

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 et Hamiltonien du modèle	2
1.1.2	Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à 2 corps	8
1.2	Équation de Bethe et distribution de rapidité	12
1.2.1	Fonction d'onde dans le secteur ordonné et représentation de Gaudin	12
1.2.2	Conditions aux bords périodiques	12
1.2.3	Thermodynamique du gaz de Lieb-Liniger à l'état fondamental	13
1.2.4	Excitations élémentaires	14
2	Relaxation et Équilibre dans les Systèmes Quantiques Intégrables : Une Approche par la Thermodynamique de Bethe	17
2.1	Notion d'état d'Équilibre de Gibbs Généralisé (GGE)	17
2.1.1	Introduction à l'Équilibre de Gibbs Généralisé	18
2.1.2	Moyenne dans l'Équilibre de Gibbs Généralisé	19
2.1.3	Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales	20
2.2	Thermodynamique de Bethe et relaxation	22
2.2.1	Moyenne dans la limite thermodynamique	22
2.2.2	Statistique des macro-états : entropie de Yang-Yang	23
2.2.3	Équations intégrales de la TBA	25
3	Fluctuation de la distribution de rapidité dans des état d'équilibre	29
3.1	Fluctuation-réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés	30
3.1.1	Cadre général : chages et dérivées fonctionnelles	30
3.1.2	Cadre d'Équilibre de Gibbs Généralisée	33
3.1.3	Vérification numérique : Echantillonnage du GGE	33
3.2	Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilités	35
3.2.1	Susceptibilités spectrales et structure variationnelle de l'entropie	35
3.2.2	Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique	37
3.2.3	Expression de la Hessienne	38
3.2.4	Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne	39
3.2.5	Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle	39
3.3	Lien entre dérivée fonctionnelle et réponse linéaire aux facteurs de Lagrange	40
3.3.1	Réponse linéaire des charges : dérivées fonctionnelles et projections	40
3.3.2	Vérification numérique thermique : énergie et nombre de particules	41
	Conclusion	45
A	Annexes	47

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 et Hamiltonien du modèle	2
1.1.2	Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à 2 corps	8
1.2	Équation de Bethe et distribution de rapidité	12
1.2.1	Fonction d'onde dans le secteur ordonné et représentation de Gaudin	12
1.2.2	Conditions aux bords périodiques	12
1.2.3	Thermodynamique du gaz de Lieb-Liniger à l'état fondamental	13
1.2.4	Excitations élémentaires	14

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 revenons ensuite sur le cas à 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 et Hamiltonien du modèle

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

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

Périodisité. 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. les 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 assuré 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 :**

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

Ces derniers de plus d'être états propres de l'opérateur énergie $\hat{\mathcal{H}}$, sont des états propres de l'opérateur impulsion \hat{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 passer 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'anticommutation (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 $\hat{\Psi}(x)$, 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 :

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

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 :

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

Opérateur.

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 .

Exemples : Énergie cinétique totale. Si l'on sait diagonaliser l'opérateur \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 l'énergie des particules libres ; on rappelle que pour une : $\hat{\mathcal{H}} |k\rangle = \varepsilon(k) |k\rangle$, avec $\varepsilon(k)$ l'énergie du mode k (1.5). Alors en injectant $\hat{f} = \hat{\mathcal{H}} (= \frac{\hat{p}^2}{2m})$ dans (1.22) on obtient l'énergie cinétique totale du système :

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

Et pour N particules, en écrivant l'état sous la forme (1.18), en utilisant les relations de commutation (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 :

$$\hat{F} = \int \int_0^L dx dy \hat{\Psi}^\dagger(x) \langle x | \hat{f} | y \rangle \hat{\Psi}(y). \quad (1.25)$$

Exemples : Énergie cinétique totale. Reprenons l'exemple de l'énergie cinétique totale avec $\hat{f} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$. En injectant $\langle x | \hat{f} | x' \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\partial}_y^2 \delta(y - x)$ 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 $|\{k_a\}\rangle$, 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 de la position z_i 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 la **quantité de mouvement totale**, on choisit $\hat{f} = \hat{p}$ (puissance 1), et pour le **nombre total de particules**, on prend $\hat{f} = \hat{p}^0$, c'est-à-dire l'identité. On note \hat{Q} l'opérateur nombre total de particule et \hat{P} l'opérateur quantité mouvement totale. 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 :

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

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) :

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

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

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 $|\{k_a\}\rangle$:

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

et dans la base $\{|x\rangle\}$: $\hat{F} = \frac{\hbar^q}{2} \int_0^L dx \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\partial}_x^q \hat{\Psi}(x) + (-1)^q \left[\hat{\partial}_x^q \hat{\Psi}^\dagger(x) \right] \hat{\Psi}(x) \right\}$ et en l'appliquant à $|\{k_a\}\rangle$: $\hat{F} |\{k_a\}\rangle = \int_0^L d^N z \hat{\mathcal{F}}_N \varphi_{\{k_a\}}(\{z_a\}) \hat{\Psi}(z_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle$ avec $\hat{\mathcal{F}}_N = \hbar^q \sum_{i=1}^N (\hat{\partial}_{z_i})^q$.

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 particule 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 :

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int \int \int \int_0^L dx_1 dx_2 dx'_1 dx'_2 \langle 1 : x_1, 2 : x_2 | \hat{\Psi}^\dagger(x_1) \hat{\Psi}^\dagger(x_2) \hat{\Psi}(x'_2) \hat{\Psi}(x'_1) \rangle \quad (1.35)$$

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

À partir d'ici, on fixe $\hbar = m = 1$. Ainsi, les dimensions (unités) des nombres d'onde k et des vitesses ne sont plus différenciées. 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 de Fock à N particules $|\{\theta_1, \dots, \theta_N\}\rangle$, où chaque paramètre θ_i est homogène à un nombre d'onde ou à une vitesse (mais pas nécessairement homogène à un nombre d'onde k d'où la notation θ), on obtient — en utilisant les équations (1.26) et (1.38) :

$$\hat{H} |\{\theta_a\}\rangle = \int d^N z \hat{\mathcal{H}}_{N\varphi\{\theta_a\}}(\{z_a\}) \hat{\Psi}(z_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle, \quad (1.40)$$

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

$$\hat{\mathcal{H}}_N = \hat{\mathcal{K}}_N + \hat{\mathcal{V}}_N \quad \text{où on rappelle} \quad \hat{\mathcal{K}}_N = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \partial_{z_i}, \text{ et } \hat{\mathcal{V}}_N = g \sum_{1 \leq i < j \leq N} \hat{\delta}(z_i - z_j). \quad (1.41)$$

Équation du mouvement associée. L'équation du mouvement du champ $\Psi(x)$ est obtenue à partir de l'équation de Heisenberg :

$$i \hat{\partial}_t \hat{\Psi} = [\hat{\Psi}, \hat{H}], \quad (1.42)$$

ce qui, après évaluation explicite du commutateur (1.17), conduit à :

$$i \hat{\partial}_t \hat{\Psi} = -\frac{1}{2} \hat{\partial}_x^2 \hat{\Psi} + g \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi} \quad (1.43)$$

est appelée l'équation de **Schrödinger non linéaire (NS)**.

Pour $g > 0$, l'état fondamental à température nulle est une sphère de Fermi. Seul ce cas sera considéré par la suite.

Conservation et commutation. Les opérateurs nombre totale de particule \hat{Q} et quantité totale de mouvement \hat{Q} commutent avec l'Hamiltonien \hat{H} du modèle de Lieb-Liniger :

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{P}] = 0. \quad (1.44)$$

Ils constituent ainsi des intégrales du mouvement. Cette propriété est une manifestation de la symétrie translationnelle du système (pour \hat{P}) et de la conservation du nombre total de particules (pour \hat{Q}).

Nous verrons au chapitre (2) que cette situation s'étend à une *infinité d'intégrales du mouvement* dans les systèmes intégrables, ce qui permettra de construire l'ensemble de Gibbs généralisé (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{K} :

$$\hat{Q} |\{\theta_a\}\rangle = N |\{\theta_a\}\rangle, \quad \hat{P} |\{\theta_a\}\rangle = \left(\sum_{a=1}^N \theta_a \right) |\{\theta_a\}\rangle, \quad \hat{K} |\{\theta_a\}\rangle = \left(\frac{1}{2} \sum_{a=1}^N \theta_a^2 \right) |\{\theta_a\}\rangle. \quad (1.45)$$

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 $\hat{\mathcal{H}}_N$ (1.41) dans le modèle de Lieb-Liniger (système avec interactions ponctuelles). Les états $\varphi_{\{\theta_a\}}$ sont des états propres du nombre total de particules $\hat{\mathcal{N}}_N$ (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 $\hat{\mathcal{N}}_1$, $\hat{\mathcal{P}}_1$ 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 :

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = \hat{\mathcal{K}}_2 + \hat{\mathcal{V}}_2, \quad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{K}}_2 = -\frac{1}{2} \partial_{z_1}^2 - \frac{1}{2} \partial_{z_2}^2, \quad \text{et} \quad \hat{\mathcal{V}}_2 = g \delta(z_1 - z_2). \quad (1.46)$$

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 :

$$\varepsilon(\theta_1) + \varepsilon(\theta_2) = \frac{\theta_1^2}{2} + \frac{\theta_2^2}{2}. \quad (1.47)$$

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 (1.46) se décompose alors en la somme de deux Hamiltoniens agissant respectivement sur Z et Y :

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = -\frac{1}{4}\partial_Z^2 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{rel}}, \quad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{H}}_{\text{rel}} = -\partial_Y^2 + g\delta(Y). \quad (1.48)$$

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 $\bar{m} = 2$. Ses états propres sont des ondes planes associées à une énergie $\bar{\theta}^2$, avec : $\bar{\theta} = \frac{\theta_1+\theta_2}{2}$, 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 :

$$-\partial_Y^2 \tilde{\varphi}(Y) + g\delta(Y) \tilde{\varphi}(Y) = \tilde{\varepsilon} \tilde{\varphi}(Y), \quad (1.49)$$

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 particule 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 :

$$\tilde{\varphi}(Y) = a e^{i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} + b e^{-i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} \propto \sin\left(\frac{1}{2}(\tilde{\theta}|Y| + \Phi)\right). \quad (1.50)$$

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

$$\Phi(\tilde{\theta}) = 2 \arctan\left(\frac{1}{i} \frac{a+b}{a-b}\right), \quad (1.51)$$

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 (1.50) dans l'équation relative (1.49), 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

$$\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}) = \frac{\tilde{\theta}^2}{4}. \quad (1.52)$$

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 : $\bar{\theta}^2 + \tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}) = \varepsilon(\theta_1) + \varepsilon(\theta_2)$, où $\bar{\theta} = \frac{\theta_1+\theta_2}{2}$.

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 :

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

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 :

$$\Phi(\tilde{\theta}) = 2 \arctan(\tilde{\theta}/g) \in [-\pi, +\pi]. \quad (1.53)$$

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 (1.51) et (1.53) avec l'identité analytique valable pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \{\pm i\}$, $2 \arctan(z) = i \ln\left(\frac{1-iz}{1+iz}\right)$ 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 (1.50) 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 :

$$S(\theta) \doteq e^{i\Phi(\theta)} \quad (1.54)$$

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

$$S(\tilde{\theta}) = \frac{1 + i\tilde{\theta}/g}{1 - i\tilde{\theta}/g}. \quad (1.55)$$

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), à la suite d'Eisenbud (1948), 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 $\tilde{\theta}/2 + \delta\tilde{\theta}$:

$$\tilde{\varphi}_{\text{inc}}(Y) \propto e^{i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} + e^{i\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|}. \quad (1.56)$$

Cette superposition évolue dans le temps comme :

$$\tilde{\varphi}_{\text{inc}}(Y, t) \propto e^{i(\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y| - t\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}))} + e^{i(\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y| - t\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta}))}. \quad (1.57)$$

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 (1.50) et (1.55), l'état sortant de la diffusion correspondant serait :

$$\tilde{\varphi}_{\text{outc}}(Y, t) \propto -e^{i\Phi(\tilde{\theta})}e^{-i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} - e^{i\Phi(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})}e^{-i\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|}. \quad (1.58)$$

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 .

$$|Y| \simeq \tilde{\theta}t - 2\Delta(\tilde{\theta}) \quad (1.59)$$

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

$$\Delta(\theta) \doteq \frac{d\Phi}{d\theta}(\theta) = \frac{2g}{g^2 + \theta^2}. \quad (1.60)$$

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 $Z = \frac{z_1 + z_2}{2} = \tilde{\theta}t$. Ainsi, la position semi-classique des deux particules après la collision s'écrit

$$z_1 = Z + \frac{Y}{2} \simeq \theta_1 t - \Delta(\theta_1 - \theta_2), \quad z_2 = Z - \frac{Y}{2} \simeq \theta_2 t + \Delta(\theta_1 - \theta_2), \quad (1.61)$$

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 (1.50)) 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 :

$$\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2) \propto \begin{cases} (\theta_2 - \theta_1 - ig)e^{iz_1\theta_1 + iz_2\theta_2} - (\theta_1 - \theta_2 - ig)e^{iz_1\theta_2 + iz_2\theta_1} & \text{si } z_1 < z_2 \\ (z_1 \leftrightarrow z_2) & \text{si } z_1 > z_2 \end{cases} \quad (1.62)$$

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. Le rapport de leurs amplitudes définit la **phase de diffusion** Φ et **matrice diffusion** S à deux corps (1.55), reste inchangé mais voici une autre écriture :

$$S(\theta_1 - \theta_2) = \frac{\theta_1 - \theta_2 - ig}{\theta_2 - \theta_1 - ig}. \quad (1.63)$$

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 (1.62)) : $\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2 = L) = \varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2 = 0)$, 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 (1.63) 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

$$e^{i\theta_1 L} e^{i\Phi(\theta_1 - \theta_2)} = -1, \quad e^{i\theta_2 L} e^{i\Phi(\theta_2 - \theta_1)} = -1. \quad (1.64)$$

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

$$\theta_1 L + \Phi(\theta_1 - \theta_2) = 2\pi I_1, \quad \theta_2 L + \Phi(\theta_2 - \theta_1) = 2\pi I_2, \quad (1.65)$$

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 (1.64) et (1.65). 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 (1.65), 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 [1, 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 (1.62)]. Dans le domaine $z_1 < z_2 < \dots < z_N$, la fonction d'onde pour un état de Bethe à N particules s'écrit (Gaudin 2014, Korepin et al. 1997, Lieb et Liniger 1963) :

$$\begin{aligned} \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \emptyset | \hat{\Psi}(z_1) \cdots \hat{\Psi}(z_N) | \{\theta_a\} \rangle \\ &\propto \sum_{\sigma} (-1)^{|\sigma|} \left(\prod_{1 \leq a < b \leq N} (\theta_{\sigma(b)} - \theta_{\sigma(a)} - ig) \right) e^{i \sum_{j=1}^N z_j \theta_{\sigma(j)}}, \end{aligned} \quad (1.66)$$

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 :

$$\varphi_{\{\theta_a\}}(x_1, \dots, x_{N-1}, L) = \varphi_{\{\theta_a\}}(0, x_1, \dots, x_{N-1}). \quad (1.67)$$

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 (1.66), on généralise l'équation (1.64) pour N particules. On obtient que chaque moment θ_a doit satisfaire l'équation :

$$e^{i\theta_a L} \prod_{b \neq a} S(\theta_a - \theta_b) = (-1)^{N-1}, \quad a = 1, \dots, N, \quad (1.68)$$

où la matrice diffusion $S(\theta)$ définie en (1.54), (1.55) et (1.63) 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 (1.68), on généralise l'équation (1.65). On obtient sa forme *logarithmique* :

$$L\theta_a + \sum_{b=1}^N \Phi(\theta_a - \theta_b) = 2\pi I_a, \quad a = 1, \dots, N, \quad (1.69)$$

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 (1.69) 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 :

$$I_a = a - \frac{N+1}{2}, \quad \text{pour } a \in \llbracket 1, N \rrbracket. \quad (1.70)$$

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 (1.69) 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 (1.69).

Dans la limite thermodynamique ($\lim_{\text{therm}} \equiv \lim_{\substack{L \rightarrow \infty \\ N \rightarrow \infty}}$), les valeurs de θ_a deviennent quasi-continues, avec un espacement $\theta_{a+1} - \theta_a = \mathcal{O}(1/L)$, 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

$$\rho_s(\theta_a) \doteq \frac{1}{L} \lim_{\text{therm}} \frac{|I_{a+1} - I_a|}{|\theta_{a+1} - \theta_a|}, \quad (1.71)$$

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

$$2\pi\rho_s(\theta_a) = \frac{2\pi}{L} \frac{\partial I}{\partial \theta}(\theta_a). \quad (1.72)$$

L'application des équations de Bethe sous forme logarithmique (1.69) conduit alors à

$$2\pi\rho_s(\theta_a) = 1 + \frac{1}{L} \sum_{b=1}^N \Delta(\theta_a - \theta_b), \quad (1.73)$$

ce qui relie ρ_s à le déplacement de diffusion Δ définie dans l'équation (1.60).

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

$$L\rho(\theta)\delta\theta \doteq \text{nombre de quasi-particules ayant une rapidité dans } [\theta, \theta + \delta\theta]. \quad (1.74)$$

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

$$\delta N(\theta) = L\rho(\theta)\delta\theta \quad (1.75)$$

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 (1.75) se réécrit comme :

$$\rho(\theta_a) = \lim_{\text{therm}} \frac{1}{L} \cdot \frac{1}{\theta_{a+1} - \theta_a} > 0. \quad (1.76)$$

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

$$\rho(\theta) = \frac{1}{L} \sum_{a=1}^N \delta(\theta - \theta_a). \quad (1.77)$$

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

$$\rho(\theta) = \rho_s(\theta). \quad (1.78)$$

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 :

$$\frac{1}{L} \sum_{b=1}^N \Delta(\theta_a - \theta_b) \xrightarrow{\text{therm}} \int_{-\theta_{\max}}^{+\theta_{\max}} \Delta(\theta_a - \theta) \rho(\theta) d\theta. \quad (1.79)$$

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

$$2\pi\rho_s(\theta) = 1 + \int_{-\theta_{\max}}^{+\theta_{\max}} \Delta(\theta - \theta') \rho(\theta') d\theta', \quad (1.80)$$

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

$$\rho(\theta) - \int_{-\theta_{\max}}^{+\theta_{\max}} \frac{\Delta(\theta - \theta')}{2\pi} \rho(\theta') d\theta' = \frac{1}{2\pi}. \quad (1.81)$$

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 [3]. 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 prédite 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 un 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 [?].

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 (1.78) et (1.81) ne sont plus valides (en particulier $\rho \neq \rho_s$). Les équations discrètes de Bethe (1.80) se condensent alors en une équation intégrale pour les densités de rapidité :

$$2\pi\rho_s = 1 + \Delta \star \rho, \quad (1.82)$$

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 :

$$f_{[\nu]}^{\text{dr}} = f + \frac{\Delta}{2\pi} \star (\nu f^{\text{dr}}) \quad (1.83)$$

où pour notre système

$$\nu = \frac{\rho}{\rho_s} \quad (1.84)$$

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 (1.83), on obtient : $1_{[\nu]}^{\text{dr}} = 1 + \frac{\Delta}{2\pi} \star (\nu 1_{[\nu]}^{\text{dr}})$ soit directement :

$$2\pi\rho_s = 1_{[\nu]}^{\text{dr}}, \quad (1.85)$$

ce qui n'est autre que la relation constitutive (1.82).

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)	17
2.1.1	Introduction à l'Équilibre de Gibbs Généralisé	18
2.1.2	Moyenne dans l'Équilibre de Gibbs Généralisé	19
2.1.3	Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales	20
2.2	Thermodynamique de Bethe et relaxation	22
2.2.1	Moyenne dans la limite thermodynamique	22
2.2.2	Statistique des macro-états : entropie de Yang-Yang	23
2.2.3	Équations intégrales de la TBA	25

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 contraignent 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 (1.45). Ces observables sont diagonales dans la base des états propres :

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

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.

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 $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}$, on définit la matrice densité locale :

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

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

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

assure la normalisation. L'état **GGE** ainsi défini est le seul permettant de prédire de manière cohérente les observables locales de \mathcal{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 paradigmatique d'un système intégrable [?]. Ses états propres sont caractérisés par un ensemble de N rapidités $\{\theta_a\}$, qui jouent le rôle de quasimomenta (**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 $\hat{\mathcal{O}}$ dans un état décrit par une matrice densité (ici noté) $\hat{\rho}$ par :

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

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

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

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 (3). 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 $\frac{1}{f} \partial_x^2 f - (\frac{1}{f} \partial_x f)^2 = \partial_x^2 \ln f$:

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

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

Cas particulier de l'équilibre thermique. Dans le cas particulier de l'équilibre thermique standard (*i.e.* Gibb-sien), 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 :

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

où $\hat{\rho}(\theta)$ agit sur une état de Bethe comme

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

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

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

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

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

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

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

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 $\hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[w]$:

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

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

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

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

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

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 $\hat{\mathcal{O}}$ diagonal dans la base de Bethe, la moyenne généralisée vaut

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

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 $\hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[w]$, défini par un *poids spectral* $w(\theta)$ (cf. équations (2.22)). Cette construction conduit naturellement à la matrice densité généralisée $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)} \propto e^{-\hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[w]}$ (cf. équations (2.26)), et à la moyenne d'un opérateur local $\hat{\mathcal{O}}$ donnée par $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \text{Tr}(\hat{\mathcal{O}} \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[w])$ (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 \mathcal{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 :

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

où $\lim_{\text{therm.}}$ est la limite thermodynamique ($N, L \rightarrow \infty$ avec $N/L \rightarrow \text{const}$) et où $\langle \mathcal{O} \rangle_{[\rho]}$ désigne la valeur d'attente de \mathcal{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 :

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

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 $\Omega[\rho]$, reppelons-nous de la transformation des équations de Bethe dans dans la limite thermodynamique, hors état fondamentale (1.84) et (1.85).

$$\nu = \frac{\rho}{\rho_s}, \quad 2\pi\rho_s = 1_{[\nu]}^{\text{dr}} \quad (2.32)$$

où $f_{[\nu]}^{\text{dr}}$ est définie en (1.83).

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.-à-d. 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 :

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

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 $(\{\theta_a\}_{a \in [1, N]})_{N \in \mathbb{N}^*}$ 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 operateurs locaux (2.31), apparaît le facteur $\Omega[\rho]$, qui compte ces états propres. La détermination de $\Omega[\rho]$ (ou équivalamment de l'entropie de Yang–Yang $\mathcal{S}_{YY}[\rho]$ car $\Omega[\rho] = e^{L\mathcal{S}_{YY}[\rho]}$ 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 $\rho_{\text{eq}}(\theta)$ observée à l'équilibre.

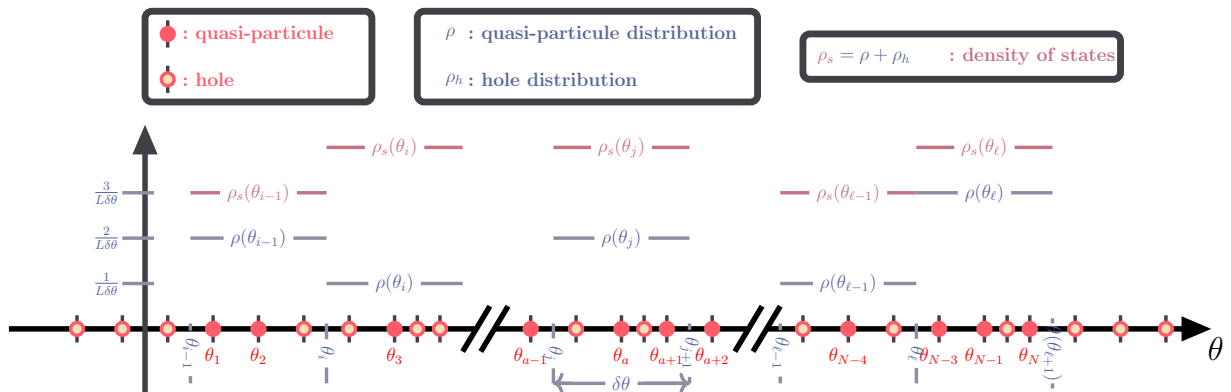
Dénombrement local des configurations microcanoniques. Pour répondre à cette question, on subdivise l'axe des rapidités en petites tranches ou cellules de largeur $\delta\theta$, chacune centrée en un point θ_a . Dans une tranche $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta]$, on suppose que la densité $\rho(\theta)$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

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

$$\approx L\mathcal{S}_{YY}[\rho], \quad (2.40)$$

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

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

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** \mathcal{W} se se définit par :

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

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

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

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 :

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

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

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* $e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}$. Finalement, la moyenne d'une observable dans le GGE (2.43) s'écrit comme une intégrale fonctionnelle/de chemin :

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

Interprétation thermodynamique.

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

Leur différence

$$(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho]$$

joue donc le rôle d'une *fonction thermodynamique effective* (analogue à une entropie libre). L'exposant $e^{L(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho]}$ 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 $e^{L(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho]}$ 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*, $\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}$ 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 :

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

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 $\nu_{eq} = \rho_{eq}/\rho_{s\epsilon q}$ 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 discrétisation).

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 (1.85), rappelée ici pour mémoire : $2\pi\rho_{s,eq} = 1_{[\nu_{eq}]}^{dr}$.

L'opérateur de dressing (1.83) étant linéaire, il se résout numériquement sous la forme :

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

où $\text{id}: f \mapsto f$ est l'identité fonctionnelle, et \star désigne la multiplication. Après discrétisation 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 $\rho_{eq} = \nu_{eq} \star \rho_{s,eq}$.

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

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

Contents

3.1	Fluctuation-réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés	30
3.1.1	Cadre général : chages et dérivées fonctionnelles	30
3.1.2	Cadre d'Équilibre de Gibbs Généralisée	33
3.1.3	Vérification numérique : Echantillonnage du GGE	33
3.2	Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilités	35
3.2.1	Susceptibilités spectrales et structure variationnelle de l'entropie	35
3.2.2	Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique	37
3.2.3	Expression de la Hessienne	38
3.2.4	Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne	39
3.2.5	Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle	39
3.3	Lien entre dérivée fonctionnelle et réponse linéaire aux facteurs de Lagrange	40
3.3.1	Réponse linéaire des charges : dérivées fonctionnelles et projections	40
3.3.2	Vérification numérique thermique : énergie et nombre de particules	41

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 : $\rho = \rho_{eq} + \delta\rho$. Cela nécessite de pousser le développement fonctionnel de la *fonction thermodynamique effective* $(S_{YY} - W)[\rho]$ 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 [4]. 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 [5, 6].

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 prédites 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 [7], 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. [4], 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 [5], ou de Caux et Konik [6], 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 [4].

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 $\delta\rho$.

3.1 Fluctuation–réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés

Soient ω , f et g des fonctions.

La dérivée fonctionnelle de $\langle Q_{[f]} \rangle_\omega$ par rapport à la fonction ω , dans la direction g , s'écrit

$$\frac{\delta \langle Q_{[f]} \rangle_\omega}{\delta \omega} [g]$$

et est définie par

$$\frac{\delta \langle Q_{[f]} \rangle_\omega}{\delta \omega} [g] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\langle Q_{[f]} \rangle_{\omega + \epsilon g} - \langle Q_{[f]} \rangle_\omega}{\epsilon}.$$

Par conséquent, il faut remplacer dans ton texte les expressions

$$\frac{\delta \langle Q_{[f_1]} \rangle_\omega}{\delta f_2}$$

par

$$\frac{\delta \langle Q_{[f_1]} \rangle_\omega}{\delta \omega} [f_2],$$

et les expressions

$$\frac{\delta Z}{\delta f_2}$$

par

$$\frac{\delta Z}{\delta \omega} [f_2].$$

De plus, la section 1.1.2 n'est qu'une application du formalisme précédent dans le cas particulier où $f_1(\lambda) = \delta(\lambda - \theta)$ et $f_2(\lambda) = \delta(\lambda - \theta')$.

Dans ce cas, on utilise la notation abrégée

$$\frac{\delta \langle Q_{[f]} \rangle_\omega}{\delta \omega(\theta)}$$

pour désigner

$$\frac{\delta \langle Q_{[f]} \rangle_\omega}{\delta \omega} [\delta(\cdot - \theta)].$$

3.1.1 Cadre général : chages 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 $\hat{\mathcal{Q}}[f]$, 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 :

$$\hat{\mathcal{Q}}[f] = L \int d\theta f(\theta) \hat{\rho}(\theta), \quad \text{où } \hat{\rho}(\theta) \text{ agit comme } \hat{\rho}(\theta) |\{\theta_a\}\rangle = \frac{1}{L} \sum \delta(\theta - \theta_a) |\{\theta_a\}\rangle \quad (3.1)$$

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 :

$$\hat{\rho}^{(S)}[w] \doteq \frac{1}{Z^{(S)}[w]} e^{-\hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[w]}, \quad \text{avec } Z^{(S)}[w] \doteq \text{Tr} \left(e^{-\hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[w]} \right), \quad (3.2)$$

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

$$\mathcal{D}_{[f]} F[g] \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[g + \epsilon f] - F[g]}{\epsilon}. \quad (3.3)$$

À partir de la définition précédente (3.3), il est clair que $\mathcal{D}_{[f]} F[g]$ est, en ce qui concerne sa dépendance en f , un fonctionnel linéaire :

$$\mathcal{D}_{[c_1 f_1 + c_2 f_2]} F[g] = c_1 \mathcal{D}_{[f_1]} F[g] + c_2 \mathcal{D}_{[f_2]} F[g], \quad (3.4)$$

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 $\hat{\mathcal{Q}}[g]$ implique que sa différentielle fonctionnelle dans la direction f :

$$\mathcal{D}_{[f]} \hat{\mathcal{Q}}[g] = \hat{\mathcal{Q}}[f]. \quad (3.5)$$

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 :

$$\langle \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_1] \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_2] \cdots \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_q] \rangle_w = (-1)^q \frac{1}{Z^{(S)}[w]} \mathcal{D}_{[f_1]} \mathcal{D}_{[f_2]} \cdots \mathcal{D}_{[f_q]} Z^{(S)}[w], \quad (3.6)$$

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

$$\langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \hat{\rho}^{(S)}(\theta_2) \cdots \hat{\rho}^{(S)}(\theta_q) \rangle_w = (-1)^q \frac{1}{L^q} \frac{1}{Z^{(S)}[w]} \frac{\delta}{\delta w(\theta_1)} \frac{\delta}{\delta w(\theta_2)} \cdots \frac{\delta}{\delta w(\theta_q)} Z^{(S)}[w], \quad (3.7)$$

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

$$\delta \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f] \doteq \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f] - \langle \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f] \rangle_w, \quad \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta) \doteq \hat{\rho}^{(S)}(\theta) - \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta) \rangle_w. \quad (3.8)$$

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

$$\langle \delta \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_1] \delta \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_2] \cdots \delta \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_q] \rangle_w = (-1)^q \mathcal{D}_{[f_1]} \mathcal{D}_{[f_2]} \cdots \mathcal{D}_{[f_q]} \ln(Z^{(S)}[w]), \quad (3.9)$$

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

$$\langle \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_2) \cdots \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_q) \rangle_w = (-1)^q \frac{1}{L^q} \frac{\delta}{\delta w(\theta_1)} \frac{\delta}{\delta w(\theta_2)} \cdots \frac{\delta}{\delta w(\theta_q)} \ln(Z^{(S)}[w]). \quad (3.10)$$

Moyennes et corrélations d'ordre faible. À l'ordre 1, les **moments non centrés** sont simplement les **valeurs moyennes**. Les moyennes des charges (3.6) et des distributions de rapidité (3.7) peuvent être exprimées comme dérivées fonctionnelles respectivement ponctuelles du logarithme de la fonction de partition :

$$\langle \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_1] \rangle_w = -\mathcal{D}_{[f_1]} \ln(Z^{(S)}[w]), \quad \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \rangle_w = -\frac{1}{L} \frac{\delta \ln(Z^{(S)}[w])}{\delta w(\theta_1)}. \quad (3.11)$$

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 (3.11), que les fluctuations des charges (3.9) et des distributions de rapidité (3.10) peuvent être obtenues comme dérivées fonctionnelles respectivement ponctuelles des moyennes :

$$\langle \delta \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_1] \delta \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_2] \rangle_w = -\mathcal{D}_{[f_2]} \langle \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_1] \rangle_w, \quad \langle \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_2) \rangle_w = -\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \rangle_w}{\delta w(\theta_2)} \quad (3.12)$$

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*.

Notation susceptibilité et fluctuations. Considérons deux fonctions f_1 et f_2 . On introduit la fonction de réponse croisée $\chi_w[f_1, f_2]$ définie par

$$\chi_w[f_1, f_2] \doteq -\mathcal{D}_{[f_2]} \langle \hat{\mathcal{Q}}[f_1] \rangle_w. \quad (3.13)$$

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

$$\chi_w[f_1, f_2] = C_w[f_1, f_2], \quad (3.14)$$

où $C_w(f_1, f_2)$, défini par

$$C_w[f_1, f_2] \doteq \langle \hat{\mathcal{Q}}[f_1] \hat{\mathcal{Q}}[f_2] \rangle_w - \langle \hat{\mathcal{Q}}[f_1] \rangle_w \langle \hat{\mathcal{Q}}[f_2] \rangle_w, \quad (3.15)$$

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 (3.1), on remarque que

$$\hat{\mathcal{Q}}[\delta(\cdot - \theta)/L] = \hat{\rho}(\theta). \quad (3.16)$$

Les moments non centrés des charges (3.6) ainsi que leurs cumulants (3.9) deviennent alors ceux des distributions de rapidités (respectivement (3.7) et (3.10)), en prenant les fonctions $f_i(\theta) = \delta(\cdot - \theta_i)/L$.

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

$$\mathcal{D}_{[\delta(\cdot - \theta)]} F[g] \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[g + \epsilon \delta(\cdot - \theta)] - F[g]}{\epsilon}, \quad (3.17)$$

$$= \frac{\partial F}{\partial g(\theta)}. \quad (3.18)$$

L'équation (3.13) s'écrit dans ce cas, en utilisant la notation de l'équation (3.17) et la propriété (3.4) :

$$\chi_w(\theta, \theta') \doteq -\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\delta w(\theta')} \quad (3.19)$$

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 (3.15), quant à elle, s'écrit :

$$C_w(\theta, \theta') \doteq \langle \hat{\rho}(\theta) \hat{\rho}(\theta') \rangle_w - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w \langle \hat{\rho}(\theta') \rangle_w \quad (3.20)$$

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 (3.14), qui relie la susceptibilité aux fluctuations, s'écrit alors :

$$-\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\delta w(\theta')} = \langle \hat{\rho}(\theta) \hat{\rho}(\theta') \rangle_w - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w \langle \hat{\rho}(\theta') \rangle_w \quad (3.21)$$

3.1.2 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

$$w(\theta) = \sum_i \beta_i f_i(\theta), \quad (3.22)$$

où les fonction régulières f_i sont des densités spectrale associées au charges \hat{Q}_i , de sorte que les charges soient bien $\hat{Q}_i^{(S)} = \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_i]$, 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 :

$$\mathcal{D}_{[f_i]} F[w] \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F\left[\sum_j (\beta_j + \delta_{ij}\epsilon) f_j\right] - F\left[\sum_j \beta_j f_j\right]}{\epsilon}, \quad (3.23)$$

$$= \left. \frac{\partial F}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_j \neq i}. \quad (3.24)$$

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* (3.6) nous l'obtenons l'expression (2.12). du chapitre (2)

Avec la condition (3.22) et la définition (3.23), nous pouvons donc réécrire les moments non centrés (des charges) (3.6) et les cumulants (des charges) (3.9), et donc les moyennes (3.11) et corrélations (3.12), 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

$$\begin{aligned} - \left. \frac{\partial}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_j \neq i} &= - \int d\theta \left. \frac{\partial w(\theta)}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_j \neq i} \frac{\delta}{\delta w(\theta)}, \\ &= L \int d\theta f_i(\theta) \left(- \frac{1}{L} \frac{\delta}{\delta w(\theta)} \right). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Nous pouvons donc, encore une fois, en utilisant (3.25), réécrire les moments non centrés des charges (3.6) en fonction des moments non centrés des distributions de rapidités (3.7) :

$$\langle \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_1] \cdots \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_q] \rangle_w = L^q \int d\theta_1 f_1(\theta_1) \cdots \int d\theta_q f_q(\theta_q) \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \cdots \hat{\rho}^{(S)}(\theta_q) \rangle_w, \quad (3.26)$$

De même, nous pouvons réécrire les cumulants des charges (3.9) à partir des cumulants des distributions de rapidités (3.10) :

$$\langle \delta \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_1] \cdots \delta \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_q] \rangle_w = L^q \int d\theta_1 f_1(\theta_1) \cdots \int d\theta_q f_q(\theta_q) \langle \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \cdots \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_q) \rangle_w. \quad (3.27)$$

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

$$\langle \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f] \rangle_w = L \int d\theta f(\theta) \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta) \rangle_w, \quad (3.28)$$

$$\langle \delta \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_1] \delta \hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[f_2] \rangle_w = L^2 \iint d\theta_1 d\theta_2 f_1(\theta_1) \langle \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \delta \hat{\rho}^{(S)}(\theta_2) \rangle_w f_2(\theta_2). \quad (3.29)$$

3.1.3 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* définie ci dessus dans l'équation (3.12). 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 deuxièmement temps en utilisant la susceptibilité.

Méthode numérique de Monte Carlo :

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

$$w(\theta) = \frac{1}{2}\theta^2, \quad (3.30)$$

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 (1.69) que l'on rappelle :

$$L\theta_j + \sum_{k \neq j} 2 \arctan\left(\frac{\theta_j - \theta_k}{g}\right) = 2\pi I_j, \quad (3.31)$$

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 (1.70) que l'on rappelle ,

$$I_j = j - \frac{N+1}{2}, \quad j \in \llbracket 1, N \rrbracket \quad (3.32)$$

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 :

$$\rho(\theta) = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \delta(\theta - \theta_j) \quad (3.33)$$

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 $\min\left(1, e^{-(\sum_j w(\theta_j) - \sum_j w(\theta'_j))}\right)$, 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 discrétisant 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 :

$$w(\theta) \rightarrow w(\theta) + \varepsilon \delta_{\theta'}(\theta), \quad (3.34)$$

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 :

$$-\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\delta w(\theta')} \approx -\frac{1}{L} \cdot \frac{\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_{w+\varepsilon\delta_{\theta'}} - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\varepsilon}. \quad (3.35)$$

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 3.1 – 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.

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

3.2 Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilités

3.2.1 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 :

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_w = \frac{\int \mathcal{D}\rho \, e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]}}{\int \mathcal{D}\rho \, e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}. \quad (3.36)$$

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

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

$$\rho_{\text{eq}} = \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w \quad (3.37)$$

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, $\mathcal{S}_{YY}[\rho]$, 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 (3.38) peut s'écrire sous la forme variationnelle :

$$\left. \frac{\delta \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta)} \right|_{\rho=\rho_{eq}} = w(\theta). \quad (3.38)$$

Dérivée fonctionnelle. On peut considérer cette équation comme une relation implicite définissant w comme une fonctionnelle de ρ . La dérivée fonctionnelle de cette relation donne :

$$\left. \frac{\delta w(\theta)}{\delta \rho(\theta')} \right|_{\rho=\rho_{eq}} = \left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \right|_{\rho=\rho_{eq}}, \quad (3.39)$$

où $\left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \right|_{\rho=\rho_{eq}}$ est l'opérateur négatif de courbure fonctionnelle de l'entropie.

Inversion. On en déduit que la réponse de ρ à une variation du potentiel conjugué w est donnée par l'inverse fonctionnel :

$$\chi_w(\theta, \theta') = \left(L \left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \right|_{\rho=\rho_{eq}} \right)^{-1}. \quad (3.40)$$

3.2.2 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 :

$$(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho] \approx (\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{eq}] + \underbrace{\int d\theta \left. \frac{\delta(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho]}{\delta \rho(\theta)} \right|_{\rho=\rho_{eq}} \delta\rho(\theta)}_{= 0 \text{ par stationnarité}} - \frac{1}{2} \int d\theta d\theta' \delta\rho(\theta) \mathcal{H}(\theta, \theta') \delta\rho(\theta') + \mathcal{O}(\delta\rho^3) \quad (3.41)$$

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

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

$$\begin{aligned} \langle \delta\rho(\theta) \delta\rho(\theta') \rangle_w &= \frac{\int \mathcal{D}\delta\rho \delta\rho(\theta) \delta\rho(\theta') \exp \left[-\frac{L}{2} \iint d\theta_1 d\theta_2 \delta\rho(\theta_1) \mathcal{H}(\theta_1, \theta_2) \delta\rho(\theta_2) \right]}{\int \mathcal{D}\delta\rho \exp \left[-\frac{L}{2} \iint d\theta_1 d\theta_2 \delta\rho(\theta_1) \mathcal{H}(\theta_1, \theta_2) \delta\rho(\theta_2) \right]}, \\ &= \frac{1}{L} \mathcal{H}^{-1}(\theta, \theta'), \end{aligned} \quad (3.42)$$

$C_w(\theta, \theta')$ coïncide avec l'inverse du hessien.

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 :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(\mathcal{W})} - \mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{\text{YY}})}, \quad (3.43)$$

où

$$\mathcal{H}^{(\mathcal{W})}(\theta, \theta') \doteq \left. \frac{\delta^2 \mathcal{W}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \right)_{\rho=\rho_{\text{eq}}}, \quad \text{et} \quad \mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{\text{YY}})}(\theta, \theta') \doteq \left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}_{\text{YY}}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \right)_{\rho=\rho_{\text{eq}}}. \quad (3.44)$$

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

$$(\mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{H})(\theta, \theta') = (\mathcal{H} \cdot \mathcal{H}^{-1})(\theta, \theta') = \int d\theta'' \mathcal{H}(\theta, \theta'') \mathcal{H}^{-1}(\theta'', \theta') = \delta(\theta - \theta'), \quad (3.45)$$

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 :

$$\mathcal{S}_{\text{YY}}[\rho] = \int d\theta [\rho_s(\theta) \ln \rho_s(\theta) - \rho(\theta) \ln \rho(\theta) - (\rho_s(\theta) - \rho(\theta)) \ln(\rho_s(\theta) - \rho(\theta))], \quad (3.46)$$

où $\rho_s(\theta)$ désigne la *densité d'états* liée à ρ par les équations de Bethe (1.82) :

$$2\pi\rho_s = 1 + \Delta \star \rho. \quad (3.47)$$

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 3.2

3.2.3 Expression de la Hessienne

La Hessienne $\mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{\text{YY}})}$ se décompose alors

$$\mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{\text{YY}})}(\theta, \theta') = \mathcal{D}(\theta, \theta') + \mathcal{V}(\theta, \theta') \quad (3.48)$$

avec une partie diagonale irrégulière reflétant une structure de type Fermi–Dirac, même dans un système bosonique, conséquence de l'exclusion statistique induite par l'intégrabilité,

$$\mathcal{D}(\theta, \theta') = \left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta) \nu_{eq}(\theta) (1 - \nu_{eq}(\theta))} \right) \delta(\theta, \theta') \quad (3.49)$$

avec une partie symétrique régulière

$$\mathcal{V}(\theta, \theta') = - \left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta)(1 - \nu_{eq}(\theta))} + \frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta')(1 - \nu_{eq}(\theta'))} \right) \frac{\Delta(\theta - \theta')}{2\pi} \quad (3.50)$$

$$+ \int d\theta'' \frac{\nu_{eq}(\theta'')}{\rho_{s,eq}(\theta'')(1 - \nu_{eq}(\theta''))} \frac{\Delta(\theta - \theta'')}{2\pi} \frac{\Delta(\theta'' - \theta')}{2\pi} \quad (3.51)$$

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

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

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

$$\mathcal{H}^{-1}(\theta, \theta') = \mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta') + \mathcal{B}(\theta, \theta') \quad (3.52)$$

avec une partie diagonale irrégulière

$$\mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta') = (\rho_{s,eq}(\theta)\nu_{eq}(\theta)(1 - \nu_{eq}(\theta)))\delta(\theta, \theta') \quad (3.53)$$

tel que

$$(\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{D})(\theta, \theta') = (\mathcal{D} \cdot \mathcal{D}^{-1})(\theta, \theta') = \int d\theta'' \mathcal{D}(\theta, \theta'') \mathcal{D}^{-1}(\theta'', \theta') = \delta(\theta - \theta'), \quad (3.54)$$

avec une partie symétrique régulière \mathcal{B} .

Les equations (3.48) , (3.52) , (3.45) et (3.54) , il vient que cette série d'implication

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H} \cdot \mathcal{H}^{-1} = \delta \\ \mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{H} = \delta \end{array} \right\} \text{ implique } \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H} \cdot \mathcal{B} = -\mathcal{V} \cdot \mathcal{D}^{-1} \\ \mathcal{B} \cdot \mathcal{H} = -\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{V} \end{array} \right\} \text{ implique } \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{B} = -\mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{V} \cdot \mathcal{D}^{-1} \\ \mathcal{B} = -\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{V} \cdot \mathcal{H}^{-1} \end{array} \right.$$

Du fait que tous ces fonctions (\mathcal{H} , \mathcal{D} , \mathcal{V} et inverse) soit symétriques alors l'équation ci-dessus ne forme qu'une et \mathcal{B} étant donc symétrique . Donc en utilisant (3.51) et (3.53)

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

où $(f \star g)(x)$ désigne la convolution $\int f(x - t)g(t)dt$. En injectant cette dernier équation et (3.52) , dans (3.42) , il vient que une équation implicite :

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

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 $\rho(\theta)$.

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

Dans cette section, nous proposons une vérification explicite de l'égalité fonctionnelle entre la susceptibilité spectrale $\chi_w(\theta, \theta')$ par inversion de la courbure et par dérivée fonctionnelle dans le régime thermodynamique. Cette égalité exprime le principe de *fluctuation-réponse* dans le cadre du GGE.

Méthode. On considère un gaz de bosons unidimensionnels intégrables, décrit par l'équation de Bethe, dans un état d'équilibre généralisé déterminé par un poids/potentiel spectral fixé $w(\theta)$. À partir de ce poids, on résout numériquement les équations TBA pour déterminer les quantités thermodynamiques d'équilibre : la densité de quasi-particules $\rho_{\text{eq}}(\theta)$, la densité d'états $\rho_{s,\text{eq}}(\theta)$, et la fonction de remplissage $\nu_{\text{eq}}(\theta) = \rho_{\text{eq}}(\theta)/\rho_{s,\text{eq}}(\theta)$.

Calcul de la matrice hermitienne. À partir de ν_{eq} , on calcule la courbure fonctionnelle de l'entropie de Yang-Yang.

On inverse ensuite numériquement cet opérateur discretisé pour obtenir la matrice

$$-\left(L\mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{\text{YY}})}\right)^{-1}(\theta, \theta').$$

Calcul par différentiation numérique. En parallèle, on calcule indépendamment la réponse linéaire

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

par différentiation numérique de la solution des équations TBA. Concrètement, on introduit une perturbation locale $\delta w(\theta')$ sur le potentiel spectral et on mesure la variation de $\rho_{\text{eq}}(\theta)$ en résolvant à nouveau l'équation de Bethe pour chaque perturbation, en conservant c , N , et L constants.

Comparaison. Les deux approches produisent des matrices $\chi_w(\theta, \theta')$ 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 3.3 – 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. Elle constitue un test non trivial du principe de fluctuation-réponse dans les systèmes intégrables.

3.3 Lien entre dérivée fonctionnelle et réponse linéaire aux facteurs de Lagrange

3.3.1 Réponse linéaire des charges : dérivées fonctionnelles et projections

Hypothèses. On considère un poids/potentiel spectral défini par une combinaison linéaire :

$$w(\theta) = \sum_j \beta_j f_j(\theta),$$

où les β_j sont les multiplicateurs de Lagrange associés aux charges généralisées :

$$\hat{Q}_i = \hat{\mathcal{Q}}[f_i] = L \int d\theta f_i(\theta) \hat{\rho}(\theta),$$

et $\hat{\rho}(\theta)$ est l'opérateur de densité spectrale.

Dérivée par rapport à β_j . On utilise la règle de chaîne fonctionnelle :

$$\left. \frac{\partial \langle \hat{Q}_i \rangle_w}{\partial \beta_j} \right)_{\beta_{k \neq j}} = \int d\theta' \left. \frac{\delta \langle \hat{Q}_i \rangle_w}{\delta w(\theta')} \right)_w \cdot \frac{\partial w(\theta')}{\partial \beta_j}.$$

Comme $\partial w(\theta')/\partial \beta_j = f_j(\theta')$, on obtient :

$$\left. \frac{\partial \langle \hat{Q}_i \rangle_w}{\partial \beta_j} \right)_{\beta_{k \neq j}} = \int d\theta' \left. \frac{\delta \langle \hat{Q}_i \rangle_w}{\delta w(\theta')} \right)_w f_j(\theta').$$

Expression de la dérivée fonctionnelle. On écrit :

$$\left. \frac{\delta \langle \hat{\mathbf{Q}}_i \rangle_w}{\delta w(\theta')} \right)_w = L \int d\theta f_i(\theta) \left. \frac{\delta \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta) \rangle_w}{\delta w(\theta')} \right)_w = -L^2 \int d\theta f_i(\theta) \chi_w(\theta, \theta'),$$

où $\chi(\theta, \theta') \doteq -\frac{1}{L} \left. \frac{\delta \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta) \rangle_w}{\delta w(\theta')} \right)_w$ est la *matrice de susceptibilité spectrale locale*.

Formule finale. En injectant dans l'expression précédente, on obtient :

$$\left. \frac{\partial \langle \hat{\mathbf{Q}}_i \rangle}{\partial \beta_j} \right|_{\beta_{k \neq j}} = L \int d\theta f_i(\theta) \int d\theta' \chi(\theta, \theta') f_j(\theta') = L^2 \iint d\theta d\theta' f_i(\theta) \chi(\theta, \theta') f_j(\theta').$$

Résultat. On définit alors la *matrice de susceptibilité croisée* χ_{ij} par :

$$\chi_w[\hat{\mathbf{Q}}_i, \hat{\mathbf{Q}}_j] \doteq - \left. \frac{\partial \langle \hat{\mathbf{Q}}_i \rangle_w}{\partial \beta_j} \right)_{\beta_{k \neq j}} = - \left. \frac{\delta \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_i] \rangle_w}{\delta f_j} \right)_w \doteq \chi_w[f_i, f_j] = C_w[f_i, f_j]$$

Ce résultat relie :

- la réponse linéaire de $\langle \hat{\mathbf{Q}}_i \rangle_w$ à une perturbation β_j ,
- la dérivée fonctionnelle de l'observable $\hat{\mathbf{Q}}[f_i]$ par rapport à sa fonction test,
- la projection de la matrice de susceptibilité spectrale locale $\chi_w(\theta, \theta')$ sur f_i, f_j .

3.3.2 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).

Cas du nombre de particules. On choisit la fonction test $f_{\hat{\mathbf{Q}}}(\theta) = 1$, ce qui définit la charge associée :

$$\hat{\mathbf{Q}} = \hat{\mathbf{Q}}[1] = L \int d\theta \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta).$$

Son facteur de Lagrange / potentiel conjugué dans $w(\theta)$ est simplement :

$$w(\theta) \supset -\beta \mu \cdot 1.$$

La susceptibilité et les corrélations associée sont égaux :

$$\chi_w[\hat{\mathbf{Q}}, \hat{\mathbf{Q}}] \doteq \left. \frac{\partial \langle \hat{\mathbf{Q}} \rangle_w}{\partial (\beta \mu)} \right)_\beta = L^2 \iint d\theta d\theta' C_w(\theta, \theta') \doteq C_w(f_{\hat{\mathbf{Q}}}, f_{\hat{\mathbf{Q}}}).$$

Cas de l'énergie. On prend maintenant $f_{\hat{\mathbf{H}}}(\theta) = \varepsilon(\theta)$, l'énergie spectrale (ici par ex. $\theta^2/2$ pour des particules libres), ce qui donne :

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{Q}}[\varepsilon] = L \int d\theta \varepsilon(\theta) \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta),$$

et facteur de Lagrange / potentiel conjugué est simplement $\beta \varepsilon(\theta)$, avec :

$$w(\theta) \supset \beta \varepsilon(\theta).$$

On en déduit la susceptibilité thermique :

$$\chi_{\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{H}}} \doteq - \left. \frac{\partial \langle \hat{\mathbf{H}} \rangle_w}{\partial \beta} \right)_{\beta \mu} = L^2 \iint d\theta d\theta' \varepsilon(\theta) C_w(\theta, \theta') \varepsilon(\theta') \doteq C_w(f_{\hat{\mathbf{H}}}, f_{\hat{\mathbf{H}}}).$$

Évaluation numérique. Les corrélations de $\rho(\theta)$ sont calculées numériquement pour un couplage $\gamma = g/n$ fixé, et une température réduite $t = 1/(\beta g^2)$ variant dans un intervalle donné. Les points correspondants sont indiqués en **bleu** dans le diagramme de phase du modèle de Lieb-Liniger (Fig. 3.4a).

Dans ce même diagramme, un **point rouge** correspond à des conditions fixes ($T = 60$ nK, $\mu = 27$ nK), pour lesquelles la carte des fluctuations $\delta\rho$ est représentée en niveaux de couleur (Fig. 3.4b).

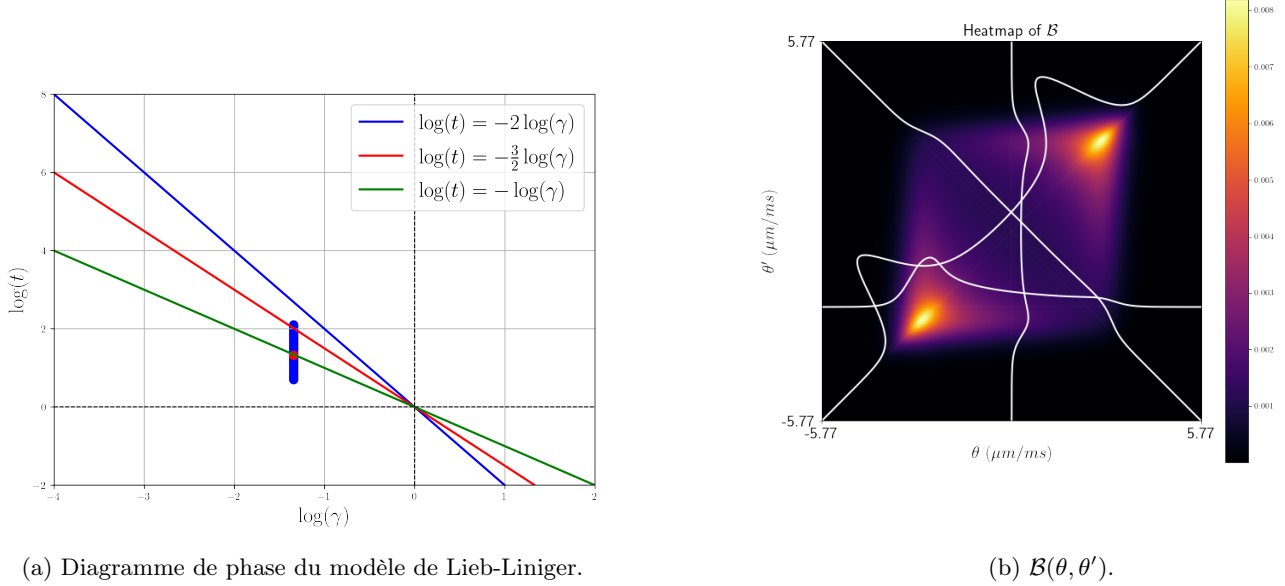


FIGURE 3.4 – (a) Diagramme de phase du modèle de Lieb-Liniger à l'équilibre thermique. Différents régimes asymptotiques sont séparés par des transitions progressives. Les points bleus représentent les fluctuations calculées numériquement pour différentes températures. Les coordonnées sont données par $\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 n}$ 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 enlever).

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. 3.5 et révèlent une excellente concordance.

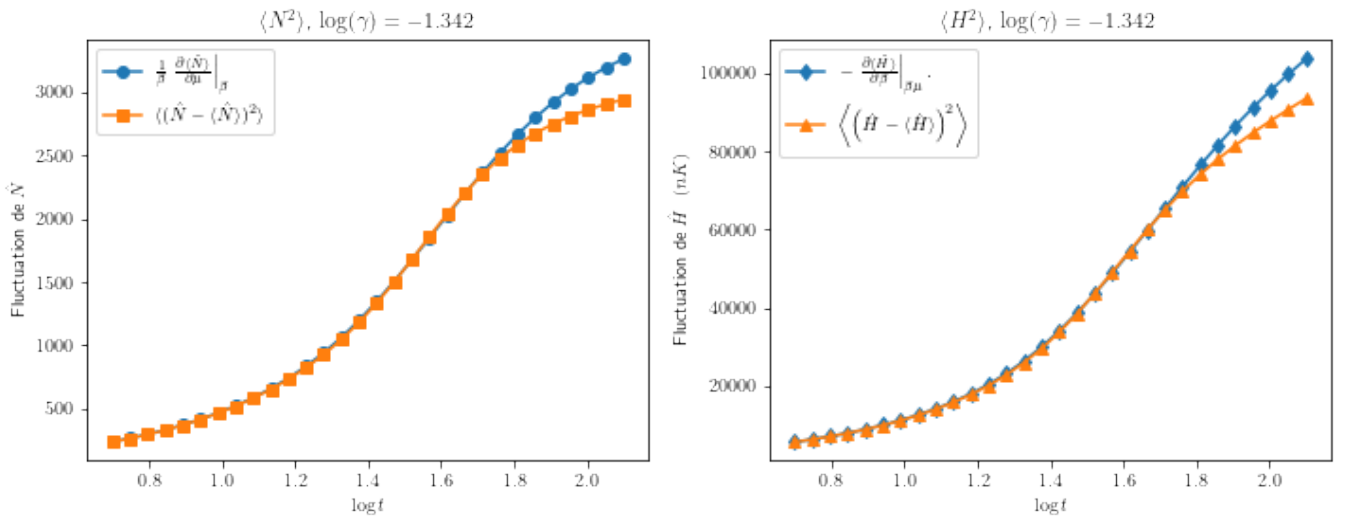


FIGURE 3.5 – Comparaison numérique entre les fluctuations calculées à partir de l'analyse quadratique de l'action (fluctuations de ρ) et celles obtenues par dérivées thermodynamiques des observables moyennes. (voir titres schéma)

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}^{SY} . 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 poid/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'avance ... 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.

Conclusion

Conclusion de la thèse.

Annexe A

Annexes

Informations complémentaires.

Bibliographie

- [1] Alexander B. Zamolodchikov and Alexey 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.
- [2] Olivier Babelon, Denis Bernard, and Michel Talon. *Introduction to Classical Integrable Systems*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics. Cambridge University Press, 2003.
- [3]
- [4] Jacopo De Nardis, Miłosz Panfil, Andrea Gambassi, Leticia F. Cugliandolo, Robert Konik, and Laura Foini. Probing non-thermal density fluctuations in the one-dimensional Bose gas. *SciPost Phys.*, 3 :023, 2017.
- [5] G. Goldstein and N. Andrei. Equilibration and generalized gge in the lieb-liniger gas. *arXiv preprint*, 2013.
- [6] Jean-Sébastien Caux and Robert Konik. Constructing the generalized gibbs ensemble after a quantum quench. *Phys. Rev. Lett.*, 109 :175301, 2012.
- [7] T. Pálmai and R. M. Konik. Quasi-local charges and the generalized gibbs ensemble in the lieb–liniger model. *Phys. Rev. E*, 98(5) :052126, 2018.