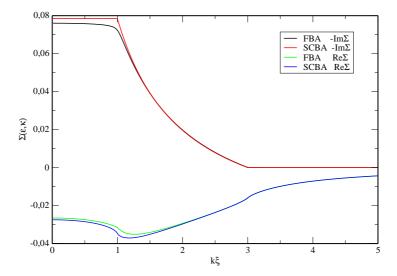


FIG. 3.5 – Partie réelle et partie imaginaire de la self-énergie en fonction de l'énergie dans FBA et SCBA pour $\varepsilon/\varepsilon_{\xi}=1$ et $U/\varepsilon_{\xi}^2=0.1$.

deux courbes avec des valeurs positives de $\Sigma(\varepsilon,k)$ correspondent à la partie imaginaire. Or, celles qui possèdent des valeurs négatives représentent la partie réelle de $\Sigma(\varepsilon,k)$. Les deux parties sont calculées dans deux approximations : FBA et SCBA. Nous remarquons sur la courbe que pour une amplitude faible de potentiel $(U/\varepsilon_{\xi}^2=0.1)$ et au centre lorsque $k\xi < 1$, la self-énegie est constante dans les deux approximations avec une amplitude légerement différente. Lorsque $k\xi > 1$, $\Sigma(\varepsilon,k)$ chute lentement vers zéro. Le k_{max} change lorsqu'on varie l'amplitude du désordre. Les atomes diffractés sont entre

$$0 \le k\xi \le 3.05$$

Le calcul itératif converge donnant ainsi une solution unique. On arrète les ittérations lorsque $max\left(\left|\frac{\Sigma_l\right)-\Sigma_{l-1}}{\Sigma_l}\right|\right) \leq 10^{-4}$ où l est le nombre itérations.

3.8.1 Comportement à basse énergie

Nous discutons maintenant l'influence du potentiel désordonné sur la sef-énergie. Le cas où $\varepsilon = 0$ est intéressant car il correspond à un potentiel chimique tout petit, c'est le cas où il n'y pas d'interactions dans le piège. En prennant encore l'expression (Eq.3.92) pour résoudre le problème à l'ordre supérieur de l'approximation de Born. La solution numérique est donc possible par itérations.

Le calcul auto consistant nous donne pour un potentiel chimique faible, un déplacement de la courbe vers les faibles valeurs d'énergies avec une amplitude de $0.78U/\varepsilon_{\xi}^2$ (voir Fig.é3.6). $Im\Sigma$ est différente de zèro pour des valeurs comprises entre $0 \le k\xi \le 2.46$ avec un $k_{max} = 0.46$ (normalisé par la longueur de corrélation). Lorsque $\mu \ll \frac{\hbar^2}{2m\xi^2}$, la longueur caractéristique vaut $56.5\mu m$ est grande par rapport à la longueur de corrélation $(26\mu m)$. Dans cette situation les atomes diffusés se trouvent entre $0 < k\xi < 0.46$.

3.8.2 Atome à impulsion nulle

Nous avons déja discuté précédemment le rôle des atomes immobiles dans le calcul de Born au premier ordre (paragraphe (3.7.2), le calcul analytique de self-énergie nous a donné une surface réctangulaire contenant un nombre d'atomes diffractés avec une énergie qui varie entre 0 et $4\varepsilon_{\xi}^2$. Sur la Fig. 3.7, on voit clairement la différence entre les deux courbes FBA et SCBA. Lorsque k=0, Le calcul itératif nous impose des conditions aux bords différentes à celles que nous avons obtenu dans FBA. Cette différence est due à la diffusion (atomes-photons) qui se répéte succéssivement. Le condensat est diffracté à longue porté sous l'effet du potentiel. Dans le calcul auto-consistant, $\Sigma(\varepsilon, k)$ décroit de façon trés différente comparant à celle du FBA donnant ainsi un nombre important qui participe à la diffusion multiple.

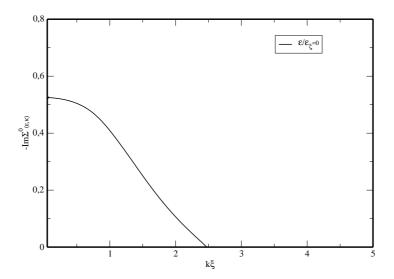


Fig. 3.6 – $-Im\Sigma(0,k)$ en fonction de $k\xi$ dans SCBA , pour deux paramètres : $\varepsilon=0$ et $U/v_\xi^2=1$

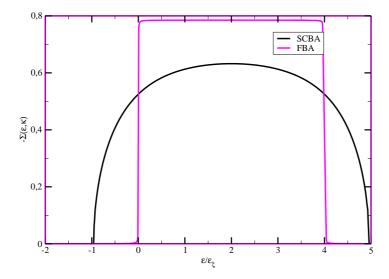


Fig. 3.7 – $-Im\Sigma(0,k)$ en fonction de l'énergie dans FBA et SCBA , pour k=0 et $U/v_\xi^2=1$.

3.9 Conclusion

Il s'agit d'une étude à la fois théorique et numérique de la self-énergie dans un champ de tavelures en 3D. L'opérateur de masse Σ qui contient de l'information sur la diffusion de l'onde de matière par un potentiel aléatoire a été examiné dans différents cas possible. Au premier ordre de l'approximation de Born, le calcul de Σ donne des résultats encourageantes en accord avec l'approche théorique. Le calcul autocohérente de la self-énergie a été aussi analysé numériquement pour voir l'effet de la corrélation à l'ordre plus élevé. Les résultats sont positifs, nous trouvons un spectre plus large d'atomes diffratés donc une diffusion multiple efficace de tous les atomes dans le nuage gazeux.

Chapitre 4

Fonction spectrale et distribution des énergies

4.1 Introduction

Ce chapitre est consacré principalement à l'étude de la distribution des énergies qui évolue dans un condensat de Bose-Einstein au cours du temps. A partir d'un modèle théorique que nous avons déja développé dans le chapitre précedent, nous déterminons la compétition entre l'énergie cinétique et le potentiel désordonné sur la vitesse d'un condensat en dehors du piège harmonique. Nous comparerons nos résulats dans l'approximation de Born au premier ordre à ceux obtenus dans l'approximation de Born self-consistante. Nous soulignerons également l'influence de la corrélation sur le transport de l'onde atomique. Enfin, à partir de la densité d'états, nous calculerons la fraction d'atomes qui sont multiplement diffusés.

4.2 Distribution de l'énergie

La distribution de l'énergie des atomes décrit la contribution des atomes avec une distribution en impulsion des ondes planes formant le nuage en expansion. Elle est définie comme étant la partie imaginaire de la transformée de Fourier de la fonction de Green.

$$F_{\mu}(\varepsilon) = \sum_{k} A(\varepsilon, k) |\phi_{\mu}(\mathbf{k})|^{2}$$
 (4.1)

 $A(\varepsilon, \mathbf{k})$ est donnée par

$$A(\varepsilon, \mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G(\varepsilon, \mathbf{k}) \tag{4.2}$$

elle est également égale

$$A(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{\pi} \frac{-Im\Sigma(\varepsilon, \mathbf{k})}{|\varepsilon - \mathbf{k}^2 - \Sigma(\varepsilon, \mathbf{k})|^2}$$
(4.3)

à savoir,

- $-A(\varepsilon, \mathbf{k})$ est la fonction spectrale. C'est une quantité mesurable qui décrit la décompsition des états ψ_{in} sur les états éxités ψ_s . Elle est réelle, positive et reliée ainsi à $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{k})$.
- $-F_{\mu}(\varepsilon)$ est la fraction d'atomes ayant une énergie totale ε contenant l'énergie cinétique plus l'énergie potentielle et il représente le potentiel chimique μ dans le condensat avant l'expansion libre.
- $-\phi_{\mu}(\mathbf{k})$ est la distribution en impulsion \mathbf{k} aprés l'expansion libre. Elle représente aussi la distribution de vitesses des atomes en expansion [79].

4.3 Calcul de la fonction spectrale dans l'approche de Born au premier ordre

Aprés avoir vu de façon quantitative l'influence de l'amplitude de diffusion sur les limites de la self-énergie, il est utile de poursuivre le calcul de la fonction spectrale pour connaître combien d'atomes vont être diffusés par un potentiel optique désordonné tout en gardant la conservation de l'énergie.

Tout d'abord, les interactions répulsives entre atomes sont responsables de l'expansion du condensat formant ainsi un nuage d'atomes froids qui bougent avec une certaine vitesse. Aprés un certain temps, lorsque les interactions disparaissent, nous éxcitons ces atomes à l'aide d'un champ lumineux, nous distinguons les valeurs de chaque paramètre résponsable au processus de diffusion. Il y'en a trois qui entrent en jeu : l'amplitude de désordre v, l'énergie de corrélation ε_{ξ} et l'énergie cinétique des atomes ε_{k} .

Pour calculer la fonction spectrale d'un condensat en expansion dans l'approximation de Born au premier ordre il suffit de prendre l'expression de la self-énergie (Eq. 3.81)) et de l'introduire dans l'équation (Eq. 4.3). Nous utilisons dans le cacul numérique des paramètres physiques expérimentaux à 1D qui sont utilisés au laboratoire d'Optique à Orsay. Ils ont pu voir à l'œil nu la transition d'Anderson. Nous exploitons ces paramètres pour les systèmes désordonnés en 3D. Les résultats sont présentés dans la section (3.7).

4.3.1 Distribution de l'énergie dans un speckle à longue portée

Nous étudions maintenant les effets induits par le potentiel désordonné sur la distribution des énergies des condensats atomiques avec une impulsion nulle $k \to 0$. À la fin de l'éxpansion lorsque toutes les interactions sont converties en énergie cinétique, on allume le potentiel optique. L'énergie cinétique est maintenant convertie en énergie potentielle, les atomes alors bougent sous l'effet du potentiel optique désordonné.

Nous calculons la distribution de l'énergie dans le cas où $k \to 0$. Pour un potentiel chimique faible $\mu \simeq 0$ la fonction de distribution en impulsion tend vers une fonction delta, on a donc $|\phi_0(\mathbf{k})|^2 \simeq \delta(\mathbf{k} = 0)$. On trouve ainsi la distribution de l'énergie des atomes

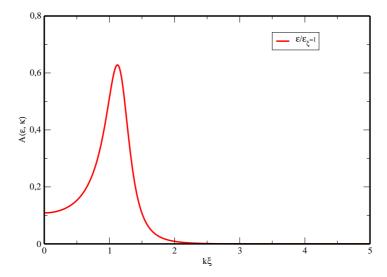


Fig. 4.1 – Fonction spectrale dans FBA, un spectre de vecteur d'onde pour deux paramètres : $\varepsilon/\varepsilon_{\xi} = 1$ et $U/\varepsilon_{\xi}^2 = 1$.

diffusés à partir de l'approche de Born au premier ordre :

$$F_{\mu \to 0}(\varepsilon) = \frac{\frac{U\xi^2}{4}\Theta\left(\frac{2}{\xi} - \sqrt{\varepsilon}\right)\Theta\left(\varepsilon\right)}{\left(\varepsilon - \frac{4U\xi^2}{4}log\frac{\varepsilon}{\varepsilon - \frac{4}{\xi^2}}\right)^2 + \left(\frac{U\xi^2}{4}\right)^2}$$
(4.4)

Cette fonction est toujours positive imposée par la fonction $\Theta(\varepsilon)$, s'annule lorsque $\varepsilon > \frac{4}{\xi^2}$. D'aprés la figure (Fig. 4.2), lorsque le potentiel chimique est négligeable par rapport à l'énergie de corrélation $\mu \ll \varepsilon_{\xi}$, la fonction de distribution qui n'est autre que la fonction spectrale $F_0(\varepsilon, k=0)$ décroît lentement en s'approchant du point limite. Cette décroissance est due au logarithme qui se trouve au dénominateur, pour une valeur infini de ε , la fonction F_0 , tend vers zéro. Les atomes ont des énergies comprises entre

$$0 \le \varepsilon \le 4\varepsilon_{\xi}$$

Par ailleurs, l'énergie cinétique est négligeable lorsque

$$\frac{U\xi^2}{4} \gg \mu$$

Alors, la position de μ est loin de la coupure 4= (sans dimension).

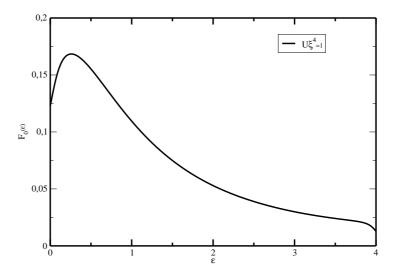


Fig. 4.2 – Distribution d'énegie dans l'approsimation de Born, le calcul analytique donne un spectre de l'énergie pour un potentiel chimique négligeable.

4.3.2 Comparaison entre le calcul numérique et le calcul analytique de la fonction spectrale dans FBA

Dans l'approximation de Born au premier ordre, et avec les paramètres physiques suivants : $U/\varepsilon_{\xi}^2=1, \xi=26~\mu m$ et $\varepsilon/\varepsilon_{\xi}=1$, le calcul numérique donne la courbe suivante Fig. 4.3, Nous constatons que la courbe contient deux fragments différents. Le fragment avec des valeurs positives de ε est en accord avec les résultats théoriques. Or le deuxième fragment qui correspond à des valeurs négatives de ε apparait comme un pic de faible largeur en $\varepsilon/\varepsilon_{\xi}=-0.5$. L'apparition de ce pic indique qu'il y'a certainement d'autres contributions (les atomes piégés dans des états plus profonds). Ce poids spectral vient peut être de la partie réelle de la fonction $\Sigma(\varepsilon,\mathbf{k})$ nous permet la normalisation de la fonction.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} A(\varepsilon, k) d\varepsilon = 1 \tag{4.5}$$

Nous vérifions numériquement que l'intégal sur tout l'espace est conservé.

4.3.3 Calcul auto-consistant de la fonction spectrale

Nous sommes maintenant sûr que la fonction est normalisée. Ces résulats encourageantes nous poussent de faire les calculs à l'ordre plus de l'approximation de Born self-consistante, en vérifiant toujours la normalisation de la fonction spectrale. Lorsqu'on prend en considération les contributions d'ordre supérieur, l'approximation de Born

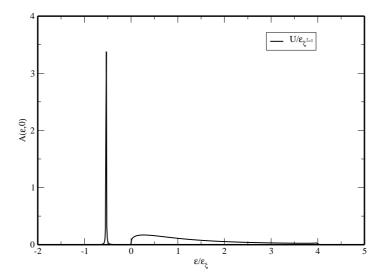


Fig. 4.3 – Fonction spectrale dans l'approximation de Born pour $U/\varepsilon_{\xi}^2 = 1$, $\varepsilon/\varepsilon_{\xi} = 1$, l'apparaition d'un spectre des atomes localisés dans la zone des énergies négatives.

self consistante nous donne des résultats intéressants et différentes à celles du premier ordre. Cette différence est due à la fonction de corrélation qui conduit à des termes supplémentaires dans la self-énergie ainsi dans la fonction spectrale. Il s'ensuit que la contribution de ces corrections à l'ordre plus élevé donne un volume différent qui tient compte de beaucoup plus les diffusions possible entre l'atome et le diffuseur.

En utilisant le paramètre de désordre U normalisé par l'énergie de corrélation ε_{ξ} , on peut alors calculer numériquent l'intégrale intervenant dans l'expression de Σ dans la limite de faible impulsion. Nous observons dans la figure (Fig. 4.4) un changement de forme de la courbe et les limites de la fonction, l'effet de la corrélation sur les bords du spectre est trés significatif, une contribution non nulle des atomes au delà des limites du spectres. Les deux parties de la courbe se compensent donnant ainsi une nouvelle figure. Cette courbe a un maximum égal à 1 avec des limites bien visibles. Ces limites correspondent à des valeurs d'énergies entre

$$-1\varepsilon_{\mathcal{E}} \leq \varepsilon \leq 5\varepsilon_{\mathcal{E}}$$

Selon le calcul auto-consistant, la partie réelle de $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{k})$ est résponsable de cette transformation donnant ainsi un spectre relativement large par rapport au calcul de Born au premier ordre. Dans ce cas, il y'a plus d'atomes énergétiques qui contribuent à la localisation.

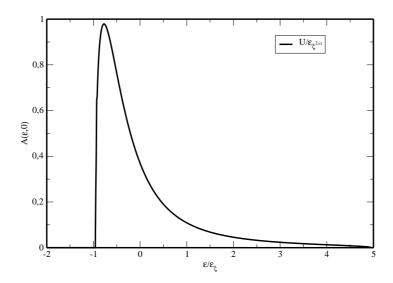


Fig. 4.4 – Fonction spectrale dans l'approximation de Born auto-consistant pour $U/\varepsilon_{\xi}^2, \varepsilon/\varepsilon_{\xi}=1$.

4.3.4 Influence du vecteur d'onde atomique

On peut varier aussi le vecteur d'onde \hat{k} ($\hat{k}=k\xi$) pour voir son influence sur les bords du spectre. Par exemple, le cas $\hat{k}=1$ correspond à une longueur d'onde égale à la longueur de corrélation. La largeur du spectre est différente de celle que nous avons trouvé dans le cas où k=0, celà signifie que la durée de vie des atomes éxcités par le potentiel change avec l'énergie de l'atome dans le speckle et aussi les atomes diffusés sont caractérisés par une longueur moyenne aléatoire différente dans les trois cas étudiés. Ce changement est dû aux corrélations. D'aprés les calculs numériques, nous remarquons que pour une amplitude de désordre égale à $U/\varepsilon_{\xi}^2=1$, il faudra beaucoup d'itérations pour que la courbe converge (voir Fig. 4.5). Ainsi, le calcul itératif de la self-énegie (la prise en compte à tous les ordres de perturbations) conduit à un changement de la distribution des énergies. Par ailleurs, même pour les vecteurs d'onde relativement grand, cette distribution est bien normalisée et modifie les conditions limites imposées par la conservation de l'énergie.

4.3.5 Influence de l'amplitude de désordre sur le nuage atomique

L'un des paramètres physiques important qui peut conduire à la localisation d'un condensat de Bose-Einstein est l'amplitude du potentiel désordonné. Au fait, l'énergie cinétique induite par les interactions est négligeable aprés l'expansion. Par ailleurs, nous branchons le potentiel aléatoire pour suivre le rôle de U sur la distribution des énergies.

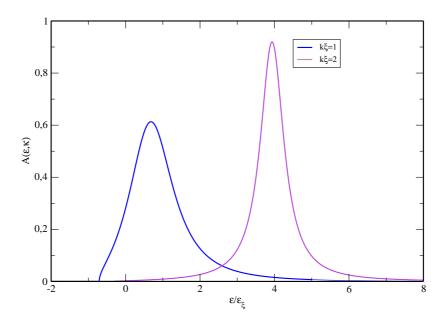


Fig. 4.5 – Fonction spectrale en fonction de $\varepsilon/\varepsilon_{\xi}=1$ dans SCBA pour deux valeurs différentes de k avec $U/\varepsilon_{\xi}^2=1$.

Nous rappelons que le paramètre U a la dimension de l'énergie au carré, il présente l'amplitude au carré du potentiel aléatoire : $U=v^2$, son effet est bien claire sur le spectre des atomes froids. Lorsque le potentiel optique est inférieur à l'énergie cinétique $V\ll\varepsilon_k$, nous prenons comme valeur égale à $U/\varepsilon_\xi^2=0.1$, les résultats donnent une courbe qui tend à se rétricir en s'approchant de 1. On voit bien claire sur la figure (Fig. 4.6) qu'elle est piquée autour de 1. Un pic parfait correspondant a une situation sans effet des diffuseurs. Aussi la fonction spectrale est lissée par une distribution Lorentzienne sous la forme $\delta\left(\varepsilon-\frac{\hbar^2}{2m}\widehat{k}^2\right)$. Une valeur plus élevée par exemple, pour $U/\varepsilon_\xi^2=1$, la courbe s'élargit en s'éloignant de la valeur $k\xi=1$: c'est l'effet de la corrélation. Au centre lorsque l'énergie cinétique domine l'énergie de corrélation, le mouvement des atomes résulte entre cette énergie cinétique et le potentiel désordonné. Dans le cas contraire, en s'approchant du bord de spectre, le mouvement des atomes résulte de celle du potentiel aléatoire.

4.3.6 Spectre des atomes froids dans le speckle optique

L'amplitude du potentiel désordonné est un paramètre important pour la diffusion des atomes. Nous prenons trois valeurs différentes du paramètres physique U/ε_{ξ}^2 (on normalise par l'énergie de corrélation pour simplifier les calculs) afin de voir son effet sur

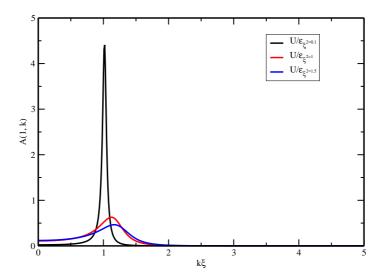


Fig. 4.6 – Fonction spectrale en fonction de $k\xi$ pour trois paramètres de désordre, on voit clairement que lorsque $U/\varepsilon_{\xi}^2 = 0.1$ la courbe présente un pic autour de 1. Lorsque le potentiel est trés faible, La fonction spectrale se rapproche du pôle de la fonction de Green.

le spectre. D'aprés la figure (Fig.4.7), nous constatons que les points limites du spectre varies au fur et à mesure que l'énergie des atomes augumente. Celà est due à la variation de la selfe énergie. Les spectres présentent une distribution d'énergie en fonction de k. Un potentiel chimique trés faible gère les atomes de faibles quantités de mouvement à travers la fonction de distribution des vitesses $\phi_{\mu}(\mathbf{k})$. Cette fonction de distribution des vitesses a été calculé par Castin [79], il trouve qu'aprés l'expansion libre du condensat de Bose-Einstein $\phi_{\mu}(\mathbf{k}) \sim 1 - \frac{k^2}{k_{\mu}^2}$ et pour $k > k_{\mu}$, $\phi_{\mu} \sim 0$, avec $k_{\mu} = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_{\xi}}}$. Nous trouvons que lorsqu'on néglige les intéractions c'est à dire le cas où $(\varepsilon = 0)$, la courbe s'élargit traduisant l'effet de la corrélation.

4.3.7 Densité d'états

La densité d'états mesure le nombre moyen d'états du système par unité de volume, elle est donnée par la relation suivante

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}} A(\varepsilon, \mathbf{k}) \tag{4.6}$$

A travers cette définition, nous cherchons le nombre d'atomes dans une géométrie confinés par un champ lumineux, en faisant l'intégration $\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} A(\varepsilon, \mathbf{k})$. Le calcul nous donne une contribution non nulle d'atomes qui participe à la diffusion multiple, pour des énergie élevés tous les atomes diffusent librement sans effet de diffuseurs (Fig. 4.8). Dans le cas

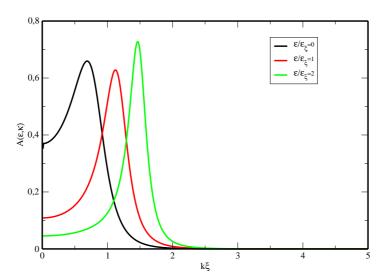


FIG. 4.7 – Fonction spectrale pour différentes d'ordre de paramètres, avec $U/\varepsilon_{\xi}^2=1$ pour $\varepsilon/\varepsilon_{\xi}=0$, donne une courbe plus large que celui de $\varepsilon/\varepsilon_{\xi}=1$ et $\varepsilon/\varepsilon_{\xi}=2$.

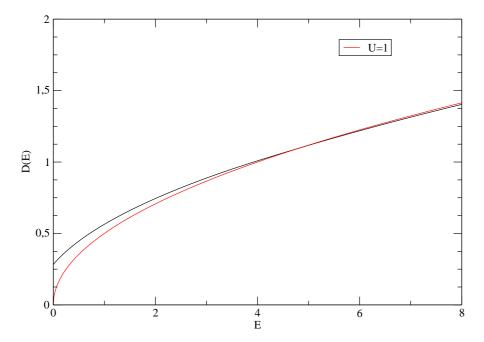


Fig. 4.8 – Densité d'états en fonction de $\varepsilon/\varepsilon_{\xi}$ pour k=1 dans deux cas différents : propagation libre, $(\rho$ varie en $\varepsilon^{1/2})$. Le transport des ondes atomiques est modifié par le nombre de diffuseurs.

où $k \to 0$, et pour un potentiel chimique faible par rapport à l'énergie de corrélation, nous trouvons 60% d'atomes localisés pour une amplitude de désordre égale à $1:\sqrt{U}=1$. Ce nombre diminue losque le potentiel chimique augmente, à la limite lorsqu'on s'approche du seuil de localisation (le potentiel chimique est égale à l'énergie de corrélation) 35% d'atomes sont localisés [80]. Nous remarquons aussi que l'amplitude de désordre a un effet significatif sur le nombre des atomes localisés.

4.4 Conclusion

Dans ce dernier chapitre, nous nous sommes intéressés à la distribution des énergies (vitesses) des ondes planes formant le nuage atomique aprés leur expansion en dehors du piége harmonique. Dans le calcul analytique dans l'approximation de Born au premier ordre donne un spectre d'énergie avec des limites bien définie, au-delà des ces limites aucun atome ne peut contribuer à la diffusion multiple. Nous avons poussé nos calculs numériques à l'ordre supérieur de l'approximation de Born, pour voir les contributions suplémentaires. Le calcul auto-consistant nous donne un spectre totalement différent de celui obtenu dans l'approximation de Born au premier ordre. L'effet de la corrélation sur le spectre est trés significatif sur la distribution de l'énergie. Beaucoup d'atomes en expansion sur le désordre avec une vitesse trés faible contribuent à la diffusion multiple. À la fin de ce chapitre, nous avons analyé la densité d'états afin de comparer les deux régimes : régime diffusif où les atomes sont délocalisés et peuvent diffusés par le potentiel optique désordonné, et le régime localisé où les atomes sont piégés par le désordre ambiant. La fraction d'atomes délocalisés ou localisés dépend de trois paramètres : le potentiel chimique, l'énergie de corrélation, et l'amplitude de désordre.

Regular Article

Diffusion and localization of cold atoms in 3D optical speckle

A. Yedjour^{1,2} and B.A. Van Tiggelen^{1,a}

- Laboratoire de Physique et de Modélisation des Milieux Condensés, CNRS /Université Joseph Fourier, Maison des Magistères, BP 166, 38042 Grenoble Cedex 9, France
- ² Laboratoire de Physique des Plasmas, des Matériaux Conducteurs, et leurs Applications, Départment de Physique, Université des Sciences et de la Technologie d'Oran, USTO, 31000 Oran, Algeria

Received 18 December 2009 / Received in final form 9 March 2010 Published online 4 June 2010 – © EDP Sciences, Società Italiana di Fisica, Springer-Verlag 2010

Abstract. In this work we re-formulate and solve the self-consistent theory for localization to a Bose-Einstein condensate expanding in a 3D optical speckle. The long-range nature of the fluctuations in the potential energy, treated in the self-consistent Born approximation, make the scattering strongly velocity dependent, and its consequences for mobility edge and fraction of localized atoms have been investigated numerically.

1 Introduction

Anderson localization is by now a phenomenon that has been widely investigated, both theoretically and experimentally, and for many different kinds of waves, from electrons, to electromagnetic waves, ultrasound [1], and cold atoms [2]. To understand Anderson localization and to provide quantitative predictions for experiments, many tool models have been proposed, among which the Anderson model is undoubtedly the best known. This model describes a noninteracting electron, tightly bound to the nucleus, but capable to tunnel to nearby atoms. Already in the celebrated 1958 paper [3], Anderson demonstrated how this model highlights the role of dimensionality. A genuine mobility edge only occurs in dimensions larger than 2 [4]. For classical waves, a few observations on 3D localization have been reported [5,6].

The tight binding model is highly relevant to understand 3D dynamical localization of cold atoms [7]. It is however not appropriate to describe localization of many other waves, where the starting point is much more a diffuse, extended motion, rather than a tightly bound state. Localization of electromagnetic waves in 3D disordered media for instance, is much more a diffusion problem than a problem of tunneling to nearest neighbors. The scaling theory of localization [8], as well as the Thouless criterion [9], both deal with conductance, and thus use the diffuse motion as a starting point.

The self-consistent theory, first formulated by Vollhardt and Wölfle in 1981 for 2D electron conductivity [10], was the first work that explicitly calculated how quantum corrections affect the classical "Drude" picture, to make way for localization. Despite its evident perturbational nature, the theory has been successful because it

provides a microscopic picture of finite-size scaling, reproduces the Ioffe-Regel criterion for the mobility edge in 3D, and locates the mobility edge of the tight-binding model quite accurately [11]. The aim of the present work is to revisit and apply this theory to the localization of cold atoms in optical speckle.

The first experiments on 1D cold atom localization have been carried out recently [12,13]. The atoms are released from a BEC and subsequently expand in a potential energy landscape created by optical speckle, supposed free of mutual interactions. Both theory [14,15] and experiment have revealed the presence of a quasi-mobility edge in 1D. Atoms with velocities $v > \hbar/m\xi$ (ξ is the correlation length of the disorder) can hardly be scattered because this would imply a momentum transfer larger than \hbar/ξ which the random speckle cannot support. As a result the localization length is infinite in the Born approximation, though finite and large when all orders are taken into account. This somewhat surprising result highlights the impact of long-range correlations in 1D. In higher dimensions, small angle scattering can still lead to small enough momentum transfer to be transferred to the speckle, even for large velocities, so that this quasi-mobility edge does not occur. Yet, correlations are expected to affect localization, since the potential field sensed by the atom strongly depends on its velocity, and strong forward scattering is not favorable for localization to occur. In addition, near the 3D mobility edge the disorder is necessarily large so that the spectral function of the atoms is neither strongly peaked near energies $E = p^2/2m$, nor has it a Lorentzian broadening.

2 Self-consistent Born approximation

In the following we consider the scattering of a noninteracting atom with energy E and momentum \mathbf{p} from a

a e-mail: bart.van-tiggelen@grenoble.cnrs.fr

disordered potential $V(\mathbf{r})$. Two properties are specific for an optical potential. Firstly, the fluctuations $\delta V(\mathbf{r})$ are determined by the optical intensity and not by the complex field. This means that they are not Gaussian but rather Poisonnian, with mean $\langle V \rangle$. As a result, the twopoint correlation will in principle not be sufficient to describe the full scattering statistics. Secondly, the correlation function, given by $\langle \delta V(\mathbf{r}) \delta V(\mathbf{r}') \rangle = U \operatorname{sinc}^2(\Delta r/\xi)$, is long range. Here $U = \langle V \rangle^2$ depends on the average optical intensity. It is not difficult to see that the Born approximation breaks down at energies $E \leq U/E_{\xi}$ [16,17], with $E_{\xi} = \hbar^2/2m\xi^2$ an important energy scale related to correlations. As usual we expect matter localization to occur at small energies, near the band edge of the spectrum. Another consequence of the long-range correlations is that scattering strongly depends on the De Broglie wave length and thus on the velocity of the atom, and even tends to vanish at high velocities. This makes it impossible to define a mean free path ℓ in the usual way, that is by identifying the simple pole of the ensemble-averaged Green function in the complex k-plane [18].

In the following we shall cope with the second problem. The ensemble-averaged Green function is written in terms of a complex self-energy as $G(E,p)=[E-p^2/2m-\varSigma(E,p)]^{-1}$ [18]. Momenta are expressed as $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ with the De Broglie wave number \mathbf{k} . We shall apply the self-consistent Born approximation (SCBA) according to which the complex self-energy $\varSigma(E,k)$ of the atom is calculated from [19]

$$\Sigma(E, k) = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{E - \sqrt{U} - \hbar^2 k'^2 / 2m - \Sigma(E, k')}.$$
 (1)

In this equation, $\sum_{\mathbf{k}} \equiv \int \mathrm{d}^3\mathbf{k}/(2\pi)^3$. The average potential \sqrt{U} has been split off to ensure that $\Sigma(E,k)$ only describes fluctuations. From now on all energies, including $\Sigma(E,k)$, will be expressed in units of the energy scale E_ξ and wave numbers in units of $1/\xi$. In equation (1), $U(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ represents the structure function associated with the speckle correlation, which determines the angular profile in single scattering [16,17]. The SCBA is convenient because its imaginary part expresses the generalized optical theorem in single scattering [18]. In addition, it avoids the bound state at energies $E < \sqrt{U}$ predicted by the first Born approximation. In reference [20] the SCBA was solved analytically for cold atoms and zero-range correlations

Equation (1) has been solved by iteration, with spline interpolation between 500 points $0 < k_n < 3$. The angular integral can be performed analytically. Typically 10–20 iterations have been necessary to ensure good convergence. In Figure 1 we show real and imaginary part of $\Sigma(E,k)$ for $U/E_\xi^2 = 1$ and $E = \sqrt{U}$ (thus at average of the potential landscape), and compare it to the first order Born approximation (FBA) applied in references [16,17]. As a realistic experimental reference we take ⁸⁷Rb-atoms released from a BEC with chemical potential $\mu = h \times 219$ Hz into an optical speckle with correlation length $\xi = 0,26$ μ m (data from the Orsay group [12,13]). This reveals that μ

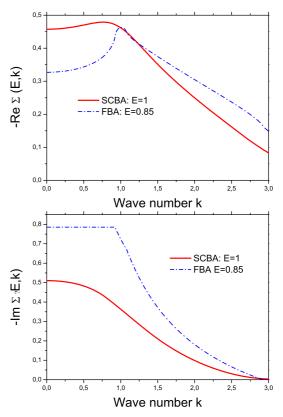


Fig. 1. (Color online) Imaginary (top) and real part (bottom) of the self energy (in units of E_{ξ}) of an atom in a speckle potential with $U/E_{\xi}^2=1$, as a function of wave number (in units of $1/\xi$) for an energy $E=E_{\xi}$, calculated in the self-consistent Born approximation (SCBA). The dashed line denotes the first Born approximation (FBA). To compensate for the shift in the band edge ($E_b=0.15E_{\xi}$) predicted by the SCBA, the FBA has been evaluated at $E=0.85E_{\xi}$.

and E_ξ are equal energy scales in typical experiments. Equivalently, the De Broglie wavelength and the correlation length are competing length scales, $\lambda/2\pi \geq \xi$. To discriminate "trivial trapping" in deep random potential wells from "genuine" Anderson localization, experimentalists wish to arrange the experiment such that the typical kinetic energies μ are somewhat larger than the typical fluctuations \sqrt{U} in the potential energy [12,13]. In that case, $U/E_\xi^2 \leq 1$. We will comment on this choice later.

Figure 1 (top) shows $-\mathrm{Im}\,\Sigma(E=1,k)$ to be nonzero only for k<3. It is also seen that the FBA significantly overestimates the amount of scattering. The real part of $\Sigma(E=1,k)$ is clearly negative. This shifts the band edge of the energy spectrum to $E_b=0.15$. The energy spectrum has an absolute lower bound E=0, but the SCBA always locates the band edge at somewhat larger energies. The SCBA does undoubtedly not treat the (small) density of states near E=0 very well, where sharply localized Lifshits-type states are likely to occur. Figure 2 shows the distribution of wave numbers at energy E=1, expressed by the spectral function $S(E,k)\sim -\mathrm{Im}\,G(E,k)$. It is a rather broad distribution, with a tail extending to k=2. This is important, since we will see in the next section

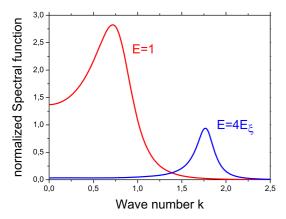


Fig. 2. (Color online) Spectral function, normalized to the total density of states at energy E, calculated in the SCBA, for $E = E_{\xi}$ (red) and $E = 4E_{\xi}$ (blue) and for $U/E_{\xi}^2 = 1$. At small energies it has a large weight at k = 0 (very cold atoms) and extends up to k = 2.

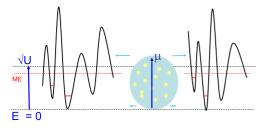


Fig. 3. (Color online) Model of the atomic expansion. The BEC releases noninteracting atoms with kinetic energies between 0 and its chemical potential μ , that penetrate the disordered speckle potential, whose average is $\langle V \rangle = \sqrt{U}$ and its variance equal to U. Note that V is bounded from below $(V \geq 0)$ but not from above. In this work we find the mobility edge (ME, red) always below the average potential energy.

that atom transport is quite sensitive to large momentum transfers, involving large k-vectors. At low energies, relevant for localization, \hbar/ξ has become the typical momentum of an atom, and E_{ξ} the typical energy. At larger energies E=3, the spectral function behaves normally, i.e. strongly peaked near $k=\sqrt{E}$. The peak is smaller because we did not include the geometric surface factor $4\pi k^2$ in phase space, so to highlight its weight at small k<1 ("slow atoms") for later purposes.

3 Diffusion with interference

We proceed with the calculation of the diffusion constant of the cold atoms, and the possible presence of a mobility edge where it vanishes. With that information we will find how many atoms will be localized. The idealized model we consider is schematically drawn in Figure 3.

The Bethe-Salpeter equation is a rigorous transport equation for the two-particle Green function [18,21,22]. In phase space the latter is written as $\Phi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E,t,\mathbf{r})$, which is readily interpreted as the "quantum probability density" for an atom with velocity $\hbar\mathbf{k}/m$ to travel, during

the time t, from position $\mathbf{r} = 0$ to position \mathbf{r} and to achieve the velocity $\hbar \mathbf{k}'/m$. Its Fourier-Laplace transform with space-time is written as $\Phi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E,\Omega,\mathbf{q})$. It has two fundamental properties, namely reciprocity, $\Phi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E,\Omega,\mathbf{q}) = \Phi_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}(E,\Omega,\mathbf{q})$, and normalization. The last property can be expressed by,

$$\sum_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E, \Omega, \mathbf{q} = 0) = \frac{-2\operatorname{Im} G(E, k')}{-i\Omega}.$$
 (2)

In particular, when also integrating over all energies,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \Phi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E, \Omega, \mathbf{q} = 0) = \frac{1}{-i\Omega}$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{-1}{\pi} \operatorname{Im} G(E, k) = \frac{1}{-i\Omega}. \quad (3)$$

The last equality, needed for later purposes, follows from a general sum rule of the spectral function [21]. This identity guarantees that the total quantum probability for the atom to be somewhere, with some velocity and with some energy, is conserved, and equal to one. The Bethe-Salpeter can be re-written as a quantum-kinetic equation for $\Phi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E,\Omega,\mathbf{q})$. The conservation of quantum probability guarantees the existence of a hydrodynamic diffusion pole. We shall express this as [22]

$$\Phi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E,\Omega,\mathbf{q}) = \frac{2}{\sum_{\mathbf{k}} -\operatorname{Im} G(E,k)} \frac{\phi(E,\mathbf{k},\mathbf{q})\phi(E,\mathbf{k}',\mathbf{q})}{-i\Omega + D(E)q^2}$$
(4)

where

$$\phi(E, \mathbf{k}, \mathbf{q}) = -\operatorname{Im} G(E, k) - i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}) F(E, k) + \mathcal{O}(q^2).$$

This expression states that the distribution of atoms in k-space at given energy E is essentially governed by the spectral function, with a small correction that supports a current. The front factor in equation (4) is imposed by the normalization condition (3). The k-integral of -Im G(E,k) is recognized as $(\pi \text{ times})$ the density of states (DOS) per unit volume $\rho(E)$. With the correct normalization, we can set $\Omega=0$. The still unknown function F(E,k) follows from [21]

$$F(E,k) = |G(E,k)|^{2} - \frac{\partial \operatorname{Re} G(E,k)}{\partial k^{2}} + |G(E,k)|^{2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\partial \operatorname{Re} G(E,k')}{\partial k'^{2}} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{k^{2}} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E,0) + |G(E,k)|^{2} \sum_{\mathbf{k}'} F(E,k') \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{k^{2}} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E,0).$$
(5)

The irreducible vertex $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E,\mathbf{q})$ generalizes the function $U(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ defined in the first section to all interference contributions in multiple scattering. Once we have solved for F(E,k), the diffusion constant follows from the Kubo-Greenwood formula [21,22],

$$D(E) = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{3} \frac{1}{\pi \rho(E)} \sum_{\mathbf{k}} k^2 F(E, k).$$
 (6)

Since $\sum_{\mathbf{k}} = (4\pi)/(2\pi)^3 \int dk k^2$, we infer that D(E) is determined by the fourth moment of the distribution F(E,k), which puts a large weight on "fast" atoms. The order of magnitude of the diffusion constant is governed by the ratio \hbar/m of Planck's constant and the mass of the atom, the second factor being dimensionless and of order unity at low energies. For $^{87}\mathrm{Rb}, \, \hbar/m \approx 1800 \, \mu\mathrm{m}^2/\mathrm{s}$. The third term in equation (5) can be transformed using the exact Ward identity,

$$\Sigma(E, \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{q}) - \Sigma^*(E, \mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E, \mathbf{q})$$
$$\times \left(G(E, \mathbf{k}' + \frac{1}{2}\mathbf{q}) - G^*(E, \mathbf{k}' - \frac{1}{2}\mathbf{q}) \right). \quad (7)$$

If this identity is developed linearly in \mathbf{q} , and inserted into equation (5), we obtain,

$$F(E,k) = F_0(E,k) + \delta_{\mathbf{q}}U(E,k) + |G(E,k)|^2 \sum_{\mathbf{k}'} F(E,k') \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{k^2} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E,0) \quad (8)$$

with

$$\begin{split} F_0(E,k) &\equiv |G(E,k)|^2 \left(1 + \frac{\partial \mathrm{Re} \Sigma(E,k)}{\partial k^2} \right) - \frac{\partial \mathrm{Re} G(E,k)}{\partial k^2} \\ \delta_{\mathbf{q}} U &\equiv |G(E,k)|^2 \sum_{\mathbf{k}'} \mathrm{Im} G(E,k') \bigg(2i \frac{\mathbf{k}}{k^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \bigg) U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E,\mathbf{q}). \end{split}$$

So far, the formalism for the diffusion constant is rigorous. Three levels of analysis exist. First, in the Drude approximation, one assumes ad hoc that all contributions from scattering $(U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E,\mathbf{q}))$ are purely isotropic in angle. Then $F(E,p)=F_0(E,p)$. The Drude diffusion constant $D_d(E)$ can be used to define a dimensionless Ioffe-Regel type parameter " $k\ell$ " from the relation $D_d(E)=\frac{1}{3}v\ell=\frac{1}{3}(\hbar/m)k\ell$. Hence,

$$k\ell \equiv \frac{\sum_{\mathbf{k}} k^2 F_0(E, k)}{\sum_{\mathbf{k}} -\operatorname{Im} G(E, k)}.$$
 (9)

For a short-range correlation, the self-energy is independent of k so that $F_0(E,k)=2\mathrm{Im}^2\,G(E,k)$, and this definition of $k\ell$ coincides with the usual one in terms of $-\mathrm{Im}\,\Sigma(E)$ [18]. For low energies we found in Figure 3 that typically $k\approx 1/\xi$. If we anticipate that $k\ell\approx 1$ near the mobility edge, we conclude that the mean free path is roughly equal to the correlation length.

The Drude approximation is popular in electronimpurity scattering but clearly inadequate when the scattering is strongly anisotropic, as for the optical speckle. In the Boltzmann approximation we adopt $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}=U(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$, i.e. the structure function associated with the optical disorder. Being a function of $\mathbf{k}-\mathbf{k}'$ only, it follows that $\delta_{\mathbf{q}}U=0$. Different results are summarized in Figure 4. At low energies Boltzmann and Drude diffusion constant typically differ by a factor 1.5 as was obtained by Kuhn et al. [16,17] on the basis of the FBA. For atom energies $E>2E_{\xi}$ the Boltzmann diffusion constant rapidly

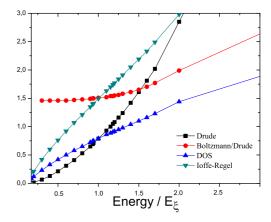


Fig. 4. (Color online) Solution of equations (6) and (8) in the Boltzmann approximation, for a disorder amplitude $U/E_{\xi}^2=1$. Shown as a function of energy are the Drude conductivity $2\pi\rho(E)D_d(E)$ (in units of the velocity $\hbar/m\xi$), the Ioffe-Regel parameter (9), the DOS that vanishes at the band edge $E/E_{\xi}=0.15$, and the ratio of Boltzmann and Drude conductivity. Note that 1/3 times the Ioffe-Regel parameter equals the Drude diffusion constant, expressed in units of \hbar/m .

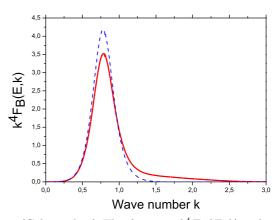


Fig. 5. (Color online) The function $k^4F_B(E,k)$, solution of equation (8) for the energy $E/E_{\xi}=0.94$ in the Boltzmann approximation. The blue dashed line compares it to the Drude approximation $k^4F_0(E,p)$ defined in equation (8), rescaled properly such that both k-integrals equal σ_B/σ_0 .

rises since only strong forward scattering can occur. In the region $E=E_\xi$, the Ioffe-Regel parameter takes values of the order of 1.5. We infer from Figure 5 that the solution $F_B(E,p)$ is roughly a rescaling of the Drude Ansatz, for which the current is dominated by atoms with velocities $v=0.83\hbar/m\xi$. Nevertheless, a non-negligible fraction of atoms faster than $v=1.5\hbar/m\xi$ contributes to the current (note that $\hbar/m\xi\approx 7$ mm/s for the set-up with Rubidium described above).

We finally consider constructive interferences, and add the most-crossed diagrams to the BS-equation in the spirit of the self-consistent theory of localization. Any observation $D < D_B$ must be attributed to constructive interferences. It is well-known that, by reciprocity, these diagrams can be constructed from the solution $\phi(E, \mathbf{k}, \mathbf{q})$ of the BS-equation by removing the incoming

and outgoing Green's functions (indicated by a hat), and by time-reversing the bottom line [23]: $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{MC}(E,\mathbf{q}) = \widehat{\Phi}_{\frac{1}{2}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q})\frac{1}{2}(\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q})}(E,\mathbf{k}+\mathbf{k}')$. Using equation (4) the two procedures lead to

$$\widehat{\Phi}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E) = \frac{2}{\sigma(E)\mathbf{q}^{2}} \left[\operatorname{Im}\Sigma(E,k) \operatorname{Im}\Sigma(E,k') + i\mathbf{q} \cdot (I_{kk'}(E)\mathbf{k} + I_{k'k}(E)\mathbf{k}') \right]$$

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathrm{MC}}(E,\mathbf{q}) = \frac{2}{\sigma(E)(\mathbf{k} + \mathbf{k}')^{2}} \left[\operatorname{Im}^{2}\Sigma(E,\frac{1}{2}\Delta k) + I_{\Delta k/2,\Delta k/2}(E)i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{q} \right]. \tag{10}$$

We abbreviated $I_{kk'} = F(E,k) \text{Im } \Sigma(E,k')/|G(E,k)|^2$, $\Delta k = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$ and introduced $\sigma(E) = 2\pi\rho(E)D(E)$, the equivalent of DC-conductivity in electron conduction. We now face the more complicated task of solving equations (8) and (6) simultaneously with $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\text{MC}}$, and of finding out if its extrapolation to small energies leads to a mobility edge where $\sigma(E) = 0$. This constitutes a "self-consistent" problem for the entire function F(E,k), rather than just for its fourth moment, the DC-conductivity.

We first observe that for most-crossed diagrams $\delta_{\bf q} U \neq 0$. This term does not appear in standard self-consistent theory [10], which relies on moment expansion. Note that it also features "self-consistently" the function $F(k)/\sigma$, just like the second term in equation (8). As can be induced from equation (10) the singularity at ${\bf k}=-{\bf k}'$ that generates the (weak) localization is partly compensated by the factor ${\bf k}+{\bf k}'$. We shall therefore ignore $\delta_{\bf q} U$ here as well.

The self-consistent equations (8), (6) and (10) can be solved almost analytically when the self-energy is assumed k-independent, typically true for zero-range correlations. Without more details we mention that the mobility edge then occurs at $k\ell = 1.122$ [24]. Quite convenient is that, even when scattering extends to infinite wave numbers, our theory does not require an ad-hoc cut-off to eliminate short wave paths that diverge in approximate theories [16,17,25]. For the speckle correlation, Figure 6 gives the result of the exact numerical solution, obtained by iteration and spline interpolation. This method worked satis factorily until close to $(\Delta E \approx E_{\xi}/5)$ the mobility edge, where the most-crossed diagrams give a diverging contribution. Before that happens, the strong forward scattering of a single scattering competes heavily with the reduction induced by weak localization.

To find the location of the mobility edge we shall use the following approximation. In Figure 7 we see that at $E/E_{\xi}=1.15$ the solution $F(E,k)/\sigma$ is closely approximated by $F_0(E,k)/\sigma_0$ (both have their fourth moment normalized to one). This implies physically that all atoms with energy E undergo the same reduction in diffusion, but keep the same velocity distribution as found in the Drude picture. If we insert $F_0(E,k)$ in the left hand side of equation (8) and integrate over k we can derive the simple relation $\sigma/\sigma_B \approx 1 - K(E)$ that is reminiscent of standard self-consistent theory [10]. The parameter K is

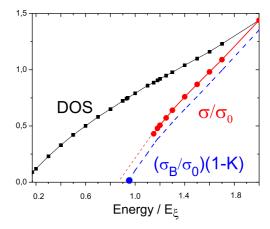


Fig. 6. (Color online) Solution of equation (8) with inclusion of the most-crossed diagrams for a disorder amplitude $U/E_\xi^2=1$. Shown in red is the ratio of conductivity and Drude conductivity for energies $E>1.15E_\xi$ for which our iteration converged. The blue dashed line relies on an approximation discussed in the text and locates the mobility at $E=0.94E_\xi$.

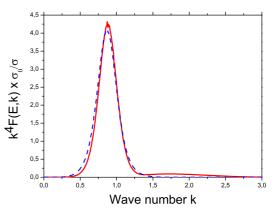


Fig. 7. (Color online) The function $k^4F(E,k)$ (in red)), solution of equation (8) with interference included, for the energy $E/E_{\xi}=1.15$, compared to the Drude approximation $k^4F_0(E,p)$ defined in equation (8) (blue dashed line). The first has been rescaled by the factor σ_0/σ such that the k-integrals of both are equal to one.

found to be

$$K(E) = -\frac{4}{3\sigma_d^2(E)} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k'}} F_0(E, \mathbf{k'}) \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k'}}{(\mathbf{k} + \mathbf{k'})^2} \times \operatorname{Im}^2 \Sigma \left(E, \frac{1}{2} |\mathbf{k} - \mathbf{k'}| \right) |G(E, \mathbf{k})|^2.$$
(11)

For $U/E_{\xi}^2=1$, this approximation locates the mobility edge (K=1) at $E/E_{\xi}=0.94$. Upon inspecting the numerically exact solution in Figure 6, we suspect that the real mobility edge is located somewhat lower, near $E/E_{\xi}=0.9$. For smaller disorder we found that the two approaches agree better. It is in principle possible to obtain numerically the function $F(E,p)/\sigma$ as $\sigma\to 0$ and calculate more precisely the location of mobility edge, but this is beyond the scope of this paper. In Figure 8 we show the different energies for different strengths of

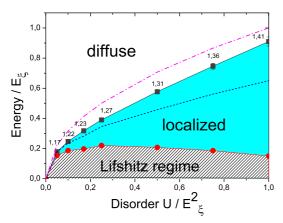


Fig. 8. (Color online) Band edge (red solid line) and mobility edge (black solid line) as a function of the disorder strength U, all expressed in the energy E_{ξ} . The criterion $E_c \approx 0.5 U/E_{\xi}$ found by references [16,17] using the FBA is adapted here to $E_c \approx 0.5 U/E_{\xi} + E_b(U)$ and is shown as a blue dashed line. The numbers around the mobility edge reveal the small variation of the Ioffe-Regel parameter (9). The mobility edge separates extended $(D(E) \neq 0)$ from localized (D(E) = 0) states. Energies $0 < E < E_b$ are excluded by the SCBA, but this is likely to be an artifact of the SCBA. In this Lifshitz regime we expect strongly localized Lifshitz-type states with small DOS. Pink dashed line: average potential energy \sqrt{U} .

the disorder. If we apply the criterion found in reference [16,17], $k\ell_B=0.95$ (dashed line in Fig. 8), localization would occur at smaller energies, around $E/E_\xi=0.65$ for $U/E_\xi^2=1$. This approach expresses the general trend well but is clearly somewhat pessimistic, probably because their choice of the ad-hoc wave number cut-off to calculate the most-crossed diagrams underestimates K. Note that all localized states occur below the average of the potential landscape. Unlike in 1D, we find no regime with atoms fast enough to be able to tunnel through the potential barriers, or even fast enough to traverse them classically, and to become localized purely by constructive interferences.

A final important question is how many atoms will wind up localized. The energies of the atoms are not governed by a thermal distribution, as in electron conduction [21], but are rather determined by the short, interaction-driven expansion process after the optical trap is turned off. If this stage would be free of disorder, the "initial" energy distribution would clearly equal the known kinetic energy distribution emerging from the free expansion [26], which will stay constant afterwards since scattering is elastic. In that case a chemical potential μ of the BEC smaller than the mobility edge will imply that all atoms are localized. Disorder however, is likely to change this scenario, but in what way is not known. We will assume here that the disorder has no influence on the kinetic energy distribution after expansion. This is true for instance when the speckle potential has a constant though random value during the interaction-driven expansion, and arguably when the speckle is switched on rapidly after free expansion. In this scenario, many atoms achieve energies larger than the chemical potential μ of

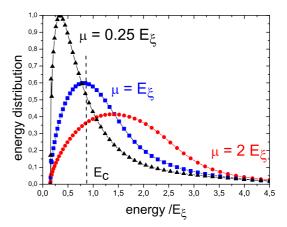


Fig. 9. (Color online) Energy distributions of the atoms inside the disordered speckle potential, for different chemical potentials of the BEC from which they were released and $U/E_{\xi}^2=1$. They all exhibit a tail of relatively fast atoms $(E>E_{\xi})$ that extends beyond the mobility edge E_c . The SCBA is likely not to be applicable in the Lifshitz regime 0 < E < 0.2

the BEC. If the initial velocity distribution is denoted by $\phi_{\mu}(\mathbf{k})$, it follows from equation (4) that the fraction of localized atoms, regardless of their final velocity (integrate over \mathbf{k}) or position (put $\mathbf{q} = 0$), is given by

$$\int_{E_b}^{E_c} \frac{dE}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \Phi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(E, t, \mathbf{q} = 0) \phi_{\mu}(\mathbf{k}') = \int_{E_b}^{E_c} dE \sum_{\mathbf{k}'} \frac{-1}{\pi} \operatorname{Im} G(E, k') \phi_{\mu}(\mathbf{k}'). \quad (12)$$

After the free expansion one finds $\phi_{\mu}(k) \sim 1 - k^2/k_{\mu}^2$ and zero for $k > k_{\mu}$ [26], where the maximum (dimensionless) wave number $k_{\mu} = \sqrt{\mu/E_{\xi}}$. The fraction of localized atoms is thus determined by the number of microscopic states below the mobility edge whose kinetic energies are smaller than μ . In present (1D) experiments is $U/E_{\varepsilon}^2=1$ and $\mu \approx E_{\xi}$ which is just slightly above the 3D mobility edge. Our expansion scenario predicts a distribution of atom energies that is quite different from $\phi_{\mu}(\mathbf{k})$ (Fig. 9). This highlights the role of the disorder during the initial expansion of the atom cloud. For $\mu \ll E_{\xi}$, this energy distribution reduces to the spectral function at k=0, independent of $\phi_{\mu}(k)$. Even for small μ , many atoms achieve energies $E > E_c$ (40 % for $U/E_{\xi}^2 = 1$) and are delocalized. This number agrees well with predictions based on zerorange correlations in which case 45 % was found to be localized for $\mu \ll E_c$ [20]. The fraction of delocalized atoms further decreases as the chemical potential rises (Fig. 10), with only 35 % localized for $\mu = E_{\xi}$. These numbers should be compared to more sophisticated scenarios for the initial kinetic energies of the atoms.

In conclusion, we have calculated the phase diagram for localization of cold atoms in a 3D speckle potential, using the self-consistent Born approximation and the self-consistent theory of localization. The mobility edge is characterized by a Ioffe-Regel type parameter that varies

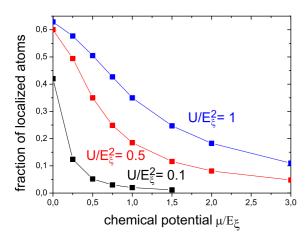


Fig. 10. (Color online) Fraction of localized atoms as a function of chemical potential, for different amplitudes of the disorder.

between 1.2 and 1.4. Depending on the chemical potential μ of the BEC, typically 35 % to 60 % of the atoms are localized when we assume that the BEC delivers atoms with kinetic energies $0 < E_K < \mu$. This approach highlights the role of the disorder in the initial expansion where interactions dominate. The self-consistent Born approximation deals already much better with the long-range correlations and the broadness of the spectral function than the first Born approximation, but does not discriminate between different statistics of the disorder. Yet, the mobility edge of the tight-binding model is known to depend on that [11]. It would be very interesting to apply a recently proposed method [27] to calculate the self-energy of the atoms more precisely. The theory presented in this work can then be used straightforwardly to find the mobility edge.

We would like to thank Sergey Skipetrov for help and discussions.

References

- A. Lagendijk, B.A. van Tiggelen, D.S. Wiersma, Phys. Today 62, 24 (2009)
- 2. A. Aspect, M. Inguscio, Phys. Today **62**, 30 (2009)
- 3. P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)
- B. Kramer, A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. 56, 1469 (1993)
- D.S. Wiersma, P. Bartolini, A. Lagendijk, R. Righini, Nature 390, 671 (1997)

- H. Hu, A. Strybulevych, J.H. Page, S.E. Skipetrov, B.A. van Tiggelen, Nature Phys. 4, 945 (2008)
- J. Chabé, G. Lemarie, B. Gremaud, D. Delande, P. Szriftgiser, J. Garreau, Phys. Rev. Lett. 101, 255702 (2008)
- 8. E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979)
- 9. J.T. Edwards, D. Thouless, J. Phys. C 5, 807 (1972)
- D. Vollhardt, P. Wölfle, Selfconsistent theory of Anderson Localization, in *Electronic Phase Transitions*, edited by W. Hanke, Ya.V. Kopaev (North-Holland, Amsterdam, 1992)
- 11. H. Kroha, T. Kopp, P. Wölfle, Phys. Rev. B 41, 888 (1990)
- 12. G. Roati et al., Nature 453, 895 (2008)
- 13. J. Billy et al., Nature **453**, 891 (2008)
- L. Sanchez-Palencia et al., Phys. Rev. Lett. 98, 210401 (2007)
- P. Lugan, A. Aspect, L. Sanchez-Palencia, D. Delande, B. Grémaud, C. Müller, C. Miniatura, Phys. Rev. A 80, 023605 (2009)
- R.C. Kuhn, C. Miniatura, D. Delande, O. Sigwarth, C.M. Müller, Phys. Rev. Lett. 98, 21041 (2007)
- R.C. Kuhn, C. Miniatura, D. Delande, O. Sigwarth, C.M. Müller, New J. Phys. 9, 161 (2007)
- A. Lagendijk, B.A. Van Tiggelen, Phys. Rep. 270, 143 (1996). The Bethe-Salpeter equation is given by Eq. (4.65), the associated exact kinetic transport equation is Eq. (4.66).
- N.E. Cusack, The Physics of Structurally Disordered Matter (IOPP, 1987)
- S.E. Skipetrov, A. Minguzzi, B.A. Van Tiggelen, B. Shapiro, Phys. Rev. Lett. **100**, 165301 (2008)
- 21. G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, 3rd edn. (Kluwer/Plenum, 2000), see Section 8.1.2; equations (8.63–8.70) of this section lead to Eqs. (5) and (6) in this work. In first edition (Plenum, New York, 1981), see Section 7.1.C. Note that we do not perform the integral over the energy as in this reference, since the expanding bosons are not in thermal equilibrium and not subject to any thermal distribution.
- Yu.N. Barabanenkov, V.D. Ozrin, Phys. Lett. A 154, 38 (1991)
- B.A. van Tiggelen, D.S. Wiersma, A. Lagendijk, Europhys. Lett. 30, 1 (1995)
- 24. B.A. van Tiggelen, A. Lagendijk, A. Tip, G.F. Reiter, Europhys. Lett. 15, 535 (1991). In this work the slightly different value 0.98 was obtained from a less rigorous moment expansion.
- E.N. Economou, C.M. Soukoulis, A.D. Zdetsis, Phys. Rev. B 30, 1686 (1984)
- 26. Y. Castin, R. Dum, Phys. Rev. Lett. 77, 5315 (1996)
- 27. R. Zimmermann, Ch. Schindler, Phys. Rev. B **80**, 144202 (2009)

Conclusion

Les travaux de thèse rapportés dans ce manuscrit se sont axés essentiellement sur les phénomènes de localisation qui ont été avancés trés rapidement ces dernières années dans le but de comprendre la transition métal-isolant. Nous avons utilisé des outils théoriques qui ont été développés initialement pour répondre à la problématique suivante :

- Quelles informations peut-on tirer de la propagation des ondes dans les milieux désordonnés?
- Quel sont les atomes localisés ou délocalisés en fonction du désordre?
- Peut-on mesurer la distributions des énergies les atomes froids diffusés par le désordre? Dans ce cadre, nous avons étudié le confinement spatial des ondes dû au désordre en accordant un intérêt particulier aux ondes électroniques dans la prémiére partie et aux ondes de matière dans la deuxième partie.

Dans la première partie, nous avons opté pour une modélisation unidimensionnelle en raison de la complexité du traitement en 2D et en 3D. Par ailleurs, l'application d'un champ électrique permet de rétablir le confinement électronique pour ce type de système. Notre étude traduit que la présence de la corrélation dans les systèmes désordonnés prédit un transport balistique à l'énergie de résonance. Le champ électrique a tendance à délocaliser les électrons, les fonctions d'ondes décroissent en loi de puissance. L'effet du champ électrique et la corrélation sur le désordre a été aussi étudié, il apparait clairement dans le deuxième chapitre que le champ électrique modifie énormément le comportement de la fonction d'onde. Pour une valeur critique égale à F_c , le champ électrique rétablit la localisation induite par le désordre, au delà de cette valeur tous les états sont superlocalisés. Au fait, cette partie de notre étude reste essentiellement centrée autour de la transition métal-isolant qui reste quant à elle intimement liée à l'effet de la corrélation et à l'effet du champ électrique.

Dans la première partie de notre travail ce sont les atomes qui jouent le rôle de diffuseurs. Dans la deuxième partie de cette étude se sont les taches de tavelures qui vont se substituer aux premières. Nous nous intéressons à l'expansion d'un condensat de Bose-Einstein en dehors du piège harmonique. Le potentiel optique à 3D qui est caractérisé par une corrélation de longue portée servira à suivre l'évolution du condensat de Bose-Einstein à travers l'équation de Gross-Pitaevskii.

Nous introduisons le formalisme de la diffusion multiple pour calculer la self énergie. En raison de la complexité du calcul analytique de la self énergie, On se restreint au premier terme du développement perturbatif de l'équation de diffusion en prenant la fonction de Green du champ moyen. Le résultat numérique de la self énergie est en trés bon accord avec les prédictions analytiques de notre modèle. Nous avons résolu numériquement l'équation auto-cohérente pour l'opérateur de masse, le calcul converge après plusieurs

itérations conduisant à une solution unique.

Nous avons poursuivi le calcul de la fonction spectrale, cette fonction définie la distribution en impulsion des ondes planes après l'expansion des condensats de Bose-Einstein, elle a un rôle important sur le nombre d'atomes localisés. Nous trouvons que pour un potentiel chimique supérieur à l'énergie de corrélation plusieurs atomes sont délocalisés, dans le cas contraire, lorsque le potentiel chimique est inférieur ou égal à l'énergie de corrélation, seule une fraction d'atomes sont localisés. Pour ce paramètre de désordre μ/ε_{ξ} , il apparait un seuil de mobilité qui sépare le régime diffusif du régime localisé.

Depuis les années quatre-vingts, les condensats de Bose-Einstein gazeux représentent un outil d'investigation expérimentale à de nombreux problèmes (superfluidité, condensation de Bose, phases quantiques...). L'intérêt des atomes froids offre la possibilité d'observer les condensats gazeux avec un dispositif d'imagerie par absorption, par fluorescence ou encore par contraste de phase. Des techniques de spectroscopie diverses (spectroscopie de Bragg et Raman) ainsi que des techniques d'excitation pour la mesure des réponses statiques et dynamiques qui permettent d'avoir accès par exemple au nombre d'atomes localisés. Par ailleurs, les condensats de Bose-Einstein offrent la possibilité d'un contrôle systématique de tous les paramètres physiques (nombre d'atomes, température, fréquences, etc).

Notre travail présente un intérêt fondamental pouvant aboutir à des perspectives intéressantes dans le domaine expérimental :

- La généralisation de la notion balistique aux désordres corrélés d'ordres supérieurs aussi bien pour les alliages ternaires que pour les structures unidimensionnelles à profil de potentiel rectangulaire.
- L'étude dynamique des figures de tavelures (l'intensité moyenne, les fluctuations, et les corrélations) est un sujet riche en problèmes fondamentaux et important pour les applications afin de caractériser les milieux désordonnés.
- La statistique Fermionique et l'absence d'interactions entre les atomes peuvent conduire à des différences dont l'étude peut être intéressante.

Bibliographie

- [1] E. Akkermans. G. Montambaux. Physique Mésoscopique des Electrons et des photons (EDP Sciences Ed., Paris, 2004)
- [2] B. van. Tiggelen, in Wave Diffusion in Complex Media, edited by J. P. Fouque (NATO Science (Kluwer, Dordrecht), lectures notes at Houche (1998).
- [3] P. Drude, "Zur Elektronentheorie" Ann. d. Physik 1, 566; 3, 369 (1900) and 7, 687 (1902).
- [4] M. Störzer, P. Gross, C. M. Aegerter, and G. Maret, "Observation of the Critical Regime Near Anderson Localization of Light", Phys. Rev. Lett. **96**, 063904 (2006).
- [5] S. Chandrasekhar, Radiative transfer (Dover, New-York, 1960).
- [6] D. Y. Sharvin et Y. V. Sharvin, "Magnetic-flux quantization in a cylindrical film of a normal metal", JETP Lett. **34**, 272 (1981)
- [7] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, "Boson localization and the superfluid-insulator transition", Phys. Rev. B 40, 546 (1989).
- [8] P. Drude, "Zur Elektronentheorie" Ann. d. Physik 1, 566;3, 369 (1900) and 7, 687 (1902).
- [9] G. Labeyrie, F. de Tomasi, J.-C. Bernard, C. A. Müller, C. Miniatura, and R. Kaiser, "Coherent Backscattering of Light by Atoms", Phys. Rev. Lett. 83, 5266 (1999).
- [10] P. W. Anderson, "Absence of Diffusion in Certain Random Lattices", Phys. Rev. 109, 1492 (1958).
- [11] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, et D. S. Fisher, "Boson localization and the superfluid-insulator transition", Phys. Rev. B 40, 546 (1989).
- [12] D. Vollhardt and P. Wölfle Scaling equations from a self-consistent theory of Anderson localization, Phys. Rev. Lett. **48**, 699 (1982).
- [13] P. E. Wolf and G. Maret, Weak localization and coherent backscattering of photons in disordered media, Phys. Rev. Lett. **55**, 2696 (1985)
- [14] D. Vollhardt and P. Wölfle, Diagrammatic, self-consistent treatment of the Anderson localization problem in d 2 dimensions, Phys. Rev. B 22, 4666 (1980), Selfconsistent

- theory of Anderson localization, in Electronic phase transitions, Elsevier Science, Amsterdam (1992).
- [15] S. K. Cheung, X. Zhang, Z. Q. Zhang, A. A. Chabanov, and A. Z. Genack, Impact of weak localization in the time domain, Phys. Rev. Lett. **92**, 173902 (2004).
- [16] A. F. Ioffe and A. R. Regel, Prog. Semicond. 4, 237, (1960).
- [17] J. Fröhlich et T. Spencer, "Absence of Diffusion in the Anderson Tight Binding Model for Large Disorder and Low Energy", Math. Phys. 88, 151 (1983).
- [18] L. Sanchez-Palencia, D. Clément, P. Lugan, P. Bouyer, G. V. Shlyapnikov, and A. Aspect, Anderson localization of expanding Bose-Einstein condensates in random potentials, Phys. Rev. Lett. 98, 210401 (2007).
- [19] R. Kuhn, O. Sigwarth, C. Miniatura, D. Delande, and C. A. Müller, Coherent matter wave transport in speckle potentials, New. J. Phys. 9, 161 (2007).
- [20] H. Hu, A. Strybulevytch, J.H. Page, Sergey E. Skipetrov, Bart A. van Tiggelen Nature Physics 4 (12), 945-948 (2008).
- [21] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L.Sanchez-Palencia, A. Aspect, and P. Bouyer, Direct observation of Anderson localization of matter waves in a controlled disorder, Nature 453, 891 (2008).
- [22] Y. Imry, Introduction to Mesoscopic Physics (Oxford University, New York, 2002).
- [23] D. J. Thouless, Electrons in disordered systems and the theory of localization, Phys. Rep. 13, 93 (1974).
- [24] N. N. Bogoliubov, "On the theory of superfluidity", J. Phys. (Moscow) 11, 23 (1947).
- [25] N. N. Bogoliubov, Sov. Phys. JETP 7, 41 (1958).
- [26] L. D. Landau, J. Phys. (Moscow) 5, 71 (1941).
- [27] A. A. Chabanov, M. Stoytchev, et A. Z. Genack, "Statistical signatures of photon localization", Nature **404**, 850 (2000).
- [28] J. Kroha, T.Kopp, and P. Wölfle, Self-consistent theory of Anderson localization for the tight-binding model with site-diagonal disorder, Phys. Rev. B 41, 888 (1990).
- [29] Y. P. Chen, J. Hitchcock, D. Dries, M. Junker, C. Welford, et R. G. Hulet, "Phase Coherence and Superfluid-Insulator Transition in a Disordered Bose-Einstein Condensate", arXiv 0710.5187 (2007).
- [30] I.M. Lifshits, S.A. Gredeskul, and L.A. Pastur, Introduction to the Theory of Disordered.
- [31] L. Sanchez-Palencia, D. Clément, P. Lugan, P. Bouyer, and A. Aspect, Disorder induced trapping versus Anderson localization in Bose-Einstein condensates expanding in disordered potentials, arXiv:0803.1774 (2008).

- [32] P. Lugan, D. Clément, P. Bouyer, A. Aspect, M. Lewenstein, et L. Sanchez-Palencia, "Ultracold Bose Gases in 1D Disorder: From Lifshits Glass to Bose-Einstein Condensate", Phys. Rev. Lett. 98, 170403 (2007).
- [33] I. Bloch, T. W. Hänsch, and T. Esslinger, "Measurement of the spatial coherence of a trapped Bose gas at the phase transition", Nature **403**, 166 (2000).
- [34] C. Eckart, Rev. Mod. Phy. 20, 399 (1948).
- [35] H.M. James, Phys. Rev. **76**, 1602 (1949).
- [36] N. F. Mott, Conduction in glasses containing transition metal-insulator, J. Non-Crystal. Solids 1, 1 (1968).
- [37] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, Scaling theory of localization: absence of quantum diffusion in two dimensions, Phys. Rev. Lett. 42, 673 (1979).
- [38] D. Clement, A. Varon, M. Hugbart, J. Retter, P. Bouyer, L. Sanchez-Palencia, D. M. Gangardt, G. V. Shlyapnikov, and A. Aspect, "Suppression of Transport of an Interacting Elongated Bose-Einstein Condensate in a Random Potential", Phys. Rev. Lett. 95, 170409 (2005).
- [39] D. Clement, A. F. Varon, J. A. Retter, L. Sanchez-Palencia, A. Aspect, and P. Bouyer, "Experimental study of the transport of coherent interacting matter-waves in a 1D random potential induced by laser speckle", New Journal of Physics 8, 165 (2006).
- [40] M.Hilke, J.C.Flores, F.Dominuez-Adame, Phys. Rev. B 58, 13 (1998).
- [41] H. Xiuqing et W. Xintian, Phys. Rev. B 55, 11 018 (1997).
- [42] F. M. Izrailev et A. A. Krokhin, "Localization and the Mobility Edge in One-Dimensional Potentials with Correlated Disorder", Phys. Rev. Lett. 82, 4062 (1999).
- [43] C. Cohen-Tannoudji, Forces exercèes par des photons sur des atomes, Cours au Collège de France, 1982-1983, disponible sur http://www.phys.ens.fr/cours/collège-de-france.
- [44] P. Sheng, Introduction to wave scattering, localization and mesoscopic phenomena, 2nd edition, Springer-Verlag, Heidelberg, (2006).
- [45] Esmailpour, A., M. Esmaeilzadeh, E. Faizabadi, P. Carpena and M. Reza Rahimi, 2006. Metal-insulator transition in random Kronig-Penney superlattices with long-range correlated disorder, Phys Rev. B **74**, 024206, (2006).
- [46] Dunlap, D.H., H.L. Wu and P. Phillips, 1990. Absence of Localization in a Random-Dimer Model, Phys. Rev. Lett. **65**, 88, (1990).

- [47] D.Giri, P.K.Datta, et K. Kundu Phys. Rev. B 48, 14147 (1993).
- [48] Evengelou, S.N. and A. Z. Wang, 1993. Localization in paired correlated random binary alloys. Phys. Rev B 47,13126- 13136, (1993).
- [49] Evengelou, S.N. and E.N. Economou, J. Reflectionless, 1993. Modes in chains with large-size homogeneous impuriti, Phys. A Math, Gen. 26, 2803, (1993).
- [50] V. Bellani, E. Diez, R, Hey, L.Toni, L Tarricone, G.B. Parravicini, F. Dominguez-Adame, R. and Gomez-Alcala Experimental Evidence of Delocalized States in Random Dimer Superlattices, Phys. Rev. Lett. 82 2159 (1999).
- [51] A.Sanchez, E.Marcia and F.Dominguez-Adame, Phys. Rev. B 49, 147 (1994).
- [52] M.I. Molina et G.P. Tsironis, Phys.Rev.Lett. 73, 464 (1994).
- [53] A. S. Pikovsky and D. L. Shepelyansky, Destruction of Anderson localization by a weak nonlinearity, Phys. Rev. Lett. 100, 094101 (2008).
- [54] C. M. Soukoulis, E. N. Economou, Phys. Rev. Lett. 46, 618 (1981); C. M. Soukoulis,
 E. N. Economou Phys. Rev. Lett. 47, 973 (1982).
- [55] Economou, E.N. and R. Alkire, 1988. Effect of potential field on ion deflection and shape evolution of trenches during plasma-assisted etching, J. Electrochem. Soc., 135, 941-949. (1988).
- [56] R .Landauer, Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices, Philosophical Mag. 21 863 (1970).
- [57] A. Yedjour "Effet d'une Perturabation Extérieure sur les Alliages binaires". Thèse de Magister, juin (2002).
- [58] J. Sun, Phy, Rev B **40**, 8270 (1989).
- [59] L. Pitaevskii and S. Stringari, Bose-Einstein condensation, Clarendon, Oxford, (2003).
- [60] F. London, Superfluid Helium II (Wiley, New York, 1954).
- [61] C. Flores, J. V. Jose and G. Monsiavais, J. Phys. Soc. 27, 369 (1989).
- [62] A. Yedjour and F. Hamdache, Journal of Applied Siences, 20, 2929-2934 (2010).
- [63] B. Shapiro, Expansion of a Bose-Einstein condensate in the presence of disorder, Phys. Rev. Lett. **99**, 060602 (2007).
- [64] P. Henseler and B. Shapiro, Density correlations in cold atomic gases: atomic speckle in the presence of disorder, Phys. Rev. A 77, 033624 (2008).
- [65] Z. Q. Zhang, A. A. Chabanov, S. K. Cheung, C. H. Wong, and A. Z. Genack, Dynamics of localized waves: pulsed microwave transmissions in quasi-onedimensional media, Phys. Rev. B 79, 144203 (2009).

- [66] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, "Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms", Nature 415, 39 (2002).
- [67] R. Berkovits and S. Feng, Correlations in coherent multiple scattering, Phys.Rep. 238, 135 (1994).
- [68] J.Goodman, Introduction to Fourier Optics. McGraw-Hill Education (ISE Editions)(1996).
- [69] C. Fort, L. Fallani, V. Guarrera, J. E. Lye, M. Modugno, D. S. Wiersma, and M. Inguscio, Effect of optical disorder and single defects on the expansion of a Bose-Einstein condensate in a one-dimensional waveguide, Phys. Rev. Lett. 95, 170410 (2005).
- [70] P. Sebbah, B. Hu, A. Z. Genack, R. Pnini, and B. Shapiro, Spatial-field correlation: the building block of mesoscopic fluctuations, Phys. Rev. Lett. 88, 123901(2002).
- [71] A. A. Chabanov, N. P. Trégourés, B. A. van Tiggelen, and A. Z. Genack, Mesoscopic correlation with polarization rotation of electromagnetic waves, Phys.Rev. Lett. 92, 173901 (2004).
- [72] D. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, and S. Stringari, "Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases", Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [73] P. Courteille, R. J. Freeland, D. S. Heinzen, F. A. van Abeelen, and B. J. Verhaar, "observation of a Feschbach Resonance in Cold Atom Scattering", Phys. Rev. Lett. 81, 69 (1998).
- [74] B. A. van Tiggelen, A. Lagendijk, and A. Tip, J. Phys. Condens. Matter 2, 7653 (1990).
- [75] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, et J. T. M. Walraven, "Phase-fluctuating 3D Bose-Einstein condensates in elongated traps", Phys. Rev. Lett. 87, 050404 (2001).
- [76] D. S. Wiersma, M. P. van Albada, B. A. van Tiggelen, et A. Lagendijk, "Experimental Evidence for Recurrent Multiple Scattering Events of Light in Disordered Media", Phys. Rev. Lett. 74, 4193 (1995).
- [77] S. E. Skipetrov, A. Minguzzi, Bart van Tiggelen, and B. Shapiro, Anderson localization of a Bose-Einstein condensate in a 3D random potential, Phys. Rev.Lett. 100, 165301 (2008).
- [78] Bart van Tiggelen," Ondes et Acoustique I", Notes de cours Master 2, Ecole Normale Supérieure de Lyon, (2004-2006).
- [79] Y. Castin and R. Dum, Phys. Rev. Lett. 77, 5315 (1996).

[80] A. Yedjour, Bart van Tiggelen "Diffusion and Localization of Cold Atoms in 3D Optical Speckle" Eur. Phys. J. D (2010).