

Table des matières

1 Modèle de Lieb-Liniger et approche Bethe Ansatz	1
1.1 Description du modèle de Lieb-Liniger	2
1.1.1 Introduction au modèle de gaz de Bose unidimensionnel	2
1.1.2 Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à 2 corps	10
1.2 Équation de Bethe et distribution de rapidité	14
1.2.1 Fonction d'onde dans le secteur ordonné et représentation de Gaudin	14
1.2.2 Conditions aux bords périodiques	14
1.2.3 Thermodynamique du gaz de Lieb–Liniger à l'état fondamental	15
1.2.4 Excitations élémentaires	16
2 Relaxation et Équilibre dans les Systèmes Quantiques Intégrables : Une Approche par la Thermodynamique de Bethe	19
2.1 Notion d'état d'Équilibre de Gibbs Généralisé (GGE)	20
2.1.1 Introduction à l'Équilibre de Gibbs Généralisé	20
2.1.2 Moyenne dans l'Équilibre de Gibbs Généralisé	22
2.1.3 Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales	23
2.2 Thermodynamique de Bethe et relaxation	25
2.2.1 Moyenne dans la limite thermodynamique	25
2.2.2 Statistique des macro-états : entropie de Yang-Yang	25
2.2.3 Équations intégrales de la TBA	28
3 Dynamique hors-équilibre et hydrodynamique généralisée	31
3.1 Formulation hamiltonienne de la GHD	32
3.1.1 Crochet de Poisson fonctionnel	32
3.1.2 Crochet avec l'Hamiltonien	34
3.2 Cas particuliers et interpretations	35
3.2.1 Cas sans interaction	35
3.2.2 la vitesse effectif	35
3.2.3 Modèle de Lieb–Liniger	36
3.2.4 Diagonalisation et invariants de Riemann dans la GHD spatiale étendue	37
4 Fluctuation de la distribution de rapidité dans des état d'équilibre	39
4.1 Fluctuation-réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés	40
4.1.1 Cadre général : chages et dérivées fonctionnelles	40
4.1.2 Cadre d'Équilibre de Gibbs Généralisée	42
4.1.3 Vérification numérique : Echantillonnage du GGE	43
4.2 Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilités	45
4.2.1 Susceptibilités spectrales et structure variationnelle de l'entropie	45
4.2.2 Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique	46
4.2.3 Expression de la Hessienne	47
4.2.4 Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne	48
4.2.5 Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle	49
5 Dispositif expérimental et méthodes d'analyse	55
5.1 Le dispositif expérimental	56
5.1.1 Système laser et contrôle de fréquence	56
5.1.2 Production et refroidissement des atomes (non détaillé ici, renvoi à d'autres travaux)	56

5.1.3	Piégeage magnétique sur puce	57
5.1.4	Génération de potentiels modulés	60
5.2	Sélection spatiale avec DMD	62
5.2.1	Motivation et principe	62
5.2.2	Mise en place technique (initiée par Léa Dubois)	62
5.2.3	Utilisation dans les protocoles	63
5.3	Techniques d'imagerie et d'analyse	64
5.3.1	Imagerie par absorption	64
5.3.2	Analyse des profils	65
5.4	Expériences et protocoles étudiés	65
5.4.1	Expansion longitudinale	65
5.4.2	Motivation et protocole expérimental d'expansion longitudinale	66
5.4.3	Sonde locale de distribution de rapidité	70
6	Étude du protocol de bi-partition : Mesure de distribution de rapidités locales $\rho(x, \theta)$ pour des systèmes hors équilibre	73
6.1	Dynamique balistique d'un gaz 1D après une coupure bipartite	75
6.1.1	Préparation expérimentale et protocole de coupure	75
6.1.2	Cadre de la GHD et dynamique balistique et	76
6.1.3	Validation expérimentale de la dynamique hydrodynamique	78
6.2	Sondre la distribution locale des rapidités	79
6.2.1	Sélection d'une tranche localisée après déformation du bord	80
6.2.2	Expansion de la tranche et observation d'une asymétrie	81
6.3	Simulations numériques	83
6.3.1	Système homogène à l'équilibre thermique	83
6.3.2	Dynamique du contour dans l'espace des phases (x, θ)	84
6.3.3	Simulation de la déformation du bord	85
6.3.4	Simulation de l'expansion.	85
6.3.5	Comparaison aux données expérimentales et discussion	87
7	Mise en place d'un confinement longitudinal dipolaire	91
7.1	Transformation de jauge et simplification du Hamiltonien	91
7.2	Potentiel Dipolaire d'un atome à deux niveaux - généralité	92
7.2.1	Introduction.	92
7.2.2	Système à deux niveaux et interaction avec le champ	93
7.2.3	Interprétation du traitement du second ordre : transition virtuelle et origine du potentiel dipolaire (AC-Stark)	93
7.2.4	Expression explicite du potentiel dipolaire	94
7.3	Piégeage dipolaire d'un atome à plusieurs niveaux	96
7.3.1	Atomes multiniveaux et origine du potentiel dipolaire dans le formalisme quantique	96
7.4	Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne	99
7.4.1	Structure électronique du Rubidium	99
7.4.2	Structure matricielle du potentiel dipolaire	100
7.4.3	Régime de désaccord très important	101
7.4.4	Structure fine et base des états $ L, S; J, m_J\rangle$	103
7.5	Notre dispositif expérimental	105
7.5.1	Choix du laser pour le piégeage dipolaire	105
7.5.2	Amplification par Tapered Amplifier (TA)	109
A	Annexes	113
B	Moment tensoriel pour $J=1/2$	115

Chapitre 1

Modèle de Lieb-Liniger et approche Bethe Ansatz

Contents

1.1	Description du modèle de Lieb-Liniger	2
1.1.1	Introduction au modèle de gaz de Bose unidimensionnel	2
1.1.2	Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à 2 corps	10
1.2	Équation de Bethe et distribution de rapidité	14
1.2.1	Fonction d'onde dans le secteur ordonné et représentation de Gaudin	14
1.2.2	Conditions aux bords périodiques	14
1.2.3	Thermodynamique du gaz de Lieb-Liniger à l'état fondamental	15
1.2.4	Excitations élémentaires	16

Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation progressive du modèle de Lieb-Liniger et de l'Ansatz de Bethe, outils centraux pour la description d'un gaz de bosons unidimensionnel en interaction via un potentiel de type delta. L'objectif est d'accompagner rigoureusement le lecteur depuis la formulation quantique du système jusqu'aux solutions exactes obtenues par l'approche de Bethe.

Nous commençons, pour des raisons pédagogiques, par le cas le plus simple : une particule libre, sans interaction, dans un espace unidimensionnel avec conditions aux bords périodiques. Cette première étape permet d'introduire naturellement les fonctions d'onde à une particule, leur évolution sous l'action du Hamiltonien libre, ainsi que la quantification résultant des conditions de périodicité — autrement dit, la version élémentaire des équations de Bethe.

Nous passons ensuite à la formulation du problème en champ quantique, en exprimant le Hamiltonien en termes d'opérateurs de création et d'annihilation dans la représentation positionnelle : il s'agit du passage à la seconde quantification. Cette étape permet de formaliser clairement les termes à un corps et à deux corps dans l'Hamiltonien, et d'établir les notations qui seront utilisées tout au long du chapitre.

Une fois ce cadre posé, nous généralisons le raisonnement au cas de N particules pour introduire le modèle complet de Lieb-Liniger. Nous présentons alors l'Ansatz de Bethe dans sa forme générale, qui fournit les états propres de l'Hamiltonien. Ce formalisme permet d'accéder explicitement au spectre du système, ainsi qu'à diverses quantités physiques telles que l'impulsion totale et le nombre de particules.

Nous traitons d'abord le cas à seulement deux particules, cette fois en tenant compte de l'interaction locale. L'analyse de ce système met en lumière les effets de l'interaction ponctuelle sur la régularité de la fonction d'onde et les conditions de raccord, ainsi que sur les modifications des équations de Bethe. Ce cas constitue une étape clé vers la généralisation à N particules.

La fonction d'onde est ensuite étendue au cas général de N particules, ce qui nous permet de dériver les équations de Bethe pour un système entièrement interactif. Ces équations encapsulent toute l'information sur les états propres du système.

Enfin, nous introduisons la notion de *distribution de rapidité*, concept fondamental pour la description des états dans la limite thermodynamique. Elle permet non seulement de caractériser les états d'énergie minimale (états fondamentaux), mais aussi d'analyser des configurations excitées au-delà de l'état fondamental. Ce formalisme constituera le socle des développements ultérieurs sur les propriétés thermodynamiques et dynamiques des gaz bosoniques intégrables.

1.1 Description du modèle de Lieb-Liniger

1.1.1 Introduction au modèle de gaz de Bose unidimensionnel

De la première à la seconde quantification

Introduction. La mécanique quantique se développe historiquement en deux grandes étapes : la *première quantification*, aussi appelée quantification canonique, et la *seconde quantification*. Comprendre ces deux cadres est essentiel pour aborder les systèmes quantiques complexes, en particulier ceux où le nombre de particules peut varier.

Première quantification (quantification canonique, particule unique). La première quantification est la mécanique quantique standard, celle que vous avez rencontrée dès vos premiers cours. Elle consiste à quantifier un système classique décrit par des variables dynamiques telles que la position x et la quantité de mouvement p . On procède en remplaçant ces variables par des **opérateurs hermitiens** \hat{x} et

$$\hat{p} \doteq -i\hbar\hat{\partial}_x, \quad (1.1)$$

où \hbar est la constante de Planck réduite, satisfaisant la **relation de commutation canonique** fondamentale $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. L'état du système est alors décrit par une **fonction d'onde** $\psi(x, t)$, solution de l'**équation de Schrödinger** indépendante du nombre de particules :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}\psi, \quad (1.2)$$

avec $\hat{\mathcal{H}}$ l'opérateur hamiltonien.

Exemple : particule libre en une boîte à une dimension.

Dans le cas d'une particule libre de masse m se déplaçant en une dimension, l'Hamiltonien est constitué uniquement du terme cinétique $\hat{\mathcal{H}} = \hat{p}^2/2m$. En représentation position, où l'opérateur quantité de mouvement s'écrit comme dans l'équation (1.1), l'Hamiltonien prend alors la forme différentielle :

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2. \quad (1.3)$$

Les états propres stationnaires de (1.2) dépendant du temps sont de la forme $\psi_k(x, t) = \varphi_k(x) e^{-i\varepsilon(k)t/\hbar}$ où $\varphi_k(x)$ est une fonction propre de l'hamiltonien, soit de l'équation stationnaire $\hat{\mathcal{H}}\varphi_k = \varepsilon(k)\varphi_k$ i.e. pour une particule libre :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi_k = \varepsilon(k)\varphi_k, \quad (1.4)$$

avec $\varepsilon(k)$ l'énergie associée à une onde plane de nombre d'onde k

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.5)$$

Les fonctions propres spatiales $\varphi_k(x)$ de l'hamiltonien libre s'écrivent comme des combinaisons linéaires d'ondes planes

$$\varphi_k(x) = ae^{-ikx} + be^{ikx}, \quad \text{avec } (a, b) \in \mathbb{C}^2. \quad (1.6)$$

Périodicité. Si la particule est confinée dans une boîte de longueur L avec des conditions aux limites périodiques (ie $\varphi_k(x + L) = \varphi_k(x)$), alors le spectre de k est quantifié :

$$e^{kL} = 1 \quad \text{ou encore } kL \in 2\pi\mathbb{Z}. \quad (1.7)$$

Le problème est équivalent à celui d'une particule libre sur un cercle de périmètre L .

La particule est délocalisée sur tout l'espace (le cercle), sans structure particulière *i.e.* le solutions (1.6) correspondent à des **états non liés** (ou états de diffusion).

Pour $k \neq 0$ (respectivement pour $k = 0$), la fonction propre $\varphi_k(x)$ de l'équation (1.6) appartient à un sous-espace propre associé à k de dimension 2 (respectivement de dimension 1) engendré par $x \mapsto e^{-ikx}$ et $x \mapsto e^{ikx}$ (respectivement par $x \mapsto 1$). L'espace engendré par l'ensemble des sous-espaces propres forme un **espace de Hilbert**, muni du **produit scalaire** défini par :

$$(\varphi_{k'}, \varphi_k) = \int_0^L \varphi_{k'}^*(x) \varphi_k(x) dx. \quad (1.8)$$

Les sous-espaces propres sont orthogonaux entre eux *i.e.* en utilisant les conséquences de la condition de périodicité (1.7), $(\varphi_{k'}, \varphi_k) = 0$ pour $|k'| \neq |k|$. Pour chaque sous-espace propre on impose que les états propres forment une base orthonormale *i.e.* en utilisant (1.7), les fonctions propres φ_k écrit sous la forme (1.6), sont orthogonaux avec $\varphi_{\bar{k}}$: $x \mapsto \pm(b^*e^{-ikx} - a^*e^{ikx})$ soit $(\varphi_{\bar{k}}, \varphi_k) = 0$, et on impose que $|a|^2 + |b|^2 = L^{-1}$ pour assurer la normalité de φ_k et de $\varphi_{\bar{k}}$ soit $(\varphi_k, \varphi_k) = (\varphi_{\bar{k}}, \varphi_{\bar{k}}) = 1$.

Les solutions générales de l'équation de Schrödinger s'écrivent alors comme une superposition d'états propres $\psi = c_0\psi_0 + \sum_{|k|>0}(c_k\psi_k + c_{\bar{k}}\psi_{\bar{k}})$.

Il y a deux base de vecteur propre particulier :

i) **Base de chiralité / impulsion :**

$$\varphi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{\pm ikx} \quad (1.9)$$

Ces derniers de plus d'être états propres de l'opérateur énergie $\hat{\mathcal{H}}$, sont des états propres de l'opérateur impulsion $\hat{\mathbf{p}}$, avec valeurs propres opposées $\pm\hbar k$.

ii) **Base symétrique / antisymétrique :** En appliquant la matrice de passage unitaire $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & +i \end{pmatrix}$ à la base $\{\varphi_+, \varphi_-\}$, on passe dans la base

$$\begin{cases} \varphi_S = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(kx) & \text{type Neumann : } \varphi'_S(0) = \varphi'_S(L) = 0 \\ \varphi_A = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(kx) & \text{type Dirichlet : } \varphi_A(0) = \varphi_A(L) = 0 \end{cases} \quad (1.10)$$

Cette condition d'orthonormalité est imposée afin de garantir l'indépendance linéaire des états quantiques, et d'assurer que toute fonction d'onde de l'espace de Hilbert puisse être développée de manière unique sur cette base.

Avec le formalisme de Dirac, la fonction d'onde φ_k est représentée par le ket $|k\rangle$ normé (*i.e.* $\langle k'|k\rangle = \delta_{k',k}$, où $\delta_{p,q}$ est le symbole de Kronecker), et l'équation de Schrödinger s'écrit : $\hat{\mathcal{H}}|k\rangle = \varepsilon(k)|k\rangle$. En appliquant le bra $\langle x|$ de part et d'autre, on obtient : $\langle x|\hat{\mathcal{H}}|k\rangle = \varepsilon(k)\langle x|k\rangle$, où $|x\rangle$ est normé (*i.e.* $\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x)$ avec $\delta(y - x)$ une distribution de Dirac) et $\varphi_k(x) = \langle x|k\rangle$ est la représentation positionnelle de l'état $|k\rangle$.

La base $\{|x\rangle\}$ étant continue, et les états $\{|k\rangle\}$ quantifiés (par exemple dans une boîte de taille finie avec conditions aux limites périodiques), les relations de changement de base s'écrivent :

$$|k\rangle = \int_0^L dx \varphi_k(x) |x\rangle, \quad |x\rangle = \sum_k \varphi_k^*(x) |k\rangle, \quad (1.11)$$

avec $\varphi_k^*(x) = \langle k|x\rangle$. L'état $|x\rangle$ est relié aux états $|k\rangle$ par une transformation de Fourier discrète. Ces

formules montrent que les états $|k\rangle$ sont les composantes de Fourier de l'état $|x\rangle$.

De la particule unique aux systèmes à N particules. Pour un système composé de N particules identiques, une approche naturelle consiste à introduire une fonction d'onde $\varphi(x_1, \dots, x_N)$ dépendant de N variables, symétrique pour des bosons ou antisymétrique pour des fermions sous l'échange de deux coordonnées $x_i \leftrightarrow x_j$, solution de l'équation de Schrödinger à N corps. Toutefois, cette description devient rapidement inextricable lorsque le nombre de particules augmente, ou lorsque le système permet la création et l'annihilation de particules, comme dans un milieu ouvert ou en contact avec un bain thermique.

Seconde quantification

Pour dépasser ces limitations, on adopte le **formalisme de la seconde quantification**, dans lequel l'état du système est décrit non plus par une fonction d'onde mais par un vecteur dans un espace de Fock. Les opérateurs de création et d'annihilation remplacent alors les variables dynamiques classiques et permettent une description unifiée et élégante des systèmes à nombre variable de particules.

Structure de l'espace des états de Fock. Dans ce formalisme, l'espace des états est une **somme directe d'espaces à N particules**, et chaque état est décrit par l'occupation des différents modes quantiques. Les opérateurs \hat{a}_k^\dagger et \hat{a}_k créent et annihilent une particule dans l'état d'onde plane de moment k :

$$|k\rangle = \hat{a}_k^\dagger |\emptyset\rangle, \quad (1.12)$$

état avec une particule dans le mode k , où $|\emptyset\rangle$ désigne le vide quantique de Fock, défini par :

$$\forall k \in \mathbb{R}: \quad \hat{a}_k |\emptyset\rangle = 0, \quad \langle \emptyset | \emptyset \rangle = 1. \quad (1.13)$$

Le symbole \hat{a}_λ représente ici de manière générique soit l'opérateur \hat{b}_λ pour les bosons, soit \hat{c}_λ pour les fermions, et satisfait respectivement les relations de commutation (pour les bosons) ou d'anticommuation (pour les fermions). Dans ce qui suit, nous nous restreignons au cas bosonique.

Relations de commutation bosoniques. Les relations de commutation fondamentales pour les bosons sont :

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = [\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_{k'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger] = \hat{\delta}_{k,k'}, \quad (1.14)$$

où $\hat{\delta}_{k,k'}$ est le symbole de Kronecker, valant 1 si $k = k'$ et 0 sinon.

Nature du champ quantique. La seconde quantification généralise ce cadre en permettant de traiter des systèmes où le nombre de particules n'est pas fixé, ce qui est fréquent en physique des particules, des champs quantiques, ou des gaz quantiques.

L'idée principale est de ne plus quantifier directement les particules, mais le *champ quantique* associé. Les états d'une particule unique deviennent alors des états d'occupation dans un espace de Fock, qui décrit l'ensemble des configurations possibles avec zéro, une, ou plusieurs particules.

Champs de Bose. Le gaz de Bose unidimensionnel est décrit dans le cadre de la théorie quantique des champs par un champ bosonique canonique $\Psi(x)$, qui agit sur l'espace de Fock des états du système. Ce champ quantique encode l'annihilation d'une particule en x , et son adjoint $\hat{\Psi}^\dagger(x)$ correspond à la création d'une particule en ce point.

$$|x\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(x) |\emptyset\rangle, \quad (1.15)$$

état avec une particule en x et $|\emptyset\rangle$ est le vide quantique de Fock défini par :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \hat{\Psi}(x) |\emptyset\rangle = 0. \quad (1.16)$$

Relations de commutation bosoniques. Ces champs satisfont les relations de commutation canoniques à temps égal :

$$[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(y)] = [\hat{\Psi}^\dagger(x), \hat{\Psi}^\dagger(y)] = 0, \quad [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(y)] = \hat{\delta}(x - y), \quad (1.17)$$

où $\hat{\delta}(x - y)$ est la fonction delta de Dirac. Ces relations expriment le caractère bosonique des excitations du champ.

État à N particules. Soient N bosons dans les états $\{k_1, \dots, k_N\}$ (un boson dans l'état k_1 , un autre dans k_2 , etc.) et aux positions $\{x_1, \dots, x_N\}$ (un boson en x_1 , un autre en x_2 , etc.). Leurs états s'écrivent alors :

$$|\{k_1, \dots, k_N\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{b}_{k_1}^\dagger \cdots \hat{b}_{k_N}^\dagger |\emptyset\rangle, \quad |\{x_1, \dots, x_N\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\Psi}^\dagger(x_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(x_N) |\emptyset\rangle, \quad (1.18)$$

où le facteur $1/\sqrt{N!}$ traduit le caractère d'indiscernabilité des bosons et garantit la symétrisation correcte de l'état.

Changement de base. On peut relier les opérateurs de création/annihilation dans la base des ondes planes aux opérateurs de champ via :

$$\hat{b}_k^\dagger = \int_0^L dx \varphi_k(x) \hat{\Psi}^\dagger(x), \quad \hat{\Psi}^\dagger(x) = \sum_k \varphi_k^*(x) \hat{b}_k^\dagger. \quad (1.19)$$

Le champ quantique $\hat{\Psi}(x)$ est relié aux opérateurs de moment \hat{b}_k par une transformation de Fourier. Ces formules montrent que les opérateurs \hat{b}_k sont les composantes de Fourier du champ $\hat{\Psi}(x)$.

Ainsi, un état à N bosons dans la base $|k\rangle^{\otimes N}$ peut s'écrire :

$$|\{k_a\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int dx_1 \cdots dx_N \varphi_{\{k_a\}}(\{x_a\}) \hat{\Psi}^\dagger(x_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(x_N) |\emptyset\rangle, \quad (1.20)$$

où on note $\{k_a\} \equiv \{k_1, \dots, k_N\}$ et $\{x_a\} \equiv \{x_1, \dots, x_N\}$, et la fonction d'onde symétrisée s'écrit : $\varphi_{\{k_a\}}(\{x_a\}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \hat{S}_N} \prod_{i=1}^N \varphi_{k_{\sigma(i)}}(x_i)$, avec \hat{S}_N le groupe symétrique d'ordre N mais aussi :

$$\varphi_{\{k_a\}}(\{x_a\}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \emptyset | \hat{\Psi}(x_1) \cdots \hat{\Psi}(x_N) | \{k_a\} \rangle. \quad (1.21)$$

Operateur.

Opérateur à un corps.

Dans la base discrètes des modes $\{|k\rangle\}$. Soit \hat{f} un opérateur à une particule, dont les éléments de matrice dans une base orthonormée $\{|k\rangle\}$ sont donnés par $f_{\lambda\nu} = \langle \lambda | \hat{f} | \nu \rangle$. Un opérateur symétrique à N particules correspondant à la somme des actions de \hat{f} sur chacune des particules s'écrit en première configuration : $\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}^{(i)}$, où $\hat{f}^{(i)}$ désigne l'action de \hat{f} sur la i^{e} particule uniquement. En base de Dirac, cela donne : $\hat{f}^{(i)} = \sum_{\lambda,\nu} f_{\lambda\nu} |i:\lambda\rangle \langle i:\nu|$, où $|i:\lambda\rangle$ représente un état où seule la i^{e} particule est dans l'état λ . On peut montrer que la somme des projecteurs agissant sur chaque particule s'identifie à une combinaison d'opérateurs de création et d'annihilation : $\sum_{i=1}^N |i:\lambda\rangle \langle i:\nu| = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\nu$, (où \hat{a}_λ est une notation générique désignant \hat{b}_λ pour les bosons, ou \hat{c}_λ pour les fermions).

On en déduit que l'opérateur à un corps \hat{F} peut se réécrire dans le formalisme de la seconde quantification comme :

$$\hat{F} = \sum_{\lambda,\nu} \langle \lambda | \hat{f} | \nu \rangle \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\nu. \quad (1.22)$$

L'opérateur $\hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\nu$ fait la transition d'une particule de l'état ν à vers l'état λ . Si $\lambda = \nu$ cette opérateur est l'opérateur nombre de particule dans le mode λ .

Exemple : Énergie cinétique totale des particules libres. Si l'on sait diagonaliser l'opérateur à une particule \hat{f} , c'est-à-dire si l'on peut écrire : $\hat{f} = \sum_k f_k |k\rangle \langle k|$, alors l'opérateur à N corps associé s'écrit : $\hat{F} = \sum_k \langle k | \hat{f} | k \rangle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$. On obtient ainsi une forme diagonale de \hat{F} en seconde quantification.

Un exemple immédiat est celui des **particules libres sans interaction**. On rappelle que : $\hat{\mathcal{H}}|k\rangle = \varepsilon(k)|k\rangle$, avec $\varepsilon(k)$ l'énergie du mode k (1.5). En injectant $\hat{f} = \hat{\mathcal{H}} (= \frac{\hat{p}^2}{2m})$ dans (1.22), on obtient l'énergie cinétique totale du système :

$$\hat{K} = \sum_k \varepsilon(k) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k. \quad (1.23)$$

Pour N particules libres, en écrivant l'état sous la forme (1.18), en utilisant les relations de commu-

tation (1.14) et la définition de l'état de Fock (1.13), on trouve que $|\{k_a\}\rangle$ est un état propre de \hat{K} associé à l'énergie $\sum_{i=1}^N \varepsilon(k_i)$, c'est-à-dire :

$$\hat{K} |\{k_a\}\rangle = \left(\sum_{i=1}^N \varepsilon(k_i) \right) |\{k_a\}\rangle. \quad (1.24)$$

Dans la base continue des positions $\{|x\rangle\}$. En injectant les relation des changement de base d'état (1.11) et de champ (1.19) (qui prend la même forme pour \hat{a}_λ et pour \hat{a}_λ^\dagger), dans (1.22) on obtient :

$$\hat{F} = \iint_0^L dx dy \hat{\Psi}^\dagger(x) \langle x | \hat{f} | y \rangle \hat{\Psi}(y). \quad (1.25)$$

Exemple : Énergie cinétique totale des particules libres. Reprenons l'exemple de l'énergie cinétique totale avec $\hat{f} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$. En injectant $\langle x | \hat{f} | x' \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 \delta(y-x)$ dans (1.25), on réécrit l'opérateur énergie cinétique total \hat{K} de l'équation (1.23) :

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\partial}_x^2 \hat{\Psi}(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L dx \hat{\partial}_x \hat{\Psi}^\dagger(x) \cdot \hat{\partial}_x \hat{\Psi}(x). \quad (1.26)$$

Lorsque cet Hamiltonien agit sur l'état de Fock à N particules libres $|\{k_a\}\rangle$, les règles de commutation (1.17) ainsi que la définition des états de Fock (1.16) impliquent (cf. Annexe ??) :

$$\hat{K} |\{k_a\}\rangle = \int_0^L d^N z \hat{\mathcal{K}}_N \varphi_{\{k_a\}}(\{z_a\}) \hat{\Psi}(z_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle, \quad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{K}}_N = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2 \hat{\partial}_{z_i}^2}{2m}, \quad (1.27)$$

où $-i\hbar \hat{\partial}_{z_i}$ désigne l'opérateur impulsion associé à la coordonnée z_i de la i -ème particule.

Quantité de mouvement totale et nombre total de particules. Dans l'exemple de l'énergie cinétique, l'opérateur \hat{f} est proportionnel à l'opérateur impulsion au carré \hat{p}^2 . On peut appliquer un raisonnement similaire à d'autres observables : pour le **nombre total de particules**, on prend $\hat{f} = \hat{p}^0$, c'est-à-dire l'identité et pour la **quantité de mouvement totale**, on choisit $\hat{f} = \hat{p}$ (puissance 1). On note \hat{Q} l'opérateur nombre total de particule et \hat{P} l'opérateur quantité mouvement totale .

Ces observables sont liées à des symétries fondamentales du système : \hat{Q} est associé à la symétrie $U(1)$ (conservation du nombre de particules); \hat{P} est associé à la translation (conservation de la quantité de mouvement).

Pour ces observables, les états $|\{k_a\}\rangle$ sont des états propres, et cela reste vrai **avec ou sans interaction**, tant que le système conserve ces symétries fondamentales. Ainsi, $|\{k_a\}\rangle$ diagonalise directement \hat{Q} et \hat{P} , même en présence d'interactions locales qui respectent $U(1)$ et la translation.

En seconde quantification, ces opérateurs s'écrivent dans la base $\{|k\rangle\}$:

$$\hat{Q} = \sum_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k, \quad \hat{P} = i\hbar \sum_k k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k, \quad (1.28)$$

Lorsqu'on les applique à un état de Fock à N particules $|\{k_a\}\rangle$, on obtient :

$$\hat{Q} |\{k_a\}\rangle = \left(\sum_{i=1}^N 1 \right) |\{k_a\}\rangle, \quad \hat{P} |\{k_a\}\rangle = -i\hbar \left(\sum_{i=1}^N k \right) |\{k_a\}\rangle. \quad (1.29)$$

Dans la base position $\{|x\rangle\}$, les opérateurs s'écrivent :

$$\hat{Q} = \int_0^L dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x), \quad \hat{P} = \frac{i\hbar}{2} \int_0^L dx \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\partial}_x \hat{\Psi}(x) - [\hat{\partial}_x \hat{\Psi}^\dagger(x)] \hat{\Psi}(x) \right\} \quad (1.30)$$

où l'expression symétrisée de \hat{P} assure son hermiticité.

Lorsqu'on applique ces opérateurs à l'état $|\{k_a\}\rangle$, on obtient (comme pour l'énergie cinétique) :

$$\hat{Q} |\{k_a\}\rangle = \int_0^L d^N z \hat{\mathcal{N}}_N \varphi_{\{k_a\}}(\{z_a\}) \hat{\Psi}(z_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle, \quad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{N}}_N = \sum_{i=1}^N 1, \quad (1.31)$$

$$\hat{P} |\{k_a\}\rangle = \int_0^L d^N z \hat{\mathcal{P}}_N \varphi_{\{k_a\}}(\{z_a\}) \hat{\Psi}(z_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle, \quad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{P}}_N = \hbar \sum_{i=1}^N \hat{\partial}_{z_i}. \quad (1.32)$$

On s'avance sur le chapitre (2). , en voulant généraliser avec $\hat{f} = \hat{p}^q$ où q est un entier. Soit dans la base $\{|k\rangle\}$: $\hat{F} = \hbar^q \sum_k k^q \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$ et en l'appliquant à $|\{k_a\}\rangle$: On peut généraliser cette construction en considérant des opérateurs à une particule de la forme $\hat{f} = \hat{p}^q$, où q est entier. Dans la base impulsion $\{|k\rangle\}$, l'opérateur à N corps associé s'écrit : $\hat{F} = \hbar^q \sum_k k^q \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$ et son action sur un état de Fock libre est immédiatement

$$\hat{F} |\{k_a\}\rangle = \hbar^q \left(\sum_{i=1}^N k_i^q \right) |\{k_a\}\rangle, \quad (1.33)$$

En représentation position $\{|x\rangle\}$, on obtient l'opérateur hermitisé

$$\hat{F} = \frac{\hbar^q}{2} \int_0^L \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\partial}_x^q \hat{\Psi}(x) + (-1)^q \left[\hat{\partial}_x^q \hat{\Psi}^\dagger(x) \right] \hat{\Psi}(x) \right\} dx$$

$$\hat{F} |\{k_a\}\rangle = \int_0^L d^N z \hat{\mathcal{F}}_N \varphi_{\{k_a\}}(\{z_a\}) \hat{\Psi}(z_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle \text{ avec } \hat{\mathcal{F}}_N = \hbar^q \sum_{i=1}^N (\hat{\partial}_{z_i})^q.$$

Remarque :

Cette construction n'est valable que pour un gaz **de particules libres, sans interaction**. En présence d'un Hamiltonien avec interaction (par exemple dans le modèle de Lieb-Liniger (LL) Sec 1.1.1), les états propres ne sont plus des produits d'ondes planes $|\{k_a\}\rangle$, et l'opérateur énergie cinétique \hat{K} n'est plus diagonalisé dans cette base. Ce sont alors les états de Bethe qui diagonalisent l'Hamiltonien complet (cinétique + interaction).

Pour $q \geq 2$, si l'on ajoute une interaction locale (comme dans le modèle de Lieb–Liniger), l'opérateur \hat{F} à une particule n'est plus suffisant pour définir une charge conservée : il faut inclure des termes à deux corps (ou davantage) pour assurer la commutation avec l'Hamiltonien. On passe ainsi progressivement des observables simples \hat{Q} et \hat{P} , liées à des symétries fondamentales, aux **charges conservées d'intégrabilité** à plusieurs corps, qui sont précisément celles qui caractérisent les états de Bethe.

Opérateurs à deux corps

Dans la base discrètes des modes $\{|k\rangle\}$. Nous considérons à présent les termes d'interaction impliquant deux particules , \hat{v} , dont les éléments de matrices sont donnés par $v_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle 1 : \alpha; 2 : \beta | \hat{v} | 1 : \gamma; 2 : \delta \rangle$, où $|i : \gamma; j : \delta\rangle$ représente l'état où la i^e particules est dans l'état γ et la j^e dans l'état δ . Ceux-ci correspondent à des opérateurs de la forme : $\hat{V} = \sum_{j < i} \hat{v}^{(i,j)} = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \hat{v}^{(i,j)}$. avec $\hat{v}^{(i,j)}$ désigne l'interaction à deux corps entre les i^e et j^e particules , exprimés dans la base à deux états : $\hat{v}^{(i,j)} = \sum_{\alpha,\beta,\delta,\gamma} |i : \alpha; j : \beta\rangle v_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle i : \gamma; j : \delta|$. On peut réécrire l'opérateur \hat{V} en termes d'opérateurs de création et d'annihilation comme suit :

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \langle 1 : \alpha; 2 : \beta | \hat{v} | 1 : \gamma; 2 : \delta \rangle \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\delta \hat{a}_\gamma. \quad (1.34)$$

Cette forme est particulièrement utile pour le traitement des interactions dans l'espace de Fock.

Dans la base continue des positions $\{|x\rangle\}$. En injectant les relation des changement de base d'état (1.11) et de champ (1.19), dans (1.34) on obtient :

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \iiint_0^L dx_1 dx_2 dx'_1 dx'_2 \langle 1 : x_1, 2 : x_2 | \hat{v} | 1 : x'_1, 2 : x'_2 \rangle \hat{\Psi}^\dagger(x_1) \hat{\Psi}^\dagger(x_2) \hat{\Psi}(x'_2) \hat{\Psi}(x'_1) \quad (1.35)$$

Exemple : Interactions ponctuelles. Dans le cas d'une interaction ne dépendant que de la distance relative entre deux particules, $\langle 1 : x_1, 2 : x_2 | \hat{v} | 1 : x'_1, 2 : x'_2 \rangle = v(x_1 - x_2) \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2)$, l'expression (1.35) se simplifie :

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 v(x_1 - x_2) \hat{\Psi}^\dagger(x_1) \hat{\Psi}^\dagger(x_2) \hat{\Psi}(x_2) \hat{\Psi}(x_1) \quad (1.36)$$

soit pour des interactions ponctuelles :

$$\hat{V} = \frac{g}{2} \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x) \quad (1.37)$$

et quand on l'applique à l'état $|\{k_a\}\rangle$, les règles de commutations (1.17) et la définition d'état de Fock (1.16) impliquent que (cf Annex ??)

$$\hat{V} |\{k_a\}\rangle = \int d^N z \hat{\mathcal{V}}_N \varphi_{\{k_a\}}(\{z_a\}) \hat{\Psi}(z_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle \quad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{V}}_N = g \sum_{1 \leq i < j \leq N} \hat{\delta}(z_i - z_j) \quad (1.38)$$

où g est la constante de couplage.

Expression de l'Hamiltonien de Lieb-Liniger LL.

À partir d'ici, on fixe $\hbar = m = 1$. Ainsi, les dimensions (unités) des nombres d'onde k et des vitesses ne sont plus différencierées. Dans le formalisme des opérateurs de champs, l'Hamiltonien d'un système soumis à des interactions ponctuelles est la somme de l'énergie cinétique \hat{K} donnée par (1.26), et du terme d'interaction \hat{V} introduit dans (1.37) :

$$\hat{H} = \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \left[-\frac{1}{2} \hat{\partial}_x^2 + \frac{g}{2} \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \right] \hat{\Psi}(x). \quad (1.39)$$

Lorsqu'on applique cet Hamiltonien à un état à N particules, il est important de distinguer deux situations :

- **Sans interaction** ($g = 0$) : les états propres sont simplement les états de Fock en impulsion $|\{k_a\}\rangle$ définie en (1.18). Ce sont des produits d'ondes planes symétrisées.
- **Avec interaction** ($g \neq 0$) : les états propres ne sont plus des produits d'ondes planes. Ce sont les états de Bethe, que l'on note

$$|\{\theta_a\}\rangle \quad (1.40)$$

où les paramètres θ_a jouent le rôle de **quasi-moments (rapidités)**. Ceux-ci sont homogènes à un nombre d'onde ou à une vitesse, mais ne coïncident pas directement avec les impulsions libres k_a . La fonction d'onde correspondante est une combinaison linéaire de morceaux d'ondes planes, reliés par des phases de diffusion fixées par l'interaction locale.

Ainsi, la notation $|\{\theta_a\}\rangle$ est choisie pour rappeler que :

- en absence d'interaction, $\theta_a = k_a$ et l'on retrouve les états de Fock,
- en présence d'interaction, θ_a sont les quasi-moments de Bethe, qui généralisent les nombres d'onde libres.

En utilisant les équations (1.27) et (1.38), on obtient :

$$\hat{H} |\{\theta_a\}\rangle = \int d^N z \hat{\mathcal{H}}_N \varphi_{\{\theta_a\}}(\{z_a\}) \hat{\Psi}(z_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle, \quad (1.41)$$

avec $\{\theta_a\} \equiv \{\theta_1, \dots, \theta_N\}$ et .

$$\hat{\mathcal{H}}_N = \hat{\mathcal{K}}_N + \hat{\mathcal{V}}_N \quad \text{où on rappelle} \quad \hat{\mathcal{K}}_N = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \partial_{z_i}, \text{ et} \quad \hat{\mathcal{V}}_N = g \sum_{1 \leq i < j \leq N} \hat{\delta}(z_i - z_j). \quad (1.42)$$

Équation du mouvement associée. L'équation du mouvement du champ $\hat{\Psi}(x)$ s'obtient à partir de l'équation de Heisenberg :

$$i\hat{\partial}_t \hat{\Psi} = [\hat{\Psi}, \hat{H}]. \quad (1.43)$$

En évaluant explicitement le commutateur (1.17), on trouve :

$$i\hat{\partial}_t \hat{\Psi} = -\frac{1}{2}\hat{\partial}_x^2 \hat{\Psi} + g\hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi}. \quad (1.44)$$

Il est important de souligner que cette équation est encore **quantique** : elle décrit l'évolution de l'opérateur de champ $\hat{\Psi}$.

En revanche, si l'on prend l'approximation dite de **champ moyen**, où l'on remplace l'opérateur de champ par son espérance de valeur dans un état cohérent ou condensé

$$\Psi = \langle \hat{\Psi} \rangle, \quad (1.45)$$

on obtient alors l'équation de **Schrödinger non linéaire (NS)** (ou équation de **Gross–Pitaevskii (GP)**) pour une fonction d'onde classique :

$$i\partial_t \Psi = -\frac{1}{2}\partial_x^2 \Psi + g|\Psi|^2 \Psi. \quad (1.46)$$

Ainsi, l'appellation « équation de Schrödinger non linéaire » n'est pertinente qu'au niveau **effectif classique** (champ moyen), et non au niveau fondamental de l'équation de Heisenberg pour les champs quantiques.

Conservation et commutation.

À propos d'autres interactions. La conservation des opérateurs nombre total de particules \hat{Q} et quantité totale de mouvement \hat{P} dépend uniquement des **symétries** de l'interaction, et non de sa force :

- Une interaction **locale et à deux corps** de type $g\hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi}$ (cas du modèle de Lieb–Liniger) est invariante par $U(1)$ et par translation. Ainsi, \hat{Q} et \hat{P} sont conservés.
- Une interaction **à longue portée mais translationalement invariante** (par exemple un potentiel dipolaire uniforme, ou un potentiel $V(x - y)$ dépendant seulement de la distance relative) conserve encore \hat{P} , et si elle respecte la symétrie $U(1)$, alors \hat{Q} reste aussi conservé.
- Une interaction **non uniforme ou dépendant explicitement de la position** (par exemple un potentiel externe $V(x)$, ou des bords durs) brise l'invariance par translation : \hat{P} n'est alors plus conservé.
- Une interaction qui **crée ou détruit des particules** brise la symétrie $U(1)$: \hat{Q} n'est plus conservé.

En résumé, la conservation de \hat{Q} et \hat{P} ne dépend pas de la nature microscopique de l'interaction, mais uniquement des **symétries correspondantes** de l'Hamiltonien.

Interactions de contact. Dans le cas particulier du modèle de Lieb–Liniger, les opérateurs nombre total de particules \hat{Q} et quantité totale de mouvement \hat{P} commutent avec l'Hamiltonien \hat{H} :

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{P}] = 0. \quad (1.47)$$

Ils constituent donc des **intégrales du mouvement**. Cette propriété reflète directement la conservation du nombre de particules (symétrie $U(1)$) et l'invariance par translation du système (symétrie spatiale).

Nous verrons au chapitre 2 que, dans les systèmes intégrables comme le modèle de Lieb–Liniger, cette situation s'étend à une **infinité d'intégrales du mouvement**. Cette richesse supplémentaire de conservation conduit naturellement à l'introduction de l'ensemble de Gibbs généralisé, appelé en anglais **Generalized Gibbs Ensemble (GGE)**.

États propres et valeurs propres. Les états propres $|\{\theta_a\}\rangle$, construits dans le cadre de la seconde quantification à partir de la solution du modèle de Lieb–Liniger, sont simultanément fonctions propres des opérateurs \hat{Q} , \hat{P} et \hat{H} :

$$\hat{Q} |\{\theta_a\}\rangle = N |\{\theta_a\}\rangle, \quad \hat{P} |\{\theta_a\}\rangle = \left(\sum_{a=1}^N \theta_a \right) |\{\theta_a\}\rangle, \quad \hat{H} |\{\theta_a\}\rangle = \left(\frac{1}{2} \sum_{a=1}^N \theta_a^2 \right) |\{\theta_a\}\rangle. \quad (1.48)$$

Conclusion. La première quantification constitue la base indispensable pour comprendre le comportement quantique d'un nombre fixé de particules. La seconde quantification en est une extension naturelle, nécessaire pour décrire des systèmes plus complexes où le nombre de particules peut varier. Elle repose sur la quantification des champs et l'introduction d'opérateurs de création et d'annihilation, ouvrant ainsi la voie à la physique quantique des champs et à de nombreuses applications modernes.

Les opérateurs \hat{Q} , \hat{P} ((1.30)) et \hat{H} (1.39) possèdent une structure diagonale commune dans la base des états propres $|\{\theta_a\}\rangle$, révélant la nature intégrable du modèle de Lieb-Liniger. Leurs valeurs propres sont respectivement les 0^e, 1^{er} et 2^e moments des θ_a . Cette structure permet de généraliser la construction à une hiérarchie complète d'observables conservées, qui seront présentées au chapitre suivant.

En passant par la seconde quantification, nous avons pu relier l'Hamiltonien à une particule $\hat{\mathcal{H}}_1$ (1.3) à un Hamiltonien à N particules $\hat{\mathcal{H}}_N$ (1.42) dans le modèle de Lieb-Liniger (système avec interactions ponctuelles). Les états $\varphi_{\{\theta_a\}}$ sont des états propres du nombre total de particules \hat{N}_N (1.31), de la quantité de mouvement totale $\hat{\mathcal{P}}_N$ (1.32) et de l'hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_N$.

Dans le cas d'un système à une particule, les états de la forme (1.9) sont déjà propres de \hat{N}_1 , $\hat{\mathcal{P}}_1$ et $\hat{\mathcal{H}}_1$ (cf. (1.4)). Mais quelle est leur forme pour N particules ? Et comment généraliser les conditions périodiques (1.7), valables pour une particule, à un système à N particules ?

Nous allons étudier le cas de $N = 2$ corps, afin de simplifier l'analyse tout en capturant les premiers effets non triviaux des interactions. Cela permettra de comprendre plus facilement les implications physiques des interactions ponctuelles, en particulier leur influence sur la structure des états propres, les conditions de continuité des fonctions d'onde, ainsi que les relations de dispersion modifiées. Ce cas servira de base pour introduire les concepts clés de la résolution exacte par la méthode de Bethe ansatz, avant de les généraliser au cas N -corps.

1.1.2 Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à 2 corps

Introduction au système de deux bosons avec interaction de contact. Considérons maintenant un système de deux bosons confinés dans une boîte unidimensionnelle de longueur L , avec des conditions aux limites périodiques. Contrairement au cas à une seule particule, une interaction de contact intervient ici dans la dynamique. L'Hamiltonien à deux particules s'écrit :

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = \hat{\mathcal{K}}_2 + \hat{\mathcal{V}}_2, \quad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{K}}_2 = -\frac{1}{2}\partial_{z_1}^2 - \frac{1}{2}\partial_{z_2}^2, \quad \text{et} \quad \hat{\mathcal{V}}_2 = g\delta(z_1 - z_2). \quad (1.49)$$

On rappelle que, pour des particules de masse unitaire (i.e., $\hbar = m = 1$), les énergies propres de l'opérateur cinétique $\hat{\mathcal{K}}_2$, associées aux fonctions d'onde symétrisées $\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}$, sont données par :

$$\varepsilon(\theta_1) + \varepsilon(\theta_2) = \frac{\theta_1^2}{2} + \frac{\theta_2^2}{2}. \quad (1.50)$$

Afin de simplifier le problème, nous nous plaçons dans le référentiel du centre de masse.

Changement de variables : coordonnées du centre de masse et relative. En première quantification, on introduit les nouvelles variables : $Z = \frac{z_1 + z_2}{2}$ (centre de masse), $Y = z_1 - z_2$ (coordonnée relative). Dans ce changement de variables, l'opérateur laplacien total $\partial_{z_1}^2 + \partial_{z_2}^2$ devient $\frac{1}{2}\partial_Z^2 + 2\partial_Y^2$. L'Hamiltonien (1.49) se décompose alors en la somme de deux Hamiltoniens agissant respectivement sur Z et Y :

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = -\frac{1}{4}\partial_Z^2 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{rel}}, \quad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{H}}_{\text{rel}} = -\partial_Y^2 + g\delta(Y). \quad (1.51)$$

Résolution du problème du centre de masse et de la coordonnée relative. L'Hamiltonien du centre de masse, $-\frac{1}{4}\partial_Z^2$, décrit une particule de masse totale $\tilde{m} = 2$. Ses états propres sont des ondes planes associées à une énergie $\tilde{\theta}^2$, avec : $\tilde{\theta} = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}$, jouant ici un rôle analogue à celui d'un pseudo-moment associé dans le référentiel de laboratoire. Le Hamiltonien relatif, $\hat{\mathcal{H}}_{\text{rel}}$, correspond quant à lui à une particule de masse réduite $\tilde{m} = \frac{1}{2}$ soumise à un potentiel delta centré en $Y = 0$. Son équation propre s'écrit :

$$-\partial_Y^2 \tilde{\varphi}(Y) + g\delta(Y)\tilde{\varphi}(Y) = \tilde{\varepsilon}\tilde{\varphi}(Y), \quad (1.52)$$

où $\tilde{\varepsilon}$ désigne l'énergie associée au mouvement relatif.

Forme symétrique de la fonction d'onde pour bosons. Dans le référentiel du centre de masse. Le système est le même que celui d'un particules de masse $\tilde{m} = \frac{1}{2}$. Le système étant composé de particules bosoniques, on cherche une solution symétrique que l'on écrit sous la forme :

$$\tilde{\varphi}(Y) = a e^{i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} + b e^{-i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} \propto \sin\left(\frac{1}{2}(\tilde{\theta}|Y| + \Phi)\right). \quad (1.53)$$

Le paramètre $\tilde{\theta} = \theta_1 - \theta_2$ joue ici un rôle analogue à celui d'un pseudo-moment associé à la coordonnée relative, est la phase s'écrit

$$\Phi(\tilde{\theta}) = 2 \arctan\left(\frac{1}{i} \frac{a+b}{a-b}\right), \quad (1.54)$$

car $a \exp(ix) + b \exp(-ix) = 2\sqrt{ab} \sin\left(x + \arctan\left(-i \frac{a+b}{a-b}\right)\right)$. Pour $\tilde{\theta} < 0$, les termes exponentiels $\exp(i\tilde{\theta}|Y|/2)$ et $\exp(-i\tilde{\theta}|Y|/2)$ correspondent aux paires de particules entrantes et sortantes d'un processus de diffusion à deux corps.

En réinjectant l'ansatz (1.53) dans l'équation relative (1.52), on obtient l'énergie propre $\tilde{\varepsilon}$ du problème réduit. Elle prend la forme cinétique usuelle $\frac{1}{2} \times \text{masse} \times \text{vitesse}^2$. La masse réduite vaut ici $\tilde{m} = \frac{1}{2}$ et le paramètre $\tilde{\theta}$ joue le rôle d'une impulsion ; ainsi

$$\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}) = \frac{\tilde{\theta}^2}{4}. \quad (1.55)$$

Cette énergie gouverne la décroissance exponentielle de la fonction d'onde dans la coordonnée relative : plus $\tilde{\theta}$ est grand, plus l'état est localisé autour de $Y = 0$, signe d'une interaction attractive plus forte entre les deux bosons.

La fonction d'onde relative présente des oscillations de fréquence $\tilde{\theta}/2$, et son énergie croît avec $\tilde{\theta}^2$. Cette solution correspond à un état de diffusion à deux corps en interaction ponctuelle. En revanche, une décroissance exponentielle autour de $Y = 0$ n'apparaît que dans le cas d'un couplage attractif ($g < 0$), où des états liés peuvent se former.

L'énergie totale se décompose enfin en la somme du mouvement du centre de masse et du mouvement relatif : $\overline{\theta}^2 + \tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}) = \varepsilon(\theta_1) + \varepsilon(\theta_2)$, où $\overline{\theta} = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}$.

Condition de discontinuité à cause du potentiel delta. En raison de la présence du potentiel delta centré en $Y = 0$, la dérivée première de la fonction d'onde $\tilde{\varphi}(Y)$ présente une discontinuité en ce point. En effet, le potentiel étant infini en $Y = 0$, la phase Φ du régime symétrique est déterminée en intégrant l'équation du mouvement autour de la singularité. En intégrant entre $-\epsilon$ et $+\epsilon$ et en faisant tendre $\epsilon \rightarrow 0$, on obtient la condition de saut de la dérivée :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} -\partial_Y^2 \tilde{\varphi}(Y) + g\delta(Y)\tilde{\varphi}(Y) dY = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}) dY,$$

$$\tilde{\varphi}'(0^+) - \tilde{\varphi}'(0^-) - g\tilde{\varphi}(0) = 0.$$

Détermination de la phase Φ . Et en évaluant la discontinuité de sa dérivée au point $Y = 0$, on trouve que la phase Φ satisfait la condition :

$$\Phi(\tilde{\theta}) = 2 \arctan(\tilde{\theta}/g) \in [-\pi, +\pi]. \quad (1.56)$$

Cette relation exprime l'effet de l'interaction delta sur la phase de la fonction d'onde à deux particules. On en déduit que plus le couplage g est fort ($g \rightarrow \infty$), plus la phase Φ se rapproche de zéro. Cela correspond à une fonction d'onde qui s'annule en $Y = 0$, caractéristique d'un régime d'imperméabilité totale.

À l'inverse, dans la limite d'une interaction faible ($g \rightarrow 0$), la phase Φ tend vers π (ou $-\pi$, selon le signe de $\tilde{\theta}$). Dans ce cas, la discontinuité de la dérivée de la fonction d'onde au point $Y = 0$ devient négligeable, ce qui traduit une interaction absente entre les deux particules.

Phase de diffusion à deux corps. En combinant les équations (1.54) et (1.56) avec l'identité analytique valable pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \{\pm i\}$, $2 \arctan(z) = i \ln\left(\frac{1-i z}{1+i z}\right)$ i.e. $e^{2i \arctan(z)} = \frac{1+iz}{1-iz}$, on obtient que le rapport des amplitudes a et b de la fonction d'onde relative (1.53) définit la *phase de diffusion* $\Phi(\tilde{\theta}) = i \ln\left(-\frac{b}{a}\right)$. On introduit alors la *matrice de diffusion* (ou *facteur de diffusion*) noté $S(\theta)$, définie comme une phase complexe :

$$S(\theta) \doteq e^{i\Phi(\theta)} \quad (1.57)$$

Dans le cas d'une interaction de type delta, cette fonction prend la forme explicite :

$$S(\tilde{\theta}) = \frac{1+i\tilde{\theta}/g}{1-i\tilde{\theta}/g}. \quad (1.58)$$

Cette expression, unitaire et analytique, caractérise entièrement la diffusion élastique à deux corps dans le modèle considéré.

Lien entre la phase de diffusion et le décalage temporel — interprétation semi-classique Wigner (1955) [11], à la suite d'Eisenbud (1948) [1], a mis en évidence un lien entre la **phase de diffusion** et un *décalage temporel*, interprétation qui peut être éclairée dans une perspective semi-classique. L'idée de Wigner repose sur l'analyse d'un paquet d'ondes incident, constitué de la superposition de deux ondes planes de moments voisins, $\tilde{\theta}/2$ et $\tilde{\theta}/2 + \delta\tilde{\theta}$:

$$\tilde{\varphi}_{\text{inc}}(Y) \propto e^{i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} + e^{i\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|}. \quad (1.59)$$

Cette superposition évolue dans le temps comme :

$$\tilde{\varphi}_{\text{inc}}(Y, t) \propto e^{i(\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|-t\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}))} + e^{i(\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|-t\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta}))}. \quad (1.60)$$

Le centre de ce 'paquet d'ondes' se situe à la position où les phases des deux termes coïncident, c'est-à-dire au point où $|Y|\delta\tilde{\theta} - t[\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta} + 2\delta\tilde{\theta}) - \tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta})] = 0$, ce qui donne $|Y| \simeq \tilde{\theta}t$ avec la vitesse réduite $\tilde{\theta} = 2\tilde{\varepsilon}'(\tilde{\theta})$. Selon les équations (1.53) et (1.58), l'état sortant de la diffusion correspondant serait :

$$\tilde{\varphi}_{\text{outc}}(Y, t) \propto -e^{i\Phi(\tilde{\theta})} e^{-i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} - e^{i\Phi(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})} e^{-i\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|}. \quad (1.61)$$

En répétant l'argument précédent de la stationnarité de phase, on trouve que la coordonnée relative est à la position $|Y| \simeq \tilde{\theta}t - 2\Phi'(\tilde{\theta})$ au moment t .

$$|Y| \simeq \tilde{\theta}t - 2\Delta(\tilde{\theta}) \quad (1.62)$$

où le **déplacement de diffusion** $\Delta(\theta)$ est donné par la dérivée de la *phase de diffusion*,

$$\Delta(\theta) \doteq \frac{d\Phi}{d\theta}(\theta) = \frac{2g}{g^2 + \theta^2}. \quad (1.63)$$

Retour aux coordonnées du laboratoire. En revenant aux coordonnées du laboratoire, la fonction d'onde à deux corps s'écrit $\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2) = \langle \emptyset | \hat{\Psi}(z_1) \hat{\Psi}(z_2) | \{\theta_1, \theta_2\} \rangle / \sqrt{2}$, dans le cas $z_1 < z_2$, c'est-à-dire pour une séparation relative $Y = z_1 - z_2 < 0$ (on pourra symétriser ultérieurement). Dans le référentiel du laboratoire, le centre de masse évolue selon $Z = \frac{z_1+z_2}{2} = \bar{\theta}t$. Ainsi, la position semi-classique des deux particules après la collision s'écrit

$$z_1 = Z + \frac{Y}{2} \simeq \theta_1 t - \Delta(\theta_1 - \theta_2), \quad z_2 = Z - \frac{Y}{2} \simeq \theta_2 t + \Delta(\theta_1 - \theta_2), \quad (1.64)$$

On peut vérifier les identités utiles suivantes :

$$z_1\theta_1 + z_2\theta_2 = 2Z\bar{\theta} + \frac{1}{2}Y\tilde{\theta}, \quad z_1\theta_2 + z_2\theta_1 = 2Z\bar{\theta} - \frac{1}{2}Y\tilde{\theta},$$

ce qui est en accord avec les masses associées : masse totale $\bar{m} = 2$, masse réduite $\tilde{m} = \frac{1}{2}$.

Cela nous motive à multiplier l'ansatz dans le référentiel du centre de masse (équation (1.53)) par un facteur de phase globale $\exp(2iZ\bar{\theta})$ pour revenir à la représentation dans le laboratoire. On obtient alors l'expression de la fonction d'onde :

$$\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2) \propto \begin{cases} (\theta_2 - \theta_1 - ig)e^{iz_1\theta_1 + iz_2\theta_2} - (\theta_1 - \theta_2 - ig)e^{iz_1\theta_2 + iz_2\theta_1} & \text{si } z_1 < z_2 \\ (z_1 \leftrightarrow z_2) & \text{si } z_1 > z_2 \end{cases} \quad (1.65)$$

Pour $\theta_1 > \theta_2$, les deux termes exponentiels $e^{iz_1\theta_1 + iz_2\theta_2}$ et $e^{iz_1\theta_2 + iz_2\theta_1}$ correspondent respectivement aux ondes entrantes et sortantes dans le canal de diffusion à deux corps [3]. Le rapport de leurs amplitudes définit la **phase de diffusion** Φ et **matrice diffusion** S à deux corps (1.58), reste inchangé mais voici une autre écriture :

$$S(\theta_1 - \theta_2) = \frac{\theta_1 - \theta_2 - ig}{\theta_2 - \theta_1 - ig}. \quad (1.66)$$

Cette phase caractérise entièrement le processus de diffusion dans le modèle de Lieb-Liniger à deux particules.

Conditions périodiques et équations de Bethe pour deux bosons (à révoir).

Périodicité en z_2 . On impose une condition de périodicité sur la fonction d'onde obtenue par ansatz de Bethe (voir équation (1.65)) : $\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2 = L) = \varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2 = 0)$, avec $0 < z_1 < z_2 = L$. Au point $z_2 = L$, la configuration reste dans le secteur $z_1 < z_2$, tandis qu'à $z_2 = 0$, on entre dans le secteur $z_2 < z_1$. La continuité de la fonction d'onde impose alors d'échanger les coordonnées $z_1 \leftrightarrow z_2$: $\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, L) = \varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(0, z_1)$. En utilisant l'expression explicite de l'ansatz dans les deux secteurs, on obtient l'égalité suivante :

$$a e^{i\theta_1 z_1 + i\theta_2 L} + b e^{i\theta_2 z_1 + i\theta_1 L} = a e^{i\theta_2 z_1} + b e^{i\theta_1 z_1}.$$

Cette relation, valable pour tout $z_1 \in [0, L]$, fixe une contrainte sur le rapport b/a . En utilisant l'expression de la phase de diffusion introduite en (1.66) pour $z_1 < z_2$:

$$-\frac{b}{a} = e^{i\Phi(\theta_1 - \theta_2)},$$

on obtient une condition sur les phases θ_1 et θ_2 , cœur de la quantification imposée par le formalisme de Bethe.

En identifiant les coefficients de $e^{i\theta_1 z_1}$ et $e^{i\theta_2 z_1}$ indépendamment, on obtient $e^{i\theta_2 L} a = b$, $e^{i\theta_1 L} b = a$, c'est-à-dire l'équations de Bethe

$$e^{i\theta_1 L} e^{i\Phi(\theta_1 - \theta_2)} = -1, \quad e^{i\theta_2 L} e^{i\Phi(\theta_2 - \theta_1)} = -1. \quad (1.67)$$

En prenant le logarithme on obtient les *équations de Bethe à deux particules* :

$$\theta_1 L + \Phi(\theta_1 - \theta_2) = 2\pi I_1, \quad \theta_2 L + \Phi(\theta_2 - \theta_1) = 2\pi I_2, \quad (1.68)$$

où $I_1, I_2 \in \mathbb{Z}/2$ sont les nombres demis entiers.

Périodicité sur z_1 . Le raisonnement symétrique conduit exactement aux mêmes égalités (1.67) et (1.68). Ces équations constituent la quantification complète du gaz de Lieb–Liniger à deux bosons sur un cercle de longueur L et seront le point de départ pour l'étude de l'état fondamental et des excitations.

Interprétation physique pour deux particules et rôle de la rapidité

Pour bien comprendre le sens physique des équations de Bethe (1.68), nous avons commencer par le cas de deux particules. Dans ce cadre, les particules interagissent lorsqu'elles se croisent, et à chaque interaction elles acquièrent une **phase de diffusion** Φ . L'état propre du système est obtenu en imposant que l'onde multi-corps soit périodique sur un cercle de longueur L : chaque particule effectue une rotation complète, accumule une phase cinématique $e^{i\theta L}$ liée à son mouvement libre, ainsi que des contributions de phase

dues aux diffusions avec l'autre particule. Cela donne lieu à une quantification des **pseudo-impulsions** θ via l'équation de Bethe.

Pour décrire ces **excitations**, ces **quasi-particules**, on introduit le paramètre θ appelé **rapidité**. Ce terme vient de la théorie relativiste [13, 2], mais reste pertinent même dans des modèles non relativistes, comme ici. La rapidité est choisie comme **paramètre spectral naturel** : elle étiquette les états propres, linéarise les relations de dispersion dans certains régimes, et elle simplifie considérablement les équations de Bethe.

On peut interpréter chaque θ comme la **vitesse d'une quasi-particule** : une entité collective qui se comporte comme une particule libre, mais qui tient compte des effets des interactions avec les autres. Contrairement à une particule élémentaire, une **quasi-particule** est une excitation émergente du système à plusieurs corps : elle résume de façon efficace le comportement collectif d'une particule « habillée » par son environnement d'interactions. Cette notion est centrale en physique des systèmes quantiques à N corps, où les excitations ne sont plus des particules indépendantes, mais des objets collectifs.

Ainsi, dans l'image de Bethe, les états propres sont des configurations stables de N quasi-particules de rapidités $\theta_1, \dots, \theta_N$, dont les valeurs sont quantifiées par les conditions d'interférence imposées par les équations de Bethe.

1.2 Équation de Bethe et distribution de rapidité

1.2.1 Fonction d'onde dans le secteur ordonné et représentation de Gaudin

Sans en donner ici la démonstration, donnons une forme généralisée de la fonction propre à N particules [cf. équation (1.21)], qui prolonge naturellement l'expression obtenue pour le cas à deux corps [cf. équation (1.65)]. Dans le domaine $z_1 < z_2 < \dots < z_N$, la fonction d'onde pour un état de Bethe à N particules s'écrit ([8, 5, 10, 4, 12]) :

$$\begin{aligned} \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \emptyset | \hat{\Psi}(z_1) \cdots \hat{\Psi}(z_N) | \{\theta_a\} \rangle \\ &\propto \sum_{\sigma} (-1)^{|\sigma|} \left(\prod_{1 \leq a < b \leq N} (\theta_{\sigma(b)} - \theta_{\sigma(a)} - ig) \right) e^{i \sum_{j=1}^N z_j \theta_{\sigma(j)}}, \end{aligned} \quad (1.69)$$

où la somme s'étend sur toutes les permutations σ de $\{1, \dots, N\}$. Le facteur $(-1)^{|\sigma|}$ est la signature de la permutation, et les amplitudes dépendent des différences de quasi-moments θ_j ainsi que du couplage g . Cette fonction d'onde est ensuite étendue par symétrie aux autres domaines du type $z_{\pi(1)} < z_{\pi(2)} < \dots < z_{\pi(N)}$ via des propriétés d'échange symétriques.

1.2.2 Conditions aux bords périodiques

Les équations précédentes ont été établies pour un système défini sur la droite réelle. Cependant, dans une perspective thermodynamique, il est essentiel de considérer une densité finie N/L . Cela peut être obtenu en compactifiant l'espace sur un cercle de longueur L , i.e. en imposant les *conditions aux bords périodiques*.

Concrètement, cela consiste à identifier $x = 0$ et $x = L$ et à exiger que la fonction d'onde soit périodique lorsqu'une particule fait le tour du système :

$$\varphi_{\{\theta_a\}}(x_1, \dots, x_{N-1}, L) = \varphi_{\{\theta_a\}}(0, x_1, \dots, x_{N-1}). \quad (1.70)$$

Cette condition doit être satisfaite pour chaque particule. Or, déplacer la j -ième particule de x_j à $x_j + L$ revient à la faire passer devant toutes les autres : cela introduit un facteur de diffusion à chaque croisement.

Équations de Bethe exponentielles

En imposant les conditions de périodicité sur la fonction d'onde de type Bethe (1.69), on généralise l'équation (1.67) pour N particules. On obtient que chaque moment θ_a doit satisfaire l'équation :

$$e^{i \theta_a L} \prod_{b \neq a} S(\theta_a - \theta_b) = (-1)^{N-1}, \quad a = 1, \dots, N, \quad (1.71)$$

où la matrice diffusion $S(\theta)$ définie en (1.57), (1.58) et (1.66) est l'amplitude de diffusion à deux corps. Le signe $(-1)^{N-1}$ vient du fait que chaque permutation change la signature du déterminant dans la représentation de Gaudin.

Équations de Bethe logarithmiques

En prenant le logarithme du membre gauche et du membre droit de l'équation (1.71), on généralise l'équation (1.68). On obtient sa forme *logarithmique* :

$$L\theta_a + \sum_{b=1}^N \Phi(\theta_a - \theta_b) = 2\pi I_a, \quad a = 1, \dots, N, \quad (1.72)$$

où les I_a sont des nombres quantiques fermioniques, c'est-à-dire des entiers $I_a \in \mathbb{Z}$ si N est impair, et des demi-entiers $I_a \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$ si N est pair.

Cette écriture révèle un lien direct avec un gaz de **fermions libres** en une dimension : en interaction forte (*i.e.* $g \rightarrow \infty$ c'est-à-dire si $\Phi = 0$), les équations (1.72) se réduisent à $L\theta_a = 2\pi I_a$, soit $\theta_a = 2\pi I_a / L$. Cela correspond exactement aux quantifications de l'impulsion pour des **fermions libres sans spin**, dans une boîte de taille L , avec conditions aux bords périodiques.

L'interprétation est alors la suivante : les solutions de Bethe θ_a décrivent des quasi-particules interagissantes, dont la configuration est déterminée par l'ensemble des nombres quantiques I_a , eux-mêmes analogues aux **moments quantiques d'un gaz de fermions libres**. C'est pourquoi on parle de *nombres fermioniques* I_a dans ce contexte.

Dans la configuration d'état fondamental (ou de type "mer de Fermi"), ces *nombres fermionique* sont pris de manière symétrique autour de zéro :

$$I_a = a - \frac{N+1}{2}, \quad \text{pour } a \in \llbracket 1, N \rrbracket. \quad (1.73)$$

ce qui correspond au choix symétrique des nombres quantiques pour l'état fondamental. Il en résulte une distribution uniforme des θ_a dans l'intervalle autour de zéro $[-\theta_{\max}, \theta_{\max}]$ où θ_{\max} est le paramètre de Fermi (ou rapidité maximale).

Interprétation physique

Les équations de Bethe (1.72) représentent une *quantification des pseudo-impulsions* θ_a des particules en interaction, résultant d'un *interféromètre multi-corps sur le cercle* : chaque particule accumule une phase $e^{i\theta_a L}$ due au mouvement libre, ainsi que des phases de diffusion lorsqu'elle croise les autres.

Ce système d'équations détermine les états propres du système de Lieb–Liniger en volume fini, et joue un rôle fondamental dans la description exacte de ses propriétés thermodynamiques et dynamiques.

1.2.3 Thermodynamique du gaz de Lieb–Liniger à l'état fondamental

Dans la limite thermodynamique, le nombre de particules N et la longueur L du système tendent vers l'infini de telle sorte que leur rapport reste fini :

$$\lim_{\substack{L \rightarrow \infty \\ N \rightarrow \infty}} \frac{N}{L} = n < \infty,$$

où n désigne la densité linéique de particules.

Considérons désormais le système à température nulle. L'état fondamental dans le secteur à nombre de particules fixé correspond à la configuration d'énergie minimale parmi les solutions des équations de Bethe (1.72).

Dans la limite thermodynamique ($\lim_{\substack{\text{therm} \\ L \rightarrow \infty \\ N \rightarrow \infty}} \equiv \lim$), les valeurs de θ_a deviennent quasi-continues, avec un espacement $\theta_{a+1} - \theta_a = O(1/L)$, et se condensent dans un intervalle symétrique autour de zéro $[-\theta_{\max}, \theta_{\max}]$. En supposant l'ordre $I_a \geq I_b$ implique $\theta_a \geq \theta_b$, cet intervalle constitue ce qu'on appelle la *mer de Dirac* (ou sphère de Fermi en dimension un).

Nous introduisons la **densité d'états** $\rho_s(\theta)$, définie par

$$\rho_s(\theta_a) \doteq \frac{1}{L} \lim_{\text{therm}} \frac{|I_{a+1} - I_a|}{|\theta_{a+1} - \theta_a|}, \quad (1.74)$$

soit en notant la fonction $I(\theta_a) = I_a$

$$2\pi\rho_s(\theta_a) = \frac{2\pi}{L} \frac{\partial I}{\partial \theta}(\theta_a). \quad (1.75)$$

L'application des équations de Bethe sous forme logarithmique (1.72) conduit alors à

$$2\pi\rho_s(\theta_a) = 1 + \frac{1}{L} \sum_{b=1}^N \Delta(\theta_a - \theta_b), \quad (1.76)$$

ce qui relie ρ_s à le déplacement de diffusion Δ définie dans l'équation (1.63).

Intéressons-nous maintenant à la *densité de particules dans l'espace des moments*, que l'on nomme la **distribution de rapidité macroscopique** et notée $\rho(\theta)$, et définie par

$$L\rho(\theta)\delta\theta \doteq \text{nombre de quasi-particules ayant une rapidité dans } [\theta, \theta + \delta\theta]. \quad (1.77)$$

Autrement dit, dans un petit intervalle $\delta\theta$, le nombre total de particules ayant une rapidité dans cet intervalle est approximativement :

$$\delta N(\theta) = L\rho(\theta)\delta\theta \quad (1.78)$$

Avec les rapidité θ_a ordonnées *i.e.* $\theta_1 < \theta_2 < \dots < \theta_N$. Pour des intervalle $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta_a]$ assez petit $\delta\theta_a = \theta_{a+1} - \theta_a$, est correspond à $\delta N(\theta_a) = 1$ quasi-particule (car une seule particule occupe l'intervalle entre deux rapidités consécutives). Dans la limite thermodynamique la dernier équation (1.78) se réécrit comme :

$$\rho(\theta_a) = \lim_{\text{therm}} \frac{1}{L} \cdot \frac{1}{\theta_{a+1} - \theta_a} > 0. \quad (1.79)$$

On peut aussi écrire la distribution de rapidité sous la forme :

$$\rho(\theta) = \frac{1}{L} \sum_{a=1}^N \delta(\theta - \theta_a). \quad (1.80)$$

Dans l'état fondamental, toutes les positions disponibles dans l'intervalle $[-\theta_{\max}, +\theta_{\max}]$ sont occupées. On a donc :

$$\rho(\theta) = \rho_s(\theta). \quad (1.81)$$

La quantité $L\rho(\theta)d\theta$ représente le nombre de rapidités dans la cellule infinitésimale $[\theta, \theta + d\theta]$, tandis que $N = L \int_{-\theta_{\max}}^{+\theta_{\max}} \rho(\theta) d\theta$ donne le nombre total de particules dans le système. Le passage de la somme discrète à l'intégrale dans le second membre de l'équation de Bethe permet d'écrire :

$$\frac{1}{L} \sum_{b=1}^N \Delta(\theta_a - \theta_b) \xrightarrow{\text{therm}} \int_{-\theta_{\max}}^{+\theta_{\max}} \Delta(\theta_a - \theta) \rho(\theta) d\theta. \quad (1.82)$$

Ainsi, l'équation pour la densité d'états devient :

$$2\pi\rho_s(\theta) = 1 + \int_{-\theta_{\max}}^{+\theta_{\max}} \Delta(\theta - \theta') \rho(\theta') d\theta', \quad (1.83)$$

et, comme $\rho = \rho_s$, à l'état fondamental, on obtient l'équation linéaire intégrale satisfaite par la densité de rapidités :

$$\rho(\theta) - \int_{-\theta_{\max}}^{+\theta_{\max}} \frac{\Delta(\theta - \theta')}{2\pi} \rho(\theta') d\theta' = \frac{1}{2\pi}. \quad (1.84)$$

1.2.4 Excitations élémentaires

À partir de l'état fondamental dans le régime d'interaction forte, les excitations élémentaires du modèle de Lieb-Liniger ont été classifiées par Lieb en deux types distincts [9]. Ces excitations peuvent être comprises comme des perturbations de la mer de Fermi formée par les quasi-particules.

- **Excitations de type I :** Il s'agit remplacer une quasi-particule avec un nombre fermionique au bord de Fermi I_N (ou I_{-N}) par une quasi-particule avec un nombre fermionique $I' > I_N$ (resp. $I' < I_{-N}$), c'est-à-dire au-delà du bord de la mer de Fermi. Ces excitations sont analogues à des excitations de particules libres et, dans la limite des faibles interactions ($g \rightarrow 0$), leur relation de dispersion reproduit celle prédicta par la théorie de Bogoliubov.

— **Excitations de type II :** Ces excitations sont de type particule-trou. Elles sont obtenues en remplaçant une quasi-particule de la mer de Fermi avec une nombre fermionique I_a (*i.e.*, en créant un trou dans l'état fondamental) et de le remplacer par une quasi-particule avec $I' = I_{N+1} = N/2$ ou $I' = I_{N-1} = -N/2$ et en réarrangeant les autres nombres fermionique. Cela correspond à une excitation interne du Fermi pseudo-mer, avec conservation du nombre de particules. Pour de petits I' , la dispersion est linéaire, correspondant à des modes phononiques. Dans la limite d'interaction faible $g \rightarrow 0$, ces excitations peuvent être interprétées comme des solitons sombres [6, 7].

Ces deux types d'excitations définissent ensemble le spectre complet du modèle de Lieb-Liniger et permettent d'accéder aux propriétés dynamiques du système, telles que les fonctions de réponse ou la structure du spectre d'énergie.

Équation de Bethe continue. À température non nulle (hors de l'état fondamental), il n'y a plus de mer de Fermi définie, et les équations (1.81) et (1.84) ne sont plus valides (en particulier $\rho \neq \rho_s$). Les équations discrètes de Bethe (1.83) se condensent alors en une équation intégrale pour les densités de rapidité :

$$2\pi\rho_s = 1 + \Delta \star \rho, \quad (1.85)$$

où le symbole \star désigne la convolution : $[\Delta \star \rho](\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} d\theta' \Delta(\theta - \theta') \rho(\theta')$. Et on peut définir la distribution de trou ρ_h , tel que $\rho_s = \rho + \rho_h$.

Opération de *dressing*.

Définition. À toute fonction $f(\theta)$ on associe sa version *habillée* (ou *dressed*) $f_{[\nu]}^{\text{dr}}(\theta)$, définie comme la solution de l'équation intégrale suivante :

$$f_{[\nu]}^{\text{dr}} = f + \frac{\Delta}{2\pi} \star (\nu f^{\text{dr}}) \quad (1.86)$$

où pour notre système

$$\nu = \frac{\rho}{\rho_s} \quad (1.87)$$

est le **facteur d'occupation**, et $\Delta/2\pi$ est le **noyau de diffusion** du modèle. Dans la suite, il est pratique de décrire la thermodynamique et la dynamique des système à l'aide de la *fonction d'occupation*.

Interprétation physique Le dressing incorpore à tous ordres les effets de rétrodiffusion entre quasi-particules. Il encode ainsi les corrections d'interaction aux grandeurs physiques initiales $f(\theta)$.

Exemple : densité de sites En prenant $f(\theta) = 1$ dans l'équation (1.86), on obtient : $1_{[\nu]}^{\text{dr}} = 1 + \frac{\Delta}{2\pi} \star (\nu 1_{[\nu]}^{\text{dr}})$ soit directement :

$$2\pi\rho_s = 1_{[\nu]}^{\text{dr}}, \quad (1.88)$$

ce qui n'est autre que la relation constitutive (1.85).

Chapitre 2

Relaxation et Équilibre dans les Systèmes Quantiques Intégrables : Une Approche par la Thermodynamique de Bethe

Contents

2.1	Notion d'état d'Équilibre de Gibbs Généralisé (GGE)	20
2.1.1	Introduction à l'Équilibre de Gibbs Généralisé	20
2.1.2	Moyenne dans l'Équilibre de Gibbs Généralisé	22
2.1.3	Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales	23
2.2	Thermodynamique de Bethe et relaxation	25
2.2.1	Moyenne dans la limite thermodynamique	25
2.2.2	Statistique des macro-états : entropie de Yang–Yang	25
2.2.3	Équations intégrales de la TBA	28

Introduction

Dans les systèmes quantiques intégrables, l'évolution vers l'équilibre à partir d'un état initial arbitraire — généralement hors d'équilibre — ne conduit pas, en général, à une thermalisation décrite par la statistique de Gibbs standard. Cette singularité résulte de l'existence d'une infinité de charges conservées en involution, qui contraintent l'évolution du système à un sous-espace restreint de l'espace des états accessibles. La relaxation vers un état stationnaire n'est donc pas décrite par l'ensemble canonique, mais par un **ensemble thermodynamique généralisé** (GGE), qui tient compte de toutes les constantes du mouvement.

Ce chapitre est consacré à la mise en place rigoureuse de cette notion. Dans une première section, nous revenons brièvement sur la notion d'opérateurs à un corps exprimés en puissances de l'impulsion \hat{p} pour une particule, introduite au chapitre précédent (1) dans l'équation (1.33). Ce cadre permet de construire une hiérarchie naturelle de charges conservées, au-delà du simple nombre de particules, de la quantité totale de mouvement ou de l'énergie cinétique. Ces charges supplémentaires permettent alors de définir les moyennes d'observables dans un état stationnaire hors d'équilibre.

Dans la section suivante, nous poserons les fondations nécessaires à la description quantitative de ces états stationnaires dans le cadre de la **thermodynamique de Bethe** (TBA), qui généralise l'analyse intégrable au-delà de l'état fondamental. Nous considérons un régime thermodynamique macroscopique à température finie (ou plus précisément à entropie de Yang–Yang finie), correspondant à des états hautement excités du spectre mais encore décrits exactement par le formalisme intégrable.

Les outils développés dans ce chapitre seront essentiels pour formuler le GGE et pour décrire la dynamique de relaxation des systèmes intégrables vers ces états stationnaires.

2.1 Notion d'état d'Équilibre de Gibbs Généralisé (GGE)

2.1.1 Introduction à l'Équilibre de Gibbs Généralisé

Configuration des états. On désigne par $\{\theta_a\} \equiv \{\theta_1, \dots, \theta_N\}$ la *configuration de rapidités* caractérisant un état propre à $N \equiv N(\{\theta_a\})$ particules – le nombre de particules n'est donc pas fixé *a priori* mais dépend de la configuration. L'état propre correspondant est noté $|\{\theta_a\}\rangle = |\{\theta_1, \dots, \theta_N\}\rangle$.

Observables diagonales dans la base des états propres. Dans le chapitre précédent (1), on a vu que l'état $|\{\theta_a\}\rangle$ associé à cette configuration est une état propre des observables nombre et quantité de mouvement et énergie cinétique (1.48). Ces observables sont diagonales dans la base des états propres :

$$\hat{Q} = \sum_{\{\theta_a\}} \left(\sum_{a=1}^N 1 \right) |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}|, \quad \hat{P} = \sum_{\{\theta_a\}} \left(\sum_{a=1}^N \theta_a \right) |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}|, \quad \hat{K} = \sum_{\{\theta_a\}} \left(\sum_{a=1}^N \frac{\theta_a^2}{2} \right) |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}|. \quad (2.1)$$

avec $\sum_{\{\theta_a\}}$ une somme sur tous les configurations.

Nous avons introduit ces observables en injectant des opérateurs \hat{f} proportionnels à des puissances de la quantité de mouvement d'une particule \hat{p} , respectivement $\propto \hat{p}^0$, $\propto \hat{p}^1$ et $\propto \hat{p}^2$, dans l'opérateur à un corps \hat{F} défini dans l'équation (1.25). Écrit de cette manière, nous avons vu dans l'équation (1.33) que pour $\hat{f} = \hat{p}^q$ avec q entier, l'état de Bethe $|\{\theta_a\}\rangle$ est un état propre de \hat{F} :

$$\hat{F} |\{\theta_a\}\rangle = \sum_{\{\theta_a\}} \left(\sum_{a=1}^N \theta_a^q \right) |\{\theta_a\}\rangle, \quad (2.2)$$

avec des valeurs propres données par des puissances de θ . Cela motive l'étude d'états d'équilibre statistique au-delà de l'équilibre thermique, c'est-à-dire au-delà de l'ensemble de Gibbs.

Pourquoi pas de terme d'interaction pour Q et P ? Les opérateurs Q (nombre total de particules, lié à la symétrie $U(1)$) et P (quantité de mouvement totale, liée à l'invariance par translation) sont des **charges de Noether simples**.

Pour un Hamiltonien comme celui du modèle de Lieb–Liniger :

$$H = \int dx \left[\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x \Psi^\dagger \partial_x \Psi + \frac{g}{2} \Psi^\dagger \Psi^\dagger \Psi \Psi \right],$$

l'interaction locale $g \Psi^\dagger \Psi^\dagger \Psi \Psi$ est **invariante par $U(1)$ et par translation**.

Par conséquent, Q et P commutent avec H sans qu'il soit nécessaire d'ajouter des termes de contact supplémentaires. Autrement dit, les états $|\{k_a\}\rangle$ restent propres pour ces observables, même en présence d'une interaction locale respectant ces symétries.

En revanche, pour les charges plus hautes Q_3, Q_4, \dots (celles qui apparaissent dans le cadre de l'intégrabilité), il est nécessaire d'inclure explicitement des termes d'interaction (contacts) afin d'assurer que

$$[Q_n, H] = 0.$$

C'est là que les corrections apparaissent — mais cela ne concerne pas Q et P .

Cette remarque prépare naturellement la discussion des **Generalized Gibbs Ensembles (GGE)**, où l'ensemble des charges conservées au-delà de Q et P joue un rôle central pour décrire la relaxation des systèmes intégrables.

Contexte et GGE dans les systèmes intégrables. Dans un système quantique **intégrable**, il existe une infinité de charges conservées locales \hat{Q}_i commutant entre elles et avec l'Hamiltonien \hat{H} ([Rigol et al. 2007] [?]). Concrètement, chaque charge se présente sous la forme $\hat{Q}_i = \int dx \hat{q}_i(x)$, où $\hat{q}_i(x)$ est une densité d'observable locale à support borné. L'intégrabilité implique ainsi une caractérisation complète des états propres par un ensemble de paramètres (rapidités $\{\theta_j\}$ dans le modèle de Lieb–Liniger) [?]. En particulier, contrairement aux systèmes génériques, un système intégrable ne thermalise pas au sens canonique classique, car la présence de toutes ces contraintes empêche l'oubli complet des conditions initiales. Les points clés sont alors :

- **Charges conservées** : infinité de locales \hat{Q}_i satisfaisant et $[\hat{Q}_i, \hat{H}] = 0$ et $[\hat{Q}_i, \hat{Q}_j] = 0$.
- **Densités locales** : chaque \hat{Q}_i s'écrit $\hat{Q}_i = \int_{\mathbb{R}} dx \hat{q}_i(x)$ avec $\hat{q}_i(x)$ à support fini.
- **Relaxation non canonique** : après un *quench* (changement brutal de paramètre), le système évolue vers un état stationnaire qui n'est pas décrit par l'ensemble canonique habituel.

Pour décrire cet état, on introduit l'**ensemble de Gibbs généralisé (GGE)**. Rigol et al. ont montré qu'une « extension naturelle de l'ensemble de Gibbs aux systèmes intégrables » prédit correctement les valeurs moyennes des observables après relaxation [?]. Formellement, pour une région finie du système $S \subset \mathbb{R}$, on définit la matrice densité locale :

$$\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)} = \frac{1}{Z^{(S)}} \exp \left(- \sum_i \beta_i \hat{Q}_i^{(S)} \right), \quad \hat{Q}_i^{(S)} = \int_S dx \hat{q}_i(x), \quad (2.3)$$

où $\beta_i \in \mathbb{R}$ sont les multiplicateurs de Lagrange (ou « températures généralisées ») associés aux charges locales conservées $\{\hat{Q}_i\}$. La fonction de partition

$$Z^{(S)} = \text{Tr} \left[\exp \left(- \sum_i \beta_i \hat{Q}_i^{(S)} \right) \right] \quad (2.4)$$

assure la normalisation. L'**état GGE** ainsi défini est le seul permettant de prédire de manière cohérente les observables locales de S à long temps [?]. Autrement dit, l'équilibre local après quench est un état stationnaire faisant perdurer la mémoire de chaque charge conservée, ce qui conduit à un nombre macroscopique de paramètres β_i thermodynamiques (une « température » par charge) [?].

Interprétation des multiplicateurs de Lagrange. Les multiplicateurs de Lagranges β_i apparaissent naturellement lors de l'optimisation sous contraintes, par exemple dans le formalisme de l'**ensemble de Gibbs généralisé (GGE)**, où il imposent la conservation des valeurs moyennes des charges $\langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)} \hat{Q}_i^{(S)}]$.

En résumé, la GGE généralise les ensembles canoniques standard : au lieu de retenir uniquement l'énergie, on impose la conservation de l'ensemble complet $\{\hat{Q}_i\}$. Cette construction rend compte du fait que, dans un système intégrable, les observables locaux convergent vers les valeurs moyennes de $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}$, et non vers celles d'un Gibbs thermique ordinaire [?][?]. On comprend ainsi pourquoi la *thermalisation habituelle* (canonique ou microcanonique) échoue : seul l'ensemble de Gibbs généralisé peut intégrer toutes les contraintes locales.

Rappel sur le modèle de Lieb-Liniger et distribution de rapidités. Comme rappelé au chapitre précédent, le **modèle de Lieb-Liniger** (gaz bosonique 1D à interactions de contact) est un exemple paradigmique d'un système intégrable [?]. Ses états propres sont caractérisés par un ensemble de N rapidités $\{\theta_a\}$, qui jouent le rôle de quasi-momenta (**Bethe ansatz**). Dans ce contexte, l'état macroscopique du gaz après relaxation unitaire est entièrement déterminé par la **distribution des rapidités**. Formellement, on définit $\rho(\theta)$ la distribution intensive des rapidités telle que $\rho(\theta)d\theta$ donne la fraction de particules par unité de longueur ayant une rapidité dans la cellule $[\theta, \theta + d\theta]$.

Cette « distribution de rapidités » est d'autant plus pertinente qu'elle est *accessible expérimentalement*. En effet, lorsque le gaz bosonique 1D est libéré et laissé s'étendre, la distribution asymptotique des vitesses des atomes coïncide avec la distribution initiale des rapidités [?]. Autrement dit, la GGE prédit un profil de vitesses observables en laboratoire. Léa Dubois souligne dans sa thèse que " la distribution de rapidités est la distribution asymptotique des vitesses des atomes après une expansion dans le guide 1D ", et qu'elle peut être extraite par l'hydrodynamique généralisée [?].

Dans la GGE, cette distribution macroscopique $\rho(\theta)$ est fixée par l'ensemble des charges conservées. Par exemple, on ajuste les β_i de sorte que les valeurs moyennes $\langle \hat{Q}_i \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}}$ correspondent aux valeurs initiales. Ce processus détermine donc la fonction $\rho(\theta)$ décrivant l'état d'équilibre local. Les observables locaux du gaz (densité, corrélations, etc.) en découlent alors via les équations de Bethe ansatz.

2.1.2 Moyenne dans l'Équilibre de Gibbs Généralisé

Convention pour les moyennes d'observables. Dans la suite du chapitre, nous noterons la moyenne d'une observable \hat{O} dans un état décrit par une matrice densité (ici noté) $\hat{\rho}$ par :

$$\langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}} \doteq \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{O}], \quad (2.5)$$

En particulier, si la matrice densité est un projecteur, comme $|\{\theta_a\}\rangle\langle\{\theta_a}|$, $\text{Tr}[|\{\theta_a\}\rangle\langle\{\theta_a}| \hat{O}] = \langle\{\theta_a\}| \hat{O} |\{\theta_a\}\rangle$. dans ce cas on notera la moyenne :

$$\langle \hat{O} \rangle_{\{\theta_a\}} = \langle\{\theta_a\}| \hat{O} |\{\theta_a\}\rangle, \quad (2.6)$$

où l'on note simplement l'ensemble des rapidité θ_a pour désigner l'état pur.

Charges conservées locales diagonales dans la base des états propres. Les charges conservées locales $\hat{Q}_i^{(S)}$ est diagonale dans la base des états propres $|\{\theta_a\}\rangle$, avec pour valeurs propres $\langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}}$:

$$\hat{Q}_i^{(S)} |\{\theta_a\}\rangle = \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} |\{\theta_a\}\rangle. \quad (2.7)$$

Probabilité d'un état à rapidités fixées. On peut alors définir la probabilité d'occurrence d'un état $|\{\theta_a\}\rangle$ comme la moyenne de la matrice densité locale $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}$ définie dans (2.3) :

$$\mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(S)} \equiv \langle \hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}}, \quad (2.8)$$

$$= \frac{1}{Z^{(S)}} \exp \left(- \sum_i \beta_i \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} \right). \quad (2.9)$$

Moyenne d'un charges conservées locales et dérivées de $Z^{(S)}$. Les charges locales $\hat{Q}_i^{(S)}$ sont diagonale dans la bases $\{|\{\theta_a\}\rangle\}$ [cf eq (2.7)]. On peut donc écrire la moyenne d'une observable comme une somme pondérée par cette probabilité [cf eqs (2.8)-(2.9)], ou encore comme une dérivée de la fonction de partition définie dans l'équation (2.4) :

$$\langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \sum_{\{\theta_a\}} \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} \mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(S)} \quad (2.10)$$

$$= \frac{1}{Z^{(S)}} \frac{\partial Z^{(S)}}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_{j \neq i}} \quad (2.11)$$

Par le même raisonnement le **moment non centré** s'écrit :

$$\langle \hat{Q}_{i_1}^{(S)} \hat{Q}_{i_2}^{(S)} \cdots \hat{Q}_{i_q}^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = (-1)^q \frac{1}{Z^{(S)}} \frac{\partial}{\partial \beta_{i_1}} \Big|_{\beta_{j \neq i_1}} \frac{\partial}{\partial \beta_{i_2}} \Big|_{\beta_{j \neq i_2}} \cdots \frac{\partial}{\partial \beta_{i_q}} \Big|_{\beta_{j \neq i_q}} Z^{(S)}. \quad (2.12)$$

Moments d'ordre supérieur et fluctuations. On s'avance sur le chapitre (4). Le premier et second moments permettent d'accéder à la variance

$$\left\langle \left(\hat{Q}_i^{(S)} - \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} \right)^2 \right\rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \langle (\hat{Q}_i^{(S)})^2 \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} - \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}}^2 \quad (2.13)$$

de la charge locale $\hat{Q}_i^{(S)}$, en injectant (2.11) et (2.12) et en utilisant $\frac{1}{f} \partial_x^2 f - (\frac{1}{f} \partial_x f) = \partial_x^2 \ln f$:

$$\left\langle \left(\hat{Q}_i^{(S)} - \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} \right)^2 \right\rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \frac{\partial^2 \ln Z^{(S)}}{\partial \beta_i^2} \Big|_{\beta_{j \neq i}}, \quad (2.14)$$

$$= - \frac{\partial \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}}}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_{j \neq i}}. \quad (2.15)$$

Cas particulier de l'équilibre thermique. Dans le cas particulier de l'équilibre thermique standard (*i.e.* Gibbsien), le système est décrit par une seule contrainte d'énergie (ou d'énergie et de particule, dans le cas d'un grand canonique). Les multiplicateurs de Lagrange associés aux charges conservées peuvent alors être identifiés à des grandeurs thermodynamiques classiques.

- Si la seule charge conservée est le nombre de particules $\hat{Q}_0^{(S)} = \hat{Q}$, le multiplicateur associé est $\beta_0 = -\beta\mu$, où μ est le potentiel chimique et $\beta = T^{-1}$ l'inverse de la température (avec $k_B = 1$).
- Si la charge conservée est $\hat{Q}_2^{(S)} - \mu\hat{Q}_0^{(S)} = \hat{K} - \mu\hat{Q}$ (ensemble grand canonique), alors le multiplicateur est simplement β .

Dans le cadre de l'équilibre thermique, les moyennes et les fluctuations thermodynamiques usuelles s'expriment naturellement comme dérivées du logarithme de la fonction de partition $Z^{(S)}$:

$$\langle \hat{Q} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z^{(S)}}{\partial \mu} \Big|_T, \quad \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle \hat{Q} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}}}{\partial \mu} \Big|_T = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln Z^{(S)}}{\partial \mu^2} \Big|_T \quad (2.16)$$

$$\langle \hat{H} - \mu\hat{Q} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = - \frac{\partial \ln Z^{(S)}}{\partial \beta} \Big|_\mu, \quad - \frac{\partial \langle \hat{H} - \mu\hat{Q} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}}}{\partial \beta} \Big|_\mu = \frac{\partial^2 \ln Z^{(S)}}{\partial \beta^2} \Big|_\mu. \quad (2.17)$$

En combinant ces relations, on peut également exprimer l'énergie moyenne et ses fluctuations comme :

$$\langle \hat{H} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \left[\frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \Big|_T - \frac{\partial}{\partial \beta} \Big|_\mu \right] \ln Z^{(S)}, \quad - \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}}}{\partial \beta} \Big|_{-\mu\beta} = \left[\frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \Big|_T - \frac{\partial}{\partial \beta} \Big|_\mu \right]^2 \ln Z^{(S)}. \quad (2.18)$$

2.1.3 Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales

Écriture des observables thermodynamiques comme sommes sur les rapidités. Dans un système à N particules caractérisé par des rapidités $\{\theta_a\}_{a=1}^N$, les charges conservées classiques — telles que le nombre de particules, l'impulsion ou l'énergie — s'écrivent comme des sommes de puissances des rapidités : $\langle \hat{Q} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^0$, $\langle \hat{P} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^1$, et $\langle \hat{K} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^2$. (cf. équations (2.1)) Dans ce paragraphe précédent, nous avons sous-entendu — sans l'expliciter — qu'il est montré que l'ensemble des charges locales conservées forme une famille donnée par :

$$\hat{Q}_i^{(S)} |\{\theta_a\}\rangle \propto \sum_a \theta_a^i |\{\theta_a\}\rangle. \quad (2.19)$$

Ces charges agissent donc de manière diagonale sur les états de Bethe, avec des valeurs propres correspondant aux moments des rapidités.

Charges locales conservées. À toute fonction régulière $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ on associe un opérateur-chARGE locAL :

$$\hat{Q}^{(S)}[f] = L^{(S)} \int d\theta f(\theta) \hat{\rho}^{(S)}(\theta). \quad (2.20)$$

où $L^{(S)}$ est la taille du support S et $\hat{\rho}^{(S)}(\theta)$ agit sur une état de Bethe comme

$$\hat{\rho}^{(S)}(\theta) |\{\theta_a\}\rangle = \frac{1}{L^{(S)}} \sum_{a=1}^N \delta(\theta - \theta_a) |\{\theta_a\}\rangle. \quad (2.21)$$

De sorte que $\hat{Q}^{(S)}[f]$ agit sur une état de Bethe comme

$$\hat{Q}^{(S)}[f] |\{\theta_a\}\rangle = \sum_{a=1}^N f(\theta_a) |\{\theta_a\}\rangle \quad \text{de sorte que} \quad \langle \hat{Q}^{(S)}[f] \rangle_{\{\theta_a\}} = \sum_{a=1}^N f(\theta_a) \quad (2.22)$$

Les choix particuliers $f_0(\theta) = 1$, $f_1(\theta) = \theta$ et $f_2(\theta) = \theta^2/2$ redonnent respectivement l'opérateur nombre $\hat{Q} = \hat{Q}_0^{(S)} = \hat{Q}^{(S)}[1]$, impulsion $\hat{P} = \hat{Q}_1^{(S)} = \hat{Q}^{(S)}[\theta]$ et énergie cinétique $\hat{K} = \hat{Q}_2^{(S)} = \hat{Q}^{(S)}[\theta^2/2]$. Et dans le cadre des (GGE), pour tous les ordres i on note :

$$\hat{Q}_i^{(S)} = \hat{Q}^{(S)}[f_i], \quad \text{de sorte que} \quad \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} = \sum_{a=1}^N f_i(\theta_a) \quad (2.23)$$

avec les densités spectrales $f_i(\theta) \propto \theta^i$.

Ces charges sont extensives : leur densité locale conservée $\hat{q}_{[f]}^{(S)}$ permet d'écrire $\hat{Q}^{(S)}[f] = \int_0^L dx \hat{q}_{[f]}^{(S)}(x)$.

Charges conservées généralisée. Les fonction f_i étant fixées, on note la fonction régulière $w : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ — dorénavant appelée *poids spectral*, ou *potentiel spectral* —

$$w = \sum_i \beta_i f_i, \quad (2.24)$$

on associe un opérateur-charge généralisé $\hat{Q}^{(S)}[w]$:

$$\hat{Q}^{(S)}[w] |\{\theta_a\}\rangle = \sum_{a=1}^N w(\theta_a) |\{\theta_a\}\rangle \quad \text{de sorte que} \quad \langle \hat{Q}^{(S)}[w] \rangle_{\{\theta_a\}} = \sum_i \beta_i \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} \quad (2.25)$$

Expression de la matrice densité généralisée. La matrice densité s'écrit sous la forme : L'ensemble général défini par $\hat{\rho}^{(S)}[w]$

$$\hat{\rho}^{(S)}[w] = \frac{e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]}}{Z^{(S)}[w]}, \quad \text{avec} \quad e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]} = \sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)} |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}|, \quad (2.26)$$

et la fonction de partition (2.4) s'écrit $Z^{(S)}[w] \doteq \text{Tr} \left[e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]} \right]$ vaut :

$$Z^{(S)}[w] = \sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}, \quad (2.27)$$

devient un Generalized Gibbs Ensemble (GGE), $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}$ (de l'équation (2.3)) dès lors que $w(\theta) = \sum_i \beta_i f_i(\theta)$ (de l'équation (2.24)) où f_i sont les densités spectrales associées aux charges locales conservées (de l'équation (2.23)).

Probabilité associée à une configuration de rapidités. Dans ce formalisme, la probabilité d'occuper l'état $|\{\theta\}\rangle$ (2.8) est donc

$$\mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(S)} = Z^{(S)}[w]^{-1} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}. \quad (2.28)$$

On voit ainsi que le poids statistique factorise naturellement sur les pseudo-moments, chaque particule étant pondérée par $w(\theta_a)$.

Moyennes d'observables dans le GGE. Pour tout opérateur local \hat{O} diagonal dans la base de Bethe, la moyenne généralisée vaut

$$\langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}^{(S)}[w]} = \frac{\sum_{\{\theta_a\}} \langle \hat{O} \rangle_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}}{\sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}} \quad (2.29)$$

Ainsi, la connaissance de la fonction $w(\theta)$ suffit à déterminer les propriétés statistiques de toute observable diagonale, y compris les charges conservées elles-mêmes.

Conclusion de la section : vers la thermodynamique de Bethe. Nous avons vu que, dans un système intégrable, la description correcte de l'équilibre stationnaire requiert l'introduction d'une *famille infinie de charges conservées*, comprenant à la fois des charges strictement locales et des charges quasi-locales. Toutes ces charges se réunissent dans l'opérateur fonctionnel $\hat{Q}^{(S)}[w]$, défini par un *poids spectral* $w(\theta)$ (cf. équations (2.22)). Cette construction conduit naturellement à la matrice densité généralisée $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)} \propto e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]}$ (cf. équations (2.26)), et à la moyenne d'un opérateur local \hat{O} donnée par $\langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \text{Tr}(\hat{O} \hat{\rho}^{(S)}[w])$ (cf. équations (2.29)). La connaissance de $w(\theta)$ suffit donc pour prédire les valeurs moyennes de toutes les observables diagonales, y compris celles des charges elles-mêmes ; c'est le cœur du **Ensemble de Gibbs Généralisé (GGE pour Generalized Gibbs Ensemble)**.

Cette base est désormais posée : dans la section suivante, nous passerons au *thermodynamique de Bethe*. Nous verrons comment, dans la limite thermodynamique, les sommes sur les configurations de rapidités se transforment en intégrales sur des densités continues, comment apparaît l'entropie de Yang–Yang, et comment les moyennes de l'ensemble généralisé se réexpriment à l'aide de ces densités macroscopiques. C'est ce formalisme qui permettra d'analyser finement la relaxation post-quench et de relier microscopie intégrable et hydrodynamique généralisée.

2.2 Thermodynamique de Bethe et relaxation

2.2.1 Moyenne dans la limite thermodynamique

Observables locales dans la limite thermodynamique. Dans la suite de ce chapitre, nous omettrons l'exposant (S). Dans la base des états de Bethe $\{|\{\theta_a\}\rangle\}$, l'opérateur $\hat{\rho}(\theta)$ défini en (2.21) est diagonal, et agit comme un projecteur sur les valeurs de rapidité.

Dans la limite thermodynamique, différentes configurations microscopiques $\{\theta_a\}$ peuvent correspondre à la même distribution de rapidité macroscopique $\rho(\theta)$. Autrement dit, plusieurs états $|\{\theta_a\}\rangle$ partagent la même valeur propre $\rho(\theta)$ de l'opérateur $\hat{\rho}(\theta)$. Cela reflète une *dégénérescence macroscopique* induite par le passage à la limite thermodynamique ($N, L \rightarrow \infty$ avec $N/L \rightarrow \text{const}$).

Si l'observable O est suffisamment locale, sa valeur d'attente dans un état propre ne dépend pas des détails microscopiques, mais uniquement de la distribution de rapidité. On écrit alors :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{O} \rangle_{\{\theta_a\}} = \langle \hat{O} \rangle_{[\rho]}, \quad (2.30)$$

où $\lim_{\text{therm.}}$ est la limite thermodynamique ($N, L \rightarrow \infty$ avec $N/L \rightarrow \text{const}$) et où $\langle O \rangle_{[\rho]}$ désigne la valeur d'attente de O dans un état macroscopique caractérisé par la distribution de rapidité $\rho(\theta)$.

Dans un ensemble général (GGE), la valeur moyenne de l'observable (2.29) devient alors :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{O} \rangle_{\hat{\varrho}[w]} = \frac{\sum_{\rho} \langle \hat{O} \rangle_{[\rho]} \Omega[\rho] e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}}{\sum_{\rho} \Omega[\rho] e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}}, \quad (2.31)$$

où \sum_{ρ} est une somme sur tous les distributions de rapidité ρ et où $\Omega[\rho]$ désigne le nombre de micro-états compatibles avec la distribution de rapidité ρ .

Pour établir la fonction $\Omega[\rho]$, rappelons-nous de la transformation des équations de Bethe dans la limite thermodynamique, hors état fondamentale (1.87) et (1.88).

$$\nu = \frac{\rho}{\rho_s}, \quad 2\pi\rho_s = f_{[\nu]}^{\text{dr}}, \quad (2.32)$$

où $f_{[\nu]}^{\text{dr}}$ est définie en (1.86).

Cette formalisation constitue la brique de base de la **hydrodynamique généralisée** et, dans la section suivante, permet de définir rigoureusement l'**entropie de Yang–Yang**, indispensable pour décrire la relaxation hors d'équilibre des systèmes intégrables.

2.2.2 Statistique des macro-états : entropie de Yang–Yang

Motivation. Dans la limite thermodynamique, une observable locale dans un *Generalized Gibbs Ensemble* (GGE) dépend uniquement de deux objets continus : (i) la **distribution de rapidité** $\rho(\theta)$, (ii) le **poids spectral** $w(\theta)$, c'est à dire la "température généralisée" assignée à chaque quasi-particule. Cette reformulation est puissante car elle fait disparaître les détails d'un état propre individuel.

Cependant, pour décrire un *vrai* équilibre à température finie, il faut la distribution à l'équilibre :

$$\rho_{\text{eq}}(\theta) \doteq \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_{\hat{\varrho}[w]}, \quad (2.33)$$

donc le lien entre ρ_{eq} et w . La réponse fut donnée dans les travaux pionniers de YANG & YANG (1969). Leur approche repose sur l'analyse de la **structure statistique des états propres** partageant la même distribution $\rho(\theta)$.

Distribution de rapidité comme macro-état. Chaque distribution de rapidité $\rho(\theta)$ ne correspond pas à un état propre unique, mais à un grand **ensemble de micro-états** : différents choix des ensembles de quasi-moments ($\{\theta_a\}_{a \in \llbracket 1, N \rrbracket}$) $_{N \in \mathbb{N}^*}$ peuvent conduire à la même densité de distribution à l'échelle macroscopique. Ainsi, $\rho(\theta)$ doit être interprétée comme un **macro-état**, qui agrège un très grand nombre d'états propres microscopiques.

La question thermodynamique devient alors : **Combien de micro-états microscopiquement distincts sont compatibles avec un même macro-état $\rho(\theta)$?**

Plus précisément, dans l'expression de moyenne des opérateurs locaux (2.31), apparaît le facteur $\Omega[\rho]$, qui compte ces états propres. La détermination de $\Omega[\rho]$ (ou équivalement de l'entropie de Yang-Yang $S_{YY}[\rho]$ car $\Omega[\rho] = e^{L S_{YY}[\rho]}$ avec L la taille du système) est donc la clé pour relier (i) le poids spectral $w(\theta)$ imposé dans le GGE et (ii) la distribution de rapidité moyenne $\rho_{eq}(\theta)$ observée à l'équilibre.

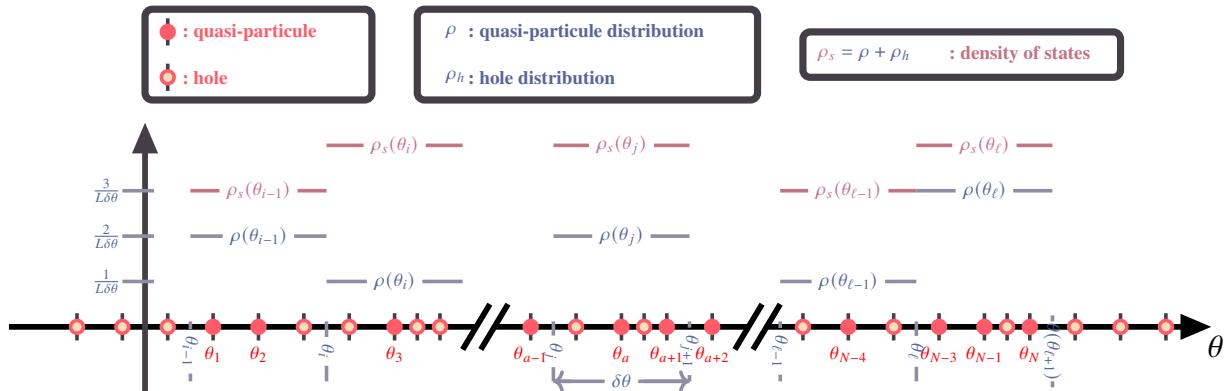
Dénombrement local des configurations microcanoniques. Pour répondre à cette question, on subdivise l'axe des rapidités en petites tranches ou cellules de largeur $\delta\theta$, chacune centrée en un point θ_a . Dans une tranche $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta]$, on suppose que la densité $\rho(\theta)$ est à peu près constante. Le nombre de quasi-particules dans cette tranche est alors approximativement :

$$N_a = L\rho(\theta_a)\delta\theta,$$

et le nombre total d'états disponibles (*i.e.*, le nombre d'états possibles si toutes les positions en moment étaient disponibles) est donné par la densité totale de niveaux

$$M_a = L\rho_s(\theta_a)\delta\theta.$$

Les particules occupent ces niveaux de manière analogue à des fermions libres (principe d'exclusion de Pauli), le nombre de manières différentes de choisir N_a niveaux parmi M_a est donné par :



$$\Omega(\theta_a) \approx \binom{M_a}{N_a} = \frac{[L\rho_s(\theta)\delta\theta]!}{[L\rho(\theta)\delta\theta]![L(\rho_s(\theta) - L\rho(\theta))\delta\theta]!}. \quad (2.34)$$

Estimation asymptotique à l'aide de Stirling. En utilisant la formule de Stirling :

$$n! \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}, \quad (2.35)$$

composé du fonction logarithmique, il vient cette équivalence :

$$\ln n! \underset{n \rightarrow \infty}{\rightarrow} n \ln n - \underbrace{n + \ln \sqrt{2\pi n}}_{o(n \ln n)}, \quad (2.36)$$

$$\underset{n \rightarrow \infty}{\sim} n \ln n \quad (2.37)$$

#conf. est jamais null donc on peut approximer, pour de grandes valeurs de L et de $\delta\theta$:

$$\ln \Omega(\theta) \underset{\substack{\rho \delta\theta \rightarrow \infty \\ \rho(\theta) \leq \rho_s(\theta)}}{\sim} L[\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta)\delta\theta. \quad (2.38)$$

Cette expression donne la contribution par unité de θ à l'**entropie** associée à la cellule autour de θ_a .

Entropie de Yang-Yang : définition . Le nombre total de micro-états compatibles avec une distribution macroscopique donnée $\rho(\theta)$ est obtenu en prenant le produit des nombres de configurations pour chaque cellule de rapidité $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta] : \Omega(\theta_a)$. En prenant le logarithme de ce produit, on accède à l'entropie totale. Pour alléger la notation, cette somme sur les cellules est notée $\sum_a^{\theta-\text{cellules}}$ où chaque a indexe une cellule de rapidité $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta]$. On écrit alors :

$$\ln \Omega[\rho] = \sum_a^{\theta-\text{cellules}} \ln \Omega(\theta_a), \quad (2.39)$$

$$\approx L S_{YY}[\rho], \quad (2.40)$$

où l'on définit l'**entropie de Yang-Yang** par la formule discrétisée :

$$S_{YY}[\rho] \doteq \sum_a^{\theta-\text{cellules}} [\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta_a) \delta\theta. \quad (2.41)$$

Énergie généralisée par unité de longueur : définition. Dans le cadre du Generalized Gibbs Ensemble (GGE), l'**énergie généralisée** associée à une distribution de rapidité $\rho(\theta)$ et à un poids spectral $w(\theta)$ est définie comme la somme des poids assignés à chaque quasi-particule. Dans la limite thermodynamique, en supposant que $w(\theta)$ varie lentement sur chaque tranche $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta]$, cette somme soit l'**énergie généralisée par unité de longueur W** se définit par :

$$LW(\{\theta_a\}) \doteq \sum_{a=1}^N w(\theta_a) \underset{\text{therm.}}{\sim} LW[\rho] \doteq L \sum_a^{\theta-\text{cellules}} w(\theta_a) \rho(\theta_a) \delta\theta. \quad (2.42)$$

Moyenne des Observables locales dans la limite thermodynamique. Dans un ensemble général (GGE), la valeur moyenne de l'observable (2.31) devient :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}[w]} \approx \frac{\sum_{\rho} \langle \hat{O} \rangle_{[\rho]} e^{L(S_{YY}[\rho] - W[\rho])}}{\sum_{\rho} e^{L(S_{YY}[\rho] - W[\rho])}}, \quad (2.43)$$

où la somme $\sum \rho$ porte sur toutes les distributions possibles de rapidité ρ

Passage à la limite continue. En faisant tendre $\delta\theta \rightarrow 0$, les sommes deviennent des intégrales et l'entropie de Yang-Yang ainsi que l'énergie généralisée par unité de longueur prennent la forme :

$$S_{YY}[\rho] = \int d\theta [\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta), \quad (2.44)$$

$$W[\rho] = \int w(\theta) \rho(\theta) d\theta \quad (2.45)$$

Formule fonctionnelle pour les moyennes. Dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$, la somme sur les distributions de rapidité ρ admissibles peut être approximée par une intégrale fonctionnelle sur l'espace des densités de rapidité continues, munie d'une mesure fonctionnelle $\mathcal{D}\rho : \sum_{\rho} \sim \int \mathcal{D}\rho$. Cette correspondance repose sur l'idée que les macro-états admissibles deviennent denses dans l'espace fonctionnel, et que le poids statistique associé à chaque configuration est donné par l'entropie de Yang-Yang. La mesure fonctionnelle $\mathcal{D}\rho$ parcourt l'espace des densités $\rho(\theta)$ continues, *chaque configuration étant pondérée par le facteur exponentiel $e^{L(S_{YY}[\rho] - W[\rho])}$* . Finalement, la moyenne d'une observable dans le GGE (2.43) s'écrit comme une intégrale fonctionnelle/de chemin :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}[w]} = \frac{\int \mathcal{D}\rho e^{L(S_{YY}[\rho] - W[\rho])} \langle \hat{O} \rangle_{[\rho]}}{\int \mathcal{D}\rho e^{L(S_{YY}[\rho] - W[\rho])}}. \quad (2.46)$$

Interprétation thermodynamique.

- $S_{YY}[\rho]$ compte le logarithme du nombre de micro-états réalisant la distribution $\rho(\theta)$: c'est l'**entropie combinatoire**.
- $W[\rho]$ mesure le *coût énergétique généralisé* associé à cette distribution, dicté par le poids spectral $w(\theta)$.

Leur différence

$$(S_{YY} - W)[\rho]$$

joue donc le rôle d'une *fonction thermodynamique effective* (analogue à une entropie libre). L'exposant $e^{L(S_{YY}-W)[\rho]}$ fixe la **probabilité relative** d'un macro-état $\rho(\theta)$ dans le GGE : le terme entropique favorise la multiplicité des états, tandis que le terme énergétique pénalise les configurations coûteuses — d'où la compétition caractéristique de l'équilibre statistique.

2.2.3 Équations intégrales de la TBA

Moyenne des observables dans l'ensemble généralisé de Gibbs.

Approximation au point selle (« méthode de la selle statique ») Dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$, cette intégrale est dominée par la configuration ρ_{eq} qui maximise le poids exponentiel $e^{L(S_{YY}-W)[\rho]}$ dans l'expression (2.46). Il s'agit de la densité de rapidité la plus probable, solution d'un problème de maximisation. On obtient à l'ordre principal

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\rho}[w]} \approx \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho_{eq}]}, \quad (2.47)$$

où ρ_{eq} est la distribution de rapidité à l'équilibre (2.33). Cette approximation correspond à une méthode de *selle statique*, où l'on développe la *fonction thermodynamique effective*, $S_{YY} - W$ au voisinage de la distribution dominante.

Dérivée fonctionnelle comme dérivée directionnelle. Dans le cadre des systèmes continus, les observables physiques dépendent souvent d'un champ $\phi(x)$, et sont représentées par des *fonctionnelles*, notées $F[\phi]$. Afin d'étudier la sensibilité de ces fonctionnelles à une variation infinitésimale du champ, on introduit la notion de **dérivée fonctionnelle**, définie par analogie avec la dérivée directionnelle en espace vectoriel de dimension finie.

Considérons une variation infinitésimale du champ de la forme $\phi(x) \mapsto \phi(x) + \epsilon \lambda(x)$, où $\lambda(x)$ est une fonction test lisse de support compact. La variation induite sur la fonctionnelle est donnée par :

$$\mathcal{D}_{[\lambda]} F[\phi] \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[\phi + \epsilon \lambda] - F[\phi]}{\epsilon} \quad (2.48)$$

La quantité $\mathcal{D}_{[\lambda]} F[\phi]$ est linéaire en $\lambda(x)$, et peut donc s'écrire sous forme d'un produit scalaire dans l'espace fonctionnel :

$$\mathcal{D}_{[\lambda]} F[\phi] = \int dx \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)} \lambda(x) \quad (2.49)$$

La fonction $\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)}$ est appelée **dérivée fonctionnelle** de $F[\phi]$ au point x . Elle joue un rôle analogue au gradient dans les espaces de dimension finie, en ce qu'elle encode la variation de $F[\phi]$ sous une perturbation infinitésimale du champ au point x .

On peut interpréter la dérivée fonctionnelle $\delta F[\phi]/\delta \phi(x)$ comme le résultat de la dérivation directionnelle de $F[\phi]$ dans la direction de la distribution $\delta(x - x_0)$, qui représente une perturbation localisée du champ au point x_0 :

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} F[\phi + \epsilon \delta(x - x_0)] \right|_{\epsilon=0} = \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x_0)} \quad (2.50)$$

Cette construction générale sera utilisée dans la suite pour formuler des conditions d'extremum (par exemple dans des principes variationnels), ou pour dériver les équations de mouvement associées à une action.

Développement fonctionnel au premier ordre. Écrivons $\rho = \rho_{\text{eq}} + \delta\rho$ et développons $(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho]$ à l'ordre linéaire :

$$(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho] \approx (\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{\text{eq}}] + \mathcal{D}_{[\delta\rho]}(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{\text{eq}}] + O(\delta\rho^2),$$

La condition de stationnarité au point selle impose : $\mathcal{D}_{[\delta\rho]}(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{\text{eq}}] = 0$ soit

$$\mathcal{D}_{[\delta\rho]}\mathcal{S}_{YY}[\rho_{\text{eq}}] = \mathcal{D}_{[\delta\rho]}\mathcal{W}[\rho_{\text{eq}}]. \quad (2.51)$$

Équation intégrale de la TBA. La condition de stationnarité au point selle $\rho = \rho_{\text{eq}}$ (2.51) réécrit de la forme de produit scalaire (2.49) implique que pour tous θ :

$$\frac{\delta\mathcal{S}_{YY}[\rho_{\text{eq}}]}{\delta\rho(\theta)} = \frac{\delta\mathcal{W}[\rho_{\text{eq}}]}{\delta\rho(\theta)}, \quad (2.52)$$

et la forme de l'*énergie généralisée* (2.45) et le rappel (2.50) impliquent que le second membre de l'équation précédente (2.52) est

$$\frac{\delta\mathcal{W}[\rho_{\text{eq}}]}{\delta\rho(\theta)} = w(\theta). \quad (2.53)$$

Ainsi (2.52) se réécrit en

$$\frac{\delta\mathcal{S}_{YY}[\rho_{\text{eq}}]}{\delta\rho(\theta)} = w(\theta), \quad (2.54)$$

En utilisant l'expression explicite de l'entropie de Yang–Yang (2.44), on obtient l'identité fonctionnelle

$$w = \ln(\nu_{eq}^{-1} - 1) - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 - \nu_{eq}). \quad (2.55)$$

où $\nu_{eq} = \rho_{eq}/\rho_{s,eq}$ est le **facteur d'occupation** à l'équilibre.

Forme pseudo-énergie. La **pseudo-énergie** ϵ se donne alors par la statistique de type Fermi-Dirac

$$\epsilon = \ln(\nu_{eq}^{-1} - 1), \quad \nu_{eq} = \frac{1}{1 + e^\epsilon}. \quad (2.56)$$

En réinjectant (2.56) dans (2.55) on obtient l'équation intégrale canonique de la thermodynamique de Bethe :

$$\epsilon = w - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 + e^{-\epsilon}). \quad (2.57)$$

Les relations (2.56)–(2.57) déterminent de façon univoque la distribution de rapidité d'équilibre ρ_{eq} à partir du poids spectral w , caractéristique du GGE.

Ainsi, la méthode du point selle relie *explicitement* le *poids spectral*, w (caractéristique du GGE) au *macro-état le plus probable*, ρ_{eq} , et permet d'évaluer les observables par la formule d'ensemble (2.47).

Résolution numérique de l'équation TBA. Prenons un poids spectrale quelconque, par exemple :

$$w(\theta) = \theta^2. \quad (2.58)$$

En injectant w dans l'équation intégrale pour la pseudo-énergie (2.57), on obtient l'équation non linéaire. Cette équation définit un opérateur contractant sur l'espace des fonctions $\epsilon(\theta)$; son Jacobien a une norme strictement inférieure à 1, garantissant la convergence de l'itération de Picard.

Algorithme d'itération. La structure contractante de l'équation garantit l'absence de cycles ou de points fixes multiples, assurant la convergence de l'itération vers l'unique solution admissible. L'équation (??) est non linéaire ; pour la résoudre numériquement, on utilise une méthode itérative de type Picard. On initialise $\epsilon_0 = w$, puis on construit une suite de fonctions ϵ_n définie par

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_0 - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 + e^{-\epsilon_n}), \quad n \geq 0$$

L'itération est poursuivie jusqu'à convergence, que l'on peut tester via le critère numérique $\beta \|\epsilon_{n+1} - \epsilon_n\|_\infty < 10^{-12}$, où $\|\cdot\|_\infty$ désigne la norme L^∞ (ou un maximum discret après discrétilisation).

Facteur d'occupation et densités. Une fois la pseudo-énergie $\epsilon(\theta)$ convergée, le facteur d'occupation à l'équilibre est obtenu en injectant ϵ dans l'équation (2.56), ce qui donne ν_{eq} .

On en déduit ensuite la densité d'état à l'équilibre $\rho_{s,eq}$ via le **dressing** de la fonction constante $f(\theta) = 1$, selon (1.88), rappelée ici pour mémoire : $2\pi\rho_{s,eq} = 1_{[\nu_{eq}]}^{\text{dr}}$.

L'opérateur de dressing (1.86) étant linéaire, il se résout numériquement sous la forme :

$$\left\{ \text{id} - \frac{\Delta}{2\pi} \star (\nu * \cdot) \right\} f_{[\nu]}^{\text{dr}} = f,$$

où $\text{id}: f \mapsto f$ est l'identité fonctionnelle, et $*$ désigne la multiplication. Après discréétisation de la variable θ , cette équation devient un système linéaire de type $Ax = b$, facilement résoluble numériquement.

La distribution de rapidité est alors obtenue par $\rho_{eq} = \nu_{eq} * \rho_{s,eq}$.

Ainsi en fixant le poids spectral $w(\theta)$, l'algorithme fournit la pseudo-énergie ϵ , le facteur d'occupation ν_{eq} et la distribution de rapidité ρ_{eq} .

À l'équilibre thermique. Si on se place à l'équilibre canonique, caractérisé par la température T et le potentiel chimique μ . Dans ce cadre, le poids spectral vaut

$$w(\theta) = \beta [\varepsilon(\theta) - \mu], \quad \beta = \frac{1}{T} \ (k_B = 1), \quad \varepsilon(\theta) = \frac{\theta^2}{2} \ (m = 1). \quad (2.59)$$

Chapitre 3

Dynamique hors-équilibre et hydrodynamique généralisée

Contents

3.1	Formulation hamiltonienne de la GHD	32
3.1.1	Crochet de Poisson fonctionnel	32
3.1.2	Crochet avec l'Hamiltonien	34
3.2	Cas particuliers et interpretations	35
3.2.1	Cas sans interaction	35
3.2.2	la vitesse effectif	35
3.2.3	Modèle de Lieb–Liniger	36
3.2.4	Diagonalisation et invariants de Riemann dans la GHD spatiale étendue	37

Introduction

De l'état stationnaire à la dynamique Après avoir étudié les propriétés stationnaires des gaz de bosons unidimensionnels, nous nous tournons désormais vers leur évolution temporelle. Ce chapitre s'appuie sur une approche hydrodynamique adaptée aux systèmes intégrables : la théorie dite d'Hydrodynamique Généralisée (GHD). Celle-ci est largement documentée dans la littérature (voir par exemple [?????????]) et nous en présentons ici les concepts essentiels.

Principe général d'une approche hydrodynamique De manière générale, l'hydrodynamique vise à décrire la dynamique à grande échelle (*coarse grained dynamics*) d'un système, également appelée « échelle d'Euler ». L'idée consiste à découper l'espace-temps d'un système de taille L en cellules de dimensions $\ell \times \tau$, comme illustré en Fig. ???. La longueur ℓ est choisie de sorte que $L \gg \ell \gg \ell_c$, où ℓ_c désigne une longueur microscopique caractéristique, par exemple la distance inter-particule. On peut alors considérer que la densité est uniforme à l'intérieur de chaque cellule, ce qui correspond à l'Approximation de Densité Locale.

Choix des échelles spatio-temporelles Le temps τ est fixé pour être beaucoup plus grand que le temps caractéristique de relaxation. Ainsi, chaque cellule de l'espace-temps est supposée décrire un état localement relaxé. La notion de relaxation occupe donc une place centrale dans la construction des approches hydrodynamiques.

Particularités pour les systèmes quantiques isolés Dans le cadre de systèmes quantiques isolés, la relaxation n'est pas un concept trivial, qu'il s'agisse de systèmes chaotiques ou intégrables. La section suivante s'attache à définir plus précisément cette notion, avant de présenter les approches hydrodynamiques adaptées à chaque cas. Pour les systèmes intégrables, une attention particulière est portée à la formulation et aux implications de l'Hydrodynamique Généralisée.

Équations hydrodynamiques de type Euler Les équations hydrodynamiques de type Euler sont des équations hyperboliques qui décrivent la dynamique émergente des systèmes à plusieurs corps à grandes échelles d'espace et de temps [?]. Elles rendent compte de la propagation de la relaxation locale, c'est-à-dire la séparation entre une dynamique lente, émergente, et la projection rapide des observables locales sur les quantités conservées. En une dimension d'espace, elles prennent la forme locale de conservation

$$\partial_t q_i + \partial_x j_i = F_i, \quad (3.1)$$

où l'indice i énumère les lois de conservation locales admises, et où F_i représente les contributions provenant de champs de force externes, qui rompent en général la conservation stricte.

Relations constitutives et exemples Les flux j_i et les termes de force F_i dépendent uniquement des densités conservées q_i (équations d'état), et sont déterminés à partir de considérations thermodynamiques, telles que la maximisation de l'entropie. Les équations d'Euler pour un fluide galiléen, ou encore l'hydrodynamique relativiste, constituent des exemples classiques de ce type d'équations.

Cas intégrable et hydrodynamique généralisée En dimension un, de nombreux systèmes à plusieurs corps présentent une propriété d'intégrabilité [?, ?]. Dans ce contexte, il existe une infinité de lois de conservation, et la théorie universelle qui décrit leur hydrodynamique à l'échelle d'Euler est l'Hydrodynamique Généralisée (GHD) [?, ?]. Cette approche englobe les équations connues pour les bâtons durs [?, ?] et les gaz de solitons [?, ?, ?], tout en s'appliquant plus largement, aussi bien à des systèmes classiques que quantiques : particules en interaction, chaînes de spins ou théories des champs quantiques (voir [?] pour des revues).

Paramétrisation spectrale et densité conservée La GHD reformule l'infinité de lois de conservation (éventuellement rompues) en une famille indexée par un paramètre spectral continu θ , plutôt que par un indice discret i . On note $\rho(x, \theta, t)$ la densité conservée en espace réel, espace spectral et temps. Le paramètre spectral énumère les objets asymptotiques issus de la théorie de diffusion correspondante (particules, solitons, etc.), incluant leur quantité de mouvement et leurs éventuels degrés internes. Dans de nombreux cas simples, θ appartient à un sous-ensemble de \mathbb{R} , représentant les moments asymptotiques, et les coordonnées (x, θ) forment un « espace des phases spectral » sur lequel ρ joue le rôle de densité.

Prise en compte des champs de force L'inclusion de champs de force externes couplés aux densités conservées a été introduite dans [?], où il est montré que la GHD s'écrit

$$\partial_t \rho + \partial_x (v^{\text{eff}} \rho) + \partial_\theta (a^{\text{eff}} \rho) = 0. \quad (3.2)$$

Ici, v^{eff} et a^{eff} sont des fonctionnels appropriés de $\rho(x, \cdot, t)$, et le dernier terme représente la contribution des champs de force. D'autres types de forces ont été étudiés [?, ?], mais ne seront pas considérés ici.

3.1 Formulation hamiltonienne de la GHD

3.1.1 Crochet de Poisson fonctionnel

Interprétation et limite non-interactive À ce niveau de généralité, l'équation de l'Hydrodynamique Généralisée (GHD) (3.2) peut être interprétée comme la dynamique hydrodynamique d'un fluide bidimensionnel dont la densité est conservée dans l'espace des phases spectral. Les effets d'interaction se traduisent par un couplage non local dans la direction des rapidités θ , reflétant les processus de diffusion élastique entre quasi-particules possédant des paramètres spectraux distincts.

Dans le cas limite d'un système *sans interactions*, l'espace spectral coïncide avec l'espace des phases classique, et l'équation de GHD se réduit alors à l'équation de Liouville (ou, de façon équivalente, à l'équation de Boltzmann sans terme de collisions) issue de la théorie cinétique élémentaire.

En l'absence de phénomènes dissipatifs, la densité de distribution ρ est conservée le long du flot hamiltonien associé à l'énergie H , ce qui s'exprime par

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = 0, \quad (3.3)$$

où $\{\cdot, \cdot\}$ désigne le crochet de Poisson canonique dans l'espace des phases. Dans cette perspective, l'Hydrodynamique Généralisée apparaît comme une extension naturelle de l'équation de Liouville aux systèmes intégrables, incorporant les effets collectifs induits par les interactions tout en préservant une description exacte à grande échelle.

Structure hamiltonienne et crochet de Poisson fonctionnel Bonnemain *et al.* [?] introduisent un crochet de Poisson fonctionnel agissant sur des fonctionnelles F et G de la distribution de rapidité $\rho(x, \theta)$ en présence d'interactions. Celui-ci s'écrit

$$\{F, G\} = \iint_{\mathbb{R}^2} dx d\theta \frac{\nu}{2\pi} \left[\partial_x \left(\frac{\delta F}{\delta \rho(x, \theta)} \right) \left(\partial_\theta \left(\frac{\delta G}{\delta \rho(x, \theta)} \right) \right)^{\text{dr}}_{[\nu]} - \partial_x \left(\frac{\delta G}{\delta \rho(x, \theta)} \right) \left(\partial_\theta \left(\frac{\delta F}{\delta \rho(x, \theta)} \right) \right)^{\text{dr}}_{[\nu]} \right], \quad (3.4)$$

où ν désigne la fonction d'occupation. Dans ce crochet l'application de l'opérateur de *dressing* $(\cdot)^{\text{dr}}_{[\nu]}$ (introduit dans (1.86)) traduit les interactions entre particules.

Charges globales conservées Les charges locales conservées ont été définies dans les équations (2.20). Dans le même formalisme, on définit les *charges globales conservées* comme des fonctionnelles linéaires agissant sur une fonction réelle et régulière $f(x, \theta)$ définie sur \mathbb{R}^2 , selon

$$\hat{Q}[f] = \int_{\mathbb{R}^2} dx d\theta f(x, \theta) \hat{\rho}(x, \theta), \quad (3.5)$$

où $\hat{\rho}(x, \theta)$ est l'opérateur distribution de rapidité. Cette quantité correspond à la charge totale associée à une observable prenant la valeur $f(x, \theta)$ pour chaque quasi-particule.

La valeur moyenne $\langle \hat{Q}[f] \rangle_{\hat{\rho}[w]}$ a été définie en (2.5). La matrice densité locale $\hat{\rho}^{(S)}[w]$ a été introduite en (2.26). De manière analogue, la *matrice densité globale* $\hat{\rho}[w]$ s'écrit

$$\hat{\rho}[w] = \frac{1}{Z[w]} e^{-\hat{Q}[w]}, \quad Z[w] = \text{Tr} \left[e^{-\hat{Q}[w]} \right], \quad (3.6)$$

où la charge globale $\hat{Q}[w]$ est définie par (3.5), et w désigne le poids spectral.

Crochet de Poisson entre charges globales Dans notre étude de la dynamique, nous n'avons pas besoin de l'information détaillée sur le poids spectral w . Nous noterons donc, dans ce chapitre, et dans la limite thermodynamique, les moyennes des opérateurs en supprimant leur chapeau, *i.e.*

$$\lim_{\text{therm}} \langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}[w]} \equiv O, \quad (3.7)$$

de sorte que, dans cette limite, la moyenne de la charge globale s'écrit

$$Q[f] = \int_{\mathbb{R}^2} dx d\theta f(x, \theta) \rho(x, \theta), \quad (3.8)$$

où f est une fonction régulière sur \mathbb{R}^2 .

Le crochet de Poisson (défini en (3.4)) entre deux charges $Q[f]$ et $Q[g]$ prend la forme

$$\{Q[f], Q[g]\} = \iint_{\mathbb{R}^2} dx d\theta \frac{\nu}{2\pi} \left[\partial_x f (\partial_\theta g)^{\text{dr}}_{[\nu]} - \partial_x g (\partial_\theta f)^{\text{dr}}_{[\nu]} \right]. \quad (3.9)$$

Cette application de *dressing* satisfait la relation de symétrie [?]:

$$\int_{\mathbb{R}^2} dx d\theta \nu f g^{\text{dr}}_{[\nu]} = \int_{\mathbb{R}^2} dx d\theta \nu f^{\text{dr}}_{[\nu]} g. \quad (3.10)$$

Pour appliquer la relation de symétrie (3.10) au crochet (3.9), il est nécessaire de vérifier que les fonctions impliquées satisfont les conditions requises sur leurs types tensoriels.¹

En utilisant cette symétrie ainsi qu'une intégration par parties, le crochet (3.9) se réécrit

$$\{Q[f], Q[g]\} = \iint_{\mathbb{R}^2} dx d\theta f \left[\partial_\theta \left(\frac{\nu}{2\pi} (\partial_x g)^{\text{dr}}_{[\nu]} \right) - \partial_x \left(\frac{\nu}{2\pi} (\partial_\theta g)^{\text{dr}}_{[\nu]} \right) \right]. \quad (3.11)$$

1. La relation de symétrie (3.10) est valable lorsque la somme des types tensoriels de f et g est $(1, 1)$ dans le sens de [?]. Dans ce formalisme, le type (a, b) caractérise la transformation d'un objet vis-à-vis de x (première entrée) et de θ (seconde entrée). Si f est de type (p, q) et g de type (r, s) , alors leur somme est $(p+r, q+s)$. La condition $(1, 1)$ garantit que l'intégrande $\nu f g^{\text{dr}}$ est un scalaire invariant, rendant l'intégrale bien définie. Dans (3.9), $\partial_x f$ est de type $(1, 0)$ et $\partial_\theta g$ de type $(0, 1)$, ce qui satisfait cette condition et permet l'utilisation de (3.10).

3.1.2 Crochet avec l'Hamiltonien

Densité hamiltonienne et grandeurs effectives On note $h(x, \theta)$ la densité associée à la moyenne de l'Hamiltonien, telle que

$$H = Q[h]. \quad (3.12)$$

La fonction d'occupation ν , la vitesse effective v^{eff} et l'accélération effective a^{eff} sont définies par

$$2\pi\rho = 1_{[\nu]}^{\text{dr}} \nu, \quad 2\pi v^{\text{eff}} \rho = (\partial_\theta h)_{[\nu]}^{\text{dr}} \nu, \quad 2\pi a^{\text{eff}} \rho = -(\partial_x h)_{[\nu]}^{\text{dr}} \nu, \quad (3.13)$$

toutes trois étant des fonctions de $\rho(\cdot, \cdot, t)$. Ces quantités interviennent dans les équations de mouvement

$$\dot{x} = v^{\text{eff}}, \quad \dot{\theta} = a^{\text{eff}}, \quad (3.14)$$

montrant que les dérivées ∂_x et ∂_θ présentes dans le crochet de Poisson correspondent respectivement à l'action de l'accélération effective sur θ et de la vitesse effective sur x .

Le crochet (3.11) appliqué à (f, h) devient :

$$\{Q[f], Q[h]\} = - \int_{\mathbb{R}^2} dx d\theta f [\partial_x(\rho v^{\text{eff}}) + \partial_\theta(\rho a^{\text{eff}})]. \quad (3.15)$$

Forme locale : densités conservées . En choisissant $(x, \theta) \mapsto \delta(\cdot - x)f(\theta)$ dans (3.8), on obtient la moyenne de la densité conservée *i.e.*

$$q_{[f]}(x) = Q[(x, \theta) \mapsto \delta(\cdot - x)f(\theta)]. \quad (3.16)$$

Appliquée à (3.15), on obtient

$$\{q_{[f]}(x), Q[h]\} = -\partial_x \left[\int_{\mathbb{R}} d\theta f \rho v^{\text{eff}} \right] + \int_{\mathbb{R}} d\theta f' \rho a^{\text{eff}}. \quad (3.17)$$

En appliquant l'équation de Liouville (3.3), on retrouve la forme de convection (3.1) :

$$\partial_t q_{[f]} + \partial_x j_{[f]} = F_{[f]}, \quad (3.18)$$

où le flux $j_{[f]}$ et le terme de force $F_{[f]}$ sont donnés par

$$j_{[f]} = \int_{\mathbb{R}} d\theta v^{\text{eff}} f \rho, \quad F_{[f]} = \int_{\mathbb{R}} d\theta a^{\text{eff}} f' \rho. \quad (3.19)$$

Forme locale : équation sur ρ De manière analogue, pour la distribution de rapidité à l'équilibre thermodynamique, on note

$$\rho(x, \theta) = Q[\delta(\cdot - x) \delta(\cdot - \theta)]. \quad (3.20)$$

Appliquée à (3.15), on obtient

$$\{\rho(x, \theta), Q[h]\} = -\partial_x(v^{\text{eff}} \rho) - \partial_\theta(a^{\text{eff}} \rho). \quad (3.21)$$

En appliquant l'équation de Liouville (3.3), on retrouve l'équation GHD (3.2) :

$$\partial_t \rho + \partial_x(v^{\text{eff}} \rho) + \partial_\theta(a^{\text{eff}} \rho) = 0. \quad (3.22)$$

Le résultat remarquable (3.22) a été obtenu pour la première fois par Bertini et al. (2016) et Castro-Alvaredo et al. (2016). Cette observation clé a déclenché l'ensemble des développements ultérieurs de la dynamique hydrodynamique généralisée (GHD) dans les systèmes quantiques intégrables. Les travaux de Bertini et al. (2016) s'appuient en partie sur ceux de Bonnes et al. (2014), où la formule donnant la vitesse effective (3.13) était apparue pour la première fois dans le contexte d'un système quantique intégrable.

Les équation (3.3), (3.18) et (3.22) décrivent la dynamique au régime d'Euler. En dehors de cette approximation, il est nécessaire de prendre en compte des contributions supplémentaires liées aux effets diffusifs [?].

3.2 Cas particuliers et interpretations

3.2.1 Cas sans interaction

En l'absence d'interaction, l'opérateur de *dressing* se réduit à l'identité. Dans ce cas, la fonction d'occupation (3.13) devient :

$$\nu = 2\pi\rho, \quad (3.23)$$

et le crochet (3.4) se simplifie en :

$$\{F, G\} = \iint dx d\theta \rho \left[\partial_x \left(\frac{\delta F}{\delta \rho(x, \theta)} \right) \partial_\theta \left(\frac{\delta G}{\delta \rho(x, \theta)} \right) - \partial_x \left(\frac{\delta G}{\delta \rho(x, \theta)} \right) \partial_\theta \left(\frac{\delta F}{\delta \rho(x, \theta)} \right) \right]. \quad (3.24)$$

Les flux et termes de force (3.19) s'expriment alors en remplaçant la vitesse effective v^{eff} et l'accélération effective a^{eff} (de (3.13)) par leurs expressions issues de la dynamique hamiltonienne libre :

$$v^{\text{eff}} \rightarrow \partial_\theta h, \quad a^{\text{eff}} \rightarrow -\partial_x h. \quad (3.25)$$

Dans le cadre de (3.31) $\partial_\theta h = \theta$ et $\partial_x h = V'$. De plus en ne considérant que les premières charges conservées associées à $f(\theta) = 1, \theta$ et $\theta^2/2$ dans (3.18) et (3.19), on retrouve les équations d'Euler classiques :

$$\begin{cases} \partial_t n + \partial_x(nu) = 0, \\ \partial_t(nu) + \partial_x(nu^2 + \mathcal{P}) = -n \partial_x V(x), \\ \partial_t E + \partial_x(u(E + \mathcal{P})) = 0, \end{cases} \quad (3.26)$$

avec la densité de particule $n(x, t) = q_{[1]}$, la vitesse moyenne du fluide $u = \frac{q_{[\theta]}}{n}$, la pression cinétique du fluide $\mathcal{P}(x, t) = \left(q_{[\theta^2]} - \frac{q_{[\theta]}^2}{n}\right)$, l'énergie totale $E = nu^2/2 + nV + ne$ où $e(x, t)$ est l'énergie interne d'une particule.

Remarques sur les charges globales En l'absence de potentiel externe ($V = 0$), le système conserve certaines charges globales. Dans un système classique non intégrable, seules ces quelques charges sont conservées. Par exemple dans un système de Gibbs sont conservé, nombre total de particules, quantité de mouvement totale, énergie cinétique totale soit respectivement $Q[1] = \int dx q[1]$, $Q[\theta] = \int dx q[\theta]$ et $Q\left[\frac{\theta^2}{2}\right] = \int dx q\left[\frac{\theta^2}{2}\right]$.

En revanche, dans un système intégrable, une infinité de charges sont conservées. En particulier, pour tout $\theta \in \mathbb{R}$: $\rho(\theta, t) = Q[\delta(\cdot - \theta)] = \int dx \rho(x, \theta, t)$, et les charges associées à une observable quelconque $f(\theta)$ s'écrivent : $Q[f] = \int d\theta f(\theta) \rho(\theta, t)$.

Cette structure est l'analogue classique de la description en termes de **distribution de rapidité** dans le cadre intégrable. Elle constitue le point de départ naturel pour développer une description hydrodynamique généralisée (GHD) dans le cas intégrable.

3.2.2 la vitesse effectif

En partant de la définition de la vitesse effectif en (3.13) et en utilisant la définition de l'application *dressing* (1.86), il vient que

$$2\pi v^{\text{eff}} \rho = \nu \partial_\theta h + \nu \left(\Delta \star (\rho v^{\text{eff}}) \right), \quad (3.27)$$

où Δ désigne le décalage en diffusion défini dans le modèle LL en Eq.(1.63) et en soustraiant $v^{\text{eff}}(\theta)\nu(\theta)$ ($\Delta \star \rho$) (θ) des deux cotés et on obtiens

$$v^{\text{eff}}(\theta) (2\pi \rho(\theta) - \nu(\theta) (\Delta \star \rho)(\theta)) = \nu(\theta) \left(\partial_\theta h(\theta) + \int d\theta' \Delta(\theta - \theta') \rho(\theta') (v^{\text{eff}}(\theta') - v^{\text{eff}}(\theta)) \right), \quad (3.28)$$

En partant de la l'écriture de la fonction d'occupation en (3.13) et en utilisant la définition de l'application *dressing* (1.86), il vient que

$$2\pi\rho - \nu \Delta \star \rho = \nu, \quad (3.29)$$

On obtient

$$v^{\text{eff}}(\theta) = \partial_\theta h(\theta) + \int d\theta' \Delta(\theta - \theta') \rho(\theta') (v^{\text{eff}}(\theta') - v^{\text{eff}}(\theta)), \quad (3.30)$$

et dans le modèle de Lieb-Liniger $\partial_\theta h(\theta) = \theta$. Sur le plan physique, le premier terme peut être interprété comme un décalage spatial induit par un processus de diffusion à deux corps. Le second terme quantifie le taux de ces processus de diffusion par unité de temps. L'équation ainsi obtenue correspond à l'équation hydrodynamique généralisée (GHD), formulée pour la première fois en 2016[?, ?].

Le résultat remarquable (??) a été obtenu pour la première fois par Bertini *et al.* [?] et Castro-Alvaredo *et al.* [?]. Cette observation a constitué le point de départ des développements ultérieurs de l'hydrodynamique généralisée (GHD) dans les systèmes quantiques intégrables. Les travaux de Bertini *et al.* [?] s'appuient en partie sur ceux de Bonnes *et al.* [?], où la formule de la vitesse effective (??) avait été présentée pour la première fois dans le cadre d'un système quantique intégrable.

Dans le cadre général de l'hydrodynamique généralisée (GHD), l'équation (3.30) s'interprète comme une extension naturelle du résultat classique obtenu pour le gaz de tiges dures. La distinction essentielle réside dans le fait que le décalage de diffusion $\Delta(\theta - \theta_0)$ dépend désormais explicitement de la rapidité relative entre les quasi-particules, alors que, dans le cas du gaz de tiges dures, Δ est une constante égale à l'opposé du diamètre des particules.

Sur le plan cinématique, on peut décrire la situation de la manière suivante : un quasi-particule *traceur* de rapidité θ — c'est-à-dire de moment asymptotique θ en l'absence d'interactions — se déplacerait, dans le vide, à vitesse constante θ . En présence d'une densité finie $\rho(\theta_0)$ de quasi-particules de rapidité θ_0 , cette vitesse est modifiée par les processus de diffusion à deux corps.

Pendant un intervalle de temps infinitésimal $[t, t + \delta t]$, le traceur subit en moyenne

$$\delta t \times |v^{\text{eff}}(\theta) - v^{\text{eff}}(\theta_0)| \rho(\theta_0)$$

collisions avec des quasi-particules de rapidité θ_0 . Chaque interaction provoque un décalage spatial $\Delta(\theta - \theta_0)$ vers l'arrière. L'équation (3.30) formalise précisément cet effet cumulatif, résultant de l'intégration des contributions de toutes les collisions binaires sur l'espace des rapidités.

Cette analyse microscopique s'étend naturellement aux modèles à N corps, où les processus de diffusion se combinent et interagissent de manière non triviale, la fonction $\Delta(\theta - \theta_0)$ encapsulant alors l'intégralité de la structure intégrable du système.

3.2.3 Modèle de Lieb–Liniger

Les informations relatives aux interactions entre particules sont contenues dans la définition du crochet de Poisson (3.4), associée à l'opérateur de *dressing* spécifique au modèle de Lieb–Liniger, défini en (1.86). L'Hamiltonien $H = Q[h]$ (3.12) s'écrit ici :

$$h(x, \theta) = \varepsilon(\theta) + V(x), \quad (3.31)$$

où l'énergie cinétique est $\varepsilon(\theta) = \theta^2/2$ et $V(x)$ représente le potentiel extérieur.

Dans ce modèle, la vitesse effective et l'accélération effective de (3.13) se réécrivent :

$$v^{\text{eff}} = \frac{(\text{id})_{[\nu]}^{\text{dr}}}{1_{[\nu]}^{\text{dr}}}, \quad a^{\text{eff}} = -V'(x). \quad (3.32)$$

Avec l'équation (3.30) la vitesse effectif dans le modèle de LL s'écrit

$$v^{\text{eff}} = \theta + \int_{\mathbb{R}} d\theta' \Delta(\theta - \theta') \rho(\theta') (v^{\text{eff}}(\theta') - v^{\text{eff}}(\theta)) \quad (3.33)$$

Ainsi, les termes de force dans (3.18) et (3.19) prennent la forme :

$$F_{[f]} = -V'(x) \int_{\mathbb{R}} d\theta f'(\theta) \rho(x, \theta). \quad (3.34)$$

L'équation GHD (3.22) devient alors :

$$\partial_t \rho + \partial_x \left(v^{\text{eff}} \rho \right) - V'(x) \partial_\theta \rho = 0. \quad (3.35)$$

3.2.4 Diagonalisation et invariants de Riemann dans la GHD spatiale étendue

En dérivant la définition de l'application *dressing* (1.86), on obtient la relation suivante :

$$\partial_X(f^{\text{dr}}) = (\partial_X f)^{\text{dr}} + \frac{\Delta}{2\pi} \star (f^{\text{dr}} \partial_X v), \quad (3.36)$$

où les variables $X = t, x, \theta$.

En injectant les définitions (3.13) dans l'équation GHD (3.22) puis en appliquant les dérivées à l'application *dressing* conformément à (3.36), on obtient :

$$\left((\partial_t 1)^{\text{dr}} + (\partial_x \partial_\theta h)^{\text{dr}} - (\partial_\theta \partial_x h)^{\text{dr}} \right) v + \left(1 + v \frac{\Delta}{2\pi} \star \right) \left(1^{\text{dr}} \partial_t v + (\partial_\theta h)^{\text{dr}} \partial_x v - (\partial_x h)^{\text{dr}} \partial_\theta v \right) = 0 . \quad (3.37)$$

Or, on a $\partial_t 1 = 0$ et $\partial_x \partial_\theta h = \partial_\theta \partial_x h$. Il en résulte donc l'équation locale de conservation :

$$\partial_t v + v^{\text{eff}} \partial_x v + a^{\text{eff}} \partial_\theta v = 0. \quad (3.38)$$

Dans les systèmes hyperboliques, la *diagonalisation* d'une équation consiste à trouver une transformation des variables qui permet de décomposer le système couplé en un ensemble de modes indépendants, appelés *invariants de Riemann* ou *modes normaux*.

Dans le cadre de la GHD spatiale étendue, l'équation d'évolution de la densité $\rho(x, \theta, t)$ est couplée de manière non triviale en (x, θ) par la vitesse effective v^{eff} et l'accélération effective a^{eff} . La fonction d'occupation $v(x, \theta, t)$ est définie par une transformation non locale dite *dressing* qui incorpore les interactions du système.

Grâce à cela, on peut affirmer que la fonction $v(x, \theta)$ s'interprète comme un continuum d'**invariants de Riemann**, c'est-à-dire des variables normales qui restent constantes le long des caractéristiques du système.

Cette diagonalisation est essentielle pour comprendre la structure hamiltonienne du système et simplifier l'analyse de sa dynamique, notamment dans le cadre spatialement étendu avec un dressing dépendant de la position.

Chapitre 4

Fluctuation de la distribution de rapidité dans des état d'équilibre

Contents

4.1	Fluctuation-réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés	40
4.1.1	Cadre général : chages et dérivées fonctionnelles	40
4.1.2	Cadre d'Équilibre de Gibbs Généralisée	42
4.1.3	Vérification numérique : Echantillonnage du GGE	43
4.2	Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilités	45
4.2.1	Susceptibilités spectrales et structure variationnelle de l'entropie	45
4.2.2	Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique	46
4.2.3	Expression de la Hessienne	47
4.2.4	Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne	48
4.2.5	Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle	49

Introduction

Pourquoi étudier les fluctuations ? L'hypothèse selon laquelle, après relaxation, le système est décrit par un *Generalized Gibbs Ensemble* (GGE) constitue un fondement majeur de notre compréhension des dynamiques hors équilibre dans les systèmes intégrables. Cette hypothèse, bien que robuste théoriquement, appelle à être testée expérimentalement.

Toutefois, la seule connaissance de la distribution de rapidité moyenne ρ_{eq} ne permet pas, à elle seule, de confirmer la validité du GGE. En effet, plusieurs ensembles statistiques peuvent mener à une même valeur moyenne de $\rho(\theta)$. Pour lever cette ambiguïté, il est nécessaire d'étudier les **fluctuations** autour de la distribution typique, notées $\delta\rho$, définies par : $\rho = \rho_{\text{eq}} + \delta\rho$. Cela nécessite de pousser le développement fonctionnel de la *fonction thermodynamique effective* ($\mathcal{S}_{YY} - W$) [ρ] à l'ordre quadratique en $\delta\rho$.

Si la GGE décrit correctement la valeur moyenne de $\rho(\theta)$ après relaxation, il est naturel de se demander si elle capture également les *fluctuations* autour de cette moyenne. Autrement dit, notre objectif est de tester si la GGE constitue le *bon ensemble statistique* pour l'état stationnaire, en analysant non seulement la distribution moyenne des quasi-particules, mais aussi ses fluctuations.

(en traveaux , ... les articles sont a lire plus en détails mais voilas un début) Plusieurs travaux récents ont mis en lumière l'intérêt expérimental de sonder ces fluctuations. De Nardis et al. ont notamment montré que la mesure de la *structure dynamique* de la densité, après un quench, permet de reconstruire entièrement l'état stationnaire, c'est-à-dire la distribution $\rho(\theta)$ du GGE [?]. En particulier, l'analyse du facteur de structure dynamique permet d'extraire les différentes *températures effectives* β_i du GGE, et donc d'accéder à la distribution macroscopique des quasi-particules [?, ?].

Ainsi, en mesurant les corrélations dynamiques du gaz — accessibles expérimentalement via la spectroscopie ou les fluctuations de densité — on peut tester si les fluctuations observées concordent avec celles prédictes par la GGE.

Concrètement, cela consiste à analyser la dispersion des vitesses (ou rapidités) sur plusieurs répétitions expérimentales d'un même quench. Si la GGE décrit correctement l'état stationnaire, la variance et les corrélations des fluctuations de $\rho(\theta)$ devraient être en accord avec les prédictions du formalisme fluctuationnel issu de l'entropie $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}$, cf. (2.3).

Le lien entre fluctuations, fonctions de réponse, et ensembles de Gibbs généralisés (GGE) a suscité un intérêt croissant dans les systèmes quantiques intégrables. Le formalisme des charges quasi-locales et des potentiels conjugués dans le GGE a été précisé dans le modèle de Lieb–Liniger par Pálmai et Konik [?], qui montrent comment structurer la matrice densité en termes de fonctionnelles de rapidité. L'identité fondamentale liant la dérivée fonctionnelle de l'entropie de Yang–Yang au noyau de fluctuations $\chi(\theta, \theta')$ est également dérivée dans ce cadre.

La relation fluctuation–réponse dans les gaz bosoniques unidimensionnels a été étudiée en profondeur par De Nardis et al. [?], qui proposent une méthode pour reconstruire les fluctuations thermiques à partir de fonctions de réponse dynamiques, en comparant mesures expérimentales et théories thermodynamiques. D'autres travaux, comme ceux de Goldstein et Andrei [?], ou de Caux et Konik [?], examinent en détail la relaxation vers un GGE à la suite d'un quench quantique, et en particulier le rôle de la distribution de rapidité dans la description des états stationnaires.

En résumé, l'étude des fluctuations de la distribution de rapidités fournit un test clé de la validité du GGE pour modéliser les résultats expérimentaux dans le modèle de Lieb–Liniger [?].

Ce chapitre est consacré à cette extension, qui permettra :

- d'obtenir les matrices de susceptibilité χ_w et les corrélations gaussiennes du GGE;
- de fournir la base théorique des équations d'hydrodynamique généralisée au second ordre.

Nous commencerons par rappeler le formalisme variationnel, puis nous dériverons l'action quadratique régissant $\delta\rho$.

4.1 Fluctuation-réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés

4.1.1 Cadre général : charges et dérivées fonctionnelles

Formulation fonctionnelle des moments et cumulants des charges. Considérons un système unidimensionnel de taille finie L . Dans le chapitre (2), aux équations (2.20) et (2.21), nous avons introduit l'opérateur de charge généralisée $\hat{Q}[f]$, défini à partir d'une fonction test $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ et de l'opérateur densité de rapidité $\hat{\rho}(\theta)$, selon la relation intégrale :

$$\hat{Q}[f] = L \int d\theta f(\theta) \hat{\rho}(\theta), \quad \text{où } \hat{\rho}(\theta) \text{ agit comme } \hat{\rho}(\theta) |\{\theta_a\}\rangle = \frac{1}{L} \sum \delta(\theta - \theta_a) |\{\theta_a\}\rangle \quad (4.1)$$

États d'équilibre généralisés et poids spectral. Dans un système intégrable, on a vu dans l'équation (2.26) qu'un état d'équilibre est décrit par une matrice densité de la forme :

$$\hat{\rho}^{(S)}[w] \doteq \frac{1}{Z^{(S)}[w]} e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]}, \quad \text{avec } Z^{(S)}[w] \doteq \text{Tr} \left(e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]} \right), \quad (4.2)$$

associée à w , où $w(\theta)$ est **poids spectral** (ou **potentiel spectral**), et $\hat{Q}^{(S)}[w]$ est une **charge généralisée** associé à ce poids.

Dérivée fonctionnelle directionnelle. Comme introduit dans l'équation (2.48), la **dérivée fonctionnelle dans la direction d'une fonction test** f appliquée à un fonctionnel $F[g]$, comme :

$$\mathcal{D}_{[f]} F[g] \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[g + \epsilon f] - F[g]}{\epsilon}. \quad (4.3)$$

À partir de la définition précédente (4.3), il est clair que $\mathcal{D}_{[f]} F[g]$ est, en ce qui concerne sa dépendance en f , un fonctionnel linéaire :

$$\mathcal{D}_{[c_1 f_1 + c_2 f_2]} F[g] = c_1 \mathcal{D}_{[f_1]} F[g] + c_2 \mathcal{D}_{[f_2]} F[g], \quad (4.4)$$

avec c_1 et c_2 des réelles et f_1 et f_2 des fonctions de \mathbb{R} dans \mathbb{R} .

La linéarité de $\hat{\mathbf{Q}}[g]$ implique que sa différentielle fonctionnelle dans la direction f :

$$\mathcal{D}_{[f]} \hat{\mathbf{Q}}[g] = \hat{\mathbf{Q}}[f]. \quad (4.5)$$

Cette notation permet une différentiation fonctionnelle claire, notamment dans les calculs de moments et cumulants.

Dans la suite, pour alléger les notations, nous noterons $\langle \cdot \rangle_w$ au lieu de $\langle \cdot \rangle_{\hat{\rho}^{(S)}[w]}$.

Moments non centrés. À l'aide de cette notation, on a définie les **moments non centrés** d'ordre q des charges sous la forme :

$$\langle \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_1] \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_2] \cdots \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_q] \rangle_w = (-1)^q \frac{1}{Z^{(S)}[w]} \mathcal{D}_{[f_1]} \mathcal{D}_{[f_2]} \cdots \mathcal{D}_{[f_q]} Z^{(S)}[w], \quad (4.6)$$

De même, on a définie les moments d'ordre q de la distribution de rapidité à l'aide des dérivées ponctuelles :

$$\langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \hat{\rho}^{(S)}(\theta_2) \cdots \hat{\rho}^{(S)}(\theta_q) \rangle_w = (-1)^q \frac{1}{L^q} \frac{1}{Z^{(S)}[w]} \frac{\delta}{\delta w(\theta_1)} \frac{\delta}{\delta w(\theta_2)} \cdots \frac{\delta}{\delta w(\theta_q)} Z^{(S)}[w] \quad (4.7)$$

Cumulants et fluctuations. On définit les **fluctuations des charges et des distributions de rapidité** par :

$$\delta \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f] \doteq \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f] - \langle \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f] \rangle_w, \quad \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta) \doteq \hat{\rho}^{(S)}(\theta) - \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta) \rangle_w. \quad (4.8)$$

Les **cumulants** d'ordre q des **charges** s'obtiennent comme dérivées fonctionnelles du logarithme de la fonction de partition :

$$\langle \delta \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_1] \delta \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_2] \cdots \delta \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_q] \rangle_w = (-1)^q \mathcal{D}_{[f_1]} \mathcal{D}_{[f_2]} \cdots \mathcal{D}_{[f_q]} \ln(Z^{(S)}[w]), \quad (4.9)$$

et la cumulant d'ordre q des **distribution de rapidité** comme dérivées ponctuelles du logarithme de la fonction de partition

$$\langle \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_2) \cdots \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_q) \rangle_w = (-1)^q \frac{1}{L^q} \frac{\delta}{\delta w(\theta_1)} \frac{\delta}{\delta w(\theta_2)} \cdots \frac{\delta}{\delta w(\theta_q)} \ln(Z^{(S)}[w]) \quad (4.10)$$

Moyennes et corrélations d'ordre faible. À l'ordre 1, les **moments non centrés** sont simplement les **valeurs moyennes**. Les moyennes des charges (4.6) et des distributions de rapidité (4.7) peuvent être exprimées comme dérivées fonctionnelles respectivement ponctuelles du logarithme de la fonction de partition :

$$\langle \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_1] \rangle_w = -\mathcal{D}_{[f_1]} \ln(Z^{(S)}[w]), \quad \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \rangle_w = -\frac{1}{L} \frac{\delta \ln(Z^{(S)}[w])}{\delta w(\theta_1)}. \quad (4.11)$$

Pour un état donné, la fonction $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$ n'est rien d'autre que la distribution de rapidités par unité de longueur.

À l'ordre 2, les **cumulants** correspondent aux **corrélations**. On constate, à partir des expressions ci-dessus (4.11), que les fluctuations des charges (4.9) et des distributions de rapidité (4.10) peuvent être obtenues comme dérivées fonctionnelles respectivement ponctuelles des moyennes :

$$\langle \delta \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_1] \delta \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_2] \rangle_w = -\mathcal{D}_{[f_2]} \langle \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_1] \rangle_w, \quad \langle \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_2) \rangle_w = -\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \rangle_w}{\delta w(\theta_2)} \quad (4.12)$$

Cette identité relie la fonction de corrélation des fluctuations aux dérivées fonctionnelles de la valeur moyenne : elle exprime une *susceptibilité fonctionnelle*, au sens où elle mesure la réponse linéaire d'une observable à une perturbation infinitésimale du poids $w(\theta)$. La susceptibilité s'identifie ainsi à la covariance entre charges généralisées, illustrant le principe de *fluctuation-réponse*.

Par souci de lisibilité, nous omettrons les indices (S) : le caractère local des observables étant désormais implicite.

Notation susceptibilité et fluctuations. Considérons deux fonctions f_1 et f_2 . On définit la **susceptibilité** (ou **fonction de réponse croisée**), $\chi_w[f_1, f_2]$ par

$$\chi_w[f_1, f_2] \doteq -\mathcal{D}_{[f_2]} \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \rangle_w. \quad (4.13)$$

Cette fonction de réponse est reliée aux fluctuations dans le GGE. Plus précisément, $\chi_w[f_1, f_2]$ vérifie

$$\chi_w[f_1, f_2] = C_w[f_1, f_2], \quad (4.14)$$

où les **corrélations à deux points** $C_w(f_1, f_2)$, défini par

$$C_w[f_1, f_2] \doteq \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \hat{\mathbf{Q}}[f_2] \rangle_w - \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \rangle_w \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_2] \rangle_w, \quad (4.15)$$

quantifie les fluctuations dans le GGE.

L'équation précédente, qui relie la réponse linéaire aux fluctuations, est une relation très importante qui sera utilisée pour des tests numériques dans cette section.

Lien entre distributions de rapidités et observables locales. À partir de l'équation (4.1), on remarque que

$$\hat{\mathbf{Q}}[\delta(\cdot - \theta)/L] = \hat{\rho}(\theta). \quad (4.16)$$

Les moments non centrés des charges (4.6) ainsi que leurs cumulants (4.9) deviennent alors ceux des distributions de rapidités (respectivement (4.7) et (4.10)), en prenant les fonctions $f_i(\theta) = \delta(\cdot - \theta_i)/L$.

Cela est en accord avec le fait que les dérivées fonctionnelles deviennent :

$$\mathcal{D}_{[\delta(\cdot - \theta)]} F[g] \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[g + \epsilon \delta(\cdot - \theta)] - F[g]}{\epsilon}, \quad (4.17)$$

$$= \frac{\partial F}{\partial g(\theta)}. \quad (4.18)$$

L'équation (4.13) s'écrit dans ce cas, en utilisant la notation de l'équation (4.17) et la propriété (4.4) :

$$\chi_w(\theta, \theta') \doteq -\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\delta \omega(\theta')} \quad (4.19)$$

où l'on a utilisé la notation $\chi_w(\theta, \theta') = \chi_w \left[\frac{\delta(\cdot - \theta)}{L}, \frac{\delta(\cdot - \theta')}{L} \right]$.

L'équation (4.15), quant à elle, s'écrit :

$$C_w(\theta, \theta') \doteq \langle \hat{\rho}(\theta) \hat{\rho}(\theta') \rangle_w - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w \langle \hat{\rho}(\theta') \rangle_w \quad (4.20)$$

où l'on utilise la notation $C_w(\theta, \theta') = C_w \left(\frac{\delta(\cdot - \theta)}{L}, \frac{\delta(\cdot - \theta')}{L} \right)$.

La relation (4.14), qui relie la susceptibilité aux corrélations, implique alors :

$$-\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\delta \omega(\theta')} = \langle \hat{\rho}(\theta) \hat{\rho}(\theta') \rangle_w - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w \langle \hat{\rho}(\theta') \rangle_w \quad (4.21)$$

4.1.2 Cadre d'Équilibre de Gibbs Généralisée

Paramétrisation du potentiel spectral et réécriture des moments des charges.

Lien entre dérivées fonctionnelles, paramétrisation spectrale et moments des charges. Dans le cadre de l'Équilibre de Gibbs Généralisées (GGE), le *poids spectral* s'écrit

$$w(\theta) = \sum_i \beta_i f_i(\theta), \quad (4.22)$$

où les fonction régulières f_i sont des densités spectrales associées au charges $\hat{\mathbf{Q}}_i$, de sorte que les charges soient bien $\hat{\mathbf{Q}}_i^{(S)} = \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_i]$, alors on peut considérer la variation fonctionnelle d'une fonctionnelle $F[w]$

par rapport à la direction f_i , ce qui revient à effectuer une perturbation $w \rightarrow w + \epsilon f_i$, autrement dit $\beta_i \rightarrow \beta_i + \epsilon$. La dérivée fonctionnelle de $F[w]$ dans la direction f_i s'écrit alors :

$$\mathcal{D}_{[f_i]} F[w] \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[\sum_j (\beta_j + \delta_{ij}\epsilon) f_j] - F[\sum_j \beta_j f_j]}{\epsilon}, \quad (4.23)$$

$$= \left. \frac{\partial F}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_{j \neq i}}. \quad (4.24)$$

Cette expression est valable tant que les fonctions f_j sont considérées comme fixées. En revanche, si les f_j peuvent varier, alors la différentiation par rapport aux β_j ne correspond plus à une dérivée fonctionnelle au sens strict. En injectant cette expression dans l'expression du *moment non-centré* (4.6) nous l'obtenons l'expression (2.12).

Avec la condition (4.22) et la définition (4.23), nous pouvons donc réécrire les moments non centrés (des charges) (4.6) et les cumulants (des charges) (4.9), et donc les moyennes (4.11) et corrélations (4.12), en remplaçant les dérivées fonctionnelles $\mathcal{D}_{[f_i]}$ par $\left. \frac{\partial}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_{j \neq i}}$.

De plus en remarquant que $\left. \frac{\partial w(\theta)}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_{j \neq i}} = f_i(\theta)$, alors la dérivé selon β_i s'écrit

$$\begin{aligned} - \left. \frac{\partial}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_{j \neq i}} &= - \int d\theta \left. \frac{\partial w(\theta)}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_{j \neq i}} \frac{\delta}{\delta w(\theta)}, \\ &= L \int d\theta f_i(\theta) \left(- \frac{1}{L} \frac{\delta}{\delta w(\theta)} \right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Nous pouvons donc, encore une fois, en utilisant (4.25), réécrire les moments non centrés des charges (4.6) en fonction des moments non centrés des distributions de rapidités (4.7) :

$$\langle \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_1] \cdots \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_q] \rangle_w = L^q \int d\theta_1 f_1(\theta_1) \cdots \int d\theta_q f_q(\theta_q) \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \cdots \hat{\rho}^{(S)}(\theta_q) \rangle_w \quad (4.26)$$

De même, nous pouvons réécrire les cumulants des charges (4.9) à partir des cumulants des distributions de rapidités (4.10) :

$$\langle \delta \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_1] \cdots \delta \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_q] \rangle_w = L^q \int d\theta_1 f_1(\theta_1) \cdots \int d\theta_q f_q(\theta_q) \langle \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \cdots \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_q) \rangle_w \quad (4.27)$$

Ces relations sont naturelles. En particulier, on retiendra que les moyennes et les corrélations des charges s'écrivent :

$$\langle \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f] \rangle_w = L \int d\theta f(\theta) \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta) \rangle_w, \quad (4.28)$$

$$\langle \delta \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_1] \delta \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_2] \rangle_w = L^2 \iint d\theta_1 d\theta_2 f_1(\theta_1) \langle \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_2) \rangle_w f_2(\theta_2). \quad (4.29)$$

4.1.3 Vérification numérique : Echantillonnage du GGE

On souhaite tester notre capacité à échantillonner le GGE avec Metropolis. Pour cela on va utiliser le principe de *fluctuation-réponse* défini ci dessus dans l'équation (4.12). On va dans un premier temps calculer numériquement les corrélations des distributions de rapidité en utilisant un algorithme de Monte Carlo basé sur les états propres du modèle de Lieb-Liniger et dans un deuxième temps en utilisant la susceptibilité.

Méthode numérique de Monte Carlo :

Paramètres fixés. On fixe un poids spectral, par exemple quadratique

$$w(\theta) = \frac{1}{2}\theta^2, \quad (4.30)$$

et on fixe les paramètres physiques du système : $N = 7$ particules, $L = 10$ la taille du système, et $g = 1$ l'intensité des interactions.

Équations de Bethe. Les états propres du gaz sont obtenus par la résolution des équations de Bethe (1.72) que l'on rappelle :

$$L\theta_j + \sum_{k \neq j} 2 \arctan \left(\frac{\theta_j - \theta_k}{g} \right) = 2\pi I_j, \quad (4.31)$$

où $\{I_j\}$ sont des entiers (ou demi-entiers) représentant une configuration de type Bethe.

Initialisation : état fondamental.

1. On commence par proposer une configuration d'entier de Bethe $\{I_j\}$ correspondant à l'état fondamental. Celle-ci est donnée par l'équation (1.73) que l'on rappelle ,

$$I_j = j - \frac{N+1}{2}, \quad j \in \llbracket 1, N \rrbracket \quad (4.32)$$

2. On résout ensuite les équations de Bethe associées afin d'obtenir l'ensemble des rapidités $\{\theta_j\}$.
3. Ces rapidités définissent une distribution empirique de rapidité, notée $\rho(\theta)$, que l'on enregistre sous la forme :

$$\rho(\theta) = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \delta(\theta - \theta_j) \quad (4.33)$$

Pour rendre cette distribution exploitable numériquement, on la binne sur une grille discrète $\{\theta_i\}$.

À chaque étape du Monte Carlo :

1. Une nouvelle configuration $\{I'_j\}$ est proposée en faisant varier chaque entier I_j aléatoirement de ± 1 , c'est-à-dire en posant $I'_j = I_j \pm 1$, le signe étant choisi au hasard.
2. À partir de cette configuration $\{I'_j\}$, on résout les équations de Bethe pour obtenir un nouvel ensemble de rapidités $\{\theta'_j\}$.
3. La nouvelle configuration est ensuite soumise au critère de Metropolis afin de décider si elle est acceptée ou rejetée. L'acceptation se fait avec une probabilité $\min \left(1, e^{-\left(\sum_j w(\theta_j) - \sum_j w(\theta'_j) \right)} \right)$, en se basant sur l'énergie associée à la fonction w .
 - Si la configuration est acceptée, on met à jour les ensembles : $\{I_j\} \leftarrow \{I'_j\}$ et $\{\theta_j\} \leftarrow \{\theta'_j\}$.
4. Enfin, on enregistre la distribution de rapidité empirique associée à la configuration $\{\theta_j\}$, en la discrétilisant sur une grille fixée $\{\theta_i\}$.

Cela permet de construire numériquement :

- la moyenne du profil de distribution de rapidité empirique , correspondant à $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$, obtenue par une moyenne sur les configurations générées par la méthode de Monte Carlo,
- la covariance spectrale empirique correspondant à $\langle \delta \hat{\rho}(\theta) \delta \hat{\rho}(\theta') \rangle_w$.

Calcul numérique de la susceptibilité par dérivée fonctionnelle. Pour évaluer la susceptibilité linéaire, définie comme la dérivée de $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$ par rapport à une perturbation infinitésimale du poids spectral $w(\theta')$, on adopte une approche numérique fondée sur les différences finies. La procédure est la suivante :

1. On modifie localement le potentiel $w(\theta)$ en y ajoutant une perturbation delta centrée en θ' , selon :

$$w(\theta) \rightarrow w(\theta) + \varepsilon \delta_{\theta'}(\theta), \quad (4.34)$$

où ε est un petit paramètre de perturbation.

2. On relance ensuite le Monte Carlo avec ce potentiel perturbé, ce qui permet d'estimer la nouvelle moyenne $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_{w+\varepsilon \delta_{\theta'}}$.
3. Enfin, on évalue la dérivée fonctionnelle par la formule de différence finie suivante :

$$-\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\delta w(\theta')} \approx -\frac{1}{L} \cdot \frac{\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_{w+\varepsilon \delta_{\theta'}} - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\varepsilon}. \quad (4.35)$$

Cette méthode permet ainsi d'approcher numériquement la matrice de réponse linéaire entre les coordonnées spectrales θ et θ' , que l'on peut comparer à la matrice de corrélation obtenue précédemment.

Difficultés numériques : Les algorithmes de Monte Carlo produisent des estimations bruitées des grandeurs physiques, notamment de la densité de rapidité moyenne $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$. Cette quantité présente une incertitude statistique (écart-type) entre deux réalisations indépendantes de la procédure de Monte Carlo. Pour réduire ce bruit, il est nécessaire d'augmenter le nombre d'échantillons de I_j , ce qui alourdit le coût numérique du calcul.

Le calcul de la susceptibilité nécessite d'estimer la dérivée fonctionnelle de la densité de rapidité par rapport au poids w .

Cependant, pour que cette approximation soit valable, ε doit être suffisamment petit. Or, si ε est trop petit, la différence $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_{w+\varepsilon\delta_\theta} - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$ devient du même ordre que leur bruit statistique, et la dérivée est alors noyée dans le bruit.

Pour limiter l'erreur statistique, on peut dans un premier temps ajuster à la fois le nombre d'échantillons des configurations $\{I_j\}$ et la valeur de ε , de sorte que l'écart-type de $\langle \rho(\theta) \rangle_w$ soit au moins dix fois plus petit que la variation $\langle \rho(\theta) \rangle_{w+\varepsilon\delta_\theta} - \langle \rho(\theta) \rangle_w$.

Il convient donc de choisir ε suffisamment petit pour garantir la validité de l'approximation linéaire, tout en s'assurant que la variation mesurée dépasse significativement le bruit statistique. En pratique, cela requiert une calibration fine de ε ainsi qu'un nombre suffisamment grand d'échantillons pour garantir une estimation fiable de la susceptibilité.

Comparaison numérique. Les deux matrices sont ensuite représentées sous forme d'images couleur pour visualiser leur structure et mettre en évidence leur éventuelle coïncidence.

FIGURE 4.1 – Comparaison des matrices : à gauche, susceptibilité $\chi_w(\theta, \theta')$ obtenue par dérivée fonctionnelle ; au centre, corrélation spectrale $C_w(\theta, \theta')$ estimée par fluctuations ; à droite, leur différence.

Discussion. (à revoir le m'avance un peu) Les figures montrent une excellente concordance entre les deux matrices, confirmant numériquement le principe de fluctuation-réponse dans le cadre du GGE. La différence résiduelle visible sur la troisième image est due aux erreurs statistiques liées à la méthode Monte Carlo et à l'approximation par différences finies dans le calcul de la dérivée fonctionnelle.

4.2 Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilités

4.2.1 Susceptibilités spectrales et structure variationnelle de l'entropie

Rappels. Dans l'approximation thermodynamique, le système est décrit en termes de grandeurs macroscopiques, notamment par la distribution de rapidité $\rho(\theta)$. Dans l'équation (2.46), nous avons vu que, dans la limite thermodynamique, la moyenne d'un observable s'écrit :

$$\langle \hat{O} \rangle_w = \frac{\int \mathcal{D}\rho e^{L(S_{YY}[\rho] - W[\rho])} \langle \hat{O} \rangle_{[\rho]}}{\int \mathcal{D}\rho e^{L(S_{YY}[\rho] - W[\rho])}}. \quad (4.36)$$

où S_{YY} est l'entropie de Yang–Yang et W l'énergie généralisée, introduites respectivement dans (2.44) et (2.45). La quantité $\langle \hat{O} \rangle_{[\rho]}$ désigne la valeur propre de l'observable associée aux états caractérisés par la distribution de rapidité ρ .

À l'équilibre thermodynamique, la distribution $\rho_{eq}(\theta)$ satisfait l'équation (2.33), et coïncide avec la moyenne de l'opérateur de densité de rapidité :

$$\rho_{eq} = \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w \quad (4.37)$$

représentant ainsi la densité continue de quasi-particules dans l'état stationnaire d'équilibre.

Dans le cadre du GGE continu, l'état macroscopique est entièrement déterminé par une densité spectrale $\rho(\theta)$ qui maximise l'entropie de Yang–Yang, $S_{YY}[\rho]$, sous la contrainte de conservation des

charges généralisées. Le poids spectral $w(\theta)$ est alors fixé. Comme nous l'avons vu (au chapitre (2)), la condition d'équilibre (2.54) peut s'écrire sous la forme variationnelle :

$$\frac{\delta \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta)} \Big|_{\rho=\rho_{eq}} = w(\theta). \quad (4.38)$$

Dérivée fonctionnelle. On peut considérer l'équation d'équilibre comme une relation implicite définissant le poids spectral w comme une fonctionnelle de la distribution de rapidité ρ . La dérivée fonctionnelle de cette relation s'écrit :

$$\frac{\delta w(\theta)}{\delta \rho(\theta')} \Big|_{\rho=\rho_{eq}} = \frac{\delta^2 \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \Big|_{\rho=\rho_{eq}}, \quad (4.39)$$

où le membre de droite représente l'opérateur hessien (ou courbure fonctionnelle) de l'entropie de Yang–Yang, évalué à l'équilibre. Cet opérateur est négatif défini, conformément à l'interprétation de \mathcal{S}_{YY} comme une entropie à maximiser.

Inversion. On en déduit que la réponse de ρ à une variation infinitésimale du poids spectral w est donnée par l'inverse fonctionnel de (4.39) :

$$-\frac{1}{L} \frac{\delta \rho(\theta)}{\delta w(\theta')} \Big|_{\rho=\rho_{eq}} = -\left(L \frac{\delta^2 \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \Big|_{\rho=\rho_{eq}} \right)^{-1}. \quad (4.40)$$

La susceptibilité fonctionnelle $\chi_w(\theta, \theta')$, définie dans (4.19), coïncide avec cette expression.

4.2.2 Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique

Une autre approche pour accéder aux fluctuations de la distribution de rapidité $\rho = \rho_{eq} + \delta\rho$ en étudiant

$$(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{eq} + \delta\rho] = \exp\{\mathcal{D}_{[\delta\rho]}\} ((\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{eq}]).$$

Dans un état de GGE consiste à exploiter le développement quadratique de l'action effective autour de l'équilibre thermodynamique. Cette méthode, dite *gaussienne*, repose sur le fait que, dans la limite thermodynamique, l'intégrale fonctionnelle définissant le GGE est dominée par les configurations proches du point-selle ρ_{eq} .

On peut alors développer l'action $\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}$ à second ordre autour de ce point d'équilibre :

$$(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho] \approx (\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{eq}] + \underbrace{\int d\theta \frac{\delta(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho]}{\delta \rho(\theta)} \Big|_{\rho=\rho_{eq}} \delta\rho(\theta) - \frac{1}{2} \int d\theta d\theta' \delta\rho(\theta) \mathcal{H}(\theta, \theta') \delta\rho(\theta')}_{= 0 \text{ par stationnarité}} + O(\delta\rho^3) \quad (4.41)$$

où $\mathcal{H}(\theta, \theta') = -\frac{\delta^2(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \Big|_{\rho=\rho_{eq}}$ est la *hessienne* de l'action effective.

Sous l'approximation gaussienne autour de l'équilibre, la covariance des fluctuations est donnée par :

$$\begin{aligned} \langle \delta\rho(\theta) \delta\rho(\theta') \rangle_w &= \frac{\int \mathcal{D}\delta\rho \delta\rho(\theta) \delta\rho(\theta') \exp\left[-\frac{L}{2} \iint d\theta_1 d\theta_2 \delta\rho(\theta_1) \mathcal{H}(\theta_1, \theta_2) \delta\rho(\theta_2)\right]}{\int \mathcal{D}\delta\rho \exp\left[-\frac{L}{2} \iint d\theta_1 d\theta_2 \delta\rho(\theta_1) \mathcal{H}(\theta_1, \theta_2) \delta\rho(\theta_2)\right]}, \\ &= (L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta'), . \end{aligned} \quad (4.42)$$

Les corrélations $C_w(\theta, \theta')$ définie en (4.20) coïncide avec cette expression .

Ces relations posent les bases d'une description quantifiée des fluctuations de densité de rapidité, essentielles pour tester expérimentalement la validité du GGE, comprendre les corrélations à longue distance, et accéder aux propriétés dynamiques fines des systèmes intégrables en une dimension.

Ce développement quadratique justifie le caractère gaussien des fluctuations dans le régime thermodynamique, et sera à la base des extensions hydrodynamiques de type MFT (Macroscopic Fluctuation Theory).

Structure de \mathcal{H} . L'opérateur hessien de l'action effective se décompose naturellement comme la différence entre deux contributions fonctionnelles :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(\mathcal{W})} - \mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{YY})}, \quad (4.43)$$

où

$$\mathcal{H}^{(\mathcal{W})}(\theta, \theta') \doteq \frac{\delta^2 \mathcal{W}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \Big|_{\rho=\rho_{eq}}, \quad \text{et} \quad \mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{YY})}(\theta, \theta') \doteq \frac{\delta^2 \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \Big|_{\rho=\rho_{eq}}. \quad (4.44)$$

L'opérateur inverse \mathcal{H}^{-1} est défini par la relation fonctionnelle :

$$(\mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{H})(\theta, \theta') = (\mathcal{H} \cdot \mathcal{H}^{-1})(\theta, \theta') = \int d\theta'' \mathcal{H}(\theta, \theta'') \mathcal{H}^{-1}(\theta'', \theta') = \delta(\theta - \theta'), \quad (4.45)$$

où $\delta(\theta - \theta')$ désigne la distribution de Dirac, et non une variation.

On remarque tout d'abord que $\mathcal{H}^{(\mathcal{W})} = 0$, car l'énergie généralisée par unité de longueur s'écrit simplement comme un couplage linéaire en ρ :

$$\mathcal{W}[\rho] = \int d\theta w(\theta) \rho(\theta),$$

avec un poids spectral $w(\theta)$ fixé (2.45). La seconde dérivée fonctionnelle de \mathcal{W} s'annule donc identiquement.

En revanche, la courbure fonctionnelle provient entièrement de l'entropie de Yang–Yang, dont l'expression (2.44) est donnée par :

$$\mathcal{S}_{YY}[\rho] = \int d\theta [\rho_s(\theta) \ln \rho_s(\theta) - \rho(\theta) \ln \rho(\theta) - (\rho_s(\theta) - \rho(\theta)) \ln(\rho_s(\theta) - \rho(\theta))], \quad (4.46)$$

où $\rho_s(\theta)$ désigne la *densité d'états* liée à ρ par les équations de Bethe (1.85) :

$$2\pi\rho_s = 1 + \Delta \star \rho. \quad (4.47)$$

Ainsi, l'opérateur de fluctuation \mathcal{H} coïncide avec la hessienne négative de l'entropie \mathcal{S}_{YY} , et détermine complètement la covariance spectrale à l'équilibre.

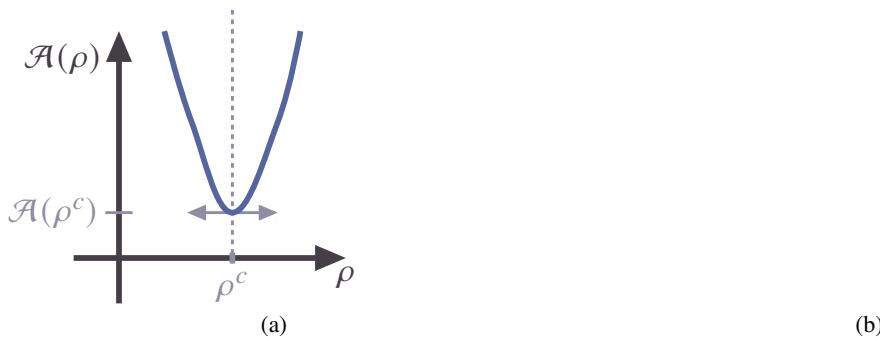


FIGURE 4.2

4.2.3 Expression de la Hessienne

En calculant la dérivée fonctionnelle seconde de l'entropie de Yang–Yang, définie en (4.46), dans la direction d'une variation $\delta\rho$, on obtient l'opérateur hessien $\mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{YY})}$. L'opérateur hermien \mathcal{H} est donné par $\mathcal{H} = -\mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{YY})}$, et se décompose comme suit :

$$\mathcal{H}(\theta, \theta') = \mathcal{D}(\theta, \theta') + \mathcal{V}(\theta, \theta') \quad (4.48)$$

La contribution diagonale locale, notée $\mathcal{D}(\theta, \theta')$, présente une singularité caractéristique d'une structure de type Fermi–Dirac. Elle reflète l'exclusion statistique effective induite par l'intégrabilité, y compris dans un système bosonique. Elle s'écrit :

$$\mathcal{D}(\theta, \theta') = \left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta) \nu_{eq}(\theta) (1 - \nu_{eq}(\theta))} \right) \delta(\theta, \theta'). \quad (4.49)$$

La partie régulière symétrique, notée $\mathcal{V}(\theta, \theta')$, regroupe quant à elle les contributions non locales issues des interactions entre quasi-particules.

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(\theta, \theta') &= - \left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta) (1 - \nu_{eq}(\theta))} + \frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta') (1 - \nu_{eq}(\theta'))} \right) \frac{\Delta(\theta - \theta')}{2\pi} \\ &\quad + \int d\theta'' \frac{\nu_{eq}(\theta'')}{\rho_{s,eq}(\theta'') (1 - \nu_{eq}(\theta''))} \frac{\Delta(\theta - \theta'')}{2\pi} \frac{\Delta(\theta'' - \theta')}{2\pi} \end{aligned} \quad (4.50)$$

avec $\rho_{eq}(\theta) = \nu_{eq}(\theta) \rho_{s,eq}(\theta)$.

4.2.4 Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne

On cherche alors \mathcal{H}^{-1} aussi sous la forme

$$\mathcal{H}^{-1}(\theta, \theta') = \mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta') + \mathcal{B}(\theta, \theta') \quad (4.51)$$

avec une partie diagonale sans interaction

$$\mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta') = (\rho_{s,eq}(\theta) \nu_{eq}(\theta) (1 - \nu_{eq}(\theta))) \delta(\theta, \theta') \quad (4.52)$$

tel que

$$(\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{D})(\theta, \theta') = (\mathcal{D} \cdot \mathcal{D}^{-1})(\theta, \theta') = \int d\theta'' \mathcal{D}(\theta, \theta'') \mathcal{D}^{-1}(\theta'', \theta') = \delta(\theta - \theta'), \quad (4.53)$$

avec une partie symétrique régulière avec interaction \mathcal{B} .

Les équations (4.48), (4.51), (4.45) et (4.53), il vient que cette série d'équivalences

$$\begin{cases} \mathcal{H} \cdot \mathcal{H}^{-1} = \delta \\ \mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{H} = \delta \end{cases} \text{ i.e. } \begin{cases} \mathcal{H} \cdot \mathcal{B} = -\mathcal{V} \cdot \mathcal{D}^{-1} \\ \mathcal{B} \cdot \mathcal{H} = -\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{V} \end{cases} \text{ i.e. } \begin{cases} \mathcal{B} = -\mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{V} \cdot \mathcal{D}^{-1} \\ \mathcal{B} = -\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{V} \cdot \mathcal{H}^{-1} \end{cases}$$

Du fait que tous ces fonctions (\mathcal{H} , \mathcal{D} , \mathcal{V} et inverse) soit symétriques alors l'équation ci-dessus sont tous équivalentes et \mathcal{B} étant donc symétrique. Donc en utilisant (4.50) et (4.52)

$$\begin{aligned} \mathcal{B}(\theta, \theta') &= -(\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{V} \cdot (\mathcal{H}^{(S_{YY})})^{-1})(\theta, \theta'), \\ &= (\rho_{s,eq}(\theta) \nu_{eq}(\theta) (1 - \nu_{eq}(\theta))) \times \\ &\quad \left\{ \frac{\Delta}{2\pi} \star \left[\left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta) (1 - \nu_{eq}(\theta))} + \frac{1}{\rho_{s,eq}(\cdot) (1 - \nu_{eq}(\cdot))} \right) \mathcal{H}^{-1}(\cdot, \theta') \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\nu_{eq}(\cdot)}{\rho_{s,eq}(\cdot) (1 - \nu_{eq}(\cdot))} \left(\frac{\Delta}{2\pi} \star \mathcal{H}^{-1}(\cdot, \theta') \right) \right] \right\} (\theta), \end{aligned} \quad (4.54)$$

où $(f \star g)(x)$ désigne la convolution $\int f(x-t) g(t) dt$. En injectant cette dernière équation et (4.51), dans (4.42), il vient que une équation implicite :

$$\begin{aligned} \langle \delta\rho(\theta) \delta\rho(\theta') \rangle_w &= \frac{1}{L} \mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta') + \\ &\quad \left. \left\{ \frac{1}{L} (\rho_{s,eq}(\theta) \nu_{eq}(\theta) (1 - \nu_{eq}(\theta))) \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left\{ \frac{\Delta}{2\pi} \star \left[\left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta) (1 - \nu_{eq}(\theta))} + \frac{1}{\rho_{s,eq}(\cdot) (1 - \nu_{eq}(\cdot))} \right) \mathcal{H}^{-1}(\cdot, \theta') \right. \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. \left. - \frac{\nu_{eq}(\cdot)}{\rho_{s,eq}(\cdot) (1 - \nu_{eq}(\cdot))} \left(\frac{\Delta}{2\pi} \star \mathcal{H}^{-1}(\cdot, \theta') \right) \right] \right\} (\theta), \right\} \right\} \end{aligned} \quad (4.55)$$

Cette expression explicite des corrélations permet d'évaluer les fluctuations des grandeurs macroscopiques comme le nombre total de particules ou l'énergie, en les exprimant comme des observables linéaires de la densité $\rho(\theta)$.

4.2.5 Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle

Principe de fluctuation-réponse. Dans cette sous-section, nous proposons de tester l'expression (4.55). Dans cette équation, le membre de droite s'écrit :

$$(L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta'),$$

où \mathcal{H} désigne l'opposé de la hessienne de l'entropie de Yang–Yang. Or $(L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta')$ est aussi le membre de droite de (4.40).

Le membre de gauche de l'équation (4.40), à savoir

$$-\frac{1}{L} \frac{\delta \rho_{\text{eq}}(\theta)}{\delta w(\theta')},$$

peut être évalué numériquement sans avoir à recourir à l'entropie de Yang–Yang. Il suffit en effet de calculer la variation de la *distribution de rapidité à l'équilibre* $\rho_{\text{eq}}(\theta)$ en réponse à une petite perturbation du *poids spectral* $w(\theta')$.

Ainsi Nous proposons ainsi de comparer numériquement les deux expressions : $(L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta')$ et $-\frac{1}{L} \frac{\delta \rho_{\text{eq}}(\theta)}{\delta w(\theta')}$, afin de tester la validité l'expression (4.55).

Méthode.

Calcul de la matrice hermitienne. On considère un gaz de bosons unidimensionnels intégrable, décrit par l'équation de Bethe, dans un état d'équilibre généralisé caractérisé par la *taille du système* L , l'*intensité d'interaction* g , et un *poids spectral* fixé $w(\theta)$.

A partir de ces paramètres, on résout numériquement les *équations de la thermodynamique de Bethe* (TBA) (2.57), ce qui permet d'obtenir les grandeurs thermodynamiques d'équilibre :

- la *distribution de rapidité* $\rho_{\text{eq}}(\theta)$,
- la *densité d'états* $\rho_{s,\text{eq}}(\theta)$
- et la *fonction d'occupation* $\nu_{\text{eq}}(\theta) = \rho_{\text{eq}}(\theta)/\rho_{s,\text{eq}}(\theta)$.

Ces quantités permettent ensuite de construire :

- la contribution diagonale singulière $\mathcal{D}(\theta, \theta')$, définie par (4.49), ainsi que son inverse $\mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta')$ (voir (4.52));
- la contribution régulière non locale $\mathcal{V}(\theta, \theta')$, définie par (4.50).

La matrice de fluctuation $\mathcal{H}(\theta, \theta')$, définie par (4.48), est obtenue en combinant ces deux contributions. L'inverse $(L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta')$ en (4.55) fournit une partie sans interaction (diagonale) $\mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta')/L$ et une partie avec interaction $\mathcal{B}(\theta, \theta')/L$ avec (4.54).

Calcul par différentiation numérique. En parallèle, on effectue une variation infinitésimale du poids spectral $w(\theta)$, et on résout à nouveau numériquement les équations TBA pour obtenir la distribution de rapidité correspondante. Par différentiation, on accède alors à :

$$-\frac{1}{L} \frac{\delta \rho_{\text{eq}}(\theta)}{\delta w(\theta')}.$$

Cette quantité représente la réponse directe du système à une perturbation du poids spectral, et peut être comparée à l'inverse de la matrice hessienne obtenue précédemment.

Dans une équilibre thermodynamique généralisé

Paramètres fixés. On fixe un *poids spectral*, par exemple quadratique

$$w(\theta) = \frac{1}{2}\theta^2, \quad (4.56)$$

et on fixe les paramètres physiques du système : $L = 10$, et $g = 1$.

En ne fixant pas N , la contribution du nombre de particule dans w n'est pas fixées contrairement pour les simulations de la partie Monte-Carlos fais dans la section précédent.

Comparaison. Les deux approches produisent des matrices que l'on compare numériquement. La coïncidence entre ces deux résultats valide la structure variationnelle de l'entropie de Yang-Yang et confirme que la réponse linéaire (calculée comme dérivée fonctionnelle) coïncide avec l'inverse de la courbure thermodynamique.

FIGURE 4.3 – Vérification numérique dans le régime thermodynamique. Gauche : χ_w par inversion de la courbure. Centre : χ_w par dérivée fonctionnelle. Droite : écart relatif entre les deux.

Conclusion. Cette vérification confirme que, dans le régime thermodynamique, la structure variationnelle de l'entropie de Yang-Yang encode entièrement les fluctuations et les réponses spectrales du système. Il s'agit d'un test non trivial du principe de fluctuation-réponse appliqué aux systèmes intégrables.

Dans un second temps, il est naturel de vouloir tester ce principe pour différentes formes du *poids spectral* w . Dans le cas général du GGE, w appartient à un espace de dimension infinie. Afin de réduire cette complexité, nous nous restreignons à une sous-famille à deux paramètres, en nous plaçant dans le cadre de l'équilibre thermique. Ce choix permet de comparer explicitement les fluctuations de grandeurs thermodynamiques macroscopiques, telles que le nombre total de particules et l'énergie cinétique.

Vérification numérique thermique : énergie et nombre de particules

Nous testons à présent notre expression des fluctuations dans le cas particulier de l'équilibre thermique. Le système est supposé en contact avec un bain à température T et potentiel chimique μ . Le poids spectral prend alors la forme canonique : $w(\theta) = \beta\varepsilon(\theta) - \beta\mu$, avec $\beta = 1/(k_B T)$ et $\varepsilon(\theta)$ l'énergie spectrale (par exemple $\theta^2/2$ pour des particules libres).

Paramètres fixés. On reprend ici le formalisme de l'équation (4.22), dans lequel le poids spectral s'écrit comme une combinaison linéaire :

$$w(\theta) = \beta_0 f_0(\theta) + \beta_2 f_2(\theta),$$

où $f_i(\theta)$ sont les densités locales associées aux charges conservées.

Dans le cas de l'équilibre thermique usuel (ensemble de Gibbs), seules deux charges sont conservées : le **nombre total de particules** \hat{Q} et l'**énergie cinétique totale** \hat{K} . Cela correspond au choix suivant :

$$\begin{aligned} f_0(\theta) &= 1, && \text{(densité de particules)} \\ f_1(\theta) &= \frac{1}{2}m\theta^2, && \text{(densité d'énergie cinétique)} \end{aligned}$$

les coefficients de Lagrange associés sont :

$$\begin{aligned} \beta_0 &= -\beta\mu, && \text{(potentiel chimique)} \\ \beta_1 &= \beta, && \text{(inverse de la température)} \end{aligned}$$

Calcul de la matrice hermitienne. Les densités locales f_i sont fixées. Pour spécifier le *poids spectral* w , on choisit les coefficients de Lagrange β_0 et β_2 en imposant dans un premier temps $T = 60$ nK et $\mu = 27$ nK. De plus, afin de se placer dans un régime physique particulier, on fixe la taille du système à $L = ?$ et l'impulsion maximale à $q = ?$.

À partir de ces paramètres, et suivant la même procédure numérique que dans la sous-section précédente, on obtient la distribution de rapidité à l'équilibre $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w \equiv \rho_{\text{eq}}(\theta)$, ainsi que les composantes de l'inverse de l'opérateur hessien \mathcal{H}^{-1}/L : la contribution diagonale sans interaction \mathcal{D}^{-1}/L et la contribution non locale issue des interactions \mathcal{B}/L .

Les **points rouges** indiquent le régime considéré dans le diagramme de phase du modèle de Lieb-Liniger, présenté en figure 4.4a. Ce diagramme a pour abscisse la **constante de Lieb** $\gamma = g/n$ et pour ordonnée la **température réduite** $t = 1/(\beta g^2)$. La densité linéaire n n'est pas un paramètre d'entrée, mais elle est calculée via : $n = \int \rho_{\text{eq}}(\theta) d\theta$.

Nous représentons également la quantité

$$\frac{1}{L} \frac{\mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta')}{\delta(\theta - \theta')}$$

sur la figure ???. La fonction delta dans (4.52) étant approximée numériquement par un pas de discréétisation, la matrice \mathcal{D}^{-1} est proportionnelle à ce pas.

La contribution \mathcal{B}/L liée aux interactions est représentée en figure 4.4b.

Enfin, en faisant varier le potentiel chimique μ , nous répétons l'ensemble des calculs précédents. Les régimes ainsi obtenus sont indiqués par des **points bleus** dans le diagramme de phase (figure 4.4a).

Corrélation des observables thermodynamiques. Conformément à l'équation (4.29), nous calculons les fluctuations du nombre total de particules ainsi que celles de l'énergie cinétique totale, respectivement données par :

$$C_w[f_0, f_0] = L^2 \iint d\theta d\theta' f_0(\theta) \frac{1}{L} \mathcal{H}^{-1}(\theta, \theta') f_0(\theta'), \quad (4.57)$$

$$C_w[f_2, f_2] = L^2 \iint d\theta d\theta' f_2(\theta) \frac{1}{L} \mathcal{H}^{-1}(\theta, \theta') f_2(\theta'). \quad (4.58)$$

Pour chaque régime simulé (correspondant aux **points bleus** et **rouges** sur la figure 4.4a), nous évaluons numériquement les quantités $C_w[f_0, f_0]$ et $C_w[f_2, f_2]$, qui représentent les fluctuations extensives des observables associées aux charges \hat{Q}_0 (nombre de particules) et \hat{Q}_2 (énergie cinétique).

Ces résultats sont représentés par des **points orange** dans la figure 4.5, illustrant l'évolution des fluctuations en fonction du régime thermodynamique du système.

Susceptibilité des observables thermodynamiques. En parallèle, pour chaque régime simulé (correspondant aux **points bleus** et **rouges** de la figure 4.4a), et conformément à l'équation (4.29), nous calculons les moyennes des charges associées au nombre total de particules et à l'énergie cinétique totale, données respectivement par :

$$\langle \hat{Q}[f_0] \rangle_w = L \int d\theta f_0(\theta) \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w, \quad (4.59)$$

$$\langle \hat{Q}[f_2] \rangle_w = L \int d\theta f_2(\theta) \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w. \quad (4.60)$$

Nous souhaitons ensuite approximer les susceptibilités thermodynamiques définies par :

$$\chi_w[f_i, f_i] = - \left. \frac{\partial \langle \hat{Q}[f_i] \rangle_w}{\partial \beta_i} \right|_{\beta_{j \neq i} \text{ fixés}}. \quad (4.61)$$

Pour cela, nous procédons à une variation infinitésimale du poids spectral w :

- Une variation infinitésimale ϵ_μ du potentiel chimique μ correspond à une perturbation du poids spectral de la forme :

$$w \rightarrow w - \beta \epsilon_\mu f_0.$$

On résout alors numériquement les équations TBA pour ce nouveau poids, afin de calculer :

$$\langle \hat{Q}[f_0] \rangle_{w-\beta \epsilon_\mu f_0}.$$

- On effectue ensuite une variation infinitésimale ϵ_β de l'inverse de la température, de sorte que la combinaison $(\beta + \epsilon_\beta)(\mu + \epsilon_\mu) = \beta\mu$ reste constante, maintenant ainsi β_0 fixe. Cela conduit à une variation du poids spectral de la forme :

$$w \rightarrow w + (\beta + \epsilon_\beta)(-\epsilon_\mu f_0 + f_2).$$

On résout à nouveau les équations TBA pour obtenir :

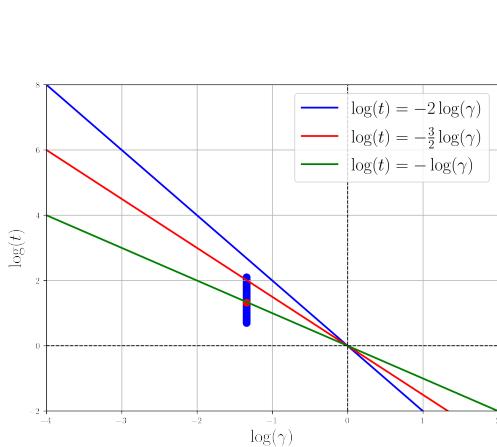
$$\langle \hat{Q}[f_2] \rangle_{w+(\beta+\epsilon_\beta)(-\epsilon_\mu f_0+f_2)}.$$

Ces simulations permettent d'estimer numériquement les susceptibilités :

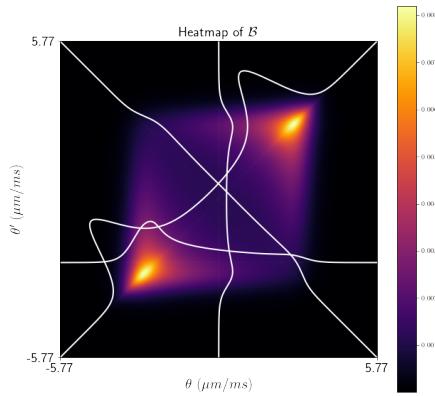
$$\chi_w[f_0, f_0] \approx \frac{\langle \hat{Q}[f_0] \rangle_{w-\beta\epsilon_\mu f_0} - \langle \hat{Q}[f_0] \rangle_w}{\beta\epsilon_\mu}, \quad (4.62)$$

$$\chi_w[f_2, f_2] \approx -\frac{\langle \hat{Q}[f_2] \rangle_{w+(\beta+\epsilon_\beta)(-\epsilon_\mu f_0+f_2)} - \langle \hat{Q}[f_2] \rangle_w}{\epsilon_\beta}. \quad (4.63)$$

Ces approximations numériques sont représentées par des **points bleus** dans la figure 4.5, et permettent de confronter les résultats issus de la dérivée fonctionnelle avec ceux provenant de la réponse directe à une perturbation du poids spectral.



(a) Diagramme de phase du modèle de Lieb-Liniger.



(b) $\mathcal{B}(\theta, \theta')$.

FIGURE 4.4 – (a) Diagramme de phase du modèle de Lieb-Liniger à l'équilibre thermique. Différents régimes asymptotiques sont séparés par des transitions progressives. Les points bleus représentent les fluctuations calculées numériquement pour différentes températures. Les coordonnées sont données par $\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 n}$ et $t = \frac{k_B T}{mg^2/\hbar^2}$. (b) Représentation en niveaux de couleur de la partie régulière \mathcal{B} des fluctuations $\delta\rho$ pour $T = 60$ nK et $\mu = 27$ nK (point rouge dans (a))(courbes blanches à enlevé).

Comparaison avec les dérivées thermodynamiques. Les résultats obtenus à partir de l'analyse quadratique de l'action (fluctuations de ρ) sont comparés aux fluctuations extraites directement par différentiation des observables thermodynamiques $\langle \hat{Q} \rangle_w$ et $\langle \hat{H} \rangle_w$. Ces comparaisons sont présentées dans la Fig. ?? et révèlent une excellente concordance.

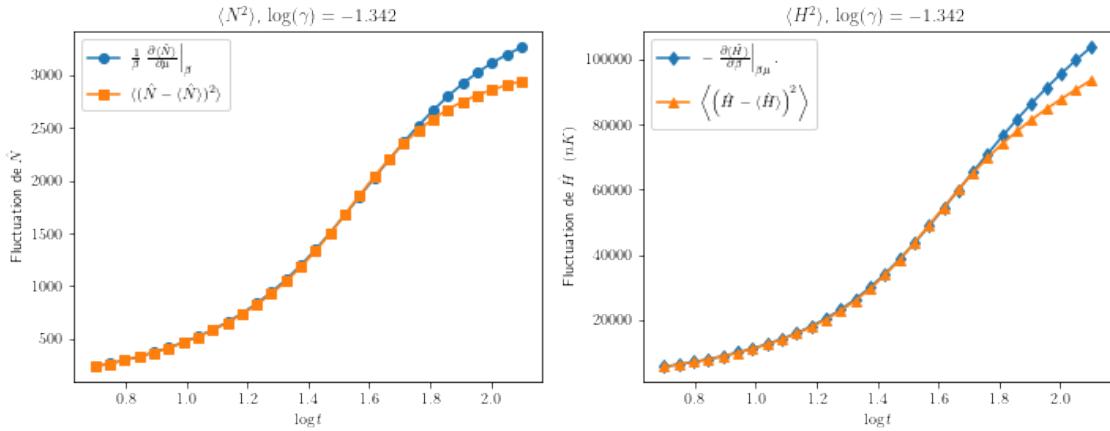


FIGURE 4.5 – Comparaison numérique entre les fluctuations calculées à partir de l’analyse quadratique de l’action (fluctuations de ρ) et celles obtenues par dérivées thermodynamiques des observables moyennes.(revoir titres shema)

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les fluctuations de la distribution de rapidité dans les états d’équilibre généralisés (GGE), en mettant en lumière le lien fondamental entre corrélations et réponse linéaire.

Nous avons d’abord introduit le formalisme général des GGE, dans lequel les observables macroscopiques sont dérivées fonctionnellement du potentiel conjugué $w(\theta)$. Dans ce cadre, nous avons montré que la matrice de susceptibilité spectrale $\chi_w(\theta, \theta')$ décrit à la fois la réponse linéaire de la densité spectrale moyenne à une perturbation infinitésimale du potentiel, et les corrélations entre fluctuations de la densité, conformément au principe de fluctuation-réponse. Ce lien a été validé numériquement par des simulations de Monte-Carlo sur des ensembles de quasi-particules.

Nous avons ensuite approfondi l’étude de la limite thermodynamique, où les fluctuations autour de l’état d’équilibre deviennent gaussiennes. Dans cette approximation, les susceptibilités s’expriment comme l’inverse de la courbure fonctionnelle de l’entropie de Yang-Yang, formalisée par l’opérateur hessien $\mathcal{H}^{S_{YY}}$. Nous avons donné une formulation explicite de cet opérateur, ainsi que de sa matrice inverse.

Enfin, nous avons relié ces objets locaux à des susceptibilités globales via une projection sur les fonctions test $f_i(\theta)$, en considérant le poids/potentiel spectral $w(\theta)$ comme une combinaison linéaire des charges \hat{Q}_i . Ce formalisme nous a permis d’interpréter la dérivée de l’observable $\langle \hat{Q}_i \rangle_w$ par rapport au multiplicateur de Lagrange β_i comme une dérivée fonctionnelle projetée de la matrice $\chi_w(\theta, \theta')$, et d’en valider la structure par une comparaison numérique explicite sur l’énergie et le nombre de particules.

(je m’aveux ... à voir) Ce chapitre établit ainsi de manière rigoureuse et quantitative le lien entre dérivées fonctionnelles, susceptibilités et fluctuations dans les GGE, en fournissant à la fois des fondements théoriques et des validations numériques robustes.

Chapitre 5

Dispositif expérimental et méthodes d'analyse

Contents

5.1	Le dispositif expérimental	56
5.1.1	Système laser et contrôle de fréquence	56
5.1.2	Production et refroidissement des atomes (non détaillé ici, renvoi à d'autres travaux)	56
5.1.3	Piégeage magnétique sur puce	57
5.1.4	Génération de potentiels modulés	60
5.2	Sélection spatiale avec DMD	62
5.2.1	Motivation et principe	62
5.2.2	Mise en place technique (initiée par Léa Dubois)	62
5.2.3	Utilisation dans les protocoles	63
5.3	Techniques d'imagerie et d'analyse	64
5.3.1	Imagerie par absorption	64
5.3.2	Analyse des profils	65
5.4	Expériences et protocoles étudiés	65
5.4.1	Expansion longitudinale	65
5.4.2	Motivation et protocole expérimental d'expansion longitudinale	66
5.4.3	Sonde locale de distribution de rapidité	70

Introduction

Ce chapitre présente l'expérience utilisée pour étudier les gaz unidimensionnels de rubidium ultra-froids. Nous décrivons l'architecture du dispositif, les méthodes d'imagerie et d'analyse, ainsi que les protocoles expérimentaux auxquels j'ai participé. Le développement initial du refroidissement et du piégeage avant la puce a été réalisé par d'anciens doctorants. La mise en place du piégeage sur la puce et du système de sélection spatiale à l'aide d'un DMD a été initiée par Léa Dubois, alors en première année de doctorat à mon arrivée. Mon travail s'est concentré principalement sur la prise de données, l'analyse et la participation à certaines expériences spécifiques telles que l'expansion longitudinale et la mesure locale de la distribution de rapidité.

Objectif du chapitre Ce chapitre a pour objectif de fournir une présentation synthétique et structurée du dispositif expérimental utilisé pour étudier la dynamique de gaz de Bose unidimensionnels ultra-froids. Il constitue un socle indispensable pour comprendre les protocoles expérimentaux développés au cours de ma thèse et les analyses présentées dans les chapitres suivants.

Architecture générale Nous présentons d'abord l'architecture complète de l'expérience, depuis la production des atomes jusqu'à leur imagerie, en passant par les étapes de refroidissement, de piégeage magnétique sur puce, de manipulation optique, et de génération de potentiels. Cette description s'accompagne d'une mise en contexte des contributions historiques au dispositif.

Contributions successives et personnelles Une attention particulière est portée à la répartition chronologique des contributions. Les étapes initiales (source atomique, MOT, piège DC) ont été développées par d'anciens doctorants. La mise en place du piégeage 1D sur puce ainsi que l'utilisation du DMD pour la sélection spatiale ont été réalisées au cours de la thèse de Léa Dubois. Mon travail s'inscrit dans cette continuité et concerne principalement la prise de données, l'analyse de protocoles dynamiques, ainsi que la participation à certaines opérations de maintenance et d'optimisation du système.

Rôle du dispositif dans la thèse Ce dispositif permet d'explorer des phénomènes hors équilibre dans des gaz quantiques 1D. Il constitue une plateforme particulièrement adaptée à l'étude de protocoles d'expansion, de sondes locales, ou de dynamiques guidées par la théorie hydrodynamique généralisée (GHD), qui sont au cœur de cette thèse.

5.1 Le dispositif expérimental

5.1.1 Système laser et contrôle de fréquence

Laser maître 1 : référence de fréquence La stabilité en fréquence de l'ensemble des faisceaux employés dans l'expérience est assurée par un laser à cavité étendue conçu au SYRTE. Ce laser est verrouillé par spectroscopie d'absorption saturée sur la raie D2 du ^{87}Rb , en ciblant le croisement des transitions $|F = 2\rangle \rightarrow |F' = 2, 3\rangle$. Ce verrouillage fournit la référence absolue de fréquence à partir de laquelle les autres sources laser sont synchronisées par battement optique.

Laser repompeur Le faisceau de repompage, qui transfère les atomes tombé dans l'état $|F = 1\rangle$ vers l'état $|F = 2\rangle$, est produit par une diode DFB (Distributed Feedback). Sa fréquence est décalée de 6 GHz par rapport au maître 1 par battement optique et mélange avec un oscillateur à micro-ondes de 6.6 GHz. Une diode Fabry–Perot, injectée par la DFB, élève la puissance de sortie au-delà de 100 mW.

Laser maître 2 : source principale de manipulation Un second laser à cavité étendue, est verrouillé par battement optique sur la fréquence du maître 1. L'émission est amplifiée au moyen d'un amplificateur à semi-conducteur évasé (Tapered Amplifier), fournissant plus de 1 W en sortie. Le faisceau ainsi produit est distribué vers différentes parties de l'installation expérimentale : alimentation du piège magnéto-optique (PMO), formation de la mélasse optique, réalisation du pompage optique, imagerie par absorption, génération du faisceau de sélection.

Gestion des fréquences et polarisations Les faisceaux peuvent être interrompus soit à l'aide d'obturateurs mécaniques, soit via des modulateurs acousto-optiques (AOM). Ces derniers offrent un temps de commutation beaucoup plus court que les systèmes mécaniques, car ils permettent de sélectionner uniquement un ordre de diffraction non nul et d'éteindre instantanément le faisceau en interrompant l'alimentation radiofréquence. L'intensité et la polarisation sont réglées via des cubes séparateurs PBS associés à des lames demi-onde, fixes ou motorisées. Ce dispositif offre une grande souplesse pour adapter la configuration optique aux différentes étapes de l'expérience.

Note Une présentation plus exhaustive du montage laser et de son système de verrouillage est disponible dans la thèse de A.Johnson[?]. Le dispositif a été conservé dans son architecture d'origine tout au long de mes travaux, avec seulement un entretien régulier.

5.1.2 Production et refroidissement des atomes (non détaillé ici, renvoi à d'autres travaux)

- Source chaude de rubidium, MOT, molasses optique.
- Refroidissement à des températures sub- μK Refroidissement sub-Doppler (détails renvoyés aux travaux précédents).

Le dispositif expérimental permet de produire des gaz ultra-froids de rubidium, en vue d'obtenir des gaz unidimensionnels dans le régime quantique dégénéré. La séquence expérimentale suit un protocole établi, initialement développé par d'anciens doctorants (voir par exemple la thèse d'A. Johnson [?]) et réoptimisé au début de la thèse de Léa. Dubois [?] sous la supervision d'I. Bouchoule.

Libération des atomes de rubidium Les atomes de ^{87}Rb sont émis à partir d'un *dispenser* placé directement dans l'enceinte à vide, à proximité de la monture de la puce atomique. Un courant de 4.5 A est appliqué pendant environ 5 s, générant un flux d'atomes thermiques dans la chambre à vide.

Capture par le piège magnéto-optique (PMO) Les atomes thermiques sont ralentis et confinés dans un piège magnéto-optique. Quatre faisceaux laser (dont deux réfléchis par la puce) combinés à un champ quadrupolaire magnétique produit par des bobines permettent de former un nuage atomique situé à quelques millimètres de la surface de la puce.

Rapprochement vers la puce Le nuage est rapproché de la surface de la puce en transférant le champ quadrupolaire depuis les bobines vers le champ produit par le fil en forme de U de la puce (fil bleu, Fig. ??). Le courant dans ce fil est ajusté lentement de 3.6 A à 1.5 A, ce qui positionne le nuage à quelques centaines de micromètres de la surface.

Pompage optique Enfin, les atomes sont préparés dans l'état magnétique $|F = 2, m_F = 2\rangle$ par pompage optique. Un faisceau circulairement polarisé σ^+ , résonant sur la transition $|F = 2\rangle \rightarrow |F' = 2\rangle$, assure la polarisation du nuage.

Mélasse optique Après la capture dans le PMO, une étape de mélasse optique est appliquée pour refroidir davantage le nuage atomique, au-delà de la limite de Doppler. La mélasse optique repose sur l'utilisation de faisceaux laser légèrement désaccordés en fréquence et polarisés de manière appropriée, qui interagissent avec les atomes selon le mécanisme de refroidissement sub-Doppler.

Le principe physique est le suivant : les atomes en mouvement voient les faisceaux laser avec un décalage Doppler, ce qui modifie la probabilité d'absorption selon leur vitesse et leur position. Combiné avec les effets de polarisation (notamment les forces de type Sisyphus dans un champ de polarisation variable), cela crée un potentiel de friction optique qui ralentit les atomes. Contrairement au refroidissement Doppler standard, la mélasse optique permet de réduire l'énergie cinétique des atomes en dessous de la limite Doppler, atteignant des températures beaucoup plus basses.

Ainsi, cette étape permet d'obtenir un nuage plus dense et plus froid, condition essentielle pour les manipulations ultérieures et la formation de gaz unidimensionnels dans le régime quantique dégénéré.

5.1.3 Piégeage magnétique sur puce

Piégeage magnétique sur puce

On peut créer des structures atomiques allongées en utilisant des techniques de piégeage optique. Par exemple, plusieurs groupes de recherche ont recours à des réseaux optiques bidimensionnels (2D) pour former un ensemble de tubes atomiques longitudinaux [?, ?, ?, ?]. Ces réseaux 2D permettent de produire un grand nombre de systèmes atomiques quasi-unidimensionnels, offrant ainsi une plateforme idéale pour l'étude des gaz 1D. Ce type de dispositif est particulièrement adapté à l'étude de gaz faiblement denses, car les densités peuvent être moyennées sur l'ensemble des tubes. Cependant, l'étude expérimentale des fluctuations locales dans chaque tube reste difficile avec ce genre de configuration. Pour surmonter cette limitation, on utilise le piégeage à l'aide de puces atomiques.

Principe général Les atomes de rubidium sont confinés par une puce atomique intégrée dans l'enceinte à vide. Une puce atomique est un circuit microfabriqué comportant de fins micro-fils parcourus par des courants électriques, ce qui permet de générer des champs magnétiques à géométrie contrôlée. Cette technologie, développée dans les années 1990 [?, ?], offre une miniaturisation significative des dispositifs de piégeage [?, ?]. Les premiers condensats de Bose-Einstein sur puce ont été réalisés en 2001 [?, ?], puis ultérieurement au Laboratoire Charles Fabry [?]. Les puces atomiques permettent d'accéder à des confinements très forts, particulièrement adaptés à l'étude des gaz de Bose unidimensionnels et à l'exploration de leurs propriétés quantiques locales [?, ?].

— Des structures atomiques allongées peuvent être réalisées par piégeage optique. Dans ce cadre, des réseaux optiques bidimensionnels (2D) permettent de créer un ensemble de tubes atomiques quasi-unidimensionnels [?, ?, ?, ?]. Ces réseaux offrent un grand nombre de systèmes atomiques identiques, facilitant l'étude statistique de gaz 1D faiblement dense. Toutefois, l'accès expérimental aux fluctuations locales dans chaque tube reste limité.

Pour contourner cette contrainte, les puces atomiques offrent une solution efficace. Ces dispositifs microfabriqués intègrent de fins micro-fils parcourus par des courants, générant des champs magnétiques de géométrie contrôlée et permettant des confinements très forts [?, ?, ?, ?]. La miniaturisation ainsi obtenue a permis l'obtention des premiers condensats de Bose-Einstein sur puce dès 2001 [?, ?], et dès 2003 au Laboratoire Charles Fabry [?]. Grâce à ces confinements, il devient possible d'étudier expérimentalement les propriétés de gaz de Bose unidimensionnels et leurs fluctuations locales [?, ?].

Structure de la puce utilisée La puce utilisée au cours de cette expérience a été conçue en collaboration avec S. Bouchoule, A. Durnez et A. Harouri (C2N). Elle repose sur un substrat de carbure de silicium sur lequel est déposé le circuit électrique. Ce dernier est recouvert d'une couche de résine BCB, aplatie par des cycles d'enduction et d'attaque plasma. Une fine couche d'or ($\sim 200 \text{ nm}$) est finalement évaporée afin de permettre l'utilisation de la puce comme miroir pour l'imagerie à 780 nm. La puce est soudée à l'indium sur une monture en cuivre inclinée à 45° par rapport à l'axe optique.

Fils de piégeage et géométrie des champs La puce atomique intègre plusieurs ensembles de conducteurs, chacun conçu pour une étape spécifique de la capture, du transport et du confinement des atomes. L'ensemble de la séquence de transfert, depuis le piège magnéto-optique (PMO) jusqu'au guide unidimensionnel, repose sur une succession de configurations magnétiques générées par ces différents fils.

Phase U : approche de la surface Après la phase de pré-refroidissement, le nuage est initialement capturé dans un PMO situé au-dessus de la puce. Il est ensuite rapproché de la surface en transférant progressivement le champ quadrupolaire des bobines externes vers celui produit par un fil en forme de U intégré à la puce (fils bleus dans la Fig. ??). Cette étape (*phase U*) est accompagnée d'un mélange optique et d'un pompage optique afin de préparer les atomes pour le piégeage magnétique.

Phase Z : piège DC et refroidissement À l'issue du pompage optique, les atomes sont transférés dans un piège magnétique combinant un courant continu circulant dans un fil en forme de Z (fil orange) et un champ magnétique externe. Ce *piège DC* assure un confinement transverse fort. Un refroidissement par évaporation radiofréquence, d'une durée d'environ 2.3 s, abaisse la température du nuage à environ $1 \mu\text{K}$, pour un nombre typique d'atomes de l'ordre de 2.5×10^5 .

Transfert vers le guide unidimensionnel Une fois refroidi, le nuage est acheminé vers la zone expérimentale où trois micro-fils parallèles et symétriques (fils jaunes) parcourus par des courants alternatifs (AC) génèrent un guide magnétique unidimensionnel assurant le confinement transverse. Le confinement longitudinal est fourni par deux paires de fils : d/d' (rose) et D/D' (vert).

Le passage du piège DC au guide 1D est réalisé de manière adiabatique grâce à cinq rampes linéaires de courant d'une durée comprise entre 50 et 60 ms chacune. Durant cette opération : (i) le courant dans le fil Z est progressivement réduit, (ii) le courant dans les micro-fils du guide est augmenté jusqu'à environ 50 mA, (iii) un courant initial de 0.5 A est appliqué dans les fils D et D' , puis ajusté pour maintenir fixe la position du centre de masse du nuage.

Ce protocole minimise les oscillations résiduelles dans le guide et assure un découplage efficace entre la dynamique longitudinale et le confinement transverse. Ce dispositif a été développé au cours de la thèse de Léa Dubois [?] et a été utilisé dans le cadre de mes protocoles expérimentaux sur l'expansion longitudinale et les sondes locales de distribution de rapidité.

Optimisation géométrique La géométrie des conducteurs de la puce a été conçue pour réduire la dissipation thermique, limiter les couplages parasites et garantir une bonne symétrie des champs magnétiques. Dans la zone expérimentale, les atomes sont piégés à environ $15 \mu\text{m}$ au-dessus des fils, soit $8 \mu\text{m}$ au-dessus de la surface de la puce.

Refroidissement final et accès au régime unidimensionnel Une dernière phase de refroidissement par évaporation radiofréquence est effectuée directement dans le guide AC. Grâce à l'anisotropie marquée du piège, le confinement transverse atteint une fréquence ω_{\perp} telle que l'énergie quantique $\hbar\omega_{\perp}$ dépasse largement les énergies thermique et chimique du système. On atteint ainsi le régime unidimensionnel, caractérisé par la hiérarchie d'énergies :

$$k_B T, \mu \ll \hbar\omega_{\perp},$$

où μ désigne le potentiel chimique et T la température du gaz.

Dans ce régime, le confinement transverse est assuré principalement par la géométrie des micro-fils et la présence de champs magnétiques externes, tandis que le confinement longitudinal, plus faible, est ajustable via une combinaison de champs magnétiques externes et de courants circulant dans des fils additionnels (d/d' et D/D').

Les gaz obtenus contiennent typiquement entre 3×10^3 et 1.5×10^4 atomes, pour des températures de l'ordre de 50 à 200 nK. La Fig. ?? illustre un exemple de nuage dans ce régime, observé avec le système d'imagerie final.

Avantages du piégeage sur puce Comparé aux systèmes utilisant des réseaux optiques 2D, le piégeage sur puce ne fournit qu'un seul tube, ce qui permet un meilleur accès aux fluctuations locales de densité et aux observables résolues spatialement. Ce type de dispositif est ainsi particulièrement adapté à l'étude de la thermodynamique et de la dynamique de gaz 1D isolés.

Limitations et effets parasites Parmi les limitations spécifiques au piégeage sur puce figurent la rugosité des potentiels magnétiques due aux imperfections des fils, qui peut induire des modulations parasites du confinement longitudinal. De plus, la stabilité du dispositif est sensible aux champs parasites magnétiques externes ainsi qu'aux échauffements dus aux courants continus.

Imagerie finale À l'issue de ce refroidissement, les atomes sont observés avec le système d'imagerie final (voir Fig. ??), adapté aux tailles caractéristiques du gaz dans le piège. Une image typique de ce nuage est présentée en Fig. ??.

Remarques expérimentales Lorsque j'ai rejoint l'équipe, la première année thèse de Léa Dubois touchait à sa fin et le dispositif expérimental était en fonctionnement stable. Les différentes étapes du cycle (dispenser, PMO, mélasse, pompage optique, piège DC, transfert vers le guide, évaporation finale) avaient été mises en place et optimisées pendant les premières années de sa thèse, sous la supervision d'I. Bouchoule. Le cycle expérimental complet dure environ 15 secondes. Une description plus détaillée peut être trouvée dans la thèse d'A. Johnson [?].

Pendant ma première année, j'ai principalement participé à la prise de données en collaboration avec Léa. Grâce à la qualité de son travail, le dispositif était globalement très fiable, ce qui a permis de mener des campagnes expérimentales riches sans intervention lourde. Néanmoins, cette stabilité avait pour contrepartie que je n'ai pas été directement impliqué dans la résolution des pannes complexes ou dans le reconditionnement complet de la manipulation, ce qui a limité ma formation sur les aspects de maintenance approfondie du dispositif.

En revanche, peu avant la fin de la thèse de Léa et au début de ma troisième année, nous avons observé une chute significative du nombre d'atomes capturés. Sous la supervision d'I. Bouchoule, une intervention lourde a alors été décidée : nous avons cassé le vide pour diagnostiquer le problème. Il s'est avéré que les connecteurs du dispenser étaient endommagés. L'opération a été mise à profit pour installer un nouveau dispenser et remplacer la puce atomique.

Cette opération a mobilisé plusieurs personnes du laboratoire et de ses partenaires : S. Bouchoule (C2N) et Anne [Nom complet à préciser] ont participé à la manipulation et à la pose de la puce, tandis que j'ai pu assister à l'étuvage de l'enceinte à vide avec F. Nogrette. Après cette intervention, j'ai suivi avec I. Bouchoule le réajustement progressif de la séquence de refroidissement : alignement des faisceaux, réglages de la mélasse, optimisation du chargement dans le piège DC, puis dans le guide.

Cet épisode m'a permis de me confronter plus directement aux paramètres critiques du cycle d'évaporation et à la reprise d'une séquence complète. Toutefois, le départ de Léa, qui maîtrisait tous les aspects de la manipulation, a marqué une rupture importante dans la continuité des savoir-faire pratiques liés à cette expérience.

(fig :puce — Schéma de la puce atomique avec fils U, Z, AC, D et D').

(fig :imagerieFinale — Schéma optique du système d'imagerie final)

[fig :nuageDC — Image du gaz dans le piège DC après évaporation]

[fig :gaz1D — Image typique d'un gaz dans le régime 1D]

5.1.4 Génération de potentiels modulés

Champ des micro-fils. Puisque que $m_F = 2$, (état assuré par pompage optique), le potentiel magnétique $-\vec{\mu} \vec{B}(\vec{r})$ (avec moment dipolaire magnétique alors $\vec{\mu}$ et le champs magnetque totale que resente les atomes $\vec{B}(\vec{r})$) est proportionnel à $|\vec{B}(\vec{r})|$ de sorte que les atomes, en état low-field seeking, sont attirés vers les régions de champ magnétique minimal. Les micro-fils, alignés selon l'axe horizontal \vec{e}_x , sont parcourus par des courants alternatifs $\pm I$ (déphasés) produisant le champ magnétique de confinement : un fil central parcouru par un courant I , et deux fils latéraux par des courants opposés $-I$.

Champ de biais. Un champ de biais transverse $\vec{B}_{\text{biais}} = B_{\text{biais}} \vec{e}_y$, avec l'axe verticale par \vec{e}_y , est appliqué afin de régler la distance des atomes par rapport aux micro-fils. En notant \vec{e}_z l'axe horizontal perpendiculaire à \vec{e}_x et \vec{e}_y l'annulation du champ total a lieu en $z_0 = \mu_0 I / (2\pi B_{\text{biais}})$ avec μ_0 la perméabilité du vide . La modulation de B_{biais} permet de déplacer le point où le champ total s'annule, ce qui permet de positionner précisément le minimum du potentiel à une distance d du plan des fils.

Champ d'Ioffe. Afin d'éviter les pertes de Majorana liées à la présence d'un champ nul, un champ longitudinal $B_0 \vec{e}_x$ est ajouté, garantissant que le minimum de champ reste non nul.

Fréquence de piégeage transverse. Dans la configuration étudiée, les atomes sont confinés à $d = 15 \mu\text{m}$ au-dessus de la puce, soit l'espacement entre deux micro-fils. Cette faible distance maximise le gradient de champ et donc la fréquence de piégeage transverse, qui s'écrit

$$\omega_{\perp}^{(0)} = \sqrt{\frac{\mu_B}{m B_0} \frac{\mu_0 I}{2\pi d^2}}$$

avec μ_B le magnéton de Bohr, m la masse atomique et μ_0 la perméabilité du vide.

Rugosité et suppression par modulation Les imperfections géométriques des micro-fils engendrent des fluctuations parasites du champ magnétique le long du guide, créant une rugosité du potentiel. Pour la supprimer, les courants sont modulés à haute fréquence ($\sim 400 \text{ KHz}$), bien au-delà des fréquences de piégeage. Dans ce régime, les atomes ne perçoivent que le potentiel moyen temporellement, où la composante parasite longitudinale est fortement réduite. Le confinement effectif reste harmonique, avec une fréquence transverse donnée par

$$\omega_{\perp} = \frac{\omega_{\perp}^{(0)}}{\sqrt{2}}.$$

Découplage des confinements transverses et longitudinaux. Les courants qui parcourent les fils D, D' , d et d' sont orientés selon \vec{e}_u . Les champs magnétiques induits possèdent alors une composante selon \vec{e}_x , notée B_{\parallel}^x , et une composante selon \vec{e}_v (axe normal à la puce), notée B_{\parallel}^y . Si le champ selon \vec{e}_x est négligeable devant B_0 , alors le potentiel moyen se sépare en une partie transverse et une partie longitudinale découpées : $\langle V \rangle = V_{\perp}(y, z) + V_{\parallel}(x)$.

Potentiel longitudinal harmonique. Dans la configuration où seuls les fils D et D' sont utilisés, le potentiel longitudinal peut, à l'ordre 2 en x , être considéré comme harmonique :

$$V_{\parallel}(x) = V_0 + \frac{1}{2} m \omega_{\parallel}^2 x^2,$$

On note $2L = 1.89 \text{ mm}$ est la distance séparant les fils D et D' . Les courants circulant dans ces deux fils sont identiques et notés $I_D = I_{D'}$. Si la condition $B_0 \gg \mu_0 I_D d / (\pi L)^2$ est vérifiée, alors le terme constant du potentiel vaut approximativement $V_0 \simeq \mu_B B_0$.

La pulsation longitudinale totale ω_{\parallel} se décompose en deux contributions : (i) une pulsation $\omega_{\parallel}^x = \sqrt{\frac{6d\mu_B\mu_0I_D}{\pi L^4m}}$ induite par le champ longitudinal B_{\parallel}^x et (ii) une pulsation $\omega_{\parallel}^v = \sqrt{\frac{\mu_B}{mB_0}\frac{\mu_0I_D}{\pi L^2}}$ liée au champ B_{\parallel}^v . Pour des courants $I > 1A$, on a $\omega_{\parallel}^v \gg \omega_{\parallel}^x$, et ainsi :

$$\omega_{\parallel} \propto \frac{I_D}{\sqrt{B_0L^2}}.$$

La fréquence longitudinale est donc réglée expérimentalement en ajustant I_D .

Avec les dimensions caractéristiques de la puce et des fils, il est possible d'atteindre des confinements longitudinaux de fréquence $f_{\parallel} = \omega_{\parallel}/2\pi$ allant jusqu'à $\sim 150 H_z$, la limite étant imposée par le chauffage des fils pour $I_D \leq 4 A$.

Mesure de la fréquence transverse et longitudinale Pour la caractérisation, la pulsation transverse ω_{\perp} a été mesurée par la méthode du mode de respiration transverse [?], tandis que ω_{\parallel} a été obtenue à partir des oscillations dipolaires longitudinales. Les détails expérimentaux de ces méthodes figurent dans le manuscrit de thèse de Léa Dubois [?], p. 73 et p. 78.

Potentiel longitudinal quartic. Si on ajoute du courant dans les fils d et d' . Alors on peut avoir un potentiel non négligeable à l'ordre 4. Pour simplifier, les courants dans ces fils I_d et $I_{d'}$ sont identiques. et le potentiel s'écrit :

Potentiel longitudinal quartique. Si l'on ajoute un courant dans les fils d et d' , on peut générer un potentiel longitudinal comportant un terme significatif à l'ordre 4 en x . Pour simplifier, on suppose $I_d = I_{d'}$. On obtient alors :

$$\begin{aligned} V_{\parallel}(x) = \mu_B B_0 &+ \frac{\mu_B \mu_0}{\pi} d \left[\frac{I_D}{L^2} + \frac{I_d}{l^2} + 3 \left(\frac{I_D}{L^4} + \frac{I_d}{l^4} \right) x^2 + 5 \left(\frac{I_D}{L^6} + \frac{I_d}{l^6} \right) x^4 \right] \\ &+ \frac{\mu_B}{B_0} \left(\frac{\mu_0}{\pi} \right)^2 \left[\left(\frac{I_D}{L^2} + \frac{I_d}{l^2} \right) x^2 + 2 \left(\frac{I_D}{L^2} + \frac{I_d}{l^2} \right) \left(\frac{I_D}{L^4} + \frac{I_d}{l^4} \right) x^4 \right]. \end{aligned}$$

En ajustant I_D et i_d , on peut réaliser par exemple un double puits [?], ou bien supprimer le terme quadratique x^2 afin d'obtenir un potentiel quartique pur :

$$V_{\parallel}(x) = a_0 + a_4 x^4$$

comme on le fait dans [?].

En pratique, la puce présente des dimensions finies et n'est pas parfaitement symétrique. Un calcul plus précis, prenant en compte la géométrie exacte (disposition et épaisseur des fils), est présenté en annexe de la thèse de Thibault Jacqmin [?], p. 151. Cela impose un ajustement fin et asymétrique des courants I_D , $I_{D'}$, I_d et $I_{d'}$.

On ajuste les courants I_D et i_d pour par exemple faire des double puits [?] ou en supprimant le terme en x^2 d'obtenir un potentiel longitudinal quartique de la forme $V_{\parallel}(x) = a_0 + a_4 x^4$ [?].

En réalité la puce présente des dimensions finies. Un calcul plus précis prenant en compte la géométrie exacte des fils (disposition sur la puce, épaisseur finie) se trouve en appendice de la thèse de Thibault Jacqmin [112], page 151. De plus la puce n'est pas parfaitement symétrique donc on doit ajuster les courants I_D , $I_{D'}$, I_d et $I_{d'}$.

Caractérisation des potentiels longitudinal et transverse. Pour atteindre le régime unidimensionnel, les confinements doivent être fortement anisotropes : un piégeage transverse très fort et un piégeage longitudinal faible. La condition $\mu, k_B T \ll \hbar\omega_{\perp}$ garantit le gel des degrés de liberté transverses.

Cette configuration est particulièrement adaptée pour obtenir des profils de densité homogènes, nécessaires à certaines expériences de transport. Le transfert des atomes du piège harmonique vers le piège quartique est réalisé de manière *adiabatique* (changement rapide du potentiel), car un transfert adiabatique entraîne des pertes importantes.

Caractérisation des potentiels longitudinal et transverse. Pour atteindre le régime unidimensionnel, les potentiels de piégeage doivent être très asymétriques : un confinement transverse fort et un confinement longitudinal faible. La fréquence transverse ω_{\perp} doit être suffisamment élevée pour geler les degrés de liberté dans cette direction, avec la condition $\mu, k_B T \ll \hbar\omega_{\perp}$.

5.2 Sélection spatiale avec DMD

5.2.1 Motivation et principe

- Besoin de préparer des tranches homogènes.
- Intérêt dans les protocoles hors équilibre.

Objectif du dispositif de sélection L'outil de sélection spatiale a été conçu pour permettre une action locale sur le gaz atomique. Il présente deux objectifs principaux. D'une part, il permet de mesurer la distribution de rapidité localement résolue, en sélectionnant une tranche du gaz avant de la libérer et de suivre son expansion. D'autre part, il offre la possibilité de créer des situations hors équilibre en retirant une partie du gaz à l'équilibre, ce qui perturbe la configuration initiale et initie une dynamique.

Intérêt pour les protocoles hors équilibre Ce dispositif permet ainsi de générer des protocoles analogues à des configurations classiques comme le pendule de Newton, ou de sonder directement la dynamique d'un gaz de Lieb-Liniger dans des conditions contrôlées. Il constitue une brique essentielle pour les expériences de dynamique et de transport quantique.

5.2.2 Mise en place technique (initiée par Léa Dubois)

- Dispositif optique de projection.
- Contrôle numérique des motifs.
- Calibration et stabilité.

Principe de sélection par pression de radiation La sélection repose sur l'illumination d'une zone définie du gaz avec un faisceau quasi-résonant avec la transition cyclique $F = 2 \rightarrow F' = 3$ de la ligne D2 du rubidium. Les atomes subissent une pression de radiation due aux cycles absorption/émission spontanée, ce qui les pousse hors du piège ou les amène dans un état non piégé.

Façonnage spatial du faisceau La sélection doit être spatialement résolue. Le profil d'intensité dans le plan des atomes est de type binaire :

$$I(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [x_1, x_2] \\ I_0 & \text{sinon} \end{cases}$$

ce qui permet de préserver ou d'éjecter les atomes selon leur position longitudinale.

Utilisation du DMD Pour générer ce profil, un DMD (Digital Micromirror Device) est utilisé. Il s'agit d'une matrice de 1024×768 micro-miroirs orientables individuellement ($\pm 12^\circ$). En inclinant ces miroirs, on contrôle localement la réflexion de la lumière. L'image du DMD est projetée directement sur le plan des atomes, en imagerie directe.

Avantages du DMD Le DMD permet une reconfiguration rapide et programmable du motif de lumière. Cette technologie est largement utilisée dans les expériences d'atomes froids pour produire des potentiels structurés, homogénéiser un faisceau ou adresser localement les atomes.

Alternatives possibles Il est possible, en théorie, d'atteindre un effet similaire par un transfert cohérent des atomes vers un état anti-piégé via un pulse micro-onde ou une transition Raman. Cependant, la méthode par pression de radiation est plus simple à mettre en œuvre et adaptée à nos objectifs expérimentaux.

Principe de l'expulsion par pression de radiation Un atome illuminé par un faisceau proche de la résonance peut être expulsé du piège soit par transition vers un état anti-piégié, soit par effet de pression de radiation. Cette dernière génère une accélération suffisante pour fournir une énergie cinétique supérieure à la profondeur du puits magnétique. Le nombre de photons diffusés nécessaire peut être estimé à partir de la conservation de l'impulsion : une vingtaine de photons suffisent typiquement à extraire un atome du piège dans nos conditions.

Modèle de diffusion et estimation du seuil Le taux de diffusion de photons est modélisé à l'aide d'un taux Γ_{sc} , dépendant de l'intensité I , de l'intensité de saturation I_{sat} , d'un paramètre α (lié à la polarisation et au champ magnétique) et du désaccord δ . À résonance, et pour un temps d'illumination τ_p , on peut estimer le nombre total de photons diffusés par atome par $N_{\text{sc}} = \tau_p \Gamma_{\text{sc}}$.

Mesures expérimentales de la puissance nécessaire La puissance minimale nécessaire pour éjecter tous les atomes d'une zone illuminée est déterminée en fixant un temps d'illumination donné, puis en variant l'intensité du faisceau. L'analyse est réalisée après un délai d'attente de ~ 10 ms, pour s'assurer que seuls les atomes encore piégés soient détectés. Il est observé que 99% des atomes sont retirés à partir d'un rapport $I/I_{\text{sat}} \approx 0.12$.

Mesures de photons diffusés par fluorescence La quantité de photons diffusés est également mesurée par l'analyse du signal de fluorescence capté par la caméra. En calibrant le rapport entre photons détectés et photons diffusés (en tenant compte de l'efficacité optique du système), le nombre moyen de photons nécessaires pour éjecter un atome est confirmé expérimentalement autour de 20. Un ajustement du modèle de diffusion permet d'estimer le paramètre $\alpha \approx 0.4$.

Saturation et effets Doppler À fort temps d'illumination ($\tau_p > 150 \mu\text{s}$), une saturation du nombre de photons diffusés est observée, interprétée comme un effet géométrique : les atomes accélérés atteignent physiquement la puce atomique et cessent de contribuer au signal. Une correction Doppler peut être introduite dans le modèle, mais reste négligeable (< 5%) dans les régimes expérimentaux utilisés.

Limitations expérimentales de la sélection Plusieurs effets peuvent limiter l'efficacité ou la propreté de la sélection :

- La diffraction liée à la taille finie de l'objectif entraîne un flou de l'ordre de $1\text{--}2 \mu\text{m}$ au bord des zones éclairées.
- Une diffusion parasite par la puce peut se produire à forte intensité si tout le DMD est illuminé ; cela est évité en réduisant la taille transverse du faisceau à quelques micro-miroirs seulement.
- Des inhomogénéités d'éclairement dues à la gaussienne du faisceau et au speckle peuvent conduire à une sur-illumination de certaines zones. Un effort a été fait pour homogénéiser l'intensité en sortie de fibre.
- La réabsorption des photons diffusés pourrait entraîner un échauffement du gaz restant. Un désaccord en fréquence de 15 MHz a été testé pour éviter ce phénomène, sans effet visible sur la température du gaz.

Mesures de l'impact sur le gaz restant La température du gaz sélectionné est comparée avant et après sélection via l'analyse des fluctuations de densité après temps de vol. Aucun changement significatif de température ni d'élargissement n'a été observé. Ces résultats suggèrent que, dans les conditions expérimentales utilisées, la sélection ne perturbe pas significativement les atomes restants.

5.2.3 Utilisation dans les protocoles

- Formes utilisées : boîtes, barrières, coupures.
- Préparation initiale contrôlée du gaz.
- Exemples de protocoles expérimentaux utilisant le DMD

Sélection locale et mesure de rapidité En sélectionnant une tranche du gaz, on peut ensuite couper le confinement longitudinal et laisser cette tranche s'étendre. Le profil de densité asymptotique obtenu après un long temps d'expansion est proportionnel à la distribution de rapidité locale du gaz initial. Ce protocole permet ainsi une mesure résolue de $\rho(x, t \rightarrow \infty) \sim \rho(v)$.

Génération d'états hors équilibre La sélection permet également de créer des discontinuités dans le profil de densité, et donc d'initier une dynamique hors équilibre. Par exemple, on peut ne conserver que deux paquets séparés de gaz, qui vont alors osciller l'un vers l'autre. Cette configuration est analogue à un pendule de Newton quantique.

Formes utilisées Les motifs projetés par le DMD peuvent prendre différentes formes : boîtes, barrières, coupures, etc. Cette flexibilité rend l'outil extrêmement précieux pour explorer diverses configurations initiales et protocoles dynamiques.

Contrôle logiciel du DMD Le pilotage du DMD repose sur l'utilisation d'un module intégré fourni par Vialux (V7001-SuperSpeed), qui comprend les bibliothèques logicielles ALP-4. Plusieurs configurations du DMD peuvent être chargées en mémoire au début de chaque cycle expérimental, puis sélectionnées en cours de séquence à l'aide d'un signal digital. Le temps de commutation des miroirs est inférieur à $30\ \mu\text{s}$, ce qui est compatible avec les protocoles étudiés.

Partage du faisceau avec la voie d'imagerie Le faisceau utilisé pour la sélection spatiale est prélevé à partir du faisceau sonde déjà accordé sur la transition $F = 2 \rightarrow F' = 3$ de la raie D2. Le partage est réalisé à l'aide d'un cube séparateur de polarisation placé en aval d'une lame demi-onde, permettant de contrôler la puissance injectée dans la fibre optique. Ce choix simplifie la mise en œuvre en évitant d'ajouter une source laser supplémentaire.

Blocage du faisceau de sélection Deux systèmes permettent de couper le faisceau de sélection pendant le cycle expérimental :

- un cache mécanique (type électro-aimant), utilisé pour un blocage longue durée ;
- un modulateur acousto-optique (AOM), permettant de produire des impulsions brèves de quelques dizaines de μs , en amont du séparateur.

Pour garantir que le faisceau ne perturbe pas l'imagerie, le cache mécanique reste fermé pendant l'utilisation du faisceau sonde.

Montage optique de projection Le faisceau façonné par le DMD est projeté dans le plan des atomes à l'aide d'un système optique permettant de sélectionner l'ordre 0 de diffraction. L'ensemble des optiques est dimensionné (diamètre 50 mm) pour limiter la diffraction. L'alignement est effectué en superposant le faisceau de sélection à la voie d'imagerie.

Grandissement et champ couvert Le montage permet de couvrir une zone de l'ordre de $600\ \mu\text{m}$ dans le plan des atomes, soit plus que la longueur typique d'un nuage ($\sim 400\ \mu\text{m}$ pour $f_{||} = 5\ \text{Hz}$). Le grandissement est déterminé par les focales utilisées : une focale $f_1 = 750\ \text{mm}$ du côté du DMD, et $f = 32\ \text{mm}$ pour l'objectif côté atomes, donnant $G = f/f_1 \approx 0.043$.

Visualisation et interface Le contrôle du DMD s'effectue via une interface graphique permettant de prévisualiser les configurations de miroirs. Une capture d'écran de cette interface est présentée dans la Fig. ??, où la zone active réfléchie est visualisée en rouge. Cette interface est pilotée de manière automatisée pendant le déroulement de la séquence expérimentale.

5.3 Techniques d'imagerie et d'analyse

5.3.1 Imagerie par absorption

- Imagerie *in situ* et après temps de vol.
- Résolution, limites instrumentales.

Système d'imagerie par absorption L'imagerie est réalisée à l'aide d'une caméra CCD à déplétion profonde, optimisée pour une grande efficacité quantique à la longueur d'onde de 780 nm. On utilise des techniques d'imagerie par absorption permettant d'extraire la densité optique $D(x, z)$, elle-même reliée à la densité atomique 3D via la loi de Beer-Lambert. Le profil de densité linéaire $n(x)$ est obtenu par intégration sur les directions transverses.

Imagerie après temps de vol En appliquant un champ magnétique vertical ($B = 8$ G), la polarisation du faisceau peut être rendue circulaire (σ^+) pour adresser la transition fermée $|F = 2, m_F = 2\rangle \rightarrow |F' = 3, m'_F = 3\rangle$. Cette configuration assure une meilleure définition de la section efficace d'absorption. Un temps de vol de quelques ms est utilisé avant l'imagerie, permettant également de décomprimer le nuage.

Imagerie in situ Sans champ magnétique, les atomes sont imagés à $7 \mu\text{m}$ de la puce, ce qui implique une double absorption du faisceau incident et réfléchi. Dans ce cas, la transition n'est pas fermée, ce qui nécessite une calibration du facteur de conversion entre la densité mesurée et la densité réelle. Un ajustement linéaire permet de relier les profils in situ aux profils obtenus après temps de vol.

Choix des paramètres d'imagerie L'intensité du faisceau sonde est choisie typiquement à $I_0/I_{\text{sat}} \approx 0.3$ pour optimiser le rapport signal sur bruit tout en restant dans une zone de linéarité acceptable. Dans ces conditions, le nombre de photons diffusés est de l'ordre de $N_{\text{sc}} \approx 230$ et le rayon de diffusion reste comparable à la résolution du système d'imagerie ($\sim 2.6 \mu\text{m}$).

Limites du modèle de Beer-Lambert La validité de la loi de Beer-Lambert repose sur une approximation à une particule. Dans le cas des gaz fortement denses ou quasi 1D, les effets collectifs, les réabsorptions et les couplages dipolaires peuvent invalider ce modèle. Pour cette raison, même pour l'imagerie in situ, un temps de vol court (~ 1 ms) est souvent appliqué afin de diluer le gaz transversalement.

Défauts et instabilités expérimentales Plusieurs limitations instrumentales ont été identifiées :

- La caméra initialement utilisée montrait des motifs parasites aléatoires ainsi qu'un offset variant au cours du temps. Le remplacement de la caméra a permis de résoudre ces problèmes.
- Des franges d'interférences apparaissaient lors de la division des images d'absorption, probablement dues à des effets Fabry-Pérot dans les optiques. Le désaxage du faisceau d'imagerie a permis d'en limiter l'impact.
- Des photons résiduels, même en l'absence de faisceau sonde, ont été détectés. Ces derniers proviennent vraisemblablement de diffusions multiples dans le système optique.

Conclusion La combinaison de l'imagerie in situ et après temps de vol, ainsi qu'une calibration soigneuse des paramètres optiques et expérimentaux, permettent d'accéder à des profils de densité fiables malgré les limites intrinsèques du système d'imagerie. Une attention particulière a été portée à la réduction des artefacts expérimentaux afin de garantir la précision des mesures.

5.3.2 Analyse des profils

- Extraction des densités, tailles, températures.
- Distribution longitudinale.
- Estimation de la température par ajustement Yang-Yang (optionnel si pertinent).

5.4 Expériences et protocoles étudiés

Cette section peut être la plus personnelle, en précisant ton rôle à chaque fois.

5.4.1 Expansion longitudinale

- Protocole d'expansion (libération longitudinale, maintien du confinement transverse).
- Suivi de l'évolution du profil.
- Analyse à différents temps d'expansion
- Comparaison aux modèles analytiques : solutions homothétiques, GP, asymptotiques.

5.4.2 Motivation et protocole expérimental d'expansion longitudinale

Motivation. Une partie essentielle de mon travail de thèse a consisté à sonder la distribution de rapidités résolue spatialement, ce qui constitue une information clé pour comprendre la dynamique hors équilibre d'un gaz quantique unidimensionnel. Pour accéder à cette observable, il est nécessaire de réaliser un protocole qui relie la distribution de rapidités à des profils de densité mesurables expérimentalement. L'expansion longitudinale dans le guide 1D s'impose alors comme un outil naturel : en laissant le nuage se dilater librement dans la direction longitudinale, on convertit en partie l'information contenue dans les phases et les excitations collectives du système en une dynamique de densité directement accessible par imagerie. Ce protocole permet ainsi de comparer les prédictions issues des équations effectives, comme l'équation de Gross-Pitaevskii dans différents régimes de confinement, avec des mesures expérimentales résolues spatialement.

Considérations physiques. Au-delà de son intérêt pratique, l'expansion longitudinale offre une fenêtre unique sur la physique des gaz bosoniques 1D. Elle permet d'étudier comment un système initialement confiné évolue vers un état dilué, révélant à la fois l'impact du régime transverse (TF 3D vs TF 1D) et l'influence des fluctuations de phase. Dans le régime TF 1D, ces fluctuations deviennent dominantes et se traduisent par des ondulations de densité mesurables. Leur analyse expérimentale, via le spectre de puissance, fournit un accès direct aux corrélations de phase et à la thermodynamique effective du gaz.

Protocole expérimental. Concrètement, l'expansion longitudinale est réalisée selon la séquence illustrée en Fig. ???:

- Le nuage est initialement piégé dans un potentiel magnétique caractérisé par une fréquence longitudinale $f_{\parallel} = 5.0$ ou 9.4 Hz selon les jeux de données, et une fréquence transverse $f_{\perp} = 2.56$ kHz.
- À $t = 0$, le confinement longitudinal est éteint en annulant les courants $I_D = I_{D'} = 0$. La coupure est réalisée sur un temps fini $t_{\parallel} = 70 \mu\text{s} \ll 1/f_{\parallel}$, ce qui évite un pic de courant parasite tout en préservant la dynamique du gaz.
- Le nuage se dilate librement dans la direction longitudinale pendant une durée τ . Ensuite, le confinement transverse est relâché en annulant I_{\perp} , avec un temps de coupure $t_{\perp} = 5 \mu\text{s} \ll 1/f_{\perp}$.
- Une image par absorption est enfin prise après un temps de vol t_v . Pour l'étude des profils de densité, on utilise typiquement $t_v = 1$ ms.

Perspective. La mise en œuvre de ce protocole d'expansion longitudinale ne répond donc pas seulement à un besoin technique de mesure, mais s'inscrit dans une stratégie plus générale : relier les prédictions théoriques de la GHD et des modèles effectifs à des observables accessibles, et sonder directement l'évolution des fluctuations et des corrélations dans un système quantique 1D.

Équations Gross-Pitaevskii dépendantes du temps. La dynamique du système étudié est décrite par l'équation de Gross-Pitaevskii (GP) (1.43) :

$$i\partial_{\tau}\phi = \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r}) + g_{3\text{D}}N|\phi|^2 \right\} \phi,$$

avec $g_{3\text{D}} = 4\pi a_{3\text{D}}$ et en présence d'un potentiel externe (voir (??) et (??)) :

$$V(\vec{r}) = V_{\perp}(\vec{r}_{\perp}) + V_{\parallel}(x), \quad V_{\perp}(\vec{r}_{\perp}) = \frac{1}{2}\omega_{\perp}^2\vec{r}_{\perp}^2, \quad V_{\parallel}(x) = \frac{1}{2}\omega_{\parallel}^2x^2.$$

Séparation des degrés de liberté. Dans un piège de type cigare, caractérisé par $\omega_{\perp} \gg \omega_{\parallel}$, la dynamique transverse se déroule sur des temps caractéristiques beaucoup plus courts que la dynamique longitudinale. On fait alors l'hypothèse d'un *suivi adiabatique transverse* : l'état reste en permanence dans son état fondamental transverse. Ainsi, les degrés de liberté transverses et longitudinaux se découpent et la fonction d'onde peut se factoriser sous la forme

$$\phi(r, \tau) = \psi(x, \tau) \Phi(\vec{r}_{\perp}, n(x, \tau)), \tag{5.1}$$

où $\psi(x, \tau)$ décrit la dynamique longitudinale et Φ est la fonction d'onde transverse dépendant paramétriquement de la densité linéaire $n(x, \tau)$. La condition de normalisation $\int d\vec{r}_{\perp} |\Phi(\vec{r}_{\perp}, n)|^2 = 1$ permet de réécrire la densité linéaire définie par $n \doteq N \int d\vec{r}_{\perp} |\phi|^2$ sous la forme

$$n(x, \tau) = N |\psi(x, \tau)|^2.$$

L'équation de Gross-Pitaevskii se réécrit alors

$$\left(i\partial_\tau + \frac{1}{2}\partial_x^2 - V_{||}(x) - \mu(n) \right) \psi = 0, \quad \mu(n) \Phi = \left(-\frac{1}{2}\Delta_{\vec{r}_\perp} + V_\perp + g_{3D} n |\Phi(\vec{r}_\perp, n)|^2 \right) \Phi. \quad (5.2)$$

Équations hydrodynamiques. En utilisant la transformation de Madelung $\psi(x, \tau) = \sqrt{n(x, \tau)} e^{i\theta(x, \tau)}$, et en introduisant la vitesse $u = \partial_x \vartheta$, on obtient les équations hydrodynamiques associées :

$$\begin{cases} \partial_\tau n + \partial_x(nu) = 0, \\ \partial_\tau u + \partial_x \left(\frac{u^2}{2} + V_{||}(x) + \mu(n) + Q(n) \right) = 0, \end{cases} \quad (5.3)$$

où le terme de pression quantique est donné par $Q(n) = -\frac{1}{2} \frac{\partial_x^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}}$. Ces équations sont équivalentes aux deux premières de (3.26), en tenant compte de la relation thermodynamique $dP = n d\mu$ et en négligeant le terme de pression quantique $Q(n)$.

Pour notre protocole, pour $\tau < 0$ le système est à l'équilibre, avec la condition $\mu(n) + V_{||}(x) = \mu(n(x = 0))$. Pour $\tau \geq 0$, le potentiel longitudinal est éteint : $V_{||}(x) = 0$.

Solutions analytiques homothétique. Si n est solution des équations hydrodynamiques (5.3), pour $\tau \geq 0$. On fait l'hypothèse que la densité linéaire suit une forme homothétique

$$n(x, \tau) = \frac{1}{\lambda(\tau)} n_0 \left(\frac{x}{\lambda(\tau)} \right), \quad (5.4)$$

avec n_0 le profil de densité à $\tau = 0$ et $\lambda(\tau)$ le facteur d'échelle à un temps d'expansion τ . Avec les contraintes $\lambda(0) = 1$ et $\lambda'(0) = 0$ et $N = \int dx n(x, \tau)$. En injectant dans (5.3) il vient que

$$\begin{cases} u(x, \tau) = \frac{\dot{\lambda}(\tau)}{\lambda(\tau)} x, \\ \partial_x \mu(n(x, \tau)) = -\frac{\ddot{\lambda}(\tau)}{\lambda(\tau)} x, \end{cases} \quad (5.5)$$

(car $\partial_\tau u = (\ddot{\lambda}/\lambda - \lambda^2/\lambda^2)x$ et $v\partial_x v = (\dot{\lambda}/\lambda)^2 x$, leur somme donne $(\ddot{\lambda}/\lambda)x$ et initialement $\mu(n_0(x)) = \mu(n_0(x = 0)) - \frac{1}{2}\omega_{||}^2 x^2$.

Calculons maintenant $\partial_x \mu(n(x))$. D'abord

$$\partial_x n(x) = \frac{1}{\lambda^2} n'_0 \left(\frac{x}{\lambda} \right).$$

À l'équilibre $\mu(n_0(y)) = \mu_0 - \frac{1}{2}\omega_{||}^2 y^2$, d'où

$$\mu'(n_0(y)) n'_0(y) = -\omega_{||}^2 y \Rightarrow n'_0(y) = -\frac{\omega_{||}^2 y}{\mu'(n_0(y))}.$$

En prenant $y = x/\lambda$ on obtient

$$n'_0 \left(\frac{x}{\lambda} \right) = -\frac{\omega_{||}^2}{\lambda} \frac{x}{\mu'(n_0(x/\lambda))}.$$

Donc

$$\partial_x n(x) = -\frac{\omega_{||}^2 x}{\lambda^3} \frac{1}{\mu'(n_0(x/\lambda))}.$$

Puis

$$\partial_x \mu(n(x)) = \mu'(n(x)) \partial_x n(x) = -\frac{m\omega_{||}^2 x}{\lambda^3} \frac{\mu'(n(x))}{\mu'(n_0(x/\lambda))}.$$

Or $n_0(x/\lambda) = \lambda n(x)$, donc on définit

$$f(\lambda) \equiv \frac{\mu'(n)}{\mu'(\lambda n)}.$$

On obtient finalement

$$\partial_x \mu(n(x)) = -\frac{\omega_{\parallel}^2}{\lambda^3} f(\lambda) x.$$

En remplaçant dans la deuxième d'Euler (5.5) et en simplifiant x ,

$$\frac{\ddot{\lambda}}{\lambda} = \frac{\omega_{\parallel}^2}{\lambda^3} f(\lambda). \quad (5.6)$$

Proposition. Si le facteur $f(\lambda)$ est bien défini indépendamment de $n > 0$ (ce qui est le cas pour les solutions homothétiques), alors f est une loi de puissance.

Preuve. Posons $g(n) = \mu'(n) > 0$ ou < 0 (i.e. μ strictement monotone). La définition de f équivaut à l'existence d'une fonction $\chi(\lambda) = 1/f(\lambda)$ telle que

$$g(\lambda n) = \chi(\lambda) g(n) \quad (\forall \lambda, n > 0).$$

En prenant $n = 1$, on a $\chi(\lambda) = g(\lambda)/g(1)$. Donc, pour tous $a, b > 0$,

$$\chi(ab) = \frac{g(ab)}{g(1)} = \frac{\chi(a) g(b)}{g(1)} = g(a) g(b),$$

c'est-à-dire que χ est *multiplicative*. Sous une hypothèse physique très faible (continuité/mesurabilité ou simple localement bornée), toute fonction multiplicative sur \mathbb{R}_+^* est de la forme

$$\chi(\lambda) = \lambda^{\alpha-1} \Rightarrow f(\lambda) = \lambda^{1-\alpha}.$$

□

Proposition. $f(\lambda) = \lambda^{1-\alpha}$ et $\mu(n) \propto n^\alpha$ sont équivalents.

1. Si $\mu(n) = C n^\alpha$ (avec $C \neq 0$) : Alors $\mu'(n) = C\alpha n^{\alpha-1}$. Par conséquent

$$f(\lambda) = \frac{C\alpha n^{\alpha-1}}{C\alpha (\lambda n)^{\alpha-1}} = \lambda^{1-\alpha}.$$

2. Réciproque : si $f(\lambda) = \lambda^{1-\alpha}$ pour tout $\lambda > 0$ (et tout $n > 0$) : Posons $g(n) = \mu'(n)$. L'hypothèse s'écrit

$$\frac{g(n)}{g(\lambda n)} = \lambda^{1-\alpha} \iff g(\lambda n) = \lambda^{\alpha-1} g(n),$$

pour tout $n > 0$ et tout $\lambda > 0$.

Fixons $n_0 > 0$ et définissons $\varphi(\lambda) \equiv g(\lambda n_0)$. La relation ci-dessus donne

$$\varphi(\lambda) = \lambda^{\alpha-1} \varphi(1).$$

Autrement dit $\varphi(\lambda) = C_1 \lambda^{\alpha-1}$ pour une constante $C_1 = \varphi(1) = g(n_0)$. En remplaçant $\lambda = x/n_0$ on obtient pour tout $x > 0$

$$g(x) = C_1 x^{\alpha-1}.$$

Ainsi $g(n) = \mu'(n) = C n^{\alpha-1}$ avec C constant.

En intégrant (en supposant $\alpha \neq 0$), $\mu(n) \propto n^\alpha$. (Pour $\alpha = 0$ on obtient $\mu'(n) = C n^{-1}$ et $\mu(n) = C \ln n + \text{const.}$)

Remarque sur les hypothèses. La démonstration utilise la propriété fonctionnelle multiplicative $g(\lambda n) = \lambda^{\alpha-1} g(n)$. Sous une hypothèse faible de continuité (ou dérivabilité) en n cette équation force la forme de puissance $g(n) \propto n^{\alpha-1}$. Sans régularité, des solutions pathologiques peuvent exister mais ne sont pas physiquement pertinentes dans le contexte thermodynamique.

□

Cas particulier. Dans le régime quasi-1D on utilise l'expression d'interpolation (cf. Salasnich et al.)

$$\mu(n) = \hbar\omega_{\perp} \left(\sqrt{1 + 4a_{3D}n} - 1 \right),$$

où n est la densité linéique et a_{3D} le scattering length. De cette formule on obtient deux limites asymptotiques :

- *Régime transverse Thomas–Fermi (TF)*, $4a_{3D}n \gg 1$. Alors $\sqrt{1 + 4a_{3D}n} \simeq 2\sqrt{a_{3D}n}$ et

$$\mu(n) \simeq 2\hbar\omega_{\perp}\sqrt{a_{3D}n},$$

ce qui correspond à $\mu \propto n^{1/2}$ (donc $\alpha = \frac{1}{2}$). Ce régime décrit la situation où $\mu \gg \hbar\omega_{\perp}$ et de nombreux niveaux transverses sont excités.

- *Régime quasi-1D (transverse fondamental)*, $4a_{3D}n \ll 1$. Alors $\sqrt{1 + 4a_{3D}n} \simeq 1 + 2a_{3D}n$ et

$$\mu(n) \simeq 2\hbar\omega_{\perp}a_{3D}n \equiv gn,$$

avec $g = 2\hbar\omega_{\perp}a_{3D}$. Ici $\mu \propto n$ (donc $\alpha = 1$) ; on est proche de l'état fondamental transverse (gaussien).

Les deux formes ci-dessus sont bien les limites asymptotiques de l'expression d'interpolation donnée plus haut.

Enfin, l'équation d'évolution du facteur d'échelle obtenue précédemment s'écrit correctement

$$\ddot{\lambda}\lambda^{\alpha+1} = \omega_{\parallel}^2$$

On part de

$$\ddot{\lambda}\lambda^{\alpha+1} = \omega_{\parallel}^2,$$

et on pose $v = \dot{\lambda}$. Comme $\ddot{\lambda} = \dot{\lambda}\frac{d\dot{\lambda}}{d\lambda}$, on obtient

$$\dot{\lambda}\frac{d\dot{\lambda}}{d\lambda} = \omega_{\parallel}^2\lambda^{-(\alpha+1)}.$$

Cas $\alpha \neq 0$. Intégration par rapport à λ :

$$\frac{1}{2}\dot{\lambda}^2 = \omega_{\parallel}^2 \int \lambda^{-(\alpha+1)} d\lambda = -\frac{\omega_{\parallel}^2}{\alpha} \lambda^{-\alpha} + C,$$

où C est une constante d'intégration déterminée par les conditions initiales $\lambda(0) = \lambda_0$, $\dot{\lambda}(0) = \dot{\lambda}_0$:

$$C = \frac{1}{2}\dot{\lambda}_0^2 + \frac{\omega_{\parallel}^2}{\alpha} \lambda_0^{-\alpha}.$$

On a donc la première intégrale

$$\dot{\lambda}^2 = \dot{\lambda}_0^2 + \frac{2\omega_{\parallel}^2}{\alpha} (\lambda_0^{-\alpha} - \lambda^{-\alpha}).$$

Cas $\alpha = 0$. L'équation devient $\ddot{\lambda}\lambda = \omega_{\parallel}^2$. On obtient

$$\dot{\lambda}^2 = \dot{\lambda}_0^2 + 2\omega_{\parallel}^2 \ln\left(\frac{\lambda}{\lambda_0}\right).$$

On impose les conditions initiales

$$\lambda(0) = 1, \quad \dot{\lambda}(0) = 0,$$

et l'on considère le cas $\alpha > 0$.

Régime à temps courts ($\tau \ll 1/\omega_{\parallel}$). On linéarise autour de l'équilibre $\lambda = 1$ en posant $\lambda(\tau) = 1 + \epsilon(\tau)$ avec $|\epsilon| \ll 1$. L'équation de mouvement devient un oscillateur harmonique forcé :

$$\ddot{\epsilon} + (1 + \alpha) \omega_{\parallel}^2 \epsilon - \omega_{\parallel}^2 = 0.$$

Pour les conditions initiales choisies, la solution à petits temps est

$$\epsilon(\tau) \simeq \frac{1}{2} \omega_{\parallel}^2 \tau^2 \quad \Rightarrow \quad \lambda(\tau) \simeq 1 + \frac{\omega_{\parallel}^2 \tau^2}{2},$$

indépendamment de l'équation d'état $\mu(n)$. Ce comportement correspond au profil universel observé à temps courts (Fig. 7.4(a)) pour tous les régimes TF.

Régime à temps longs ($\tau \gg 1/\omega_{\parallel}$). Pour $\lambda^{-\alpha} \ll 1$, l'équation intégrée donne

$$\dot{\lambda} \simeq \sqrt{\frac{2\omega_{\parallel}^2}{\alpha}} \quad \Rightarrow \quad \lambda(\tau) \simeq \frac{2}{\alpha} \omega_{\parallel} \tau.$$

En particulier :

- TF 1D ($\alpha = 1$) : $\lambda(\tau) \simeq \sqrt{2} \omega_{\parallel} \tau$,
- TF 3D ($\alpha = 1/2$) : $\lambda(\tau) \simeq 2 \omega_{\parallel} \tau$.

Ces comportements sont bien observés sur la Fig. 7.4(b) et correspondent à l'expansion asymptotique du gaz.

Système	loi pour $\mu(n)$	β (avec $f(\lambda) = \lambda^{-\beta}$)	$\omega_{\text{breath}}/\omega_{\parallel}$
Gaz classique isotherme (1D, $\mu \propto \ln n$)	$\mu'(n) \propto 1/n$	-1	$\sqrt{3} \approx 1.732$
Gaz de Bose 1D en régime moyen (GP, $\mu \propto n$)	$\alpha = 1$	0	2
Tonks–Girardeau (1D, $\mu \propto n^2$)	$\alpha = 2$	1	$\sqrt{5} \approx 2.236$
Gaz de Fermi unitaire (ex. 3D, $\mu \propto n^{2/3}$)	$\alpha = \frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\sqrt{3 + \frac{2}{3}} \approx 1.915$
Cas général (loi de puissance)	$\mu \propto n^{\alpha}$	$\beta = \alpha - 1$	$\sqrt{3 + \alpha}$

TABLE 5.1 – Valeurs de β et fréquences du mode de souffle pour quelques régimes usuels.

5.4.3 Sonde locale de distribution de rapidité

- Principe de la mesure : coupure d'une tranche puis expansion.
- Rôle du DMD dans la sélection.
- Accès à la distribution de vitesse locale.
- Comparaison avec les prédictions GHD.
- Limites et incertitudes

Distribution de rapidités locale dans les gaz 1D

Motivation. La compréhension des gaz de bosons 1D avec interactions de contact répulsives repose sur la notion de distribution de rapidités $\rho(\theta)$. Chaque état propre du système peut être paramétré par un ensemble de rapidités $\{\theta_i\}$ (Ansatz de Bethe), ou interprété comme les vitesses de quasi-particules à durée de vie infinie. Ici, on utilise la définition pratique issue des expansions 1D : les rapidités correspondent aux vitesses asymptotiques des atomes après une expansion, avec $x_j \simeq \tau \theta_j$ pour un temps τ long. Cette définition est directement applicable à des mesures expérimentales de distribution de rapidités locales.

Distribution locale et LDA. Pour un nuage atomique piégé dans un potentiel longitudinal variant lentement, on peut appliquer l'Approximation de Densité Locale (LDA). Le gaz est alors vu comme un fluide décomposé en cellules mésoscopiques de densité homogène et relaxée. Dans chaque cellule, l'état d'équilibre est décrit par un Ensemble de Gibbs Généralisé (GGE), ou équivalement par une distribution de rapidités locale $\rho(x, \theta)$. Cette description permet d'étudier non seulement l'équilibre, mais aussi la dynamique hors équilibre à grandes échelles spatiales et temporelles, via la théorie Hydrodynamique Généralisée (GHD).

Protocole expérimental. Pour mesurer $\rho(x, \theta)$ localement :

1. Une zone du nuage atomique de taille ℓ centrée en x_0 est sélectionnée à l'aide d'un dispositif de micromiroirs digitaux (DMD). La pression de radiation supprime instantanément les atomes en dehors de la zone, laissant uniquement ceux de la cellule.
2. Après la sélection, le confinement longitudinal est relâché, tandis que le confinement transverse reste actif. Les atomes réalisent une expansion 1D pendant un temps τ , puis le profil de densité est imager (typiquement pour $\tau \sim 1$ ms).
3. Le protocole est répété pour plusieurs positions x_0 , permettant d'obtenir la distribution de rapidités locale sur l'ensemble du nuage.

Mesures à l'équilibre. Pour un gaz initialement à l'équilibre dans un piège harmonique, le profil de densité de chaque zone sélectionnée est analysé via la thermodynamique Yang-Yang et la LDA, donnant température T_{YY} et potentiel chimique μ_{YY} . Après un temps d'expansion long, le profil devient homothétique à la distribution de rapidités locale $\rho(x, \theta)$. La comparaison avec les prédictions numériques montre une bonne cohérence, confirmant que le protocole permet de sonder efficacement $\rho(x, \theta)$.

Résumé. — Une sonde locale de distribution de rapidités a été mise en place grâce au DMD. — Les atomes sélectionnés réalisent une expansion dans le guide 1D. — Après un temps long, le profil de densité reflète la distribution de rapidités locale. — Ce protocole a été appliqué avec succès sur un nuage atomique initialement à l'équilibre.

Dynamique.

Motivation. Pour vérifier si le régime asymptotique des expansions longitudinales est atteint, il est nécessaire de comparer les résultats expérimentaux à une théorie dynamique. L'outil adapté est l'Hydrodynamique Généralisée (GHD), déjà introduite au Chapitre 3, qui décrit l'évolution spatio-temporelle de la distribution de rapidités.

Invariance d'échelle hydrodynamique. On considère une sélection initiale homogène de taille ℓ centrée en x_0 . Dans ce cas, les équations GHD (3.35) s'écrivent sans potentiel, avec la condition initiale $\rho(x, \theta, 0) = \rho_0(\theta)$ si $|x - x_0| \leq \ell/2$, et 0 sinon. En introduisant les variables sans dimension $\alpha = (x - x_0)/\ell$ et $\beta = \tau/\ell$, l'équation devient indépendante de ℓ .

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_\beta \tilde{\rho}(\alpha, \theta; \beta) + \partial_x (\nu_{[\tilde{\rho}]}^{\text{ell}}(\theta) \tilde{\rho}(\alpha, \theta; \beta)) = 0 \\ \tilde{\rho}(\alpha, \theta; 0) = \begin{cases} \rho_0(\theta) & \text{si } |\alpha| \leq \frac{1}{2}, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \end{array} \right.$$

Il en résulte que les profils de densité $n(x, \tau)$, exprimés en fonction de α , ne dépendent que du rapport β . Autrement dit, deux sélections de tailles différentes mais telles que τ/ℓ soit constant doivent conduire aux mêmes profils après expansion. Cette invariance a été vérifiée expérimentalement : les profils se superposent de manière remarquable.

Lien avec les équations de Gross-Pitaevskii Dans le régime quasi-condensat (qBEC), à basse température, la dynamique peut aussi être décrite par les équations hydrodynamiques issues de Gross-Pitaevskii (en négligeant la pression quantique) Après changement de variables ($\alpha = (x - x_0)/\ell$, $\beta = \tau/\ell$, $\tilde{n} = n/n_0$), on retrouve un système d'équations qui ne dépend plus de ℓ , mais uniquement du rapport adimensionné $\eta = \beta g n_0/m$.

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_\beta \tilde{n} + \partial_\alpha (\tilde{v} \tilde{n}) = 0, \quad \partial_\beta \tilde{v} + \tilde{v} \partial_\alpha \tilde{v} = -\frac{gn_0}{m} \partial_\alpha \tilde{n}, \\ \tilde{n}(\alpha, \beta = 0) = \begin{cases} 1 & \text{si } |\alpha| \leq \frac{1}{2}, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad \tilde{v}(\alpha, \beta = 0) = 0. \end{array} \right.$$

Il en découle que les profils de densité sont universels lorsqu'ils sont exprimés en fonction de (α, η) . Expérimentalement, ce comportement est bien confirmé : les centres des profils se superposent pour des conditions initiales différentes, et l'accord est même bon sur les bords.

Régime asymptotique. L'expansion des tranches est bien décrite par l'hydrodynamique généralisée (GHD). Les comparaisons entre données expérimentales et simulations GHD (avec des distributions thermiques initiales) montrent un bon accord au centre des profils, mais révèlent que le régime asymptotique complet n'est pas atteint dans les temps accessibles expérimentalement. Pour $\tau = 50$ ms, l'écart reste d'environ 12%, et une convergence complète nécessiterait des temps irréalistes (~ 500 ms). L'extraction de la distribution de rapidité à partir des profils reste donc approximative.

Hypothèse thermique. Afin de restreindre le nombre de paramètres d'ajustement, on suppose que la distribution de rapidité locale est thermique. Dans ce cas, seule la température T est ajustée, le potentiel chimique étant fixé par l'équation d'état. L'ajustement sur les profils expérimentaux conduit à une température effective $T_{\text{fit}} = 230$ nK, environ 2.5 fois plus grande que celle extraite à l'équilibre. Néanmoins, les distributions de rapidité obtenues restent proches, confirmant que, dans le régime fortement qBEC, la dynamique dépend surtout des interactions et peu de la température. L'influence possible d'une faible population transversale excitée a été évaluée et s'est révélée négligeable.

8.6 Mesure locale de distribution de rapidités hors équilibre

Le faisceau de sélection (DMD) permet non seulement de sonder la distribution de rapidités locale, mais aussi de créer des situations hors équilibre. Un protocole illustratif consiste à retirer les atomes d'une région centrale de taille $\ell_0 = 70 \mu\text{m}$, puis à laisser le gaz évoluer librement. Après un temps $\tau = 15$ ms, la distribution de rapidités développe une structure doublement piquée, très différente d'une distribution thermique. Une seconde sélection locale ($\ell = 35 \mu\text{m}$) suivie d'une expansion révèle expérimentalement ce profil, en excellent accord avec les simulations GHD.

Cette approche démontre l'importance d'une mesure locale : alors que la distribution globale $\int dx \rho(x, \theta)$ est conservée, la distribution locale $\rho(x, \theta)$ reflète directement la dynamique hors équilibre. Le dispositif basé sur le DMD offre ainsi un outil puissant pour générer et caractériser divers protocoles hors équilibre (cisaillage, jonctions de densité, états stationnaires non thermiques, etc.), ouvrant de nouvelles perspectives pour l'étude des gaz de Bose 1D.

Chapitre 6

Étude du protocal de bi-partition : Mesure de distribution de rapidités locales $\rho(x, \theta)$ pour des systèmes hors équilibre

Contents

6.1	Dynamique balistique d'un gaz 1D après une coupure bipartite	75
6.1.1	Préparation expérimentale et protocole de coupure	75
6.1.2	Cadre de la GHD et dynamique balistique et	76
6.1.3	Validation expérimentale de la dynamique hydrodynamique	78
6.2	Sondre la distribution locale des rapidités	79
6.2.1	Sélection d'une tranche localisée après déformation du bord	80
6.2.2	Expansion de la tranche et observation d'une asymétrie	81
6.3	Simulations numériques	83
6.3.1	Système homogène à l'équilibre thermique	83
6.3.2	Dynamique du contour dans l'espace des phases (x, θ)	84
6.3.3	Simulation de la déformation du bord	85
6.3.4	Simulation de l'expansion.	85
6.3.5	Comparaison aux données expérimentales et discussion	87

Introduction

Objectif de ce chapitre : Ce chapitre est consacré à l'étude de la dynamique hors équilibre d'un gaz quantique unidimensionnel intégrable, soumis à une discontinuité initiale de densité induite par un protocole de type **quench bipartite**. L'objectif principal est d'évaluer dans quelle mesure la Théorie Hydrodynamique Généralisée (GHD) permet de décrire cette dynamique, tant sur le plan théorique qu'expérimental. Nous nous appuyons sur une préparation initiale contrôlée, un protocole de coupure abrupte, et une analyse des profils de densité et des facteurs d'occupation pour tester les prédictions de la GHD.

Modèles intégrables et thermalisation généralisée : Les modèles intégrables jouent un rôle central dans l'étude des systèmes quantiques à plusieurs corps, notamment en régime hors équilibre. Leur caractéristique essentielle est la présence d'une infinité de constantes du mouvement, qui empêche l'évolution vers l'équilibre thermodynamique canonique. Cette contrainte mène à l'émergence d'un état d'équilibre généralisé, décrit non par l'ensemble canonique, mais par l'**Ensemble de Gibbs Général (GGE)**, qui maximise l'entropie sous contraintes intégrales multiples (cf Chap (2)).

Une analogie classique : le pendule de Newton : Une illustration classique du comportement non diffusif des systèmes intégrables est fournie par le pendule de Newton : les chocs élastiques entre sphères de masses égales conduisent à une propagation balistique de l'énergie, sans diffusion. Cette analogie, bien que classique, capture l'essence du transport cohérent que l'on retrouve dans les systèmes intégrables quantiques.

Le problème de Riemann en hydrodynamique : Un test fondamental de la dynamique hors équilibre est fourni par le problème dit de Riemann, qui consiste à étudier l'évolution d'un système à partir d'une discontinuité initiale dans l'espace. Dans sa formulation générale, on considère une équation de conservation de la forme

$$\partial_t u + \partial_x f(u) = 0, \quad (6.1)$$

accompagnée d'une condition initiale arbitraire $u(x, t = 0) = u_0(x)$. Dans le cas particulier que nous considérons ici, l'état initial est composé de deux régions homogènes, juxtaposées de part et d'autre de l'origine :

$$u(x, t = 0) = \begin{cases} u_g & \text{si } x < 0 \\ u_d & \text{si } x > 0 \end{cases}. \quad (6.2)$$

Ce type de configuration, appelé problème de Riemann à données discontinues, permet de sonder la réponse non linéaire du système.

Le problème de Riemann quantique : un cadre paradigmatic. Dans un système quantique intégrable, le problème de Riemann consiste à connecter brusquement deux régions préparées dans des états thermodynamiques différents, généralement homogènes. Ce scénario, dit de *quench bipartite*, constitue un cadre paradigmatic pour sonder la dynamique hors équilibre dans les gaz quantiques unidimensionnels [?, ?]. Contrairement au cas classique, la présence d'un nombre infini de constantes du mouvement empêche l'établissement d'un état thermique usuel. La relaxation locale conduit alors à un état d'équilibre généralisé, spécifique à chaque région de l'espace-temps. Le problème de Riemann quantique permet ainsi d'étudier la propagation balistique d'informations, l'émergence d'un régime autosimilaire stationnaire, et la structure fine des distributions locales de quasi-particules. Il offre un terrain théorique idéal pour tester la validité de la Théorie Hydrodynamique Généralisée [?, ?], tout en étant expérimentalement accessible grâce aux systèmes ultrafroids unidimensionnels.

Apparition de la Théorie Hydrodynamique Généralisée (GHD) : L'avènement de la GHD a marqué une avancée majeure dans la compréhension de la dynamique des systèmes intégrables. Introduite dans le contexte des théories des champs (modèle de Sinh-Gordon, modèle de Lieb-Liniger) et des chaînes quantiques (chaîne XXZ de Heisenberg) [références à insérer], elle permet de décrire analytiquement la propagation d'informations dans ces systèmes en intégrant les contraintes des charges conservées. Plusieurs solutions analytiques du problème de Riemann ont depuis été obtenues, notamment dans la chaîne XXZ et pour des gaz de sphères dures en 1D, confirmant la validité et la puissance prédictive de la GHD.

Notre système : un gaz de bosons 1D faiblement interactifs : Nous considérons un gaz quantique unidimensionnel de bosons faiblement interactifs, confiné dans une géométrie strictement 1D, et bien décrit par le modèle intégrable de Lieb-Liniger avec interactions répulsives. Ce système présente un comportement quantique collectif tout en restant dans un régime faiblement corrélé, ce qui en fait un candidat idéal pour tester les prédictions de la GHD.

Préparation expérimentale et protocole de coupe : La configuration initiale consiste à préparer un gaz homogène à densité constante n_0 , et à température contrôlée (voir Fig. 6.4). Un protocole de coupe abrupte est ensuite appliqué : la partie gauche du système ($x < 0$) est vidée de ses atomes, tandis que la partie droite ($x > 0$) reste occupée. Ce *quench bipartite* génère une discontinuité initiale de densité, analogue au problème de Riemann, mais dans un système quantique doté d'un nombre infini de lois de conservation. Ce protocole a déjà fait l'objet d'une première étude expérimentale dans la thèse de Léa Dubois [?], qui en a révélé le potentiel pour sonder la dynamique hors équilibre.

Observation d'une propagation balistique : Nous prolongeons cette étude en analysant la dynamique unitaire du gaz à l'aide des outils de la GHD. Nous montrons que la discontinuité initiale donne lieu à une propagation balistique, en bon accord avec la solution du problème de Riemann généralisé. Le profil de densité mesuré à différents temps révèle une frontière en déplacement linéaire, reproduite avec précision par les prédictions théoriques (voir Fig. 6.5 (e)-(g)). Des écarts résiduels, attribuables à des effets thermiques et à des imperfections expérimentales, sont toutefois observés.

Reconstruction de la distribution de rapidité : Un aspect central de notre approche repose sur la reconstruction de la distribution initiale de rapidité à partir des profils de densité mesurés dans la région de transition. Cette démarche s'apparente à une forme de *thermométrie généralisée*, et permet d'inférer des informations fines sur les états locaux du système.

Accès expérimental au facteur d'occupation $\nu(x, \theta)$: Nous développons également une méthode expérimentale originale permettant de mesurer localement le facteur d'occupation $\nu(x, \theta)$ dans la région de déformation. Cette quantité révèle une forte asymétrie : large et lisse du côté initialement occupé, abrupte et tronquée du côté initialement vide. Ce comportement reflète la nature hors équilibre du système, et s'accorde qualitativement avec les prédictions de la GHD, bien que la résolution spatiale expérimentale limite l'accès aux détails les plus fins.

Conclusion : Ce chapitre explore ainsi, à la fois théoriquement et expérimentalement, la dynamique d'un gaz intégrable soumis à une discontinuité initiale de densité. Il met en lumière la pertinence de la GHD pour décrire de telles dynamiques, et démontre la faisabilité d'outils d'analyse avancés comme la reconstruction de la distribution de rapidité ou la mesure locale du facteur d'occupation.

6.1 Dynamique balistique d'un gaz 1D après une coupure bipartite

Introduction

Dans cette section, nous étudions la dynamique hors équilibre d'un gaz quantique unidimensionnel de bosons soumis à une coupure bipartite. Ce protocole expérimental permet de générer une discontinuité nette dans le profil de densité initial, menant à une évolution balistique non triviale.

L'objectif est double :

- du point de vue expérimental, suivre en temps réel l'évolution du gaz et caractériser ses propriétés locales et globales ;
- du point de vue théorique, confronter ces observations aux prédictions de la Théorie Hydrodynamique Généralisée (GHD), qui fournit un cadre analytique pour décrire la relaxation de systèmes intégrables à grande échelle.

Cette étude constitue une illustration directe du problème de Riemann quantique, dans lequel un état initial composé de deux régions thermodynamiques différentes évolue selon une dynamique déterministe. Elle permet également d'accéder à des signatures locales de la distribution de quasi-particules (ou rapidités), jusque-là difficiles à sonder expérimentalement.

6.1.1 Préparation expérimentale et protocole de coupure

Contexte expérimental et références Les détails concernant l'imagerie, le piégeage et la sélection spatiale sont présentés de manière approfondie dans le chapitre (5), ainsi que dans la thèse de Léa Dubois [?]. Dans cette sous-section, nous nous limitons aux éléments essentiels à la compréhension du protocole de coupure et de la dynamique qui en résulte.

Préparation d'un gaz unidimensionnel de bosons Nous utilisons un gaz ultra-froid de ^{87}Rb , piégé sur une puce atomique dans l'état hyperfin $|F = 2, m_F = 2\rangle$. Le confinement transverse est assuré par trois microfils parcourus par des courants RF, produisant un piège harmonique de fréquence $\omega_\perp/2\pi = 2,56$ kHz. Après évaporation, on obtient un gaz à température $T \approx 100$ nK, dans un régime 1D caractérisé par $\mu, k_B T \ll \hbar\omega_\perp$. Le couplage effectif en 1D est $g = 2a_{3D}\hbar\omega_\perp$, avec $a_{3D} = 5,3$ nm.

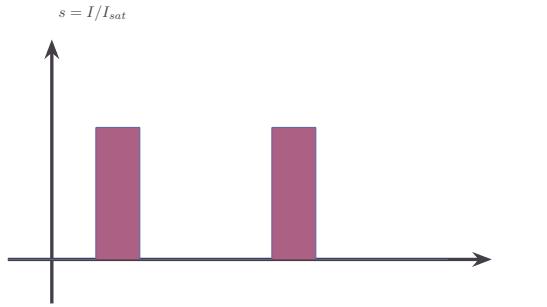


FIGURE 6.1 – Schéma synthétique du dispositif expérimental : cycles d’illumination, intensités de courant, géométrie du piège, et évolution du profil longitudinal au cours du protocole de coupure.

Confinement longitudinal quartique Le confinement longitudinal est généré par quatre fils latéraux, dont les courants sont ajustés pour annuler les composantes linéaire, quadratique et cubique du potentiel. Il en résulte un confinement quartique $V(x) = a_4x^4$, produisant un profil de densité quasi-plat sur environ $250 \mu\text{m}$. Cette homogénéité est cruciale pour l’étude des dynamiques balistiques et pour l’application de la GHD.

Coupure bipartite par sélection spatiale La bipartition initiale est réalisée en illuminant l’extrémité gauche du gaz par un faisceau quasi-résonant façonné par un DMD. Les atomes exposés sont expulsés du piège via pression de radiation. Cette méthode, développée dans [?], permet de créer une discontinuité nette du profil de densité, entre une région vide ($x < 0$) et une région remplie homogène ($x > 0$).

Évolution après coupure Une fois la coupure effectuée, le confinement longitudinal est supprimé tandis que le confinement transverse est maintenu. Le gaz évolue alors librement dans une direction, ce qui est analogue au problème de Riemann (6.1) mais depuis une condition initiale de deux régions homogène (6.2). L’évolution du profil de densité $n(x, t)$ est suivie par imagerie après différentes durées t d’évolution.

[figure de shemat de coupure en tikz zt au coter deux nuage , un coupé et l'autre non coupé]

6.1.2 Cadre de la GHD et dynamique balistique et

Points clés :

- Présentation du facteur d’occupation $\nu(x, \theta; t)$ comme variable hydrodynamique.
- Formulation de l’équation convective de GHD.
- Structure auto-similaire $\nu(x, \theta; t) = \nu^*(x/t, \theta)$ et résolution implicite via la vitesse effective.
- Prédictions analytiques pour le profil de densité $n(x, t)$.

Dans cette section, nous présentons le cadre théorique de la *Théorie Hydrodynamique Généralisée* (GHD) appliquée à l’expérience décrite précédemment. L’objectif est de décrire analytiquement la dynamique balistique induite par une coupure bipartite dans un gaz quantique unidimensionnel, en exploitant les équations de GHD appliquées au modèle de Lieb-Liniger.

Nous procédons en plusieurs étapes :

1. Nous introduisons la description hydrodynamique à l’échelle d’Euler.
2. Nous formulons les équations de GHD pour l’évolution du facteur d’occupation $\nu(x, \theta; t)$.
3. Nous analysons la structure auto-similaire de la solution en régime hydrodynamique.
4. Nous présentons la solution semi-analytique du problème de Riemann bipartite, ainsi que sa résolution graphique.

Description hydrodynamique à l’échelle d’Euler Dans un système intégrable, les états stationnaires sont entièrement caractérisés par leur distribution de rapidités $\rho(\theta)$ ou, de manière équivalente, par le facteur d’occupation $\nu(\theta)$ (Cf Chap (3)). En régime hors équilibre, on suppose qu’à des échelles de temps longues et d’espace macroscopiques, le système évolue lentement vers un état localement stationnaire. Cela permet d’introduire une description hydrodynamique dans laquelle les quantités locales dépendent de la position et du temps : $\rho(x, \theta; t)$ ou $\nu(x, \theta; t)$.

Pourquoi travailler avec ν plutôt qu'avec ρ ?

Équation de GHD en termes de ρ . L'évolution à grande échelle du système est gouvernée par les équations de GHD [?, ?]. L'évolution pour la distribution des rapidités $\rho(x, \theta; t)$ (Eq (3.35)), en l'absence de potentiel extérieur, prend la forme d'une équation convective :

$$\partial_t \rho + \partial_x (\nu_{[\rho]}^{\text{eff}} \rho) = 0, \quad (6.3)$$

où $\nu_{[\rho]}^{\text{eff}}(\theta)$ est la vitesse effective des quasi-particules de rapidité θ , fonctionnelle non linéaire de ρ et où un terme de compression $\partial_x (\nu_{[\rho]}^{\text{eff}} \rho)$ apparaît lorsqu'on développe la dérivée. Cela complique l'analyse, notamment lorsque les vitesses effectives varient fortement dans l'espace ou le temps.

Pour chaque rapidité θ , l'équation (6.3) constitue un cas particulier du problème de Riemann généralisé (6.1). Nous considérons ici une condition initiale de type « coupure bipartite », représentant un état homogène à droite ($x > 0$) et vide à gauche ($x < 0$) :

$$\rho(x, \theta; t = 0) = \begin{cases} \rho_0(\theta) & \text{si } x > 0, \\ 0 & \text{si } x < 0. \end{cases} \quad (6.4)$$

Ce type de condition correspond, pour chaque rapidité θ , au condition introduit dans l'introduction (6.2).

Équation de GHD en termes de ν . En comparaison, l'évolution du facteur d'occupation $\nu(x, \theta; t)$ (Eq (3.38)), qui, en l'absence de potentiel extérieur suit une équation de transport pur :

$$\partial_t \nu + \nu_{[\nu]}^{\text{eff}} \partial_x \nu = 0, \quad (6.5)$$

où la dérivée temporelle est directement couplée à une dérivée spatiale. Cette forme préserve l'information le long des caractéristiques associées aux vitesses effectives $\nu_{[\nu]}^{\text{eff}}$, ce qui rend la dynamique plus lisible et plus simple à analyser.

Les équation de transport pur (6.5) ne sont pas des cas particuliers du problème de Riemann généralisé (6.1). Et donc même si les conditions initiales de type « coupure bipartite », pour ν :

$$\nu(x, \theta; t = 0) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } x > 0, \\ 0 & \text{si } x < 0. \end{cases} \quad (6.6)$$

sont du type (6.2).

Dans ce travail, nous choisissons de formuler la dynamique hydrodynamique généralisée en termes de la fonction d'occupation $\nu(x, \theta; t)$, plutôt que de la densité de quasi-particules $\rho(x, \theta; t)$. Cette approche présente plusieurs avantages. D'une part, l'équation vérifiée par ν est une équation de transport pur (6.5), ce qui permet une résolution naturelle par la méthode des caractéristiques, plus simplement que dans (6.3). D'autre part, ν possède une interprétation physique claire comme taux de remplissage des états accessibles, borné entre 0 et 1, ce qui en fait une variable plus stable et mieux adaptée aux calculs analytiques ou numériques. De plus, la dynamique effective des observables s'exprime naturellement en fonction de ν . Enfin, ν et ρ étant liés (par (1.87)), résoudre l'équation en ν revient, une fois $\nu_{[\nu]}^{\text{eff}}$ déterminé, à résoudre complètement la dynamique de ρ .

Structure auto-similaire de la solution. Un point central est que les conditions initiales (6.6) sont invariantes par dilatation. En effet quelque soit $\alpha > 0$, et pour tout x réelle, on a $\nu(\alpha x, \theta; t = 0) = \nu(x, \theta; t = 0)$. Un autre point central de la GHD est l'invariance d'échelle des solutions de l'équation (6.5) ((6.3) aussi et plus généralement de (6.1)) . En effet, si $\nu(x, \theta; t)$ est solution de l'équation (6.5), alors $\nu(\alpha x, \theta; \alpha t)$ l'est également , pour tout $\alpha > 0$, avec les conditions initiales $\nu(\alpha x, \theta; t = 0)$. **Comme les fonctions $\nu(\alpha x, \theta; t = 0)$ et $\nu(\alpha x, \theta; t = 0)$ coïncident, alors si (6.5) admet au plus une solution physique (entropique Cf Annex ??) pour chaque données initiales, on doit avoir $\nu(\alpha x, \theta; \alpha t) = \nu(x, \theta; t)$ pour tout $\alpha > 0$.** Sous hypothèse d'unicité (Cf Annex ??), cette propriété implique que :

$$\nu(x, \theta; t) = \nu^* \left(\frac{x}{t}, \theta \right), \quad (6.7)$$

autrement dit, les solutions dépendent uniquement du rapport $\xi = x/t$, appelé *variable auto-similaire*.

Résolution de l'évolution de v . La dynamique est alors entièrement encodée dans la fonction $v^*(\xi, \theta)$, qui décrit la structure locale du gaz le long des rayons de vitesse ξ . Et, pour ξ est fixé, θ libre, (6.5), se réécrit , avec des dérivés selon ξ :

$$(\xi - v_{[\nu^*(\xi, \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta)) \partial_\xi v^* = 0. \quad (6.8)$$

Soit simplement pour chaque θ , soit la vitesse effective est égale à ξ , soit $\partial_\xi v^*(\xi, \theta) = 0$.

Autrement dit : pour une θ donnée, la fonction $v^*(\xi, \theta)$ est constante en ξ , sauf au point $\xi = v_{[\nu^*(\xi, \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta)$, où une **discontinuité** apparaît.

La vitesse effective, $v_{[\nu^*(\xi, \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta)$, est strictement monotone en θ ; il existe donc au plus un unique point θ^* tel que $\xi = v_{[\nu^*]}^{\text{eff}}(\theta^*)$, c'est-à-dire une seule discontinuité dans la solution.

La solution $v^*(\xi, \theta)$ s'écrit comme une fonction en escalier paramétrée par une valeur de coupure θ^* :

$$v^*(\xi, \theta) = \begin{cases} v_0(\theta) & \text{si } \theta < \theta^*, \\ 0 & \text{si } \theta > \theta^*, \end{cases} \quad \text{où on rappelle } v_{[\nu^*(\xi, \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta^*) = \xi. \quad (6.9)$$

Cette équation implicite peut être résolue numériquement afin d'obtenir θ^* pour chaque valeur de ξ . On en déduit ensuite $v^*(\xi, \theta)$, puis $\rho(x, \theta; t)$ via les équations (1.88) et (1.87), ce qui permet finalement de déterminer le profil de densité linéaire $n(x, t)$ à un instant donné :

$$n(x; t) = \int d\theta \rho(x, \theta; t). \quad (6.10)$$

Résumé Ainsi, dans le cadre de la GHD, la dynamique balistique résultant du quench bipartite est décrite par une solution auto-similaire paramétrée par une coupure en rapidité $\theta^*(\xi)$. Cette solution permet de prédire les profils de densité et d'occupation mesurables dans l'expérience. Elle fournit également un point de comparaison direct avec les données expérimentales obtenues à différents temps t , comme nous le verrons dans les sections suivantes.

6.1.3 Validation expérimentale de la dynamique hydrodynamique

Dans cette section, nous présentons les résultats expérimentaux obtenus après la coupure bipartite, et les comparons aux prédictions de la GHD à l'échelle d'Euler. L'objectif est de vérifier que la dynamique du gaz est bien décrite, à court et moyen terme, par une solution auto-similaire des équations hydrodynamiques.

Libération du gaz et expansion balistique. À l'issue du protocole de coupure décrit en sous-section 6.1.1, le confinement longitudinal est entièrement supprimé, tandis que le confinement transverse est maintenu. Cette opération permet au gaz de s'étendre librement le long de l'axe longitudinal, tout en conservant un comportement unidimensionnel (cf. section ??). L'évolution du profil de densité $n(x, t)$ est alors enregistrée à différents temps t après la libération, en utilisant une imagerie par absorption.

Mise en évidence de l'auto-similarité (régime d'Euler). Pour se concentrer sur les facteurs d'occupation ν , on note simplement que la distribution de rapidité ρ adopte une forme auto-similaire : $\rho(x, \theta; t) = \rho^*(\xi, \theta)$, avec $\xi = x/t$. En injectant dans l'équation (6.10), il vient que dans le cadre de la GHD à l'échelle d'Euler, il est attendu que les profils de densité présentent une forme auto-similaire :

$$n(x; t) = n^*(\xi), \quad (6.11)$$

où n^* ne dépend que de ξ .

Cette propriété est testée expérimentalement en superposant les profils mesurés à différents temps, après mise à l'échelle selon $\xi = x/t$. La Fig. 6.2(a) montre les profils normalisés mesurés entre $t = 10$ ms et $t = 18$ ms. L'excellent recouvrement obtenu confirme la validité du régime balistique et la pertinence de la description auto-similaire prédictive par la GHD.

Contrainte expérimentales. La description par la GHD à l'échelle d'Euler est limitée à un domaine temporel intermédiaire $t \in [t_m, t_M]$:

- Pour $t > t_M \simeq 18$ ms, la densité maximale du gaz devient trop faible, et les effets de taille finie altèrent la validité de l'approximation d'un système semi-infini.
- Pour $t < t_m \simeq 6 \pm 2$ ms, plusieurs effets remettent en question la validité de la GHD :

- La coupure initiale n'est pas parfaitement abrupte (longueur caractéristique $\sim 1 \mu\text{m}$).
- La résolution de l'imagerie limite la détection fine du bord.
- La GHD n'est valable qu'aux grandes échelles spatio-temporelles.

Ainsi, dans nos conditions expérimentales, le régime GHD est atteint de manière fiable pour des temps compris entre $t_m \approx 6 \text{ ms}$ et $t_M \approx 18 \text{ ms}$.

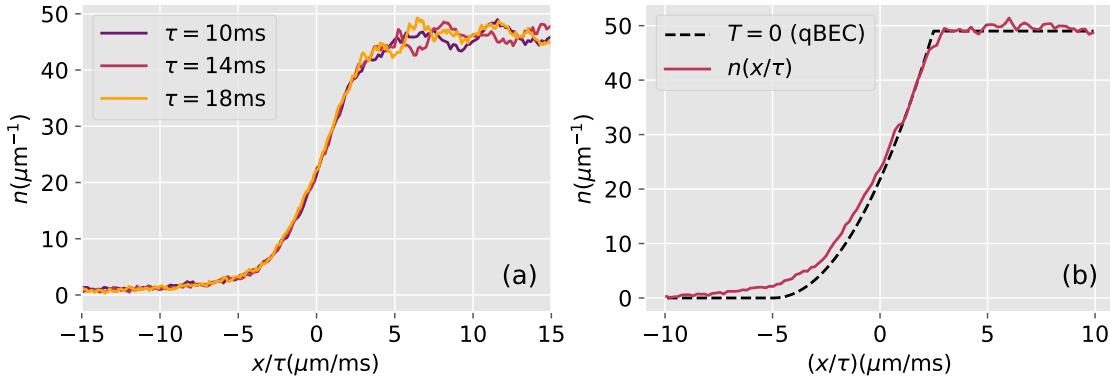


FIGURE 6.2 – (a) Profils de densité mesurés pour différents temps t , représentés en fonction de la variable x/τ . L'excellent recouvrement des courbes confirme l'auto-similarité et la dynamique balistique. (b) Comparaison entre un profil mesuré à $t = 10 \text{ ms}$ (points) et la prédition GHD à température nulle (ligne), pour un paramètre de Lieb $\gamma = 4,6 \times 10^{-3}$.

Conclusion Ces observations expérimentales confirment que la dynamique induite par une coupure bipartite est bien décrite par la GHD à l'échelle d'Euler, dans un régime temporel intermédiaire bien identifié. La mise à l'échelle en x/t permet une confrontation directe entre théorie et expérience, et ouvre la voie à des tests plus précis des effets thermiques et des corrections hors-échelle d'Euler.

Résumé

Nous avons étudié la dynamique hors équilibre d'un gaz unidimensionnel de bosons à la suite d'une coupure bipartite, créant une discontinuité initiale dans le profil de densité. Cette configuration, analogue au problème de Riemann quantique, engendre une évolution balistique décrite par la Théorie Hydrodynamique Généralisée (GHD).

Sur le plan expérimental, nous avons mis en œuvre un protocole précis pour préparer un gaz homogène, le scinder spatialement à l'aide d'un DMD, puis le libérer dans un guide unidimensionnel. L'évolution du profil de densité $n(x, t)$ a été mesurée pour différents temps, révélant une structure auto-similaire caractéristique du régime hydrodynamique.

Côté théorique, nous avons présenté les équations de GHD dans leur forme convective, et montré que la solution du problème de Riemann s'exprime sous la forme d'une distribution auto-similaire $v(x/t, \theta)$. Cette structure permet de prédire analytiquement les profils de densité.

La comparaison entre les données expérimentales et les prédictions de la GHD à température nulle montre une excellente correspondance dans un régime temporel intermédiaire bien défini ($t \in [6, 18] \text{ ms}$). Ces résultats valident la GHD comme cadre pertinent pour décrire la relaxation balistique de systèmes quantiques intégrables, et ouvrent la voie à des explorations plus fines des effets thermiques et quantiques hors équilibre.

6.2 Sonder la distribution locale des rapidités

Introduction

Les outils de l'hydrodynamique généralisée (GHD) introduits dans la section 6.1.2 permettent de décrire la dynamique hors équilibre dans des configurations de type jonction bipartite. Dans le scénario de jonction bipartite — où deux parties du gaz, initialement préparées dans des états thermodynamiques distincts, sont soudainement mises en contact — la dynamique engendre des profils locaux fortement hors équilibre. En

particulier, lorsque l'état initial consiste en un gaz homogène à droite et une région vide à gauche, la GHD prédit qu'à grand temps le système atteint un régime stationnaire autosimilaire, dans lequel les observables locales dépendent uniquement du *variable auto-similaire* $\xi = x/t$. Dans ce régime, la distribution locale des quasi-particules est décrite par un facteur d'occupation $\nu^*(\xi, \theta)$, solution d'une équation de type (6.9).

Une prédition remarquable de ce cadre est la présence, du côté droit du système, d'une discontinuité abrupte dans la distribution en rapidité du facteur d'occupation $\nu^*(\xi, \theta)$ — signature d'un état local proche du fondamental. À l'inverse, du côté gauche (où le gaz est initialement absent), la distribution reste lisse en rapidité, ce qui indique un état localement excité, distinct d'un état fondamental. Ce contraste fort entre les deux régions — l'une présentant une distribution lisse, l'autre une discontinuité abrupte — reflète la propagation balistique des quasi-particules, conséquence directe de l'intégrabilité du système. En effet, dans un système intégrable, les quasi-particules conservent leur individualité et se propagent à vitesse bien définie sans diffusion, ce qui permet de maintenir à grand temps des structures non thermalisées comme des discontinuités, absentes dans les systèmes non intégrables.

L'objectif de cette section est de confronter ces prédictions théoriques à l'expérience, en accédant à la distribution locale de rapidités du gaz. Pour cela, nous mettons en œuvre un protocole expérimental inspiré de la Réf. [?], permettant de mesurer indirectement cette distribution via l'expansion libre d'une tranche localisée du gaz. En parallèle, nous réalisons des simulations numériques de la dynamique à l'aide de la GHD, ce qui nous permet de comparer les distributions mesurées avec les prédictions théoriques, et ainsi de tester la présence effective de la discontinuité attendue.

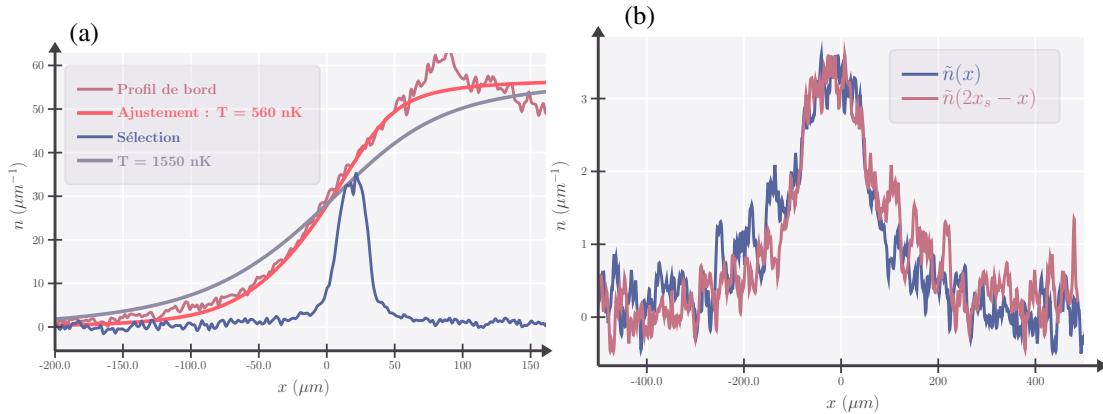


FIGURE 6.3 – (a) *Profil de bord et tranche sélectionnée*. Le profil de bord après 18 ms est montré en rouge. L'ajustement thermique donne une température $T = 560$ nK (orange). Le profil de densité mesuré 1 ms après la sélection de la tranche est en bleu. (b) *Asymétrie du profil d'expansion de la tranche*. Le profil de densité après une expansion pendant $\tau = 30$ ms est comparé à son image miroir. Le centre de symétrie $x_s = -17 \mu m$ minimise la distance quadratique $\delta^2 = \int dx (\tilde{n}(x) - \tilde{n}(2x_s - x))^2$.

6.2.1 Sélection d'une tranche localisée après déformation du bord

Sélection locale d'une tranche du gaz. Afin d'accéder localement à la distribution de rapidité, nous exploitons le fait qu'après un temps $t = 18$ ms, le bord du gaz s'étale sur plusieurs centaines de microns — environ $350 \mu m$ — comme illustré en Fig. 6.5(e)-(f) et Fig. 6.3(a). Cette large extension spatiale permet d'identifier des régions à la fois assez étendues pour être sélectionnées expérimentalement, et suffisamment étroites pour que le gaz puisse y être considéré comme localement homogène dans le cadre de l'hydrodynamique généralisée.

Pour isoler une telle région, un **faisceau pousseur** est appliqué afin d'**éliminer tous les atomes situés hors d'un intervalle spatial** centré en $x_0 = 18 \mu m$ et de largeur ℓ . Cette technique, inspirée de la Réf. [?], permet de ne conserver qu'une **tranche localisée du gaz**, dont la distribution en rapidité reflète l'état local $\rho(x, \theta)$ aux abords de $x \approx x_0$, comme illustré en Fig. 6.6(a)–(c).

Contrôle expérimental du faisceau de sélection. La sélection spatiale du gaz est réalisée à l'aide d'un dispositif à micro-miroirs (DMD), qui permet de contrôler finement la forme du faisceau pousseur utilisé pour éliminer les atomes hors d'un intervalle centré en x_0 . Ce dispositif est piloté via une interface logicielle développée au sein de l'équipe, basée sur les outils CICERO-Iso et SPARTACUS. Le DMD est commandé par une série de paramètres expérimentaux transmis à ces logiciels, dont certains (comme la position x_0) sont enregistrés systématiquement au cours de l'expérience. En revanche, d'autres paramètres, notamment la largeur effective ℓ du faisceau, n'ont pas été archivés dans les paramètres enrégistrés associée aux séquences expérimentales. Ainsi, dans les paragraphes précédents, nous avons pu indiquer précisément la valeur de x_0 (ici $x_0 = 18 \mu\text{m}$), mais non celle de ℓ . Cette valeur sera déterminée a posteriori par analyse des profils expérimentaux, et jouera un rôle essentiel dans les simulations numériques présentées plus loin.

Inhomogénéité de la tranche sélectionnée Dans l'idéal, on souhaiterait que l'intervalle de sélection soit suffisamment fin pour garantir l'homogénéité de la densité locale au sein de la tranche. Toutefois, comme la valeur exacte de ℓ n'a pas été enregistrée, nous ne pouvons pas l'estimer directement à partir des données de Fig. 6.3(a), qui représente l'état du système avant sélection. Néanmoins, cette même figure montre également le profil de densité mesuré une milliseconde après la sélection. Or, comme nous le verrons dans la suite, les simulations GHD montrent que, dans cet intervalle de temps, la distribution en espace réel ne subit ni déplacement significatif, ni déformation notable. Il est donc raisonnable d'utiliser ce profil post-sélection comme estimation fidèle de la densité initiale dans la tranche.

Estimation de la largeur ℓ et conséquences À partir de cette analyse, nous pouvons estimer que la largeur ℓ de la tranche sélectionnée est de l'ordre de 20 à 30 μm . Or, pour une position centrale $x_0 \approx 18 \mu\text{m}$, la densité atomique $\tilde{n}(x; \tau = 0)$ varie sensiblement sur cette échelle. La tranche sélectionnée n'est donc pas localement homogène, et la distribution de rapidité mesurée correspond en réalité à une moyenne spatiale de $\rho(x, \theta)$ sur un intervalle de largeur ℓ centré en x_0 . Cette observation est essentielle pour l'interprétation des données et sera prise en compte dans la suite, en particulier dans les comparaisons avec les simulations hydrodynamiques.

6.2.2 Expansion de la tranche et observation d'une asymétrie

Principe de l'expansion et lien avec la distribution en rapidité Après la sélection, la tranche est laissée en expansion libre unidimensionnelle pendant un temps τ , puis son profil de densité longitudinal $\tilde{n}(x, \tau)$ est mesuré. Cette expansion permet de convertir l'information spatiale en une information sur la distribution en rapidité. En effet, pour un temps τ suffisamment grand, on s'attend à ce que la densité observée soit proportionnelle à la distribution totale des rapidités dans la tranche :

$$\tau \tilde{n}(\tau\theta - x_0; \tau) \xrightarrow[\tau \rightarrow \infty]{} \Pi(\theta), \quad (6.12)$$

où, quel que soit le temps d'expansion unidimensionnelle τ , la distribution de rapidité extensive $\Pi(\theta)$ reste constante, c'est-à-dire $\Pi(\theta) = \int \rho(x, \theta; \tau \geq 0) dx$. En particulier, cette distribution s'identifie à celle de l'état initial dans la tranche sélectionnée :

$$\Pi(\theta) = \int_{x_0 - \ell/2}^{x_0 + \ell/2} \rho(x, \theta; \tau = 0) dx. \quad (6.13)$$

Autrement dit, $\Pi(\theta)$ correspond à la distribution de rapidité intégrée sur la tranche sélectionnée, conservée lors de l'expansion.

Observation expérimentale de l'asymétrie La théorie prédit que la distribution locale de quasi-particules $\rho(x, \theta)$ est fortement asymétrique en θ . Cette asymétrie se retrouve dans $\Pi(\theta)$ et doit donc se manifester dans le profil d'expansion $\tilde{n}(x, \tau)$. Cette asymétrie est effectivement observée dans nos données expérimentales, comme illustré en Fig. 6.3(b) pour un temps d'expansion $\tau = 30 \text{ ms}$.

Quantification de l'asymétrie par symétrisation. La figure 6.3(b) présente deux courbes : le profil mesuré $\tilde{n}(x)$ (abréviation de $\tilde{n}(x, \tau)$) et son image par symétrie par rapport à un axe $x = 2x_s$. L'objectif est

de rendre visible et de quantifier l'asymétrie du profil. Pour ce faire, nous considérons une décomposition naturelle du profil autour d'un centre $x = x_s$:

$$\tilde{n}(x) = \tilde{n}_{\text{pair}}^{(x_s)}(x) + \tilde{n}_{\text{impair}}^{(x_s)}(x), \quad \text{où} \quad \begin{cases} \tilde{n}_{\text{pair}}^{(x_s)}(x) &= \frac{\tilde{n}(x) + \tilde{n}(2x_s - x)}{2}, \\ \tilde{n}_{\text{impair}}^{(x_s)}(x) &= \frac{\tilde{n}(x) - \tilde{n}(2x_s - x)}{2}. \end{cases} \quad (6.14)$$

Cette décomposition correspond à une projection du profil sur les fonctions paires et impaires centrées en $x = x_s$.

L'asymétrie du profil est directement reliée à la composante impaire de la densité. Pour la quantifier, nous introduisons une mesure basée sur la symétrie par rapport à un axe x_s . Pour un décalage donné x_s , nous définissons la norme quadratique de la partie impaire comme :

$$\delta^2(x_s) = \int dx \left[\frac{\tilde{n}(x) - \tilde{n}(2x_s - x)}{2} \right]^2 / \int dx n(x)^2 \quad (6.15)$$

La valeur optimale de x_s minimise $\delta^2(x_s)$ et fournit un axe de symétrie effectif pour le profil. Cette méthode permet de comparer de manière robuste différentes conditions expérimentales, ou différents temps d'expansion, en s'affranchissant d'un ajustement arbitraire de centre.

Effet de l'homogénéité de la tranche sélectionnée Plus la densité atomique est homogène dans la tranche sélectionnée, plus l'expansion est asymétrique et restitue fidèlement la distribution de rapidité au point x_0 . En effet, si $\rho(x, \theta)$ est uniforme sur la largeur ℓ , on obtient :

$$\Pi(\theta) \simeq \ell \rho(x_0, \theta) \Rightarrow \tau \tilde{n}(\tau\theta - x_0; \tau) \simeq \ell \rho(x_0, \theta), \quad (6.16)$$

ce qui permet d'accéder directement à la distribution locale, y compris à d'éventuelles discontinuités.

Deux stratégies permettent d'améliorer cette homogénéité :

- Diminuer la largeur ℓ de la sélection,
- Augmenter le temps t de déformation du bord avant sélection, pour étendre la région d'intérêt spatialement.

Cependant, ces deux approches ont des limitations : une plus petite valeur de ℓ réduit le nombre d'atomes sélectionnés, ce qui diminue le rapport signal/bruit, et des temps t trop longs font sortir le système du régime semi-infini, introduisant des effets de bord non désirés (voir Fig. [à insérer]).

Limites sur le temps d'expansion Allonger le temps d'expansion τ permet d'approcher plus fidèlement le régime asymptotique $\tau \rightarrow \infty$ où la correspondance avec $\Pi(\theta)$ est exacte. Toutefois, cette expansion est limitée expérimentalement par la taille longitudinale du confinement 1D, de l'ordre de 1 mm, correspondant à la taille typique des triplets de microfils. Comme illustré en Fig. 6.3(b), le nuage atteint cette taille à $\tau \sim 30$ ms, ce qui constitue une limite pratique. Par ailleurs, des simulations GHD (voir Ref. [?]) montrent que des temps significativement plus longs seraient nécessaires pour que $\tau \tilde{n}$ converge véritablement vers $\Pi(\theta)$.

Renforcer l'asymétrie observée Enfin, une asymétrie plus marquée peut être obtenue en modifiant l'état initial du gaz. En particulier, une bipartition réalisée à partir d'un état initial plus excité (c'est-à-dire moins proche du fondamental) du côté gauche renforcerait le contraste entre les deux côtés. Cette stratégie permettrait d'amplifier la discontinuité attendue dans la distribution de rapidité, et donc dans le profil d'expansion.

[Figure : asymétries observées pour différents états initiaux]

Résumé

Dans cette section, nous avons présenté un protocole permettant de sonder la distribution locale des quasi-particules dans un gaz unidimensionnel hors équilibre, en sélectionnant une tranche étroite après déformation du bord, puis en la laissant s'étendre librement. Cette procédure permet d'accéder indirectement

à la distribution intégrée en rapidité $\Pi(\theta)$ dans la tranche, et de tester les prédictions de la GHD sur la structure locale du facteur d'occupation $v(x, \theta)$.

L'analyse expérimentale révèle une forte asymétrie du profil d'expansion, signature d'une distribution de rapidité non thermique. La méthode de symétrisation introduite permet de quantifier cette asymétrie de manière robuste. Nous avons montré que l'homogénéité de la tranche sélectionnée, la durée d'expansion libre, ainsi que l'état initial du gaz influencent fortement l'observation de cette asymétrie.

Enfin, ces résultats confirment qualitativement les prédictions de la GHD dans le régime stationnaire autosimilaire, en particulier l'existence d'une discontinuité du côté du gaz initialement présent, tout en mettant en évidence les limitations expérimentales et les effets hors modèle — notamment les contraintes liées à la sélection spatiale et à la durée d'expansion.

Pour approfondir cette analyse, nous nous appuyons à présent sur des simulations numériques basées sur l'équation de GHD. Celles-ci permettent de modéliser la dynamique complète de la tranche sélectionnée, depuis la déformation du bord jusqu'à son expansion, et de confronter quantitativement les distributions mesurées aux prédictions théoriques.

6.3 Simulations numériques

Cette section présente en détail les étapes nécessaires à la résolution numérique de l'équation de GHD dans le cadre des simulations effectuées.

Dans un premier temps, nous explicitons le calcul du facteur d'occupation $v(\theta)$ et de la densité de rapidité $\rho(\theta)$ à l'équilibre thermique, obtenus à partir d'un couple (T, μ) donné.

Nous décrivons ensuite l'évolution du système sous l'effet du potentiel de piégeage : en particulier, nous nous intéressons à la dynamique du contour délimitant la région occupée dans l'espace des phases (x, θ) , en exploitant la conservation lagrangienne du facteur d'occupation.

La simulation permet alors de suivre la déformation du bord au cours du temps. Une fois ce bord suffisamment évolué, nous extrayons une tranche du système pour en simuler l'expansion.

Enfin, nous comparons la distribution de rapidité issue de cette expansion numérique avec celle mesurée expérimentalement, dans des conditions analogues.

6.3.1 Système homogène à l'équilibre thermique

Nous considérons d'abord un gaz unidimensionnel homogène infini, à l'équilibre thermique, caractérisé par un couple de paramètres thermodynamiques (T, μ) . La thermodynamique de Bethe-Ansatz permet de décrire un tel système par une équation intégrale sur le poids/potentiel spectral $w(\theta)$, donnée par :

$$w(\theta) = \beta \left(\frac{1}{2} m \theta^2 - \mu \right), \quad (6.17)$$

où $\beta = (k_B T)^{-1}$ est l'inverse de la température (en unités d'énergie). La résolution de cette équation donne accès au facteur d'occupation $v_0(\theta)$.

À partir de $v_0(\theta)$, les densités de quasi-particules $\rho(\theta)$ et de niveaux disponibles $\rho_s(\theta)$ sont obtenues par un processus de **habillage** (ou **dressing**) standard (voir section 2.2.3). Ces grandeurs sont ensuite utilisées pour calculer les observables physiques.

Détermination du potentiel chimique à température fixée Dans l'expérience, la quantité accessible est la densité linéique homogène n_0 , par exemple $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$ (voir Fig. 6.3(a)). Afin de reproduire cette densité dans les simulations, nous fixons la température T (déterminée indépendamment dans l'expérience), puis nous ajustons la valeur du potentiel chimique μ pour satisfaire la contrainte :

$$n_0 = \int \rho_0(\theta) d\theta. \quad (6.18)$$

Ce processus est effectué numériquement en résolvant les équations TBA pour différentes valeurs de μ jusqu'à obtenir l'accord avec la densité cible. Dans notre cas, pour $T = 560 \text{ nK}$, nous obtenons $\mu = 65 \text{ nK}$ comme valeur correspondant à la densité $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$.

Les résultats de cette résolution sont illustrés en Fig. 6.4 :

- Le facteur d'occupation obtenu $v_0(\theta)$ est représenté en (a).
- La densité spatiale correspondante, constante dans le cas homogène, est illustrée en (b).

- Le facteur $v_0(\theta)$ est à nouveau tracé en (c), en complément pour lecture directe.

Dans ce régime homogène, la distribution est indépendante de la position, i.e.

$$v(x, \theta) = v_0(\theta), \quad \forall x, \quad (6.19)$$

comme visible en Fig. 6.4(a,c).

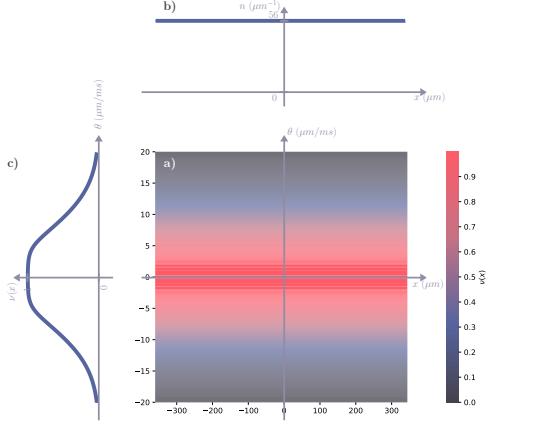


FIGURE 6.4 – a) Facteur d'occupation initial $v(x, \theta) = v_0(\theta)$ correspondant à un état d'équilibre thermique à la température $T = 560$ nK, pour une densité linéaire homogène $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$. Ces paramètres correspondent à une potentielles chimiques $\mu = 65$ nK. b) Densité spatiale linéaire $n(x) = \int \rho_{[v]}(x, \theta) d\theta$, constante et égale à $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$. c) Facteur d'occupation $v_0(\theta)$ correspondant à la distribution thermique illustrée en a).

6.3.2 Dynamique du contour dans l'espace des phases (x, θ) .

Une fois le facteur d'occupation initial $v_0(\theta)$ déterminé, nous cherchons à décrire l'évolution temporelle de la région occupée dans l'espace des phases (x, θ) . Cette région, notée Γ_t , est définie comme le support du facteur d'occupation $v(x, \theta, t)$: elle contient l'ensemble des points pour lesquels v est non nul à l'instant t .

Interprétation lagrangienne et trajectoires caractéristiques. Dans le formalisme de l'hydrodynamique généralisée, l'évolution de v est gouvernée par une équation de transport (6.5). Cette équation admet une interprétation **lagrangienne** : le facteur d'occupation v reste constant lorsqu'on le suit le long des trajectoires caractéristiques $(x(t), \theta(t))$, c'est-à-dire

$$v(x(t), \theta(t); t) = v(x(0), \theta(0); 0). \quad (6.20)$$

Autrement dit, $\frac{dv}{dt}(x, \theta; t) = 0$, ce qui conduit au système d'équations caractéristiques (3.14) :

$$\partial_t \begin{pmatrix} x(t) \\ \theta(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{[v]}^{\text{eff}}(\theta(t)) \\ 0 \end{pmatrix} \text{ soit } \begin{cases} \dot{x}(t) &= v_{[v]}^{\text{eff}}(\theta), \\ \dot{\theta}(t) &= \theta(0) \equiv \theta. \end{cases} \quad (6.21)$$

Autrement dit, les quasi-particules de rapidité θ se déplacent à la vitesse efficace $v_{[v]}^{\text{eff}}$, et leur répartition reste inchangée tout au long de leur trajectoire dans l'espace des phases. Cette conservation est analogue à une conservation lagrangienne classique, où l'on suit un élément de fluide individuellement.

État initial en "patch" et Propagation du support. Nous considérons un état initial de type « patch » : le facteur d'occupation $v(x, \theta; 0)$ est égal à $v_0(\theta)$ à l'intérieur d'une certaine région initiale Γ_0 , et nul en dehors. Ce choix modélise une situation typique de type « front d'onde » avec un gaz localement homogène dans une portion de l'espace.

En suivant chaque point $(x(t), \theta)$ de cette région selon l'équation (6.21), on détermine la région atteinte à l'instant t , notée Γ_t . Par construction, le facteur d'occupation reste constant le long de ces trajectoires d'après (6.20), $v(x(t), \theta, t) = v(x(0), \theta, 0)$ soit :

$$\nu(x(t), \theta, t) = \nu_0(\theta). \quad (6.22)$$

Par conséquent, on peut écrire l'évolution du facteur d'occupation de manière explicite :

$$\nu(x, \theta, t) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } (x, \theta) \in \Gamma_t, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.23)$$

Cette propriété est une conséquence directe du cadre intégrable sous-jacent et de la forme particulière de l'équation de GHD, qui assure que les caractéristiques $(x(t), \theta)$ suivent une dynamique conservant localement l'occupation.

Enfin, notons que, dans ce cadre, la vitesse efficace $v_{[\nu]}^{\text{eff}}(x, \theta, t)$ est fonctionnelle du facteur d'occupation instantané. Toutefois, dans les cas où ν conserve sa structure initiale par blocs (comme ici avec un contour net), on peut exprimer cette vitesse uniquement à partir de ν_0 sur chaque trajectoire, ce qui permet de déterminer toute la dynamique sans recalculer le champ ν à chaque pas de temps. Cette remarque est à la base des méthodes numériques efficaces employées dans nos simulations (voir section ??).

6.3.3 Simulation de la déformation du bord

Dans la configuration initiale correspondant à l'expérience de déformation du bord (Fig. 6.5), la région occupée par le gaz correspond à $x > 0$, avec un facteur d'occupation uniforme $\nu(x, \theta; t = 0) = \nu_0(\theta)$ pour $x > 0$, et nul pour $x < 0$. Le contour initial séparant ces deux domaines est donné par $(x = 0, \theta)$. L'évolution de ce front peut être entièrement décrite à l'aide de l'équation de GHD, en supposant que le contour reste bijectif au cours du temps.

Nous paramétrons ce contour par une variable s , de sorte que le bord à l'instant t est donné par $(x_b(s; t), \theta_b(s))$, avec $\theta_b(s)$ strictement croissante (i.e. $(x_b(s; t), \theta_b(s)) \in \partial\Gamma_t$). La conservation lagrangienne du facteur d'occupation implique que la vitesse efficace $v_{[\nu^*]}^{\text{eff}}(\theta_b(s))$ est indépendante du temps de déformation t . En dérivant (??), on obtient que chaque point $(x_b(s; t), \theta_b(s))$ suit une trajectoire caractéristique associée à cette vitesse efficace :

$$x_b(s; t) = v_{[\nu^*]}^{\text{eff}}(\theta_b(s)) \cdot t,$$

où $\nu^*(v, \theta)$ désigne le facteur d'occupation exprimé dans les variables autosimilaires, avec $v = x/t$. Le facteur d'occupation autosimilaire prend alors la forme (6.23) :

$$\nu^*(x_b(s; t)/t, \theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } \theta < \theta_b(s) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, \quad \text{soit} \quad \nu^*(v, \theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } v < v_{[\nu^*]}^{\text{eff}}(\theta), \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.24)$$

La vitesse efficace $v_{[\nu^*]}^{\text{eff}}(\theta)$ est déterminée par : $v_{[\nu^*]}^{\text{eff}}(\theta) = \frac{\text{id}_{[\nu^*]}^{\text{dr}}(\theta)}{\text{1}_{[\nu^*]}^{\text{dr}}(\theta)}$. À partir de la connaissance du contour $(x_b(s; t), \theta_b(s))$, on reconstruit le facteur d'occupation $\nu(x, \theta; t)$ à l'aide de l'équation (6.24) (Fig. 6.5 (e) &(g)). On en déduit ensuite la densité totale de quasi-particules par : $\rho_s(x, \theta; t) = \frac{\hbar}{m} \cdot \text{1}_{[\nu]}^{\text{dr}}(\theta)$, $\rho(x, \theta; t) = \nu(x, \theta; t) \cdot \rho_s(x, \theta; t)$, puis la densité linéique : $n(x, t) = \int \rho(x, \theta; t) d\theta$. (Fig. 6.5 (e)&(f)).

Enfin, en fixant $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$, nous ajustons la température T des simulations GHD pour reproduire les données expérimentales de déformation du bord (Fig. 6.3). Cet ajustement donne $T = 560 \text{nK}$.

6.3.4 Simulation de l'expansion.

Après la déformation du bord, une sélection spatiale est réalisée pour isoler une tranche du gaz (voir Fig. 6.6(a)), que l'on laisse ensuite se dilater librement en une dimension pendant un temps τ . Contrairement au cas de la déformation du bord, le contour de la région occupée dans (x, θ) n'est plus bijectif ($\partial\Gamma_t \ni (x, \theta) \mapsto \theta$ n'est pas injectif) : pour une position donnée de x , plusieurs rapidité θ peuvent exister telles que (x, θ) appartiennent au contour $\partial\Gamma_t$ de la région occupée.

Pour surmonter cette difficulté, nous décomposons le contour en deux branches bijectives : le bord gauche $(x_g(s; \tau), \theta_g(s))$ et le bord droit $(x_d(s; \tau), \theta_d(s))$. Cette décomposition garantit que sur chaque branche, la correspondance $\theta \mapsto x$ est bijective. Le facteur d'occupation après un temps τ est alors donné par (6.23) :

$$\nu(x(s; \tau), \theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } \theta \in [\theta_g(s), \theta_d(s)], \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.25)$$

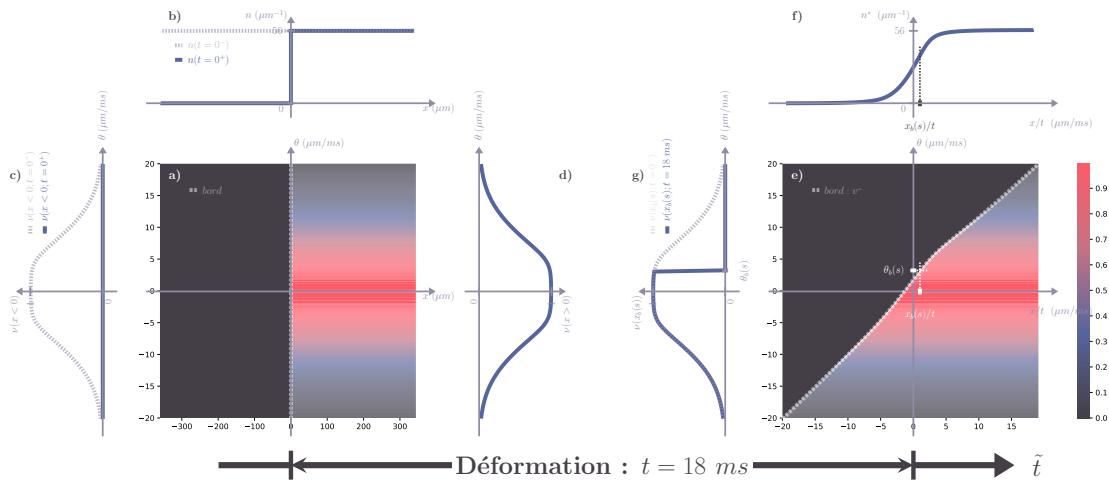


FIGURE 6.5 – (a) À l'instant $t = 0^+$, immédiatement après le « quench bipartite » en $x = 0$, le facteur d'occupation est donné par $v(x, \theta; t = 0^+) = v_0(\theta)$ pour $x > 0$ et est nul pour $x < 0$. Le bord initial représenté en tirets par l'ensemble des points $(x_b(s; t = 0^+) = 0, \theta(s; t = 0^+))$. (b) Densité spatiale linéique $n(x)$: en pointillés, $n(x; t = 0^-) = \int \rho(x, \theta; t = 0^-) d\theta = n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$ juste avant le quench ; en ligne pleine, $n(x; t = 0^+) = n_0$ pour $x > 0$ et 0 pour $x < 0$. (c) À gauche de la coupure ($x < 0$) : en pointillés, $v(x, \theta; t = 0^-) = v_0(\theta)$; en ligne pleine, $v(x, \theta; t = 0^+) = 0$. (d) À droite de la coupure ($x > 0$), le facteur d'occupation reste inchangé : $v(x, \theta; t = 0^+) = v_0(\theta)$. (e) À l'instant $t = 18 \text{ ms}$, après l'évolution balistique post-quench, le facteur d'occupation est donné par $v^*(x_b(s; t)/t, \theta) = v_0(\theta)$ pour $\theta < \theta_b(s; t)$, et nul pour $\theta > \theta_b(s; t)$, résolvant l'équation (6.9), pour $t > 0$. $v(x(s; t), \theta(s; t)) = v^*(x(s; t)/t, \theta(s; t))$ est invariant de la déformation ie de $t > 0$. Le bord représenté en tirets par l'ensemble des points $(x_b(s; t)/t, \theta(s; t))$. Étant donné que la coupure initiale est en $x = 0$ et que l'évolution du bord est balistique, cette courbe résoud $v_{[v^*(x(s; t)/t, \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta(s; t)) = x(s; t)/t = v(s)$ (6.5). (f) Densité spatiale $n^*(x/t)$ en régime hydrodynamique (scaling). (g) Pour les atomes à droite de la coupure : en pointillés, $v^*(x(s; t)/t, \theta) = v_0(\theta)$; en ligne pleine, $v^*(x_b(s; t)/t, \theta) = v_0(\theta)$ pour $\theta < \theta_b(s; t)$ et nul pour $\theta > \theta_b(s; t)$. Le raisonnement est similaire pour les atomes à gauche de la coupure.

La vitesse efficace dépend désormais explicitement du temps τ et de la position, puisqu'elle est fonction du facteur d'occupation local :

$$v_{[v(x(s; \tau), \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta(s)),$$

Pour résoudre numériquement (??) on est ici obligé d'induire des pas de temps $d\tau$:

$$x(\tau + d\tau) = x(\tau) + v_{[v(x(s; \tau), \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta(s))d\tau.$$

En suivant l'évolution de chaque point du contour via cette vitesse, on reconstruit la densité spatiale $n(x, \tau)$, à comparer aux données expérimentales (Fig. 6.6(f)).

Détermination de la taille de la tranche ℓ . Les simulations d'expansion conservent le nombre de particules à mieux que 3%. Comme mentionné précédemment, lors de l'expérience, nous avons enregistré la position du centre de la tranche x_0 , mais pas sa largeur ℓ . Nous avons donc choisi d'ajuster ℓ de manière à ce qu'après expansion unidimensionnelle, le nombre total de particules prédit par les simulations coïncide avec celui mesuré expérimentalement dans la Fig. 6.7(b).

Une première simulation est réalisée avec la température $T = 560 \text{ nK}$, obtenue précédemment par ajustement sur la déformation du bord. Pour reproduire correctement le nombre total de particules après une expansion unidimensionnelle de durée $\tau = 30 \text{ ms}$, la largeur de la tranche doit être fixée à $\ell = 24 \mu\text{m}$.

Cette expansion unidimensionnelle est modélisée en supposant que le facteur d'occupation $v(x, \theta)$ est conservé localement au sein de la tranche sélectionnée. La figure 6.6 illustre les différentes étapes de cette procédure. Dans un premier temps, la tranche est extraite du bord du système, tel qu'il a évolué jusqu'à l'instant $t = 18 \text{ ms}$ dans le piège. L'évolution unidimensionnelle à partir de cette condition initiale repose sur le transport lagrangien du bord dans l'espace des phases (x, θ) , en l'absence de piégeage.

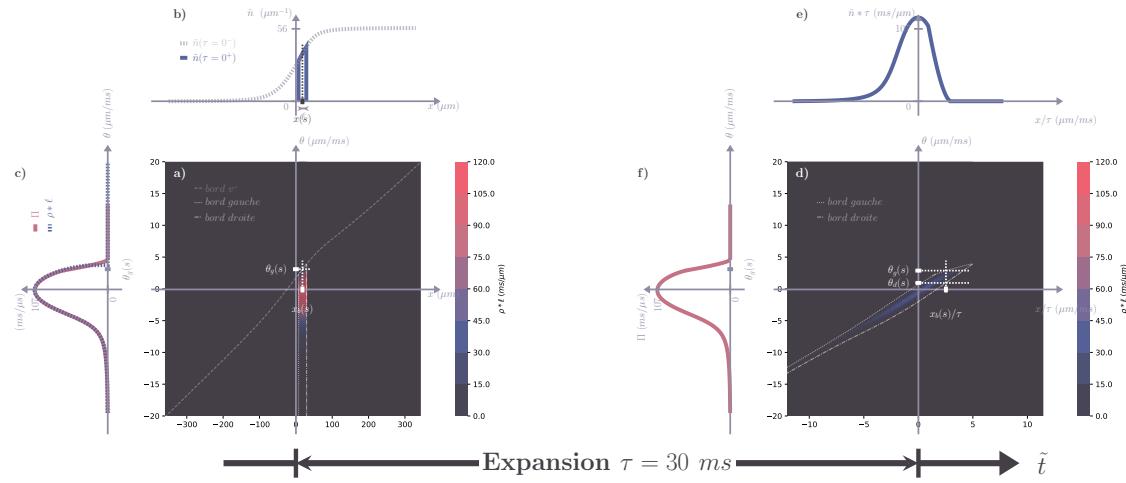


FIGURE 6.6 – (a) À l'instant $\tau = 0^+$, immédiatement après la sélection de la tranche centrée en $x = x_0$ et de largeur ℓ , la distribution de rapidité localement résolue est donnée par $\rho(x, \theta; \tau = 0^+) = \nu(x, \theta; t = 18 \text{ ms}) \rho_s(x, \theta; t = 18 \text{ ms})$ pour $|x - x_0| < \ell/2$, et est nulle pour $|x - x_0| > \ell/2$. Le bord gauche immédiatement après la sélection est représenté en pointillés par l'ensemble des points $(x_g(s; \tau = 0^+), \theta_g(s; \tau = 0^+))$, et le bord droit en tiret-point par l'ensemble des points $(x_d(s; \tau = 0^+), \theta_d(s; \tau = 0^+))$. Le bord complet est donc la concaténation de ces deux ensembles. (b) Densité linéaire spatiale $\tilde{n}(x)$: en pointillés, $n(x; t = 18 \text{ ms})$ juste avant la sélection ; en ligne pleine, $\tilde{n}(x; \tau = 0^+)$, égal à $n(x; t = 18 \text{ ms})$ pour $|x - x_0| < \ell/2$ et nul ailleurs. (c) Distribution de rapidité après sélection, $\Pi(\theta) = \int \rho(x, \theta; \tau) dx$, invariante sous l'évolution unidimensionnelle, représentée en rouge. La distribution localement résolue en $x_b(s; \tau = 0^+)$, $\rho(x_b(s; \tau = 0^+), \theta; \tau = 0^+)$, est représentée en pointillés. Cette distribution est localement conservée, i.e., $\rho(x(s; \tau), \theta(s; \tau))$ reste inchangée au cours de l'évolution unidimensionnelle, indépendamment de τ . (e) Distribution localement résolue $\rho(x, \theta; \tau = 30 \text{ ms})$ après une évolution unidimensionnelle de 30 ms. Le bord gauche est représenté en pointillés par les points $(x_g(s; \tau = 30 \text{ ms}), \theta(s; \tau = 30 \text{ ms}))$, et le bord droit en tiret-point par $(x_d(s; \tau = 30 \text{ ms}), \theta(s; \tau = 30 \text{ ms}))$. (f) Densité spatiale $\tilde{n}(x; \tau = 30 \text{ ms})$. (g) Distribution de rapidité $\Pi(\theta)$ après la sélection (identique à celle de (c)).

6.3.5 Comparaison aux données expérimentales et discussion

Nous comparons dans cette section les profils de densité obtenus par simulation GHD à ceux mesurés expérimentalement après expansion d'une tranche extraite du bord du système.

La Fig. 6.7(a) montre le profil d'expansion simulé à partir d'un état initial à température $T = 560 \text{ nK}$, déterminée indépendamment par ajustement sur la déformation du bord (cf. Fig. 6.3). Le profil présente une forte asymétrie caractéristique, avec un bord droit abrupt et une densité qui s'annule au-delà d'une certaine position. Toutefois, cette chute est moins abrupte que celle de la distribution locale des rapidités $\rho(x, \theta)$ au centre de la tranche. Deux effets principaux expliquent cet élargissement :

- (i) La distribution de rapidité n'est pas homogène dans la tranche, si bien que la distribution intégrée $\Pi(\theta) = \int \rho(x, \theta) dx$ diffère de $\ell \rho(x, \theta)$, comme visible sur la Fig. 6.7(a), ligne pleine versus pointillée ;
- (ii) Le temps d'expansion $\tau = 30 \text{ ms}$ est fini, de sorte que la densité spatiale observée $\tilde{n}(x, \tau)$ diffère de la transformation directe $\Pi((x - x_0)/\tau)/\tau$, comme le montre la comparaison entre les courbes rouge et marron dans la même figure.

La Fig. 6.7(b) compare la densité simulée à $T = 560 \text{ nK}$ avec les données expérimentales. Bien que la forme générale du profil soit qualitativement bien reproduite, des écarts significatifs apparaissent, en particulier autour de $x \approx \pm 350 \mu\text{m}$, et jusqu'à 25% dans la région centrale.

Afin d'améliorer cet accord, nous avons traité la température T de l'état initial comme un paramètre libre, conjointement à la largeur de tranche ℓ . L'ajustement donne une température apparente de $T = 1550 \text{ nK}$, représentée par la ligne magenta dans la Fig. 6.7(b). Cette valeur permet de mieux reproduire le profil d'expansion, en particulier dans les régions périphériques.

Cependant, le profil au bord correspondant à cette température, présenté en Fig. 6.3(a), est incompatible avec les observations expérimentales. En particulier, la courbure du bord simulé à cette température est

beaucoup plus prononcée que celle mesurée. Ceci suggère que l'ajustement par température libre masque d'autres effets physiques non pris en compte dans le modèle.

Une analyse plus fine du profil expérimental révèle la présence de queues asymétriques à droite, absentes des prédictions GHD à l'échelle d'Euler. Ces queues pourraient résulter de phénomènes hors du cadre du modèle, notamment :

- **Effets de sélection de tranche** : le faisceau pousseur utilisé pourrait chauffer localement les atomes en bordure, entraînant des distributions de rapidité plus étendues que prévu.
- **Effets diffusifs** : dans les régions de forts gradients, notamment au bord du gaz, des termes de diffusion (omnis présents dans la GHD à l'échelle d'Euler) pourraient devenir significatifs. De telles corrections ont été proposées récemment pour modéliser la GHD au-delà de l'approximation eulérienne.

En résumé, bien que la GHD reproduise globalement la forme du profil d'expansion, des écarts importants subsistent. Leur origine semble liée à des effets microscopiques non capturés par la description eulérienne — en particulier la dynamique hors équilibre aux bords — soulignant l'intérêt d'une extension du modèle pour mieux décrire ces régimes.

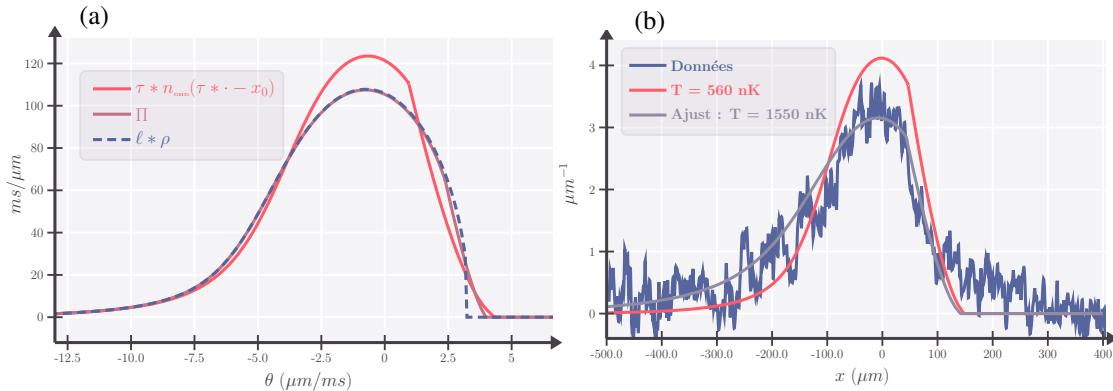


FIGURE 6.7 – (a) *Profil de densité après expansion de la tranche : effets de la largeur finie et du temps d'expansion fini.* Courbe orange : profil obtenu par simulation GHD après expansion pendant $\tau = 30$ ms, avec $T = 560$ nK. Courbe marron : distribution asymptotique $\Pi((x - x_0)/\tau)/\tau$. Courbe pointillée noire : approximation $\ell\rho(x_0, (x - x_0)/\tau)/\tau$ dans le cas d'une tranche étroite. (b) *Comparaison aux données expérimentales.* En bleu : profil expérimental après expansion pendant $\tau = 30$ ms. En orange : simulation GHD avec $T = 560$ nK. En magenta : ajustement du profil expérimental donnant $T = 1550$ nK.

Résumé

Cette section a détaillé la mise en œuvre des simulations numériques basées sur l'hydrodynamique généralisée (GHD), permettant de modéliser finement la dynamique du système dans les régimes explorés expérimentalement.

Nous avons d'abord établi l'état initial du gaz à l'équilibre thermique, en déterminant les distributions $v(\theta)$ et $\rho(\theta)$ à partir de la densité et de la température expérimentales. En exploitant la conservation lagrangienne du facteur d'occupation, nous avons ensuite simulé la déformation du bord dans le piégeage, puis l'expansion unidimensionnelle d'une tranche extraite de ce bord.

Les simulations reproduisent qualitativement les principaux traits observés expérimentalement, notamment l'asymétrie du profil d'expansion et la chute abrupte du bord droit. Cependant, des écarts significatifs subsistent, notamment dans les régions périphériques et dans la forme fine des profils. Ces différences soulignent les limites du modèle à l'échelle d'Euler, et suggèrent que des effets hors modèle — tels que la sélection de tranche, le chauffage local, ou des corrections diffusives — peuvent jouer un rôle non négligeable.

Ces résultats confirment la pertinence de la GHD pour décrire la dynamique collective d'un gaz unidimensionnel hors équilibre, tout en ouvrant la voie à des extensions du modèle pour capturer des effets plus fins, au-delà de l'approximation hydrodynamique idéale.

Conclusion du chapitre

Ce chapitre a présenté une exploration conjointe expérimentale et théorique de la dynamique hors équilibre d'un gaz unidimensionnel de bosons, initiée par une coupure bipartite. Ce protocole génère un état initial présentant une discontinuité macroscopique de densité, dont l'évolution constitue une réalisation physique du problème de Riemann quantique.

L'analyse repose sur la *Théorie Hydrodynamique Généralisée* (GHD), cadre théorique récent permettant de décrire, à l'échelle d'Euler, la relaxation déterministe de systèmes quantiques intégrables. Nous avons montré que la GHD permet non seulement de prédire les profils de densité issus de la dynamique balistique du gaz, mais également de modéliser la distribution locale des quasi-particules, accessibles via un protocole de sélection spatiale.

Les mesures expérimentales, validées par des simulations numériques basées sur la GHD, confirment l'existence d'une structure auto-similaire de la dynamique, ainsi que l'asymétrie caractéristique des distributions de rapidité hors équilibre. Les écarts résiduels entre théorie et expérience soulignent la nécessité de développer des extensions de la GHD, intégrant des effets hors d'équilibre plus subtils, tels que la diffusion, le chauffage local ou les défauts de sélection.

Ainsi, ce travail établit une correspondance quantitative entre un cadre mathématique hydrodynamique issu de l'intégrabilité quantique et des observations expérimentales fines, consolidant la GHD comme un outil efficace pour décrire la relaxation déterministe de systèmes quantiques unidimensionnels, et ouvrant des perspectives pour explorer les limites de cette approche dans des régimes plus complexes.

Chapitre 7

Mise en place d'un confinement longitudinal dipolaire

Contents

7.1	Transformation de jauge et simplification du Hamiltonien	91
7.2	Potentiel Dipolaire d'un atome à deux niveaux - généralité	92
7.2.1	Introduction	92
7.2.2	Système à deux niveaux et interaction avec le champ	93
7.2.3	Interprétation du traitement du second ordre : transition virtuelle et origine du potentiel dipolaire (AC-Stark)	93
7.2.4	Expression explicite du potentiel dipolaire	94
7.3	Piégeage dipolaire d'un atome à plusieurs niveaux	96
7.3.1	Atomes multiniveaux et origine du potentiel dipolaire dans le formalisme quantique	96
7.4	Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne	99
7.4.1	Structure électronique du Rubidium	99
7.4.2	Structure matricielle du potentiel dipolaire	100
7.4.3	Régime de désaccord très important	101
7.4.4	Structure fine et base des états $ L, S; J, m_J\rangle$	103
7.5	Notre dispositif expérimental	105
7.5.1	Choix du laser pour le piégeage dipolaire	105
7.5.2	Amplification par Tapered Amplifier (TA)	109

Introduction

Dans cette section, nous présentons l'implémentation expérimentale et théorique d'un piégeage dipolaire dans le bleu, permettant de confiner des atomes de rubidium froids à l'aide de deux barrières de potentiel. Contrairement au cas plus standard du piégeage rouge, où les atomes sont attirés vers les maxima d'intensité, un piégeage dans le bleu ($\Delta > 0$) repousse les atomes vers les minima d'intensité lumineuse, créant ainsi des barrières efficaces.

Le formalisme utilisé repose sur une description quantique du couplage dipolaire entre un champ laser classique quasi-monochromatique et un atome à deux niveaux. Nous déduisons l'Hamiltonien effectif en seconde quantification sans faire appel à des transformations de jauge. L'objectif est d'obtenir une expression exploitable pour le potentiel optique ressenti par les atomes dans le régime de grand désaccord.

[Insérer ici un schéma des niveaux d'énergie du Rubidium (transitions D1 et D2, base fine)]

7.1 Transformation de jauge et simplification du Hamiltonien

Petites réserves et extensions

- Si un **potentiel externe** $V(x)$ est présent, ou si la translation est brisée (bords durs, conditions aux limites), la quantité de mouvement totale P n'est plus conservée.
- En présence d'un **champ électromagnétique** (jauge), le moment cinétique devient $\Pi = p - qA$ et l'expression de P change.
- De même, pour des **potentiels dipolaires** ou à longue portée, la forme des charges conservées peut être modifiée et nécessite de prendre en compte des contributions supplémentaires pour préserver les symétries pertinentes.

Ces considérations constituent une pré-introduction utile avant d'aborder les systèmes avec interactions complexes et les charges conservées d'ordre supérieur.

Cadre sans potentiel vecteur. Soit une particule de masse m couplée à un champ électromagnétique. Dans une jauge $\mathcal{J} \equiv (\vec{A}, \Phi)$, le quadrivecteur potentiel s'écrit $A^\mu = \{A^0 \equiv \Phi/c, A^i \equiv \vec{A}\}$. Si l'on définit la dérivée covariante comme $\mathcal{D}_\mu = \partial_\mu + \frac{iq}{\hbar} A_\mu = \{\mathcal{D}_t \equiv \partial_t + \frac{iq}{\hbar} \Phi, \vec{\mathcal{D}} = \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar} \vec{A}\}$, l'équation de Schrödinger régissant l'évolution de la fonction d'onde $|\psi\rangle$ prend la forme :

$$i\hbar \mathcal{D}_t |\psi\rangle = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\mathcal{D}} \right)^2 |\psi\rangle, \quad i\hbar \partial_t |\psi\rangle = H_{\mathcal{J}} |\psi\rangle, \text{ avec } H_{\mathcal{J}} = \frac{1}{2m} (\vec{P} - q\vec{A})^2 + q\Phi \quad (7.1)$$

Hamiltonien simplifié. Dans une autre jauge \mathcal{J}' , le potentiel s'écrit $A'^\mu = \{\Phi'/c, \vec{A}'\}$ avec $A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu \chi$, où χ est une fonction scalaire dépendant de l'espace et du temps. Un argument rapide pour garantir que cette transformation conserve les équations de Maxwell est que le tenseur électromagnétique $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ est invariant par changement de jauge. Dans cette nouvelle jauge, la dérivé corariante s'écrit $\mathcal{D}'_\mu = \partial_\mu + \frac{iq}{\hbar} A'_\mu = \{\mathcal{D}'_t \equiv \partial_t + \frac{iq}{\hbar} (\Phi - \partial_t \chi), \vec{\mathcal{D}}' \equiv \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar} (\vec{A} + \vec{\nabla} \chi)\}$, l'équation de Schrödinger s'écrit

$$i\hbar \mathcal{D}'_t |\psi'\rangle = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\mathcal{D}}' \right)^2 |\psi'\rangle, \quad \text{soit} \quad i\hbar \partial_t |\psi'\rangle = H_{\mathcal{J}'} |\psi'\rangle, \text{ avec } H_{\mathcal{J}'} = -q\partial_t \chi + \tilde{H}_{\mathcal{J}}, \quad (7.2)$$

avec $|\psi'\rangle = \hat{T}_\chi(t) |\psi\rangle$, $\hat{T}_\chi(t) \equiv \exp \left(\frac{iq}{\hbar} \chi(\vec{R}, t) \right)$ et $\tilde{H}_{\mathcal{J}} = \hat{T}_\chi H_{\mathcal{J}} \hat{T}_\chi^\dagger = \frac{1}{2m} (\vec{P} - q(\vec{A} + \vec{\nabla} \chi))^2 + q\Phi$. Je choisis $\chi = -\vec{R} \cdot \vec{A}$ (*i.e.* $\mathcal{J}' \equiv (\vec{A})$). $\hat{T}_\chi(t)$ devient un opérateur translation de $iq\vec{A}$ dans l'espace des impulsion, et l'opérateur champs électrique transverse étant $\vec{E}_\perp = -\partial_t \vec{A}$. L'Hamiltonien $H_{\mathcal{J}'}$ devient :

$$\hat{H}_{\mathcal{J}'} = \tilde{H}_{\mathcal{J}} + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (7.3)$$

avec $\tilde{H}_{\mathcal{J}} = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + q\Phi$. L'opérateur de couplage atome-rayonnement quantifié est donné par :

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\vec{D} \cdot \vec{E}_\perp, \quad (7.4)$$

où \vec{D} est l'opérateur de moment dipolaire électrique, défini par : $\vec{D} = q\vec{R}$.

Conclusion – Simplification par transformation de jauge La transformation de jauge que nous avons appliquée permet de travailler dans un cadre où le **potentiel vecteur** est nul. Dans cette jauge particulière, le Hamiltonien du système est considérablement simplifié, car le couplage au champ électromagnétique ne se fait plus par le terme de couplage minimal $(\vec{P} - q\vec{A})^2$, mais uniquement à travers un **potentiel scalaire effectif**.

Cette simplification rend l'analyse théorique plus accessible et facilite l'interprétation physique du rôle du champ électromagnétique, en le ramenant à une simple modulation de l'énergie potentielle.

7.2 Potentiel Dipolaire d'un atome à deux niveaux - généralité

7.2.1 Introduction.

Un atome neutre placé dans un champ électrique \vec{E}_\perp développe un moment dipolaire induit $\vec{D}(t)$. Si le champ varie lentement devant la dynamique interne de l'atome, le moment dipolaire reste aligné avec la composante transverse du champ, $\vec{E}_\perp(t)$, et l'énergie potentielle d'interaction s'écrit $\hat{H}_{\text{int}}(t) = -\vec{D}(t) \cdot \vec{E}_\perp(t)$.

Dans cette configuration, l'énergie potentielle est minimale là où l'intensité du champ est maximale. L'atome est alors attiré vers les régions de forte intensité du champ électrique : on parle de *piège dipolaire optique*, ou encore de *pince optique*.

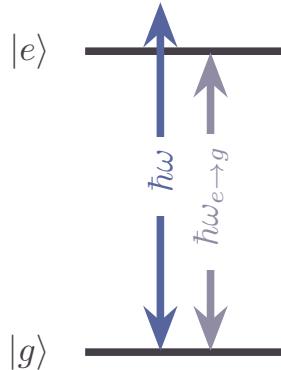


FIGURE 7.1 – Structure à deux niveaux : $|g\rangle$ pour l'état fondamental ("ground") et $|e\rangle$ pour l'état excité ("excited"). La différence d'énergie entre les deux niveaux, notée $\hbar\omega_{e\rightarrow g}$, est représentée, ainsi que la transition induite par le couplage laser de fréquence ω . Dans cet exemple, la transition est dans le bleu.

7.2.2 Système à deux niveaux et interaction avec le champ

Pour donner une vision simplifiée du phénomène, on considère un atome modélisé par **deux niveaux** : l'état fondamental $|g\rangle$ d'énergie $\hbar\omega_g$ et l'état excité $|e\rangle$ d'énergie $\hbar\omega_e$, couplés par un champ électrique $\vec{E}_\perp(\vec{r}, t) = \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) \cos(\omega t)$. On suppose que le champ laser est **désacordé par rapport à la résonance**, c'est-à-dire que le désaccord $\Delta \doteq \omega - \omega_{g\rightarrow e}$ (avec la fréquence de transition $\omega_{g\rightarrow e} \doteq \omega_e - \omega_g$, est **grand devant la fréquence de Rabi**, qui caractérise le couplage dipôle–champ :

$$\Omega(\vec{r}) = -\langle e | \vec{D} \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) | g \rangle / \hbar \quad (7.5)$$

$$= -\vec{d}_{g\leftrightarrow e} \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) / \hbar, \quad (7.6)$$

où $\vec{d}_{g\leftrightarrow e} = \langle e | \hat{\vec{D}} | g \rangle$ est l'élément de matrice dipolaire réel entre les niveaux $|g\rangle$ et $|e\rangle$.

[Insérer ici un schéma des niveaux d'énergie du Rubidium (transitions D1 et D2, base fine)]

7.2.3 Interprétation du traitement du second ordre : transition virtuelle et origine du potentiel dipolaire (AC-Stark)

Transitions virtuelles et suppression des transitions réelles. Lorsque le champ laser est fortement désacordé par rapport à la résonance atomique, c'est-à-dire lorsque le désaccord $\Delta = \omega - \omega_{g\rightarrow e}$ vérifie $\Gamma \ll |\Delta|$, l'excitation réelle de l'atome devient négligeable. Le paramètre Γ désigne la *largeur naturelle* de la transition $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$, c'est-à-dire le taux d'émission spontanée d'un photon par un atome excité. Il est relié à la durée de vie τ de l'état $|e\rangle$ par $\Gamma = 1/\tau$. Dans le cas d'une transition dipolaire électrique de type S-P, il peut être calculé à partir de l'électrodynamique quantique selon la formule :

$$\Gamma = \frac{\omega_{g\rightarrow e}^3}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3} |\vec{d}_{g\leftrightarrow e}|^2, \quad (7.7)$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide et c la vitesse de la lumière.

Ainsi, lorsque $\Gamma \ll |\Delta|$, la probabilité d'exciter réellement l'atome vers l'état $|e\rangle$ devient négligeable.

De plus, pour que l'occupation réelle de l'état excité reste négligeable, il faut également que la fréquence de Rabi Ω , qui mesure la force du couplage lumière–atome, satisfasse la condition $\Omega \ll |\Delta|$. Dans ce régime de fort désaccord et de couplage faible, le champ ne peut alors induire qu'une *transition virtuelle* $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$, sans véritable occupation de l'état excité.

Effet de second ordre : origine du potentiel dipolaire. Toutefois, même si le champ laser ne permet pas de peupler réellement l'état excité, il peut induire des transitions *virtuelles* via l'interaction dipolaire \hat{H}_{int} . Le système passe temporairement par l'état $|e\rangle$ sans s'y stabiliser :

$$|g\rangle \xrightarrow{\hat{H}_{\text{int}}} |e\rangle \xrightarrow{\hat{H}_{\text{int}}} |g\rangle, \quad (7.8)$$

Ce processus modifie l'énergie propre de l'état $|g\rangle$, générant un **décalage AC-Stark**, interprété comme un **potentiel dipolaire**.

Analyse perturbative à différents ordres :

- **Ordre 0** — énergie non perturbée : L'atome est dans l'état fondamental $|g\rangle$. Son énergie propre est simplement :

$$E_g^{(0)} = E_g. \quad (7.9)$$

- **Ordre 1** — pas de correction diagonale :

Dans l'approximation des grandes longueurs d'onde $\lambda \gg \langle \vec{r} \rangle$, c'est-à-dire lorsque la longueur d'onde du champ laser est grande devant la taille de l'atome, l'interaction lumière-matière se décrit par le *Hamiltonien dipolaire électrique*. Dans ce cadre, la correction d'énergie au premier ordre est donnée par :

$$\delta E_g^{(1)} = \langle g | \hat{H}_{\text{int}} | g \rangle. \quad (7.10)$$

Or, pour un champ oscillant typiquement de la forme $\vec{E}_\perp(t) = \frac{1}{2}\vec{\mathcal{E}} e^{-i\omega t} + \text{c.c.}$, ce terme est rapide et oscille à la fréquence du laser. De plus, dans une base d'états propres de parité définie (comme c'est le cas pour les niveaux atomiques), l'opérateur \vec{D} étant de parité impaire, son **élément diagonal est nul** :

$$\langle g | \vec{D} | g \rangle = 0 \Rightarrow \langle g | \hat{H}_{\text{int}} | g \rangle = 0. \quad (7.11)$$

Ainsi, non seulement $\delta E_g^{(1)}(t) \sim \cos(\omega t)$ est une oscillation à haute fréquence, mais sa moyenne temporelle est aussi nulle :

$$\langle \delta E_g^{(1)} \rangle_t = 0. \quad (7.12)$$

Par conséquent, il n'y a **aucun décalage d'énergie net à l'ordre 1** : c'est uniquement à l'ordre 2 que l'interaction induit un potentiel stationnaire, correspondant au déplacement AC-Stark.

- **Ordre 2** — transitions virtuelles : À l'ordre 2 de la théorie des perturbations indépendantes du temps, la correction d'énergie associée à l'état fondamental $|g\rangle$ s'écrit

$$\delta E_g^{(2)} = \left(\frac{|\langle e | \hat{H}_{\text{int}} | g \rangle|^2}{\hbar(\omega - \omega_{g \rightarrow e})} + \frac{|\langle e | \hat{H}_{\text{int}} | g \rangle|^2}{\hbar(\omega + \omega_{g \rightarrow e})} \right). \quad (7.13)$$

Le premier terme, en $1/(\omega - \omega_{g \rightarrow e}) = 1/\Delta$, correspond au processus *quasi-résonant* qui domine lorsque le laser est proche d'une transition atomique. Le second terme, en $1/(\omega + \omega_{g \rightarrow e})$, est dit *anti-résonant*. Dans l'approximation de l'ordre tournant (ou approximation séculière, RWA), ce terme est négligé car il est fortement décalé en énergie ($\omega + \omega_{g \rightarrow e} \gg \omega_{g \rightarrow e}$).

On obtient alors, dans cette approximation, la correction simplifiée

$$\delta E_g^{(2)} \simeq \frac{|\langle e | \hat{H}_{\text{int}} | g \rangle|^2}{\hbar\Delta}. \quad (7.14)$$

Cette correction est responsable de l'apparition d'un *potentiel effectif* ressenti par l'atome dans son état fondamental, appelé **potentiel dipolaire optique**.

7.2.4 Expression explicite du potentiel dipolaire

Champ électrique appliqué. On considère un champ électrique de la forme :

$$\vec{E}_\perp(\vec{r}, t) = \frac{1}{2}\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) e^{-i\omega t} + \text{c.c.}, \quad \text{avec } \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) = \mathcal{E}(\vec{r}) \vec{u} \quad (7.15)$$

où \vec{u} est un vecteur de polarisation unitaire, et $\mathcal{E}(\vec{r})$ est l'amplitude complexe spatiale du champ.

Potentiel dipolaire. En utilisant l'expression de la fréquence de Rabi (7.5), la correction d'énergie à l'ordre 2 (7.14), que l'on notera *potentiel dipolaire* (*i.e.* $U_{\text{dip}}(\vec{r}) \equiv \delta E_g^{(2)}$), s'écrit alors :

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) = \frac{\hbar \Omega^2(\vec{r})}{4\Delta}, \quad (7.16)$$

En utilisant l'expression de l'intensité locale du champ laser $I(\vec{r}) = \frac{1}{2} \epsilon_0 c |\vec{\mathcal{E}}(\vec{r})|^2$, de l'intensité de saturation $I_{\text{sat}} = \frac{\hbar \omega_{g \rightarrow e}^3 \Gamma}{12\pi c^2}$, de la largeur naturelle (7.7) et de la fréquence de Rabi (7.6), on obtient également :

$$\Omega^2(\vec{r}) = \frac{I(\vec{r})}{I_{\text{sat}}} \frac{\Gamma^2}{2}. \quad (7.17)$$

Le potentiel dipolaire (7.16) s'écrit alors sous la forme opérationnelle suivante :

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) = \frac{\hbar \Gamma^2}{8 I_{\text{sat}}} \frac{I(\vec{r})}{\Delta}, \quad (7.18)$$

ce qui montre que le potentiel dipolaire est proportionnel à l'intensité lumineuse locale.

Ce potentiel permet de décrire le confinement des atomes dans des régions où $I(\vec{r})$ est élevé (ou faible, selon le signe de Δ), formant ainsi des barrières optiques contrôlables avec une résolution sub-micronique.

Conditions de validité. Les expressions (7.16) et (7.18) pour le potentiel dipolaire sont obtenues sous les hypothèses suivantes, qui assurent la validité du modèle à deux niveaux et du traitement perturbatif :

- **Réduction à un sous-espace résonant** : le champ est quasi-résonant avec une seule transition atomique, ce qui suppose que le désaccord est faible devant les fréquences optiques impliquées, *i.e.* $|\Delta| \ll \omega, \omega_{g \rightarrow e}$. Cela permet de restreindre le système à deux niveaux et d'ignorer les autres transitions dipolaires.
- **Régime de grand désaccord en fréquence (large détuning)** : lorsque $|\Delta| \gg \Gamma$, c'est-à-dire lorsque le désaccord est grand devant la largeur naturelle de la transition, les excitations réelles vers l'état excité sont fortement supprimées. L'interaction lumière-matière peut alors être traitée en perturbation du second ordre : l'atome reste majoritairement dans son état fondamental, et l'effet du champ lumineux se manifeste sous la forme d'un potentiel effectif induit par des couplages virtuels.
- **Régime de faible saturation** : on suppose que la fréquence de Rabi Ω est beaucoup plus faible que le désaccord, *i.e.* $\Omega \ll |\Delta|$. Cette condition garantit que la population de l'état excité reste négligeable, ce qui justifie l'approximation adiabatique sur l'état fondamental.

Interprétation physique. Le potentiel $U_{\text{dip}}(\vec{r})$ représente une énergie potentielle effective induite par l'interaction entre un atome neutre et le champ laser. Il dépend explicitement de la position \vec{r} via l'intensité locale du champ lumineux $I(\vec{r})$. Ce potentiel guide ainsi la dynamique de l'atome comme le ferait un potentiel externe classique.

La direction du mouvement dépend du signe du désaccord $\Delta = \omega - \omega_{e \rightarrow g}$:

- Si $\Delta < 0$ (désaccord rouge), le potentiel est attractif : les atomes sont attirés vers les zones de forte intensité lumineuse.
- Si $\Delta > 0$ (désaccord bleu), le potentiel est répulsif : les atomes sont repoussés vers les régions de faible intensité.

Ce phénomène est à la base des pièges dipolaires optiques, largement utilisés dans les expériences de refroidissement et de confinement d'atomes ultrafroids.

Confinement optique. Le potentiel dipolaire $U_{\text{dip}}(\vec{r})$, dépendant de la position via l'intensité du champ laser, permet de confiner des atomes neutres en créant des paysages de potentiel contrôlés. Selon la géométrie du champ lumineux, on peut générer des régions de potentiel attractif ou répulsif.

Dans le cas d'un désaccord bleu ($\Delta > 0$), les atomes sont repoussés des zones de forte intensité. On peut alors façonner des *barrières de potentiel* en structurant l'intensité lumineuse, par exemple à l'aide de faisceaux interférents ou d'optiques diffractives. Cela permet de créer des cavités, des guides ou des réseaux où les atomes sont confinés entre les zones lumineuses, sans nécessairement focaliser le faisceau.

Diffusion spontanée résiduelle. Un autre aspect important de l'interaction lumière-matière est la diffusion spontanée induite par le champ lumineux. Même lorsque le champ est fortement désaccordé et que l'état excité n'est que virtuellement peuplé, une faible probabilité de transition réelle subsiste. Elle conduit à l'émission spontanée de photons, accompagnée d'un transfert aléatoire d'impulsion à l'atome, ce qui génère un chauffage du nuage atomique.

Le taux de diffusion spontanée dans le régime dispersif s'écrit :

$$\Gamma_{\text{sp}}(\vec{r}) = \frac{\Gamma^3}{8I_{\text{sat}}} \cdot \frac{I(\vec{r})}{\Delta^2}. \quad (7.19)$$

Il est donc crucial, pour limiter le réchauffement, de travailler à fort désaccord $|\Delta| \gg \Gamma$, tout en maintenant une intensité suffisante pour produire un potentiel dipolaire profond.

Optimisation du régime dispersif pour un potentiel donné. À partir des expressions (7.7) et (7.19), on peut analyser comment minimiser le taux de diffusion spontanée Γ_{sp} , sous la contrainte de produire un potentiel dipolaire U_{dip} fixé.

On observe en effet que :

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) \propto \frac{I(\vec{r})}{\Delta}, \quad \text{tandis que} \quad \Gamma_{\text{sp}}(\vec{r}) \propto \frac{I(\vec{r})}{\Delta^2}. \quad (7.20)$$

À potentiel U_{dip} fixé, cela implique que :

$$I(\vec{r}) \propto \Delta \quad \Rightarrow \quad \Gamma_{\text{sp}}(\vec{r}) \propto \frac{1}{\Delta}. \quad (7.21)$$

Autrement dit, pour produire un potentiel donné, le taux de diffusion diminue linéairement avec $|\Delta|$. Il est donc avantageux de travailler à grand désaccord : plus Δ est grand, plus l'intensité requise est élevée, mais moins le taux de diffusion est important.

Ce raisonnement montre que l'on n'a pas véritablement un « compromis » entre I et Γ_{sp} , mais plutôt une *stratégie optimale* : à potentiel fixé, augmenter le désaccord est toujours bénéfique vis-à-vis du chauffage.

Cependant, d'un point de vue pratique, l'augmentation de l'intensité I pose des contraintes expérimentales : puissance laser plus élevée, coûts financiers plus importants et difficultés techniques accrues.

7.3 Piégeage dipolaire d'un atome à plusieurs niveaux

7.3.1 Atomes multiniveaux et origine du potentiel dipolaire dans le formalisme quantique

Le modèle à deux niveaux est suffisant pour introduire le concept de piégeage dipolaire, mais il reste limité pour décrire les détails réels d'un atome comme le ^{87}Rb , qui possède une structure hyperfine et fine complexe. Dans ce contexte, le potentiel dipolaire dépend du sous-niveau quantique occupé par l'atome, et le traitement doit être généralisé.

Description quantique de l'atome et du champ laser

Quantification de champ laser. Considérons un atome immobile possédant un état fondamental $|g\rangle$ et une série d'états excités $|e_i\rangle$, d'énergies respectives $\hbar\omega_g$ et $\hbar\omega_{e_i}$. Le champ laser (7.15) est quantifié dans un volume V , polarisé selon \vec{u} , et d'expression [?]

$$\vec{E}_\perp = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 V}} \vec{u} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad (7.22)$$

où \hat{a} et \hat{a}^\dagger sont les opérateurs d'annihilation et de création de photons à la fréquence ω .

Champ cohérent et états de Fock. Le champ électromagnétique émis par le laser est un état **cohérent**, noté $|\alpha\rangle$, qui est une superposition d'états de Fock $|N\rangle$ avec une distribution de Poisson centrée autour d'une valeur moyenne $\langle N \rangle = |\alpha|^2 \gg 1$. Cela signifie que les composantes principales du champ se trouvent dans une bande étroite $\Delta N \ll \langle N \rangle$. Dans cette situation, les amplitudes de transition impliquant des changements d'un seul photon, comme $\langle N | \vec{E}_\perp | N + 1 \rangle$, varient très peu avec N , et l'on peut faire l'approximation :

$$\langle N | \vec{E}_\perp | N + 1 \rangle \approx \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0V}} \sqrt{N+1} \vec{u} \simeq \sqrt{\frac{\hbar\omega\langle N \rangle}{2\varepsilon_0V}} \vec{u}. \quad (7.23)$$

Ainsi, l'élément de matrice global devient simplement proportionnel à l'amplitude classique du champ.

Ainsi, dans l'approximation cohérente et intense ($\langle N \rangle \gg 1$), le champ quantique peut être remplacé par un **champ classique** :

$$\vec{E}_\perp \longrightarrow \hat{\mathcal{E}} \vec{u} \cos(\omega t), \quad (7.24)$$

ce qui justifie l'usage des amplitudes de champ classiques dans le calcul de la fréquence de Rabi et du potentiel dipolaire.

Hamiltonien total. L'hamiltonien total du système « atome + champ » s'écrit alors [?]:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{at}} + \hat{H}_{\text{L}} + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (7.25)$$

avec dans le formalisme **atome + champ quantifié**, aussi appelé **formalisme de l'atome habillé**, avec :

- $\hat{H}_{\text{at}} = \sum_{e_i} \hbar\omega_{g \rightarrow e_i} |e_i\rangle \langle e_i|$, l'hamiltonien de l'atome. Il décrit les états propres internes (typiquement les niveaux électroniques) sans interaction avec le champ. Ici, chaque état excité $|e_i\rangle$ est associé à une énergie $\hbar\omega_i$;
- $\hat{H}_{\text{L}} = \hbar\omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})$, l'hamiltonien du **champ électromagnétique quantifié** dans un mode unique (celui du laser). Il est représenté comme un oscillateur harmonique quantique avec énergie $\hbar\omega$ par photon, et opérateurs \hat{a} , \hat{a}^\dagger de création/annihilation de photons. Le terme $\frac{1}{2}\hbar\omega$ est l'énergie du vide (qui peut être ignorée dans la plupart des cas);
- $\hat{H}_{\text{int}} = -\vec{D} \cdot \vec{E}_\perp$, l'interaction **dipolaire quantifiée** entre l'atome et le champ électrique transverse \vec{E}_\perp (7.22) s'écrit :

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0V}} (\vec{D} \cdot \vec{u}) (\hat{a} + \hat{a}^\dagger). \quad (7.26)$$

Dans l'*approximation des grandes longueurs d'onde* ($\lambda \gg \langle \vec{r} \rangle$, où \vec{r} désigne la coordonnée électrique relative au noyau), cet Hamiltonien prend la forme de l'**Hamiltonien dipolaire électrique** [?, ?]. L'opérateur de moment dipolaire atomique \vec{D} se décompose comme $\vec{D} = \sum_{e_i} \vec{d}_{g \leftrightarrow e_i} |g\rangle \langle e_i| + \text{h.c.}$, où $\vec{d}_{g \leftrightarrow e_i} = \langle g | \vec{D} | e_i \rangle$ est l'élément de matrice dipolaire entre les états $|g\rangle$ et $|e_i\rangle$, et “h.c.” désigne le terme hermitien conjugué.

Cette écriture traduit le fait que seules les transitions dipolaires électriques permises par les règles de sélection (parité et conservation du moment angulaire) participent au couplage avec le champ quantifié.

Équivalence entre champ quantique et champ classique Considérons un champ électromagnétique monochromatique de fréquence ω , quantifié dans un volume V , contenant en moyenne $\langle N \rangle$ photons.

- Du point de vue quantique, l'énergie moyenne d'un champ dans un seul mode est donnée par : $\langle \hat{H}_{\text{L}} \rangle = \hbar\omega \left(\langle N \rangle + \frac{1}{2} \right)$. En négligeant l'énergie du point zéro $\frac{1}{2}\hbar\omega$, qui ne contribue pas aux transitions physiques, on obtient :

$$E_{\text{quantique}} = \langle N \rangle \hbar\omega. \quad (7.27)$$

- Du point de vue classique, une onde électromagnétique de champ électrique $\vec{E}_\perp(t) = \hat{\mathcal{E}} \cos(\omega t) \vec{u}$ transporte une densité d'énergie électrique : $u_E = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathcal{E}^2$, ce qui donne une énergie totale dans le volume V :

$$E_{\text{classique}} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathcal{E}^2 V. \quad (7.28)$$

En identifiant ces deux expressions dans un seul mode, on obtient la relation fondamentale :

$$\langle N \rangle \hbar \omega = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathcal{E}^2 V, \quad (7.29)$$

qui permet d'exprimer l'amplitude du champ électrique E_0 en fonction du nombre moyen de photons $\langle N \rangle$ dans le champ laser.

États habillés et structure des niveaux

Les états propres de l'Hamiltonien non-interactif $\hat{\mathbf{H}}_{\text{at}} + \hat{\mathbf{H}}_{\text{L}}$ sont les produits tensoriels $|g, N\rangle$ et $|e_i, N\rangle$, décrivant un atome dans l'état $|g\rangle$ ou $|e_i\rangle$ avec N photons dans le mode du champ laser. Leurs énergies respectives sont :

$$E_{g,N} = \hbar \omega_g + N \hbar \omega, \quad E_{e_i,N} = \hbar \omega_{e_i} + N \hbar \omega.$$

On parle d'« états habillés » pour désigner cette base atome + champ, qui servira à construire les états propres du système complet en présence d'interaction. L'interaction dipolaire $\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} = -\vec{\mathbf{D}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\perp}$ couple les états $|g, N+1\rangle$ et $|e_i, N\rangle$ via l'absorption d'un photon, ainsi que $|g, N\rangle$ et $|e_i, N+1\rangle$ via une émission virtuelle. Les autres transitions, fortement hors résonance, sont négligées dans l'approximation séculaire.

Annulation de la correction d'énergie au premier ordre.

- **Ordre 1 — pas de correction diagonale :**

Dans le cadre de la théorie des perturbations indépendantes du temps, la correction d'énergie au premier ordre pour un état $|i\rangle$ est donnée par :

$$\delta E_i^{(1)} = \langle i | \hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} | i \rangle. \quad (7.30)$$

Or, dans le cas de l'interaction dipolaire, l'opérateur $\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} = -\vec{\mathbf{D}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\perp}$ est de parité impaire, alors que les états électroniques $|g\rangle, |e_i\rangle, \dots$ ont une parité bien définie.

Un opérateur de parité impaire possède des éléments diagonaux nuls dans une base d'états de parité définie. Ainsi :

$$\langle g | \hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} | g \rangle = 0, \quad \langle e_i | \hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} | e_i \rangle = 0. \quad (7.31)$$

De manière générale, $\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}}$ ne couple que des états de parité opposée, et il est donc purement hors-diagonal dans la base des états propres de $\hat{\mathbf{H}}_{\text{at}}$.

Il en résulte que la correction d'énergie au premier ordre est strictement nulle :

$$\delta E_i^{(1)} = 0. \quad (7.32)$$

La première contribution non nulle provient donc du second ordre, qui décrit des transitions virtuelles de type

$$\begin{array}{ccc} |g, N\rangle & \xrightarrow{\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}}} & |e, N-1\rangle \\ |g, N\rangle & \xleftarrow{\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}}} & |e, N+1\rangle, \end{array} \quad (7.33)$$

responsables du décalage AC-Stark (ou potentiel dipolaire optique).

- **Ordre 2 — décalage d'énergie :**

Le champ étant loin de la résonance avec les états $|e_i\rangle$, on applique la théorie des perturbations indépendantes du temps au second ordre. L'interaction induit un décalage de l'énergie de l'état $|g\rangle$ donné par :

$$\delta E_g^{(2)} = \sum_{e_i} \left(\frac{|\langle e_i, N-1 | \hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} | g, N \rangle|^2}{E_{g,N} - E_{e_i,N-1}} + \frac{|\langle e_i, N+1 | \hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} | g, N \rangle|^2}{E_{g,N} - E_{e_i,N+1}} \right). \quad (7.34)$$

Approximation séculaire et sélection des transitions pertinentes. Dans le cadre du piégeage dipolaire, nous faisons l'hypothèse que le champ laser est **quasi-résonant** avec un **nombre restreint de transitions atomiques**. Autrement dit, la fréquence du laser ω est suffisamment proche de certaines transitions $\omega_{g \rightarrow e_i} = \omega_{e_i} - \omega_g$ de l'atome, de sorte que le désaccord $\Delta_i = \omega - \omega_{g \rightarrow e_i}$ est **petit devant les fréquences optiques** elles-mêmes : $|\Delta_i| \ll \omega_L, \omega_{g \rightarrow e_i}$, et $|\Delta_i| \gg \Gamma, \Omega$. Cette hypothèse permet de simplifier l'analyse perturbative de l'interaction atome-laser : dans la somme intervenant dans la correction d'énergie au second ordre, seuls les **termes proches de la résonance** (i.e., pour lesquels $E_g \simeq E_i \pm \hbar\omega$) contribuent significativement à la somme. En effet, pour ces termes, le dénominateur devient **petit**, ce qui rend leur contribution **dominante**. Les autres transitions, très éloignées en énergie, ont des dénominateurs très grands, et leur influence devient négligeable. Cette **troncature de la somme perturbative** constitue l'**approximation séculaire**.

Dans ce régime, l'interaction dipolaire sélectionne efficacement les couplages entre les états atomiques et photoniques **ayant une différence d'un seul photon** :

$$|g, N\rangle \xleftrightarrow{\hat{H}_{\text{int}}} |e_i, N-1\rangle, \quad (7.35)$$

soit

$$\delta E_g^{(2)} \simeq \sum_{e_i} \frac{|\langle e_i, N-1 | \hat{H}_{\text{int}} | g, N \rangle|^2}{\hbar(\omega - \omega_{g \rightarrow e_i})}. \quad (7.36)$$

Expression des éléments de matrice dans l'interaction atome-champ cohérent

Les éléments intervenant dans l'équation de second ordre, qui donne la correction d'énergie d'un état atomique sous l'effet du champ laser, sont des éléments de matrice du type :

$$-\langle e_i, N-1 | \vec{D} \cdot \vec{E}_\perp | g, N \rangle.$$

Conclusion. En conséquence, l'élément de matrice d'interaction s'écrit finalement :

$$\langle e_i, N-1 | \hat{H}_{\text{int}} | g, N \rangle = -\frac{\mathcal{E}}{2} \langle e_i | \vec{D} \cdot \vec{u} | g \rangle.$$

Ce terme relie l'état atomique $|g\rangle$ au niveau excité $|e_i\rangle$, avec un couplage proportionnel à l'amplitude du champ classique et à l'élément de matrice dipolaire entre les deux états. C'est ce terme qui entre au numérateur dans l'expression de la correction d'énergie au second ordre, et qui donne naissance au **potentiel dipolaire optique**.

7.4 Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne

7.4.1 Structure électronique du Rubidium

L'atome de Rubidium (^{87}Rb) est un **élément alcalin**, c'est-à-dire qu'il possède une configuration électronique de la forme $[\text{Kr}] 5s^1$, avec un unique électron de valence situé dans la couche $5s$. Cela implique que la structure énergétique de l'atome est essentiellement déterminée par ce seul électron périphérique, interagissant avec un cœur atomique fermé (couche interne complète).

En première approximation, on peut donc modéliser le Rubidium comme un système à un électron, à la manière de l'atome d'hydrogène, mais avec un potentiel effectif tenant compte du blindage dû aux électrons du cœur. Ce modèle permet de comprendre la structure fine et les transitions optiques dominantes de l'atome.

La structure des niveaux d'énergie est ensuite raffinée par les effets suivants :

- **Structure fine** : Elle résulte du couplage spin-orbite entre le moment angulaire orbital \vec{L} et le spin \vec{S} de l'électron de valence. Ce couplage divise chaque niveau orbital (par exemple, le niveau $5p$) en deux sous-niveaux caractérisés par le moment angulaire total $J = L \pm \frac{1}{2}$. Ainsi, la transition $5S \leftrightarrow 5P$ donne naissance aux deux raies bien connues :
 - **raie D2** : $\lambda = 780$ nm, correspondant à la transition $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$,
 - **raie D1** : $\lambda = 795$ nm, correspondant à la transition $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2}$.

- × **Structure hyperfine (non traitée ici)** : Elle résulte du couplage entre le moment angulaire total de l'électron (\vec{J}) et celui du noyau (\vec{I}), introduisant une subdivision supplémentaire des niveaux d'énergie. Bien que cette structure hyperfine soit essentielle dans certains contextes (résonances hyperfines, refroidissement laser, etc.), elle ne sera pas considérée ici car nous nous limitons à l'étude des effets associés à la structure fine.

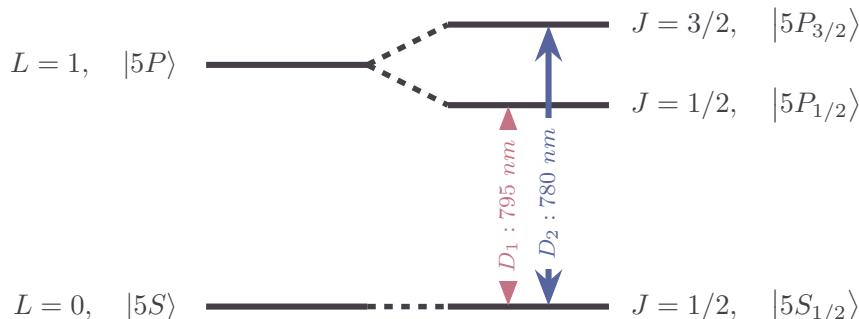


FIGURE 7.2 – Structure fine (transitions D1 et D2) de l'atome de Rubidium ^{87}Rb .

En effet le faisceau à environ 770 nm est donc **hors résonance**, mais **pas trop éloigné** de ces transitions (désaccord de l'ordre de quelques dizaines de THz), ce qui garantit que la structure hyperfine peut être **négligée** dans un premier temps, et que l'interaction est bien décrite par la contribution dominante des raies D1 et D2. Dans ce régime de désaccord modéré, le potentiel dipolaire est obtenu comme une somme pondérée des contributions des transitions proches, et les autres transitions atomiques (plus énergétiques) peuvent être ignorées.

Ce modèle à un électron actif simplifie grandement l'analyse des interactions entre le Rubidium et un champ laser, en particulier dans le cadre du piégeage dipolaire et des transitions induites par effet Stark.

7.4.2 Structure matricielle du potentiel dipolaire

Lorsque la structure fine est prise en compte, le potentiel dipolaire ne se réduit plus à une simple fonction scalaire, mais se décompose en contributions scalaire, vectorielle et tensorielle, définies dans l'espace des états électroniques $|J, m_J\rangle$.

Dans un scénario expérimental où l'on restreint l'espace interne de l'atome à deux sous-niveaux hyperfins ou Zeeman (par exemple pour définir un pseudo-spin), le potentiel dipolaire peut être représenté par une matrice 2×2 de la forme générale :

$$U_{\text{dip}} = U_{\text{scal}}^{(0)} \cdot \text{Id}_2 + U_{\text{vec}}^{(1)} (\vec{J} \cdot \vec{B}_{\text{fict}}) + U_{\text{tens}}^{(2)} (\vec{J}, \vec{u}). \quad (7.37)$$

où :

- **Terme scalaire** : $U_{\text{scal}}^{(0)}$ génère un décalage isotrope du niveau atomique qui est indépendant du sous-niveau de J (ou F). Ce décalage est la composante « classique » de l'effet Stark AC, proportionnelle à l'intensité lumineuse, et n'entraîne pas de structure fine dépendant de la polarisation de la lumière. Ce terme domine dans la plupart des configurations expérimentales, notamment avec un champ lumineux polarisé rectiligne, comme c'est le cas ici.
- **Terme vectoriel (Zeeman optique)** : $U_{\text{vec}}^{(1)}$ agit comme un champ magnétique fictif (optical Zeeman effect) le long de $\vec{B}_{\text{fict}} \propto i(\vec{E}^* \times \vec{E})$. En effet, il est proportionnelle à l'opérateur $i(\vec{u}^* \times \vec{u}) \cdot \vec{J}$ se comportant comme $\vec{J} \cdot \vec{B}_{\text{fict}}$. Ainsi, la polarisation circulaire du champ ($i[\vec{u}^* \times \vec{u}] \neq 0$) donne un décalage dépendant de l'orientation de \vec{J} (analogue à un effet Zeeman), alors que pour une polarisation rectiligne (\vec{u} réel) ce produit vectoriel s'annule et ce terme vectoriel disparaît. On parle souvent de champ fictif parce que, en convention, le terme vectoriel du Hamiltonien d'interaction s'écrit formellement $\mu_B g_J (\vec{J} \cdot \vec{B}_{\text{fict}})$. Dans notre cas (polarisation rectiligne), ce terme est donc négligeable.

- × **Terme tensoriel :** $U_{\text{tens}}^{(2)}$ introduit une anisotropie du potentiel selon l'orientation du moment angulaire par rapport à la polarisation du champ. Ce terme est proportionnel à une combinaison quadrupolaire des composantes de \vec{J} :

$$\frac{3[(\vec{u}^* \cdot \vec{J})(\vec{u} \cdot \vec{J}) + (\vec{u} \cdot \vec{J})(\vec{u}^* \cdot \vec{J})] - 2\vec{J}^2}{2J(2J-1)}. \quad (7.38)$$

Le terme tensoriel ne contribue que pour les états atomiques ayant un moment cinétique total $J \geq 1$. Pour les atomes alcalins, comme le ^{87}Rb , l'état fondamental est un état S avec $J = 1/2$, et ce terme est donc strictement nul. En effet, un spin $1/2$ ne peut posséder de quadrupôle : seules les composantes scalaire et vectorielle du potentiel dipolaire subsistent (voir Annexe B pour une démonstration détaillée).

Résumé. La décomposition (7.37) montre que :

- en toute généralité, le potentiel dipolaire comporte trois contributions (scalaire, vectorielle et tensorielle) ;
- pour les atomes alcalins au repos dans leur état fondamental ($J = 1/2$), seul le terme vectoriel peut subsister (si la polarisation est elliptique), tandis que le terme tensoriel disparaît.

Cette structure matricielle du potentiel dipolaire joue un rôle central dans la manipulation cohérente des états internes de l'atome, la réalisation de barrières optiques dépendantes du spin, ou encore la mise en œuvre de qubits dans des réseaux d'atomes piégés. Elle permet également d'exploiter des phénomènes comme les transitions Raman induites optiquement ou la séparation de spin dans des pièges optiques.

7.4.3 Régime de désaccord très important

Dans ce chapitre, nous ne considérons le régime de désaccord très important que dans le but de calculer les éléments de matrice du moment dipolaire \vec{D} . En effet, pour un laser fortement détuné par rapport aux transitions électroniques ($|\Delta| \gg \Delta_{\text{fs}}, \Delta_{\text{hfs}}$), le champ lumineux ne peut plus distinguer les différents niveaux excités liés aux sous-niveaux J ou F (par exemple les niveaux $5P_{1/2}$ et $5P_{3/2}$ pour le rubidium).

Dans ce régime, les niveaux excités peuvent être traités uniquement en termes de moment angulaire orbital L et de sa projection m_L , car le moment dipolaire \vec{D} ne dépend pas du spin de l'électron. Les éléments de matrice $\langle e | \vec{D} | g \rangle$ se calculent donc simplement en utilisant les états orbitaux, ce qui permet de négliger les détails de la structure fine ou hyperfine dans cette approximation.

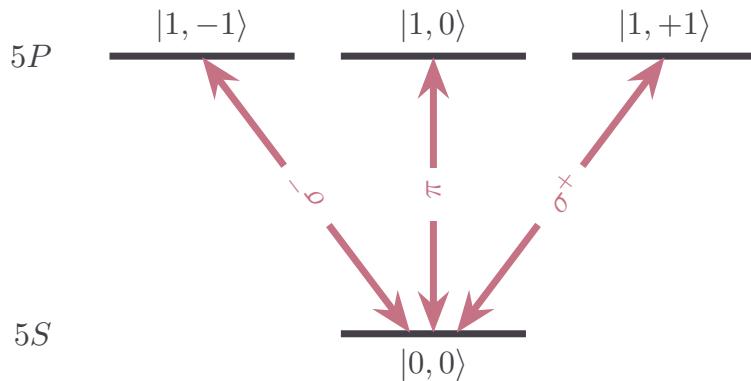


FIGURE 7.3 – Structure des niveaux électroniques $|L, m_L\rangle$ de l'atome de rubidium.

[Insérer ici un schéma de transition entre niveaux m_L avec $q = 0$]

Décalage d'énergie au second ordre. On considère des états électroniques notés $|g\rangle = |nL\rangle$ et $|e\rangle = |n'L'\rangle$. Dans le régime de désaccord important, l'effet de la lumière sur ces états peut être traité par la théorie des perturbations indépendantes du temps au second ordre. Cette perturbation implique le carré de l'opérateur dipolaire et donne naissance au potentiel dipolaire. On note que l'interaction ne couple que les sous-niveaux orbitaux via des règles de sélection simples sur L et m_L .

Dans ce contexte, il est utile de travailler dans la base $|L, m_L\rangle$, propre au moment angulaire orbital. Les amplitudes de transition sont alors gouvernées par les coefficients de Clebsch-Gordan. Une transition de type $S \rightarrow P$ (i.e. $L = 0 \rightarrow L' = 1$) se comporte, pour une polarisation donnée, comme une transition entre deux niveaux effectifs.

Structure orbitale et opérateur dipolaire. L'opérateur dipolaire, en tant que vecteur, peut être exprimé dans la base sphérique :

$$\vec{D} = \sum_{q=-1}^{+1} \hat{D}_q \vec{u}_q,$$

où $q = 0, \pm 1$ désigne respectivement les composantes de polarisation rectiligne (π), circulaire droite (σ^+) et circulaire gauche (σ^-), et \vec{u}_q est le vecteur de polarisation associé.

Dans cette base, seule la composante \hat{D}_q correspondant au changement $m_L \rightarrow m'_L = m_L + q$ est active :

$$\langle m'_L | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | m_L \rangle \propto \delta_{m'_L, m_L + q}.$$

Application du théorème de Wigner-Eckart. L'opérateur dipôle électrique \vec{D} est un opérateur vectoriel, que l'on peut exprimer en termes de composantes sphériques \hat{D}_q avec $q = 0, \pm 1$, correspondant aux polarisations π et σ^\pm .

Le théorème de Wigner-Eckart permet d'évaluer les éléments de matrice de l'opérateur dipolaire entre états de moment angulaire en factorisant la dépendance radiale et angulaire :

$$\langle L', m'_L | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | L, m_L \rangle = \langle L' | \| \vec{D} \| | L \rangle \cdot \langle L, 1; m_L, q | L', m'_L \rangle, \quad (7.39)$$

où $\langle L' | \| \vec{D} \| | L \rangle$ est l'élément de matrice réduit, qui encode la dépendance radiale (par exemple $d_{5S \rightarrow 5P}$ pour le rubidium), et $\langle L, 1; m_L, q | L', m'_L \rangle$ est le coefficient de Clebsch-Gordan associé à la conservation du moment cinétique orbital projeté.

Pour une polarisation linéaire parallèle à l'axe z , on a $q = 0$ (polarisation π).

Application au cas $5S \rightarrow 5P$ et avec une polarisation π . Considérons la transition électronique entre les niveaux $5S$ et $5P$ du rubidium 87, en négligeant la structure fine (i.e., on travaille dans la base des moments angulaires orbitaux $|L, m_L\rangle$). Dans cette approximation, l'état fondamental est noté $|L = 0, m_L = 0\rangle$, et l'état excité $|L' = 1, m_{L'}\rangle$, car la transition dipolaire électrique autorise $\Delta L = \pm 1$.

L'élément de matrice s'écrit alors, en utilisant le théorème de Wigner-Eckart :

$$\langle L' = 1, m'_L | \vec{D} \cdot \vec{u}_{q=0} | L = 0, m_L = 0 \rangle = d_{5S \leftrightarrow 5P} \cdot \langle L = 0, 1; m_L = 0, q = 0 | 1, m'_L \rangle. \quad (7.40)$$

où :

- $d_{5S \leftrightarrow 5P} = \langle L' = 1 | \| \vec{D}_0 \| | L = 0 \rangle$ est l'élément de matrice réduit, indépendant de m_L ou de la polarisation q ;
- $\langle L = 0, 1; m_L = 0, q = 0 | 1, m'_L \rangle$ est un **coefficient de Clebsch-Gordan**.

Ce dernier impose une condition stricte de conservation de la projection du moment angulaire : $m_{L'} = m_L + q = 0 + 0 = 0$. Par conséquent, seule la composante $m_{L'} = 0$ de l'état excité est couplée à $|L = 0, m_L = 0\rangle$ sous l'action du champ π -polarisé. Et comme $\langle 0, 1; 0, 0 | 1, 0 \rangle = 1$, on obtient finalement :

$$d_{5S \leftrightarrow 5P} = \langle L' = 1, m'_L = 0 | \vec{D} \cdot \vec{u}_{q=0} | L = 0, m_L = 0 \rangle. \quad (7.41)$$

Cette analyse met en évidence le rôle de la polarisation du champ lumineux dans la sélection des transitions permises, et montre que dans le régime de très grand désaccord, la structure fine peut être ignorée au profit d'une description plus simple en termes de nombres quantiques orbitaux.

Valeur de l'élément de matrice réduit. L'expression (7.39) reste valable pour les éléments de matrice réduits [?]. Dans le cas du rubidium 87, on peut ainsi déterminer numériquement la valeur de l'élément $\langle L' || \vec{D} || L \rangle$, noté $d_{5S \leftrightarrow 5P}$, à partir des données spectroscopiques expérimentales (fréquence de transition, largeur naturelle, etc.).

$$d_{5S \leftrightarrow 5P} \approx 2,5 \times 10^{-29} \text{ C} \cdot \text{m}. \quad (7.42)$$

Cette valeur est essentielle pour quantifier les amplitudes de transition, les forces radiatives et les potentiels dipolaires induits par un champ laser, dans les expériences de manipulation optique d'atomes de rubidium.

7.4.4 Structure fine et base des états $|L, S; J, m_J\rangle$.

Le moment angulaire électronique total J résulte du couplage entre le moment angulaire orbital total L et le moment angulaire de spin S des électrons, selon la relation $J = L + S$. Dans le cas des atomes alcalins, on ne considère que l'électron de valence, pour lequel le spin est fixé à $S = 1/2$.

Lorsque le désaccord du faisceau laser devient comparable à la séparation entre les doublets de structure fine, il est nécessaire de prendre en compte le couplage spin-orbite. Celui-ci donne lieu à une levée de dégénérescence des niveaux d'énergie, conduisant à ce que l'on appelle la structure fine de l'atome. Dans ce régime, les états propres du système s'écrivent dans la base couplée $|L, S; J, m_J\rangle$, où m_J est la projection de J sur l'axe de quantification. Ces niveaux sont représentés sur la figure 1.2.

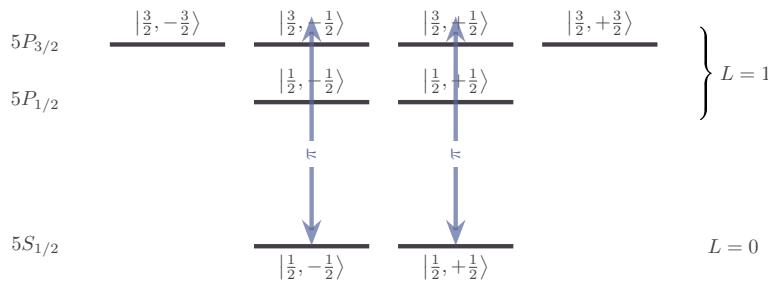


FIGURE 7.4 – Structure fine (niveaux $|J, m_J\rangle$) de l'atome de rubidium.

[Insérer ici un schéma de transition]

Décalage d'énergie au second ordre. En notant $\hbar\omega_{5S_{1/2} \rightarrow 5P_{J'}} = \hbar\omega_{5P_{J'}} - \hbar\omega_{5S_{1/2}}$ la différence d'énergie entre les états excités $|e\rangle \equiv |5P_{J'}\rangle$ et l'état fondamental $|g\rangle \equiv |5S_{1/2}\rangle$, le décalage d'énergie induit par un champ lumineux de polarisation **rectiligne** s'écrit, au second ordre en perturbation (voir équation (7.36)) :

$$\delta E_{5S_{1/2}}^{(2)} = \frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \sum_{J' \in \left\{ \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right\}} \frac{|\langle 5P_{J'} | \vec{u} \cdot \vec{D} | 5S_{1/2} \rangle|^2}{\omega - \omega_{5S_{1/2} \rightarrow 5P_{J'}}}. \quad (7.43)$$

Ce décalage est purement scalaire dans le cas d'un champ à polarisation linéaire, car les contributions vectorielles (champ fictif) disparaissent lorsque \vec{u} est réel. De plus, le terme tensoriel est nul dans l'état fondamental $5S_{1/2}$ du rubidium 87, qui a $J = \frac{1}{2}$.

Projection dans la base découpée. Pour calculer les déplacements lumineux induits par un champ électromagnétique sur chacun des niveaux de structure fine, il est utile d'exprimer les états de la base couplée $|L, S; J, m_J\rangle$ dans la base découpée $|L, S; m_L, m_S\rangle$. Cette décomposition permet de faire apparaître explicitement les composantes orbitales et de spin, ce qui facilite l'évaluation des éléments de matrice du moment dipolaire.

Pour effectuer ces calculs, on utilise les coefficients de Clebsch-Gordan, qui permettent de relier la base $|L, S; J, m_J\rangle$ à la base produit $|L, m_L; S, m_S\rangle$ selon la relation :

$$|L, S; J, m_J\rangle = \sum_{\substack{m_L + m_S = m_J \\ -L \leq m_L \leq L, \\ -S \leq m_S \leq S}} \langle L, m_L; S, m_S | J, m_J \rangle |L, m_L; S, m_S\rangle. \quad (7.44)$$

Cette décomposition permet ensuite de calculer les éléments de matrice du moment dipolaire selon

$$\langle L', S'; J', m'_J | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | L, S; J, m_J \rangle. \quad (7.45)$$

Application au cas $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2, 3/2}$ avec $q = 0$. Le moment angulaire électronique total J résulte du couplage entre le moment angulaire orbital L et le spin électronique S , selon la relation $J = L + S$. Dans le cas des atomes alcalins, on ne considère que l'électron de valence, pour lequel $S = \frac{1}{2}$.

Considérons l'état fondamental $|5^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2}\rangle$, que l'on peut écrire de manière équivalente comme :

$$|5^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2}\rangle \equiv |5S, J = \frac{1}{2}, m_J = \pm\frac{1}{2}\rangle \equiv |n = 5; L = 0, S = \frac{1}{2}; J = \frac{1}{2}, m_J = \pm\frac{1}{2}\rangle.$$

Dans le but de faciliter les calculs, nous projetons cet état dans la base découplée $|L, m_L; S, m_S\rangle$. Étant donné que $L = 0$ pour l'état S , on a $m_L = 0$ nécessairement. L'état se réécrit donc simplement :

$$|5^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2}\rangle = |m_L = 0, m_S = \pm\frac{1}{2}\rangle$$

Plusieurs notations sont utilisées afin de s'adapter aux préférences des lecteurs et de lever toute ambiguïté. On remarque ici que, dans le cas $L = 0$, l'état couplé coïncide avec l'état découpé, car le moment orbital ne contribue pas à la somme vectorielle du moment angulaire total.

Continuons avec les états excités $|5^2P_{1/2}, m'_J\rangle$, que l'on peut écrire de manière équivalente comme :

$$|5^2P_{J'}, m'_J\rangle \equiv |5P, J', m'_J\rangle \equiv |n = 5; L' = 1, S' = \frac{1}{2}; J', m'_J\rangle.$$

Pour rappel, les opérateurs de montée/descente agissant sur les états propres du moment angulaire vérifient la relation générale :

$$\hat{A}_{\pm}|n, A, m_A\rangle = \hbar\sqrt{A(A+1) - m_A(m_A \pm 1)}|n, A, m_A \pm 1\rangle \quad (7.46)$$

où l'opérateur $\hat{A} \in \{\hat{S}, \hat{L}, \hat{J}, \dots\}$.

Donc

$$\begin{aligned} |5^2P_{1/2}, m'_J = \pm\frac{1}{2}\rangle &= \mp\sqrt{\frac{1}{3}}|m'_L = 0, m'_S = \pm\frac{1}{2}\rangle \pm \sqrt{\frac{2}{3}}|m'_L = \pm 1, m'_S = \mp\frac{1}{2}\rangle, \\ |5^2P_{3/2}, m'_J = \pm\frac{1}{2}\rangle &= +\sqrt{\frac{2}{3}}|m'_L = 0, m'_S = \pm\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|m'_L = \pm 1, m'_S = \mp\frac{1}{2}\rangle, \\ |5^2P_{3/2}, m'_J = \pm\frac{3}{2}\rangle &= +|m'_L = \pm 1, m'_S = \pm\frac{3}{2}\rangle. \end{aligned}$$

Cette notation sera utile par la suite pour analyser les transitions permises et les amplitudes associées lors de l'interaction dipolaire avec une lumière polarisée ($q = 0$ correspondant à une polarisation π). En se rappelant que dans ce cas

$$d_{5S \rightarrow 5P} \doteq \langle L' = 1 | \vec{D} | L = 1 \rangle = \langle L' = 1, m'_L = 0 | \vec{D} \cdot \vec{u} | L = 0, m_L = 0 \rangle$$

il vient que

$$\begin{aligned} \langle 5^2P_{1/2}, m'_J = \pm\frac{1}{2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | 5^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2} \rangle &= \mp\sqrt{\frac{1}{3}}d_{5S \rightarrow 5P}, \\ \langle 5^2P_{3/2}, m'_J = \pm\frac{1}{2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | 5^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2} \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}d_{5S \rightarrow 5P}, \\ \langle 5^2P_{3/2}, m'_J = \pm\frac{3}{2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | 5^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2} \rangle &= 0. \end{aligned}$$

Potentiel dipolaire Potentiel dipolaire s'écrit :

$$\begin{aligned} U_{\text{dip}}(\vec{r}) &= \frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \left(\frac{|\langle 5^2P_{1/2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | 5^2S_{1/2} \rangle|^2}{\Delta_1} + \frac{|\langle 5^2P_{3/2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | 5^2S_{1/2} \rangle|^2}{\Delta_2} \right) \\ &= \frac{d_{5S \rightarrow 5P}^2 |\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2} \right). \end{aligned}$$

Ainsi finalement

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) = \frac{\hbar\Gamma^2}{8I_{\text{sat}}} \left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2} \right) I(\vec{r}), \quad (7.47)$$

avec $\Delta_1 = \omega - \omega_{5S_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2}}$ et $\Delta_2 = \omega - \omega_{5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}}$.

Taux d'émission spontanée Le même hamiltonien d'interaction qui génère le potentiel dipolaire est aussi responsable des processus de diffusion de photons (absorption suivie de réémission spontanée), qui conduisent à des effets dissipatifs.

Dans le cas d'un champ à polarisation linéaire et avec un grand désaccord par rapport aux transitions D1 et D2, le **taux d'émission spontanée** est donné par :

$$\Gamma_{sc}(\vec{r}) = \frac{\Gamma^3}{8I_{\text{sat}}} \left(\frac{1}{3\Delta_1^2} + \frac{2}{3\Delta_2^2} \right) I(\vec{r}). \quad (7.48)$$

Ce résultat repose sur les hypothèses suivantes :

- **Désaccords** $\Delta_{1,2}$ grands devant la largeur naturelle Γ ,
- **État fondamental unique** $|5S_{1/2}\rangle$,
- **Décomposition des contributions** de D1 et D2 avec poids 1/3, 2/3 respectivement, comme dans le potentiel dipolaire,
- **Polarisation linéaire du champ**, ce qui annule les composantes vectorielles du potentiel.

7.5 Notre dispositif expérimental

7.5.1 Choix du laser pour le piégeage dipolaire

Notre objectif est de réaliser un piégeage dipolaire optique pour des atomes de rubidium-87 confinés dans une géométrie unidimensionnelle. Pour cela, nous utilisons un potentiel dipolaire induit par un faisceau laser décalé vers le bleu des transitions atomiques D1 ($5S_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2}$, à $\lambda_{D1} = 794.98$ nm) et D2 ($5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$, à $\lambda_{D2} = 780.24$ nm). Le décalage spectral $\Delta > 0$ garantit que les atomes sont repoussés des zones d'intensité maximale, ce qui permet de construire une "boîte" optique où les atomes sont piégés entre plusieurs faisceaux.

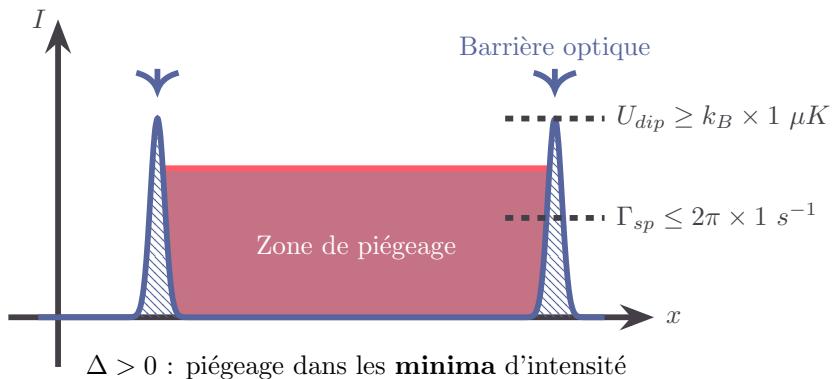


FIGURE 7.5

[Insérer ici un schéma des faisceaux bleus repoussant les atomes dans une boîte au centre]

Dans cette configuration, les faisceaux lasers génèrent un potentiel optique conservatif $U_{dip}(\vec{r})$ et induisent un taux de diffusion spontané $\Gamma_{sc}(\vec{r})$, tous deux proportionnels à l'intensité locale $I(\vec{r})$. Ces deux effets ont des conséquences opposées sur les atomes : le premier permet de les confiner, le second les chauffe et peut entraîner leur perte. Il est donc crucial d'optimiser ce compromis.

Critères de sélection

Deux critères fondamentaux guident notre choix de laser :

- Le **potentiel dipolaire** au niveau des atomes, $U_{dip}(0)$, doit être supérieur à une valeur minimale $U_{dip}^{(min)}$, fixée à :

$$U_{dip}(0) \geq U_{dip}^{(min)} = k_B \times 1\mu K. \quad (7.49)$$

Cette valeur garantit une barrière suffisante pour confiner les atomes contre leur agitation thermique résiduelle ou leur expansion quantique.

- Le **taux de diffusion spontané** au point x^* défini par $U_{dip}(x^*) = U_{dip}(0)/2$ doit rester inférieur à une valeur seuil pour limiter l'échauffement et les pertes :

$$\Gamma_{sp}(x^*) \leq 2\pi \times 1 s^{-1}. \quad (7.50)$$

Ce critère conduit, en utilisant le fait que le potentiel $U_{dip}^{(min)}(\vec{r})$ et le taux de diffusion spontanée $\Gamma_{sp}(\vec{r})$ soit proportionnelle à l'intensité $I(\vec{r})$, à la borne stricte suivante :

$$\Gamma_{sp}(0) \leq \Gamma_{sp}^{(max)} = 2\pi \times 2 s^{-1}. \quad (7.51)$$

Figure de mérite : ratio potentiel / diffusion

Le compromis entre profondeur de piège et diffusion est quantifié par la figure de mérite suivante :

$$\frac{U_{dip}(\vec{r})}{\hbar\Gamma_{sc}(\vec{r})} = \frac{1}{\Gamma} \cdot \frac{\left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2}\right)}{\left(\frac{1}{3\Delta_1^2} + \frac{2}{3\Delta_2^2}\right)} \geq \frac{U_{dip}^{(min)}}{\hbar\Gamma_{sc}^{(max)}} \quad (7.52)$$

Un calcul numérique montre que, sous ces contraintes, il est nécessaire de sélectionner des lasers dont la longueur d'onde est inférieure à une valeur maximale

$$\lambda_{abs}^{(max)} \simeq 778,4 \text{ nm.}$$

Contraintes sur la puissance laser

Le faisceau utilisé est gaussien. On rappelle que le *waist* w_0 désigne le rayon minimal du faisceau, défini comme la distance radiale r pour laquelle l'intensité transverse chute à $1/e^2$ de sa valeur au centre du faisceau, et ce à la position où le faisceau est le plus focalisé. Typiquement, nous utilisons ici des faisceaux avec un waist de l'ordre de $w_0 \sim 1 \mu\text{m}$.

Dans le cadre d'un piégeage **blue-detuned**, les atomes sont confinés dans une région **centrale de faible intensité**, située entre deux faisceaux focalisés. Le piégeage repose alors sur la formation de **parois optiques abruptes**, engendrées par les gradients d'intensité des faisceaux. Pour obtenir un gradient suffisamment marqué, il est nécessaire que chaque faisceau possède un **waist étroit**.

L'intensité maximale atteinte au centre du faisceau est donnée par :

$$I(0) = \frac{2P}{\pi w_0^2}, \quad (7.53)$$

avec P la puissance incidente. Cette expression relie directement la puissance requise aux contraintes de piégeage, et sera utilisée pour définir les bornes admissibles sur $P(\lambda)$ pour une longueur d'onde donnée.

En reportant cette intensité dans les expressions standards du potentiel et de la diffusion, on obtient les bornes admissibles pour la puissance :

$$\underbrace{U_{dip}^{(min)} \cdot \frac{\pi w_0^2}{2} \frac{8I_{sat}}{\Gamma^2} \cdot \left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2}\right)^{-1}}_{P^{(min)}(\lambda)} \leq P(\lambda) \leq \underbrace{\Gamma_{sc}^{(max)} \cdot \frac{\pi w_0^2}{2} \frac{8I_{sat}}{\Gamma^3} \cdot \left(\frac{1}{3\Delta_1^2} + \frac{2}{3\Delta_2^2}\right)^{-1}}_{P^{(max)}(\lambda)} \quad (7.54)$$

[Insérer ici une figure avec les courbes $P^{(min)}(\lambda)$ et $P^{(max)}(\lambda)$, et la zone autorisée]

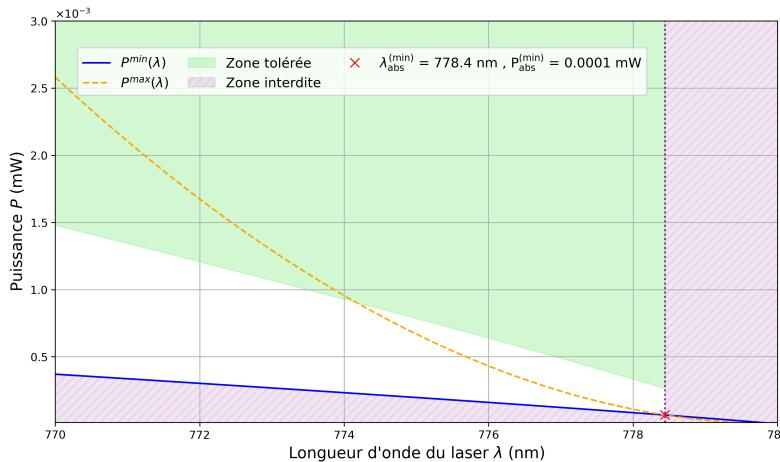


FIGURE 7.6 – Puissance requise en fonction de la longueur d’onde pour $w_0 = 1 \mu\text{m}$

L’intersection de ces courbes définit une **zone de faisabilité expérimentale** dans l’espace (λ, P) . Le croisement des courbes fournit la longueur d’onde maximale admissible :

$$\lambda_{abs}^{(max)} \simeq 778.4 \text{ nm}, \quad P_{abs}^{(min)} \simeq 0.0001 \text{ mW}$$

Un premier filtrage des sources laser admissibles impose que la longueur d’onde soit inférieure à $\lambda_{abs}^{(max)}$ et que la puissance disponible dépasse $P_{abs}^{(min)}$.

Prise en compte des pertes optiques

L’ensemble des éléments optiques traversés par le faisceau — incluant la sortie de fibre, les lentilles de collimation et de focalisation, les miroirs de redirection, les diaphragmes, ainsi que le diviseur de faisceau — induit des pertes cumulées non négligeables. Une estimation réaliste, fondée sur les caractéristiques typiques des composants et l’expérience de montage, indique que les pertes globales s’élèvent à environ 60 à 75%.

Ces pertes doivent être prises en compte dès le dimensionnement initial du système laser, afin de garantir que la puissance effectivement disponible au niveau des atomes soit suffisante pour atteindre les profondeurs de piége souhaitées. En pratique, on modélise cette efficacité par un facteur global η , défini comme :

$$P_{\text{utile}} = \eta \cdot P_{\text{laser}}, \quad \text{avec } \eta \simeq 0.25.$$

Ce coefficient sera utilisé dans la suite pour évaluer les puissances minimales requises des sources laser candidates. Une marge de sécurité est également conservée pour pallier les éventuels désalignements ou dégradations optiques en conditions expérimentales réelles.

Sources laser utilisées et pureté spatiale

Trois sources laser ont été sélectionnées pour la réalisation de la boîte optique blue-detuned destinée au piégeage dipolaire du Rubidium-87, dont deux répondent aux conditions de puissance admissibles $P^{(min)}(\lambda)$ et $P^{(max)}(\lambda)$.

- **DFB** à $\lambda = 772.5 \text{ nm}$, puissance $P = 75 \text{ mW}$.
- **DBR** à $\lambda = 778.0 \text{ nm}$, puissance $P = 60 \text{ mW}$.
- **DBR** à $\lambda = 770.5 \text{ nm}$, puissance $P = 32 \text{ mW}$.

Le laser DFB (Distributed Feedback) intègre un réseau de Bragg directement dans la région active, ce qui permet un couplage efficace entre la rétroaction optique et le gain, assurant une émission monomode stable tant sur le plan spectral que spatial. Cette architecture confère au DFB une excellente stabilité et une robustesse appréciées en physique atomique.

Le laser DBR (Distributed Bragg Reflector), quant à lui, dispose d’un réseau de Bragg séparé de la région active. Cette configuration offre une plus grande flexibilité dans le réglage de la longueur d’onde, mais entraîne généralement une stabilité spectrale un peu moindre par rapport aux lasers DFB.

Ces diodes sont pigmaillées sur des fibres monomodes à maintien de polarisation (type PM780-HP), assurant un profil spatial très pur. En effet, bien que des modes transverses supérieurs puissent être émis par la puce laser, la fibre ne guide que le mode fondamental LP₀₁, équivalent au mode gaussien TEM₀₀, dans la gamme spectrale 770–780 nm. Cette configuration agit comme un filtre spatial puissant, garantissant une sortie de faisceau gaussien avec une pureté supérieure à 99.5% en puissance.

Cette haute pureté spatiale est cruciale pour obtenir une focalisation optimale et des gradients de champ suffisamment intenses dans la zone de piégeage, tout en minimisant les pertes optiques et les effets parasites liés à la présence de modes non fondamentaux.

Enfin, les trois lasers se situent dans la zone de tolérance définie par les conditions sur la puissance minimale et maximale en fonction de la longueur d'onde, validant leur adéquation pour la construction de notre boîte optique blue-detuned.

Avec un waist de $w_0 = 1 \mu\text{m}$, les puissances minimales requises pour satisfaire les conditions $U_{\text{dip}}^{(\min)}$ et $\Gamma_{\text{sp}}^{(\max)}$ sont extrêmement faibles : environ 1.1 μW pour la DFB à 772.5 nm, 0.3 μW pour la DBR à 778.0 nm, et 1.4 μW pour la DBR à 770.5 nm. Ces valeurs sont très largement inférieures aux puissances disponibles pour chacun de ces lasers, même en tenant compte des pertes optiques, ce qui confirme la faisabilité expérimentale du dispositif.

Choix du waist pour les projets futurs. On souhaite choisir une source laser adaptée à différents projets. Notamment, on peut n'utiliser qu'un seul faisceau focalisé sur les atomes, et avec un acousto-optique dessiner un potentiel sur le plan focal des atomes. L'avantage par rapport à la double barrière expliquée plus haut est qu'ici un seul faisceau suffit. Il faut cependant que l'acousto-optique dessine plus rapidement que le temps de relaxation des atomes. Ce projet est mené par Florence Nogrette.

Un autre projet, plus simple et utilisant également un seul faisceau, consiste à employer un faisceau gaussien avec un waist suffisamment grand pour recouvrir tous les atomes et à utiliser le DMD pour façonnner un potentiel sur le plan des atomes. Afin de garder une marge pour ces projets, nous avons choisi un waist de 300 μm .

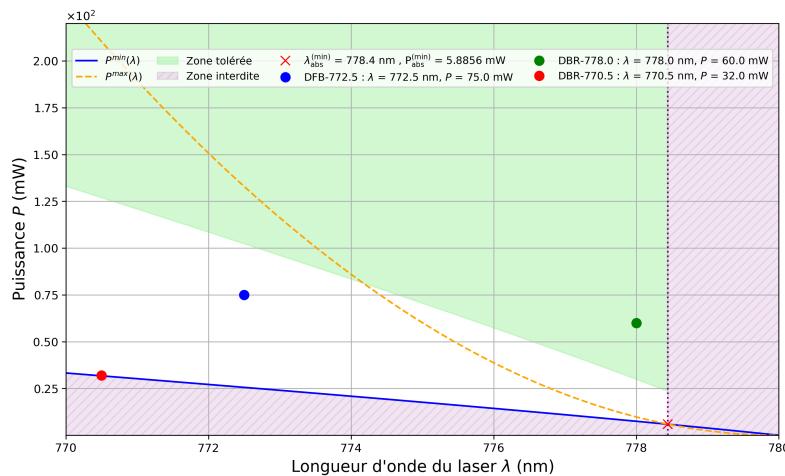


FIGURE 7.7 – Puissance requise en fonction de la longueur d'onde pour $w_0 = 300 \mu\text{m}$

Avec un waist de $w_0 = 300 \mu\text{m}$, les puissances minimales requises augmentent considérablement en raison de la baisse d'intensité au centre du faisceau. On obtient ainsi des puissances nécessaires de l'ordre de 102 mW pour la DFB à 772.5 nm, 30 mW pour la DBR à 778.0 nm, et 127 mW pour la DBR à 770.5 nm (Fig. 7.7).

Afin d'assurer un potentiel dipolaire plus propre, avec le moins de diffusion et de chauffage possible, nous avons choisi la source laser présentant le plus grand désaccord : la DBR à 770.5 nm. Néanmoins, pour obtenir un puits suffisamment profond, la puissance disponible reste insuffisante.

Ce constat a motivé l'ajout d'un amplificateur optique (TA — *Tapered Amplifier*) en sortie du laser à 770.5 nm, afin de compenser la puissance limitée et de garantir des conditions de piégeage satisfaisantes malgré les pertes optiques du système.

[Photos laser à 770.5 nm]

7.5.2 Amplification par Tapered Amplifier (TA)

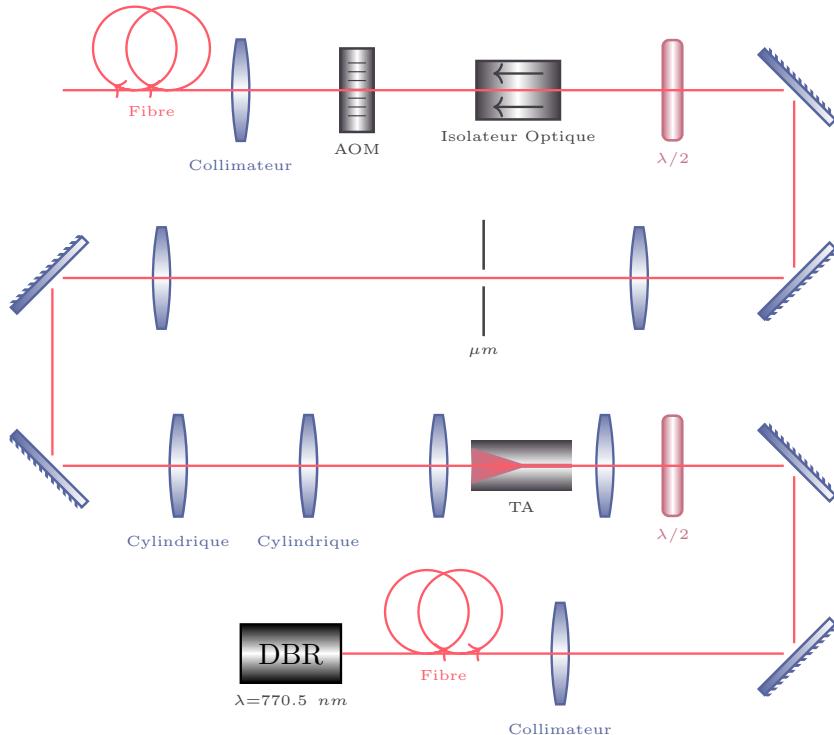


FIGURE 7.8 – Schéma global de l'amplification

Principe et motivation

Afin de compenser le déficit de puissance du laser DBR à 770.5 nm — notamment dans le scénario initialement envisagé avec un waist focalisé important — un amplificateur optique de type *Tapered Amplifier* (TA) a été ajouté en aval de la source laser.

Un TA est un semi-conducteur optique amplificateur non résonant, composé d'une région d'entrée étroite (guidée) et d'une région de sortie évasée (tapered), permettant d'amplifier efficacement un faisceau monomode tout en conservant un profil spatial de bonne qualité. Contrairement aux lasers, le TA n'oscille pas par lui-même : il agit uniquement sur un signal incident (seed). Il peut amplifier des puissances faibles (quelques mW) en entrée jusqu'à plusieurs centaines de mW, voire au-delà, en sortie.

Ce dispositif est particulièrement adapté aux expériences de piégeage optique, où une puissance laser relativement élevée est nécessaire tout en maintenant une bonne qualité spatiale.

Contraintes et précautions

L'utilisation d'un TA s'accompagne de plusieurs contraintes expérimentales importantes :

- **Sensibilité aux rétro-réflexions :** la puce du TA ne supporte pas les retours optiques parasites, qui peuvent entraîner des instabilités, des dégradations de performance, voire endommager le composant. Un **isolateur optique** est donc placé en sortie pour bloquer tout retour de lumière vers le TA.
- **Sensibilité à l'alignement :** une injection efficace du faisceau dans la zone guidée d'entrée du TA requiert un alignement très précis. Celui-ci est réalisé à l'aide de deux miroirs montés sur des supports à réglage fin, offrant 4 degrés de liberté (translations X-Y, inclinaisons θ_x, θ_y).
- **Émission multi-modes en sortie :** malgré une injection monomode, la sortie du TA présente parfois plusieurs lobes d'intensité dus à la géométrie évasée. Un diaphragme ou une **pinhole** de 50 μm (à ajuster selon le profil observé) est donc utilisé pour filtrer spatialement le mode fondamental TEM₀₀.

Mise en œuvre expérimentale

Le schéma global de l'amplification est présenté sur la figure 7.8 .

- ▷ **Laser seed :** le laser DBR à 770.5 nm est stabilisé en température et en courant à l'aide du contrôleur Thorlabs ITC-510, et injecté dans le TA à l'aide d'une optique de couplage sur table optique.
- ▷ **Boîtier de protection et régulation thermique :** le TA est installé dans un boîtier métallique maison, conçu pour assurer à la fois une protection mécanique et une stabilité thermique. Ce boîtier intègre un module Peltier et une thermistance pour la régulation active de la température, pilotés par un contrôleur thermique (Arrow OEM). L'ensemble est alimenté par une alimentation dédiée (Delta Electronics), garantissant un fonctionnement stable du système de refroidissement. Cette stabilisation thermique est cruciale pour limiter les dérives du TA et préserver la qualité spatiale du faisceau amplifié.
- ▷ **Filtrage spatial :** un diaphragme (pinhole) placé dans le plan de Fourier d'un système en configuration télescopique, positionné en sortie de l'amplificateur TA, permet de sélectionner efficacement le mode spatial fondamental.
- ▷ **Isolateur optique :** un isolateur optique est placé immédiatement après le TA pour éviter tout retour de lumière vers la puce.
- ▷ **Modulation de puissance :** un modulateur acousto-optique (AOM) est inséré juste avant la fibre optique, permettant de couper la lumière à la demande (switch rapide) ou de moduler dynamiquement l'intensité laser. Cela permet un contrôle fin de l'illumination au niveau des atomes.
- ▷ **Mesure de puissance :** une photodiode ou un power meter placé après l'AOM permet de calibrer précisément la puissance en fonction du courant injecté dans le TA, et de corriger les effets d'instabilité si besoin.

Caractérisation et performance

La diode laser et le Tapered Amplifier (TA) sont asservis à une température stable de 25°C. Une courbe de puissance de sortie du TA en fonction du courant injecté a été mesurée (voir figure 7.9), avec la diode laser fonctionnant à 25°C et délivrant une puissance maximale d'environ 31.2 mW, tandis que le TA est testé jusqu'à un courant d'injection de 2.5 A.

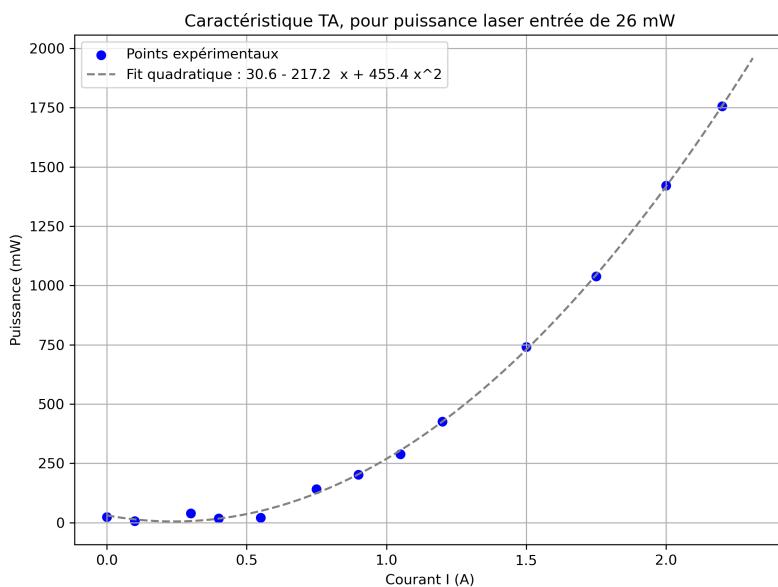


FIGURE 7.9 – Puissance de sortie du Tapered Amplifier (TA) en fonction du courant d'injection, pour une puissance d'entrée provenant de la diode laser fixée à 25 mW.

Afin d'éviter une dégradation prématuée des composants, il a été choisi de ne pas les faire fonctionner à leurs limites maximales. La diode laser est ainsi réglée pour fournir une puissance d'environ 25 mW (courant $I_{\text{diode}} = 150.6 \text{ mA}$) et le TA est exploité avec un courant d'environ 1.5 A. Cette configuration assure un bon compromis entre puissance de sortie et longévité des dispositifs, tout en garantissant une amplification stable et un profil spatial préservé.

Pour un courant d'injection de 1.5 A dans le TA, la puissance mesurée en sortie, après passage dans le modulateur acousto-optique (AOM), atteint environ 62 mW.

L'AOM génère plusieurs ordres de diffraction : le mode zéro (non diffracté), les modes ± 1 , etc. Afin d'optimiser le transfert d'énergie dans un mode diffracté souhaité (par exemple le premier ordre ± 1), le cristal AOM a été ajusté finement en rotation. Ce réglage permet de maximiser la puissance dans ce mode non nul.

Le faisceau correspondant à ce mode diffracté, qui concentre la majorité de la puissance utile, est ensuite injecté dans une fibre monomode à maintien de polarisation.

Ainsi, l'AOM est configuré de manière à transférer efficacement la puissance vers le mode diffracté utile, avec une puissance d'environ 62 mW disponible à l'entrée de la fibre, garantissant une qualité spatiale et une polarisation stables pour l'expérience.

Le système ainsi mis en place permet d'obtenir, de manière stable, une puissance suffisante en sortie pour alimenter la fibre de piégeage, même en tenant compte des pertes optiques du système.

Annexe A

Annexes

Informations complémentaires.

Annexe B

Pourquoi le terme tensoriel disparaît pour $J = \frac{1}{2}$

Le terme tensoriel du potentiel dipolaire s'exprime formellement comme la composante d'ordre 2 d'une combinaison de produits d'opérateurs angulaires $\{J_i J_j\}$. On peut le voir comme un tenseur sphérique de rang $k = 2$, noté $T^{(2)}$. Deux arguments simples montrent que cette contribution est nulle pour un état à $J = \frac{1}{2}$.

Argument par règles de sélection (Wigner–Eckart). Le théorème de Wigner–Eckart et les règles de couplage angulaire imposent des contraintes sur les éléments de matrice réduits d'un tenseur sphérique $T^{(k)}$. En particulier, pour des états $|J, m\rangle$, l'élément de matrice réduit $\langle J|T^{(k)}|J\rangle$ peut être non nul seulement si la condition triangulaire est satisfaite :

$$|J - J| \leq k \leq J + J \implies 0 \leq k \leq 2J.$$

Autrement dit, le rang k du tenseur ne peut dépasser $2J$. Pour $J = \frac{1}{2}$ on a $2J = 1$: les tenseurs de rang $k \geq 2$ (dont $k = 2$) sont donc interdits — leur élément de matrice réduit s'annule. Par conséquent tous les composantes du tenseur d'ordre 2 ont des éléments de matrice nuls entre états de $J = \frac{1}{2}$, et le terme tensoriel ne contribue pas.

Intuition physique. Le terme tensoriel représente une interaction quadrupolaire : il mesure l'anisotropie de la distribution de charge (ou de la densité électronique) de rang 2 (quadrupôle) et la façon dont cette anisotropie couple à la polarisation de la lumière. Un système ayant un moment cinétique minimal $J = \frac{1}{2}$ ne peut porter qu'un dipôle (rang 1) mais pas de quadrupôle indépendant ; il est donc incapable de présenter une réponse tensorielle.

Justification par calcul élémentaire (esquisse). Pour rendre cela plus concret, on peut écrire les produits symétrisés d'opérateurs de spin pour $J = \frac{1}{2}$ en termes des matrices de Pauli σ_i :

$$J_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i, \quad J_i J_j = \frac{\hbar^2}{4} \sigma_i \sigma_j.$$

Or les matrices de Pauli satisfont $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$, si bien que toute combinaison symétrique et sans trace construite à partir de $\sigma_i \sigma_j$ se réduit à une combinaison de l'identité et d'opérateurs de rang 1 (proportionnels à σ_k). Il n'existe donc pas de composante indépendante de rang 2 dans l'algèbre des opérateurs sur l'espace à deux dimensions. En particulier, la combinaison traceless/quadrupolaire

$$3[(\vec{u}^* \cdot \vec{J})(\vec{u} \cdot \vec{J}) + (\vec{u} \cdot \vec{J})(\vec{u}^* \cdot \vec{J})] - 2\vec{J}^2$$

s'annule (ou se réduit à une combinaison triviale proportionnelle à l'identité) lorsqu'elle est restreinte à l'espace $J = \frac{1}{2}$. Ceci confirme algébriquement l'argument angulaire précédent.

Remarque sur la forme normale de la fraction. La formule souvent écrite

$$\frac{3[(\vec{u}^* \cdot \vec{J})(\vec{u} \cdot \vec{J}) + (\vec{u} \cdot \vec{J})(\vec{u}^* \cdot \vec{J})] - 2\vec{J}^2}{2J(2J-1)}$$

est valable pour $J \geq 1$. Pour $J = \frac{1}{2}$ le dénominateur $2J(2J - 1)$ s'annule formellement; ceci indique simplement que l'écriture fractionnaire n'est pas définie là où le terme tensoriel n'a pas de sens physique. Le bon énoncé est : «pour $J < 1$ (en particulier $J = \frac{1}{2}$), la composante tensorielle est identiquement nulle».

Conclusion. Pour les atomes alcalins dans leur état fondamental (configuration $nS_{1/2}$, donc $J = \frac{1}{2}$), la contribution tensorielle du potentiel dipolaire est strictement nulle. On conserve alors uniquement les termes scalaire et, éventuellement, vectoriel (ce dernier ne dépendant que de la polarisation elliptique/circulaire).

Bibliographie

- [1] PhD thesis.
- [2] O. Babelon, D. Bernard, and M. Talon. *Introduction to Classical Integrable Systems*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2003. Online publication date : August 2009.
- [3] I. Bouchoule and J. Dubail. Generalized hydrodynamics in the one-dimensional bose gas : theory and experiments. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2022(1) :014003, jan 2022.
- [4] F. Franchini. *An Introduction to Integrable Techniques for One-Dimensional Quantum Systems*, volume 940. 09 2016.
- [5] M. Gaudin and J. Caux. The bethe wavefunction. *The Bethe Wavefunction*, pages 1–322, 01 2012.
- [6] M. Ishikawa and H. Takayama. Solitons in a one-dimensional bose system with the repulsive delta-function interaction. *Journal of the Physical Society of Japan*, 49 :1242–1246, 1980.
- [7] T. Karpiuk, T. Sowiński, M. Gajda, K. Rzążewski, and M. Brewczyk. Correspondence between dark solitons and the type ii excitations of the lieb-liniger model. *Phys. Rev. A*, 91 :013621, Jan 2015.
- [8] V. Korepin, A. Izergin, and N. Bogoliubov. Quantum inverse scattering method and correlation functions. *Journal of Soviet Mathematics*, 31, 02 1993.
- [9] E. H. Lieb. Exact analysis of an interacting bose gas. ii. the excitation spectrum. *Phys. Rev.*, 130 :1616–1624, May 1963.
- [10] E. H. Lieb and W. Liniger. Exact analysis of an interacting bose gas. i. the general solution and the ground state. *Phys. Rev.*, 130 :1605–1616, May 1963.
- [11] E. P. Wigner. Lower limit for the energy derivative of the scattering phase shift. *Phys. Rev.*, 98 :145–147, Apr 1955.
- [12] B. M. Wouters. *The quench action approach to out-of-equilibrium quantum integrable models*. Phd thesis, Institute for Theoretical Physics Amsterdam (ITFA), October 2015.
- [13] A. B. Zamolodchikov and A. B. Zamolodchikov. Factorized s-matrices in two dimensions as the exact solutions of certain relativistic quantum field theory models. *Annals of Physics*, 120(2) :253–291, 1979.