

Chapitre 2

Relaxation et Équilibre dans les Systèmes Quantiques Intégrables : de l’Ensemble de Gibbs Généralisé à la Thermodynamique de Bethe

Sommaire

2.1	Notion d’état d’Équilibre de Gibbs Généralisé (GGE)	24
2.1.1	Introduction à l’Équilibre de Gibbs Généralisé	24
2.1.2	Moyenne dans l’Équilibre de Gibbs Généralisé	25
2.1.3	Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales	27
2.2	Thermodynamique de Bethe et relaxation	29
2.2.1	Moyenne dans la limite thermodynamique	29
2.2.2	Statistique des macro-états : entropie de Yang-Yang	30
2.2.3	Équations intégrales de la TBA	33

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 particularité résulte de l’existence d’une infinité de charges conservées, qui sont mutuellement en involution, c’est-à-dire qu’elles commutent entre elles. L’évolution du système est alors contrainte 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**, appelé *Ensemble de Gibbs Généralisé* (en anglais *Generalized Gibbs Ensemble (GGE)*), qui prend en compte l’ensemble des 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 $\hat{\mathbf{p}}$ pour une particule, introduite au chapitre précédent (Chap. 1). 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 totale. 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 bases nécessaires à la description quantitative de ces états stationnaires dans le cadre du formalisme du Bethe Ansatz thermodynamique (*Thermodynamic Bethe Ansatz (TBA)*), introduit initialement par Yang et Yang [YY69] afin d’étendre le Bethe Ansatz au régime

thermodynamique, au-delà de l'état fondamental. Nous considérerons un régime macroscopique à température finie (ou, plus précisément, à entropie de Yang–Yang finie), correspondant à des états hautement excités du spectre, mais toujours décrits exactement grâce à l'intégrabilité du modèle.

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 $|\{\theta_a\}\rangle = |\{\theta_1, \dots, \theta_N\}\rangle$.

Rappel : 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 un état propre des observables nombre d'atome, quantité de mouvement et énergie totale (1.48). Ces observables sont diagonales dans la base des états propres :

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

avec $\sum_{\{\theta_a\}}$ une somme sur tous les états de Bethe.

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} [Rig+07; CCR11]. 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 borné¹. L'intégrabilité implique une caractérisation complète des états propres par un ensemble de paramètres (rapidités $\{\theta_j\}$ dans le modèle de LL) [NP16]. 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 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 le **GGE** [Rig+07], 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 $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}$, *i.e.* un sous-système, on définit la matrice densité locale :

$$\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})} = \frac{1}{Z_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}} \exp \left(- \sum_i \beta_i \hat{Q}_i^{(\mathcal{S})} \right), \quad \hat{Q}_i^{(\mathcal{S})} = \int_{\mathcal{S}} dx \hat{q}_i(x), \quad (2.2)$$

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

$$Z_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})} = \text{Tr} \left[\exp \left(- \sum_i \beta_i \hat{Q}_i^{(\mathcal{S})} \right) \right] \quad (2.3)$$

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 [NP16]. Autrement dit, l'équilibre local après quench est un état

1. Dans le chapitre suivant 3, nous développerons davantage $\hat{q}_i(x)$ à l'échelle mésoscopique et en hydrodynamique. Dans ce chapitre, nous nous limitons à la thermodynamique, mais je le mentionne ici pour introduire le formalisme.

stationnaire faisant perdurer la mémoire de chaque charge conservée, ce qui conduit à un nombre infini de paramètres β_i thermodynamiques (une « température » par charge) [Nar+17a].

Interprétation des multiplicateurs de Lagrange. Les multiplicateurs de Lagranges β_i apparaissent naturellement lors de la maximisation de l'entropie sous contraintes, par exemple dans le formalisme du **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, le **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 calculées par $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}$, et non vers celles d'un Gibbs thermique ordinaire [NP16; Rig+07]. On comprend ainsi pourquoi la *thermalisation habituelle* (canonique ou micro-canonique) échoue : seul l'ensemble de Gibbs généralisé peut intégrer toutes les contraintes locales.

Rappel sur le modèle de LL et distribution de rapidités. Comme rappelé au chapitre précédent, le **modèle de LL** (gaz bosonique 1D à interactions de contact) est un exemple paradigmatic d'un système intégrable [NP16]. Ses états propres sont caractérisés par un ensemble de N rapidités $\{\theta_a\}$, qui jouent le rôle de quasi-moments (**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 le nombre 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 que l'on laisse s'étaler longitudinalement, la distribution asymptotique des vitesses des atomes coïncide avec la distribution initiale des rapidités [Nar+17a].

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

2.1.2 Moyenne dans l'Équilibre de Gibbs Généralisé

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

$$\langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}} \doteq \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{O}], \quad (2.4)$$

En particulier, si la matrice densité est un projecteur, comme $|\{\theta_a\}\rangle\langle\{\theta_a\}|$,

$$\text{Tr}[|\{\theta_a\}\rangle\langle\{\theta_a\}| \hat{O}] = \langle\{\theta_a\}| \hat{O} |\{\theta_a\}\rangle.$$

dans ce cas on notera la moyenne :

$$\langle \hat{O} \rangle_{\{\theta_a\}} = \langle\{\theta_a\}| \hat{O} |\{\theta_a\}\rangle, \quad (2.5)$$

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 $\hat{Q}_i^{(S)}$ sont diagonales dans la base des états propres $|\{\theta_a\}\rangle$, avec pour valeurs propres $\langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}}$:

$$\hat{Q}_i^{(S)} |\{\theta_a\}\rangle = \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} |\{\theta_a\}\rangle. \quad (2.6)$$

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 (2.2) :

$$\mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(S)} \equiv \langle \hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}}, \quad (2.7)$$

$$= \frac{1}{Z_{\text{GGE}}^{(S)}} \exp \left(- \sum_i \beta_i \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} \right). \quad (2.8)$$

Moyenne des charges conservées locales et dérivées de $Z_{\text{GGE}}^{(S)}$. Les charges locales $\hat{Q}_i^{(S)}$ sont diagonales dans la base $\{|\{\theta_a\}\rangle\}$ [cf eq (2.6)]. On peut donc écrire la moyenne d'une observable comme une somme pondérée par cette probabilité [cf eqs (2.7)-(2.8)], ou encore comme une dérivée de la fonction de partition définie dans l'équation (2.3) :

$$\langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \sum_{\{\theta_a\}} \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} \mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(S)} \quad (2.9)$$

$$= - \frac{1}{Z_{\text{GGE}}^{(S)}} \frac{\partial Z_{\text{GGE}}^{(S)}}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_{j \neq i}} \quad (2.10)$$

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

$$\langle \hat{Q}_{i_1}^{(S)} \hat{Q}_{i_2}^{(S)} \cdots \hat{Q}_{i_q}^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = (-1)^q \frac{1}{Z_{\text{GGE}}^{(S)}} \frac{\partial}{\partial \beta_{i_1}} \Big|_{\beta_{j \neq i_1}} \frac{\partial}{\partial \beta_{i_2}} \Big|_{\beta_{j \neq i_2}} \cdots \frac{\partial}{\partial \beta_{i_q}} \Big|_{\beta_{j \neq i_q}} Z_{\text{GGE}}^{(S)}. \quad (2.11)$$

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

$$\left\langle \left(\hat{Q}_i^{(S)} - \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} \right)^2 \right\rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \langle (\hat{Q}_i^{(S)})^2 \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} - \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}}^2 \quad (2.12)$$

de la charge locale $\hat{Q}_i^{(S)}$, en injectant (2.10) et (2.11) et en utilisant $\frac{1}{f} \partial_x^2 f - (\frac{1}{f} \partial_x f) = \partial_x^2 \ln f$:

$$\left\langle \left(\hat{Q}_i^{(S)} - \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} \right)^2 \right\rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \frac{\partial^2 \ln Z_{\text{GGE}}^{(S)}}{\partial \beta_i^2} \Big|_{\beta_{j \neq i}}, \quad (2.13)$$

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

Relaxation dans les systèmes intégrables et chaotiques Avant relaxation, un sous-système est décrit par une infinité de données initiales², par exemple les positions et les impulsions microscopiques $\{\hat{x}_i, \hat{p}_i\}$ de toutes les particules.

Après relaxation, si le sous-système est **intégrable**, cette infinité de données initiales se projette sur une infinité de charges conservées $\hat{Q}_i^{(S)}$, qui contraignent complètement la dynamique de relaxation. L'état stationnaire (ou "d'équilibre") est alors entièrement déterminé par l'ensemble de ces charges et par leurs multiplicateurs de Lagrange associés β_i : c'est le modèle statistique du **GGE**, indispensable pour décrire correctement l'état stationnaire d'un système intégrable.

À l'inverse, dans les sous-systèmes **chaotiques**, ce qui émerge après relaxation est l'équilibre thermique standard. Dans ce cas, la dynamique chaotique "efface" presque toute l'information initiale : l'infinité de données microscopiques avant relaxation converge vers un nombre fini de quantités pertinentes, typiquement l'énergie (et éventuellement le nombre de particules). Le modèle statistique approprié n'est alors pas le **GGE**, mais simplement le modèle de Gibbs [l'Ensemble de Gibbs (en anglais **Gibbs Ensemble (GE)**)], caractérisé par un petit nombre de multiplicateurs de Lagrange : la température (et éventuellement le potentiel chimique).

2. En réalité, c'est seulement dans la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$) qu'un nombre infini de données est requis. Pour un système fini contenant N particules, il suffit d'en spécifier $(2N)^d$, où d est la dimension de l'espace ; ici $d = 1$. Dans cette section, je m'avance un peu lorsque j'emploie le terme « infinité ».

- Si la seule charge conservée est le nombre de particules, noté $\hat{Q}_0^{(S)} \equiv \hat{Q}^{(S)}$, alors le multiplicateur associé est $\beta_0 \equiv -\beta\mu$, où μ désigne le potentiel chimique et $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$ l'inverse de la température (avec k_B la constante de Boltzmann, que l'on prendra égale à 1).
- Si la charge conservée est $\hat{Q}_2^{(S)} - \mu\hat{Q}_0^{(S)} \equiv \hat{H}^{(S)} - \mu\hat{Q}^{(S)}$ (ensemble grand-canonical), alors le multiplicateur est simplement β .

Dans ce dernier cas particulier, la matrice densité locale (2.2) se réduit à celle de l'**ensemble grand-canonical de Gibbs** :

$$\hat{\rho}_{\text{GE}}^{(S)} = \frac{1}{\Xi_{\text{GE}}^{(S)}} \exp \left\{ -\beta \left(\hat{H}^{(S)} - \mu \hat{Q}^{(S)} \right) \right\}, \quad \hat{Q}^{(S)} = \int_S dx \hat{q}(x), \quad \hat{H}^{(S)} = \int_S dx \hat{h}(x), \quad (2.15)$$

avec $\hat{q}(x)$ et $\hat{h}(x)$ les densités locales de nombre de particules et d'énergie, respectivement.

La fonction de partition grand-canonical associée est

$$\Xi_{\text{GE}}^{(S)} = \text{Tr} \left[\exp \left\{ -\beta \left(\hat{H}^{(S)} - \mu \hat{Q}^{(S)} \right) \right\} \right]. \quad (2.16)$$

Les moyennes et les fluctuations thermodynamiques usuelles s'expriment naturellement comme dérivées du logarithme de la fonction de partition grand-canonical $\Xi_{\text{GE}}^{(S)}$:

$$\langle \hat{Q}^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GE}}^{(S)}} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \Xi_{\text{GE}}^{(S)}}{\partial \mu} \Bigg|_\beta, \quad \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle \hat{Q}^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GE}}^{(S)}}}{\partial \mu} \Bigg|_\beta = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln \Xi_{\text{GE}}^{(S)}}{\partial \mu^2} \Bigg|_\beta \quad (2.17)$$

$$\langle \hat{H}^{(S)} - \mu \hat{Q}^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GE}}^{(S)}} = - \frac{\partial \ln \Xi_{\text{GE}}^{(S)}}{\partial \beta} \Bigg|_\mu, \quad - \frac{\partial \langle \hat{H}^{(S)} - \mu \hat{Q}^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GE}}^{(S)}}}{\partial \beta} \Bigg|_\mu = \frac{\partial^2 \ln \Xi_{\text{GE}}^{(S)}}{\partial \beta^2} \Bigg|_\mu. \quad (2.18)$$

Les mêmes que dans (2.10) et (2.14).

En combinant les dérivées précédentes, on reconnaît l'énergie moyenne et ses fluctuations :

$$\langle \hat{H}^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GE}}^{(S)}} = \left[\frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \Big|_T - \frac{\partial}{\partial \beta} \Big|_\mu \right] \ln \Xi_{\text{GE}}^{(S)}, \quad - \frac{\partial \langle \hat{H}^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GE}}^{(S)}}}{\partial \beta} \Big|_{-\mu\beta} = \left[\frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \Big|_T - \frac{\partial}{\partial \beta} \Big|_\mu \right]^2 \ln \Xi_{\text{GE}}^{(S)}. \quad (2.19)$$

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 : $\langle \hat{Q}^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^0$, $\langle \hat{P}^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^1$, et $\langle \hat{H}^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^2$. (cf. équations (2.1)) Dans le 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 :

$$\hat{Q}_i^{(S)} |\{\theta_a\}\rangle \propto \sum_a \theta_a^i |\{\theta_a\}\rangle. \quad (2.20)$$

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

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

$$\hat{Q}^{(S)}[f] = L^{(S)} \int d\theta f(\theta) \hat{\rho}^{(S)}(\theta). \quad (2.21)$$

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

$$\hat{\rho}^{(S)}(\theta) |\{\theta_a\}\rangle = \frac{1}{L^{(S)}} \sum_{a=1}^N \delta(\theta - \theta_a) |\{\theta_a\}\rangle. \quad (2.22)$$

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

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

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

$$\hat{Q}_i^{(S)} = \hat{Q}^{(S)}[f_i], \quad \text{de sorte que} \quad \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} = \sum_{a=1}^N f_i(\theta_a) \quad (2.24)$$

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

Ces charges conservées peuvent s'écrire sous la forme fonctionnelle $\hat{Q}^{(S)}[f] = \int_0^L dx \hat{q}_{[f]}^{(S)}(x)$. où la densité associée $\hat{q}_{[f]}^{(S)}$ est une observable locale.

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

$$w = \sum_i \beta_i f_i, \quad (2.25)$$

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

$$\hat{Q}^{(S)}[w] |\{\theta_a\}\rangle = \sum_{a=1}^N w(\theta_a) |\{\theta_a\}\rangle \quad \text{de sorte que} \quad \langle \hat{Q}^{(S)}[w] \rangle_{\{\theta_a\}} = \sum_i \beta_i \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} \quad (2.26)$$

Expression de la matrice densité généralisée. Dans le cas des modèles intégrables traités par le Bethe Ansatz, il est toutefois plus pratique de réécrire cette matrice densité $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}$ de (2.2) en termes du *poids spectral* $w(\theta)$ introduit en (2.25). On obtient alors :

$$\hat{\rho}^{(S)}[w] = \frac{e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]}}{Z^{(S)}[w]}, \quad \text{avec} \quad e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]} = \sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)} |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}|, \quad (2.27)$$

et la fonction de partition (2.3) s'écrit $Z^{(S)}[w] \doteq \text{Tr} \left[e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]} \right]$ et vaut :

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

Probabilité associée à une configuration de rapidités. Dans ce formalisme, la probabilité d'occuper l'état $|\{\theta\}\rangle$ (2.7) est donc

$$\mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(S)} = Z^{(S)}[w]^{-1} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}. \quad (2.29)$$

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

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

$$\langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}^{(S)}[w]} = \frac{\sum_{\{\theta_a\}} \langle \hat{O} \rangle_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}}{\sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}} \quad (2.30)$$

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 ne peut se limiter aux seules constantes de mouvement usuelles, telles que l'énergie ou l'impulsion. Elle requiert l'introduction d'une *famille infinie de charges conservées*, qui forment la structure intégrable du modèle. Ces charges comprennent à la fois des charges strictement locales, construites comme des intégrales de densités dépendant d'un nombre fini de sites ou de points de l'espace, et des charges dites quasi-locales, dont la densité est faiblement non locale mais reste suffisamment bien définie pour jouer un rôle physique. L'ensemble de ces charges contraint fortement la dynamique et empêche la thermalisation au sens usuel (c'est-à-dire vers l'ensemble canonique ou microcanonique). La relaxation vers l'équilibre se fait alors vers un état stationnaire généralisé, décrit par le **GGE**, où chaque charge conservée intervient avec son propre multiplicateur de Lagrange.

Toutes ces charges se réunissent dans l'opérateur fonctionnel $\hat{Q}^{(S)}[w]$, défini par un *poids spectral* $w(\theta)$ (cf. équations (2.23)). Cette construction conduit naturellement à la matrice densité généralisée $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)} \propto e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]}$ (cf. équations (2.27)), et à la moyenne d'un opérateur local \hat{O} donnée par $\langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \text{Tr}(\hat{O}\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}[w])$ (cf. équations (2.30)). La connaissance de $w(\theta)$ suffit donc pour prédire les valeurs moyennes de toutes les observables, y compris celles des charges elles-mêmes ; c'est le cœur du **GGE**.

Cette base est désormais posée : dans la section suivante, nous passerons à la **TBA**. Nous verrons comment, dans la limite thermodynamique, les sommes sur les configurations de rapidités se transforment en intégrales sur des fonctions 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 microscope 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 (2.22) est diagonal, et ses valeurs propres correspondent aux **distributions de rapidité** associées à chaque état de Bethe.

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

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

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{O} \rangle_{\{\theta_a\}} = \langle \hat{O} \rangle_{[\rho]}, \quad (2.31)$$

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

Dans un ensemble général (GGE), la valeur moyenne de l'observable (2.30) devient alors :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}[w]} = \frac{\sum_{\rho} \langle \hat{O} \rangle_{[\rho]} \Omega[\rho] e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}}{\sum_{\rho} \Omega[\rho] e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}}, \quad (2.32)$$

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

Pour établir la fonction $\Omega[\rho]$, rappelons-nous de la transformation des équations de Bethe dans la limite thermodynamique, hors état fondamental (1.90) et (1.92).

$$\nu = \frac{\rho}{\rho_s}, \quad 2\pi\rho_s = 1_{[\nu]}^{\text{dr}} \quad (2.33)$$

où $f_{[\nu]}^{\text{dr}}$ est définie en (1.91).

Cette formalisation constitue la brique de base de l'**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 **GGE** dépend uniquement d'un objet continu : le **poids spectral** $w(\theta)$, c'est-à-dire la « température généralisée » assignée à chaque quasi-particule.

Le **poids spectral** $w(\theta)$ est en correspondance bijective avec la **distribution de rapidité à l'équilibre** :

$$\rho_{\text{eq}}(\theta) \doteq \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_{\hat{\varrho}[w]}, \quad (2.34)$$

Cette reformulation est particulièrement puissante car elle permet de décrire les propriétés locales du système sans se référer aux détails d'un état propre individuel.

Les travaux pionniers de YANG & YANG (1969) [YY69] ont fourni la justification de cette approche. Leur méthode repose sur l'analyse statistique des états propres partageant la même distribution $\rho(\theta)$, montrant ainsi comment la structure microscopique des états peut se traduire en une description thermodynamique complète.

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 rapidité 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 de distribution de rapidité $\rho(\theta)$?**

Plus précisément, dans l'expression de moyenne des opérateurs locaux (2.32), apparaît le facteur $\Omega[\rho]$, qui compte ces états propres. La détermination de $\Omega[\rho]$ (ou équivalement de l'entropie de Yang–Yang $S_{YY}[\rho]$ car $\Omega[\rho] = e^{L S_{YY}[\rho]}$ avec L la taille du système) est donc la clé pour relier (i) le poids spectral $w(\theta)$ imposé dans le GGE et (ii) la distribution de rapidité moyenne $\rho_{\text{eq}}(\theta)$ observée à l'équilibre.

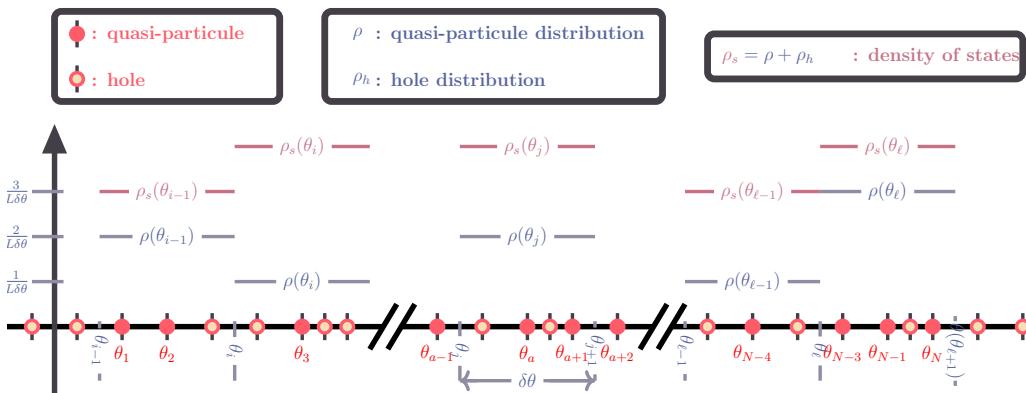
Dénombrement local des configurations microcanoniques. Pour répondre à cette question, on subdivise l'axe des rapidités en petites tranches ou cellules de largeur $\delta\theta$, chacune centrée en un point θ_a . Dans une tranche $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta]$, on suppose que la densité $\rho(\theta)$ 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 (Fig 2.1) est donné par :

FIGURE 2.1 – Schéma illustrant la discréétisation de l'espace des rapidités en cellules de largeur $\delta\theta$.

$$\Omega(\theta_a) \approx \binom{M_a}{N_a} = \frac{[L\rho_s(\theta)\delta\theta]!}{[L\rho(\theta)\delta\theta]![L(\rho_s(\theta) - \rho(\theta))\delta\theta]!}. \quad (2.35)$$

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

$$n! \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}, \quad (2.36)$$

composé avec la fonction logarithmique, on obtient :

$$\ln n! \underset{n \rightarrow \infty}{\rightarrow} n \ln n - \underbrace{n + \ln \sqrt{2\pi n}}_{o(n \ln n)}, \quad (2.37)$$

$$\underset{n \rightarrow \infty}{\sim} n \ln n \quad (2.38)$$

$\Omega(\theta)$ n'est jamais nul donc on peut approximer, pour de grandes valeurs de L :

$$\ln \Omega(\theta) \underset{\substack{L\rho \delta\theta \rightarrow \infty \\ \rho(\theta) \leq \rho_s(\theta)}}{\sim} L[\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta) \delta\theta. \quad (2.39)$$

Cette expression donne la contribution à l'**entropie** associée à la cellule autour de θ_a de taille $\delta\theta$.

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 :

$$\ln \Omega[\rho] = \sum_a^{\theta-\text{cellules}} \ln \Omega(\theta_a), \quad (2.40)$$

$$\approx L S_{YY}[\rho], \quad (2.41)$$

où l'on définit l'**entropie de Yang-Yang** par unité de longueur, par la formule discréétisée :

$$S_{YY}[\rho] \doteq \sum_a^{\theta-\text{cellules}} [\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta_a) \delta\theta. \quad (2.42)$$

Énergie généralisée par unité de longueur : définition. 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 définit par :

$$\mathcal{W}(\{\theta_a\}) \doteq \frac{1}{L} \sum_{a=1}^N w(\theta_a) \underset{\text{therm.}}{\sim} \mathcal{W}[\rho] \doteq \sum_a^{\theta\text{-cellules}} w(\theta_a) \rho(\theta_a) \delta\theta. \quad (2.43)$$

Moyenne des Observables locales dans la limite thermodynamique. Dans un ensemble général (GGE), la valeur moyenne de l'observable (2.32) devient :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}[w]} \approx \frac{\sum_{\rho}^{\rho} \langle \hat{O} \rangle_{[\rho]} e^{L(S_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}{\sum_{\rho}^{\rho} e^{L(S_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}, \quad (2.44)$$

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

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

$$S_{YY}[\rho] = \int d\theta [\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta), \quad (2.45)$$

$$\mathcal{W}[\rho] = \int w(\theta) \rho(\theta) d\theta \quad (2.46)$$

Formule fonctionnelle pour les moyennes. Dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$, la somme sur les distributions de rapidité ρ admissibles peut être approximée par une intégrale fonctionnelle sur l'espace des densités de rapidité continues, munie d'une mesure fonctionnelle $\mathcal{D}\rho : \sum_{\rho} \sim \int \mathcal{D}\rho$. Cette correspondance repose sur l'idée que les macro-états admissibles deviennent denses dans l'espace fonctionnel, et que le poids statistique associé à chaque configuration est donné par l'entropie de Yang-Yang. La mesure fonctionnelle $\mathcal{D}\rho$ parcourt l'espace des densités $\rho(\theta)$ continues, *chaque configuration étant pondérée par le facteur exponentiel* $e^{L(S_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}$. Finalement, la moyenne d'une observable dans le **GGE** (2.44) s'écrit comme une intégrale fonctionnelle/de chemin :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}[w]} = \frac{\int \mathcal{D}\rho e^{L(S_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])} \langle \hat{O} \rangle_{[\rho]}}{\int \mathcal{D}\rho e^{L(S_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}. \quad (2.47)$$

Interprétation thermodynamique.

- $S_{YY}[\rho]$ compte le logarithme du nombre de micro-états par unité de longueur associé à 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

$$(S_{YY} - \mathcal{W})[\rho] \quad (2.48)$$

joue donc le rôle d'une *fonction thermodynamique effective* (analogue à une énergie libre). L'exposant $e^{L(S_{YY} - \mathcal{W})[\rho]}$ fixe la **probabilité relative** d'un macro-état $\rho(\theta)$ dans le **GGE** : le terme entropique favorise les 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

Approximation au point selle (« méthode de la selle statique ») Dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$, l'intégrale (2.47) est dominée par la configuration ρ_{eq} qui maximise le poids exponentiel $e^{L(S_{YY} - W)[\rho]}$ dans l'expression (2.47). Il s'agit de la densité de rapidité la plus probable, solution d'un problème de maximisation. On obtient à l'ordre principal

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\rho}[w]} \approx \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho_{eq}]}, \quad (2.49)$$

où ρ_{eq} est la distribution de rapidité à l'équilibre (2.34). Cette approximation correspond à une méthode de *selle statique*, où l'on développe la *fonction thermodynamique effective*, $S_{YY} - W$ au voisinage de la distribution dominante.

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

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

$$\mathcal{D}_{[\lambda]} F[\phi] \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[\phi + \epsilon \lambda] - F[\phi]}{\epsilon} \quad (2.50)$$

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 :

$$\mathcal{D}_{[\lambda]} F[\phi] = \int dx \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)} \lambda(x) \quad (2.51)$$

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 :

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} F[\phi + \epsilon \delta(x - x_0)] \right|_{\epsilon=0} = \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x_0)} \quad (2.52)$$

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 $\rho = \rho_{eq} + \delta\rho$ et développons $(S_{YY} - W)[\rho]$ à l'ordre linéaire :

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

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

$$\mathcal{D}_{[\delta\rho]} S_{YY}[\rho_{eq}] = \mathcal{D}_{[\delta\rho]} W[\rho_{eq}]. \quad (2.53)$$

Équation intégrale de la TBA. La condition de stationnarité au point selle $\rho = \rho_{eq}$ (2.53) réécrit de la forme de produit scalaire (2.51) implique que pour tous θ :

$$\frac{\delta S_{YY}[\rho_{eq}]}{\delta \rho(\theta)} = \frac{\delta W[\rho_{eq}]}{\delta \rho(\theta)}, \quad (2.54)$$

et la forme de l'*énergie généralisée* (2.46) et le rappel (2.52) impliquent que le second membre de l'équation précédente (2.54) est

$$\frac{\delta W[\rho_{\text{eq}}]}{\delta \rho(\theta)} = w(\theta). \quad (2.55)$$

Ainsi (2.54) se réécrit en

$$\frac{\delta S_{YY}[\rho_{\text{eq}}]}{\delta \rho(\theta)} = w(\theta), \quad (2.56)$$

En utilisant l'expression explicite de l'entropie de Yang–Yang (2.45), on obtient l'identité fonctionnelle

$$w = \ln(\nu_{\text{eq}}^{-1} - 1) - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 - \nu_{\text{eq}}). \quad (2.57)$$

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

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

$$\epsilon = \ln(\nu_{\text{eq}}^{-1} - 1), \quad \nu_{\text{eq}} = \frac{1}{1 + e^\epsilon}. \quad (2.58)$$

En réinjectant (2.58) dans (2.57) on obtient l'équation intégrale canonique de la thermodynamique de Bethe :

$$\epsilon = w - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 + e^{-\epsilon}). \quad (2.59)$$

Les relations (2.58)–(2.59) 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 (2.49).

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

$$w(\theta) = \frac{1}{2}\theta^2. \quad (2.60)$$

En injectant w dans l'équation intégrale pour la pseudo-énergie (2.59), 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 (2.59) 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

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_0 - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 + e^{-\epsilon_n}), \quad n \geq 0 \quad (2.61)$$

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 l'itération (2.61) convergée vers la **pseudo-énergie** $\epsilon(\theta)$, le facteur d'occupation à l'équilibre est déterminé en substituant $\epsilon(\theta)$ dans l'équation (2.58), ce qui fournit ν_{eq} .

On en déduit ensuite la densité d'état à l'équilibre $\rho_{s,\text{eq}}$ via le **dressing** de la fonction constante $f(\theta) = 1$, selon (1.92), rappelée ici pour mémoire : $2\pi\rho_{s,\text{eq}} = 1^{\text{dr}}_{[\nu_{\text{eq}}]}$.

L'opérateur de dressing (1.91) étant linéaire, il se résout numériquement sous la forme :

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

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

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

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} (Fig 2.2).

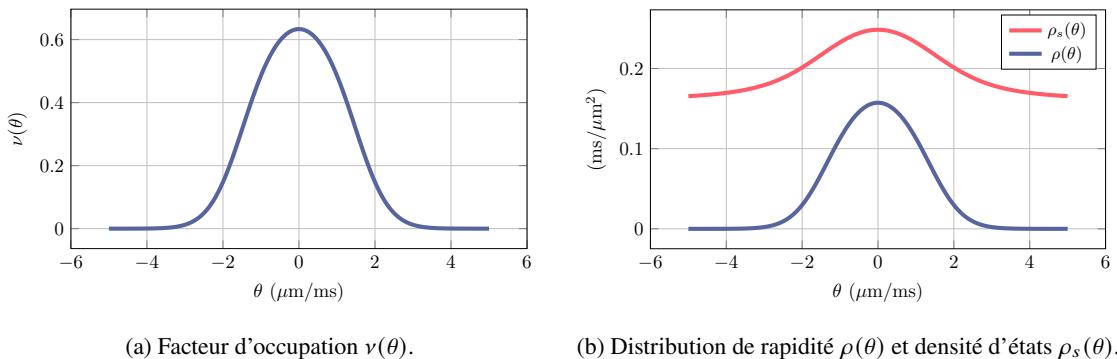


FIGURE 2.2 – Représentation spectrale pour le poids $w(\theta) = \theta^2/2$, avec $\hbar = m = q = 1$. (a) Facteur d'occupation $\nu(\theta)$. (b) Distribution de rapidité $\rho(\theta)$ et densité d'états $\rho_s(\theta)$.

2.2.3.1 Équilibre thermique

État fondamental. À l'état fondamental, le facteur d'occupation vaut

$$\nu(\theta) = \begin{cases} 1, & \theta \in [-\theta_{\max}, \theta_{\max}], \\ 0, & \text{sinon,} \end{cases} \quad (2.62)$$

où θ_{\max} dépend de la densité du système. La distribution de rapidités à l'état fondamental peut alors être obtenue à partir des équations constitutives de Lieb [LL63]. Cette distribution ne dépend que d'un paramètre adimensionné, appelé *paramètre de Lieb* :

$$\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 n}, \quad (2.63)$$

avec g le paramètre d'interaction 1D et n la densité linéique du gaz.

En fonction de γ , deux régimes limites apparaissent :

- **Régime de Tonks-Girardeau** : ce régime correspond à des interactions fortes, $\gamma \rightarrow \infty$ (ou $g \rightarrow \infty$, densité faible). Dans ce cas, la distribution de rapidités ressemble à une *mer de Fermi*.
- **Régime de quasi Bose-Einstein Condensate (qBEC)** : pour $\gamma \ll 1$, les interactions sont faibles et la distribution de rapidités se déforme par rapport à la mer de Fermi. Dans la limite $\gamma \rightarrow 0$, la distribution attendue est un demi-cercle [LL63] :

$$\rho(\theta) = \frac{n}{\pi c} \sqrt{1 - \left(\frac{\theta}{2c} \right)^2}, \quad c = \sqrt{gn/m}. \quad (2.64)$$

Pour des γ petits mais non nuls, la distribution est proche du demi-cercle mais présente une discontinuité aux bords, comme illustré sur la Fig. 2.3.

Diagramme des régimes du gaz de Lieb-Liniger.

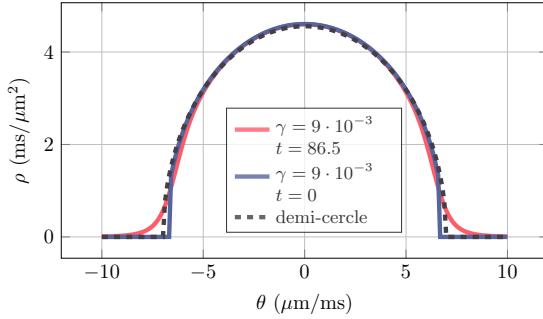


FIGURE 2.3 – Distributions de rapidités pour différents paramètres de Lieb γ et différentes températures T . Distribution dans le régime de faible interaction ($\gamma \ll 1$) : le demi-cercle gris représente la distribution attendue pour $\gamma \rightarrow 0$, tandis que le profil bleu correspond à γ petit mais non nul, montrant une discontinuité aux extrémités. La distribution jaune illustre l'état excité au-delà de l'état fondamental, avec apparition d'ailes aux extrémités.

Paramètres fixés. Dans le cas de l'équilibre thermique usuel (ensemble de Gibbs), seules deux charges sont conservées : le **nombre total de particules** $\hat{Q}[f_0]$ et l'**énergie totale** $\hat{Q}[f_2]$. Cela correspond au choix suivant :

$$\begin{aligned} f_0(\theta) &= 1, && \text{(densité de particules)} \\ f_2(\theta) &= \frac{1}{2}m\theta^2, && \text{(densité d'énergie } \varepsilon \text{)} \end{aligned}$$

les coefficients de Lagrange associés sont :

$$\begin{aligned} \beta_0 &= -\beta\mu, && \text{(potentiel chimique)} \\ \beta_2 &= \beta, && \text{(inverse de la température)}, \end{aligned}$$

avec $\beta = 1/(k_B T)$ et k_B constante de Boltzmann.

Le poids spectral s'écrit comme une combinaison linéaire :

$$w(\theta) = \beta_0 f_0(\theta) + \beta_2 f_2(\theta), \quad (2.65)$$

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

Les densités locales f_i sont fixées. Pour spécifier le *poids spectral* w , on choisit les coefficients de Lagrange β_0 et β_2 en imposant une température T et un potentiel chimique μ .

À l'équilibre thermique, les propriétés du système ne dépendent pas uniquement du paramètre de Lieb γ , mais également de la température T , que l'on peut rendre adimensionnelle via le paramètre :

$$t = \frac{k_B T}{mg^2/\hbar^2}. \quad (2.66)$$

La densité linéaire n ne paramétrise pas directement le poids spectral w (4.61), mais est liée au potentiel chimique μ via :

$$Ln = \langle \hat{Q}[f_0] \rangle_w \left(= \int d\theta \rho_{eq}(\theta) \right). \quad (2.67)$$

C'est ainsi que les simulations numériques seront effectuées en utilisant γ et t .

Un exemple de ce profil avec ($\gamma = 9 \cdot 10^{-3}$, $t = 86.5$) est représenté sur la Fig. 2.3.

Pour synthétiser les différents comportements, les régimes principaux peuvent être représentés dans le plan (γ, t) . Le diagramme de la Fig. 2.4 distingue trois zones : gaz de Bose idéal, gaz de Tonks-Girardeau et qBEC. Les courbes qui délimitent ces zones correspondent à des conditions analytiques sur γ et t , par exemple $\gamma^{3/2}t = 1$, $\gamma^2t = 1$ et $\gamma t = 1$. Il ne s'agit pas de transitions de phase, mais de cross-over entre régimes asymptotiques. Les expériences sur puce atomique du LCF ont permis d'étudier ces régimes. La plupart des résultats présentés dans cette thèse correspondent à $\gamma \sim 0.9 \times 10^{-2}$. La zone grise indique la gamme de paramètres expérimentaux explorés pendant cette thèse.

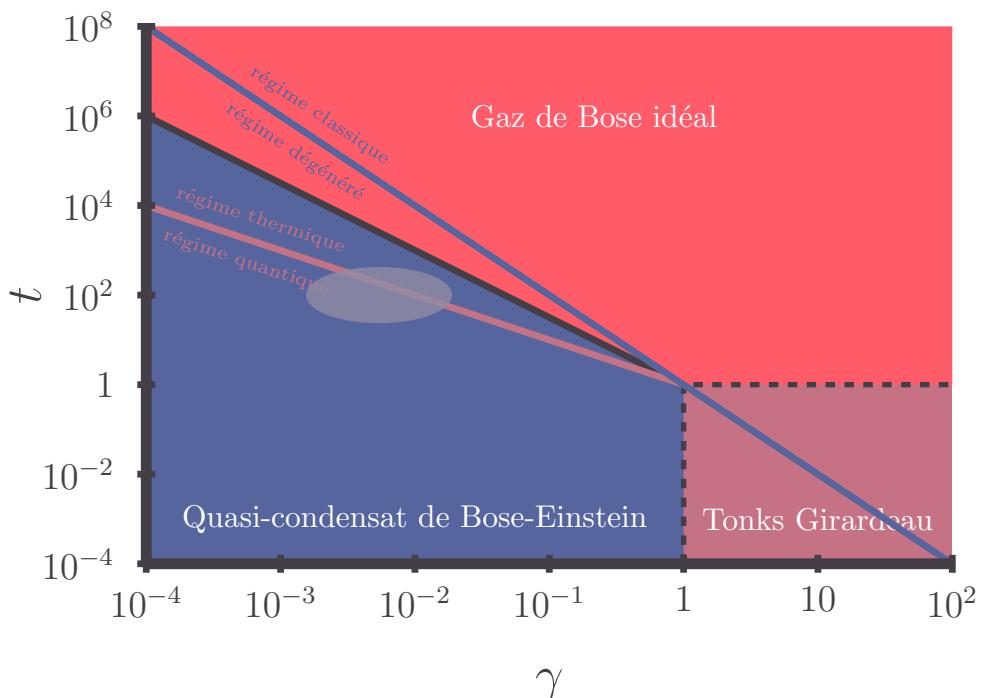


FIGURE 2.4 – Diagramme des régimes principaux du gaz de Lieb–Liniger : gaz de Bose idéal, Tonks–Girardeau et qBEC, en fonction des paramètres adimensionnés γ et t . Les courbes noires, bleues et orange délimitent les cross-overs entre régimes. La zone grise correspond aux paramètres expérimentaux explorés pendant la thèse. Figure adaptée de [BDW11].

Conclusion du chapitre

Dans les systèmes intégrables, l'état stationnaire hors équilibre est correctement décrit par un GGE basé sur une infinité de charges conservées. Ces charges sont liées aux puissances des rapidités des quasi-particules.

La description via le *poids spectral* $w(\theta)$ permet de relier ces charges aux distributions de rapidité à l'équilibre. En moyenne, $w(\theta)$ définit à la fois les valeurs moyennes des charges conservées et la distribution de rapidité correspondante.

Dans la limite thermodynamique, $w(\theta)$ sert de donnée d'entrée pour les équations de le TBA, qui permettent, par un calcul numérique, de reconstruire la distribution de rapidité à partir de $w(\theta)$.

Enfin, le formalisme du GGE offre un cadre puissant non seulement pour les moyennes des observables, mais également pour l'étude des corrélations et des fluctuations, comme nous le verrons au Chapitre 4.

