

Table des matières

1 Modèle de Lieb-Liniger et approche Bethe Ansatz	3
1.1 Description du modèle de Lieb-Liniger	4
1.1.1 Introduction au modèle de gaz de Bose unidimensionnel et Hamiltonien du modèle	4
1.1.2 Opérateurs nombre de particules et moment dans la formulation quantique du gaz de Lieb-Liniger	9
1.1.3 Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à 2 corps	10
1.2 Équation de Bethe et distribution de rapidité	13
1.2.1 Fonction d'onde dans le secteur ordonné et représentation de Gaudin	13
1.2.2 Conditions aux bords périodiques	13
1.2.3 Équations de Bethe exponentielles	14
1.2.4 Équations de Bethe logarithmiques	14
1.2.5 Interprétation physique	14
1.2.6 Thermodynamique du gaz de Lieb-Liniger à température nulle	14
1.2.7 Excitations élémentaires à température nulle	15
2 Relaxation et Équilibre dans les Systèmes Quantiques Intégrables : Une Approche par la Thermodynamique de Bethe	17
2.0.1 Notion d'état d'équilibre généralisé (GGE)	17
2.0.2 Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales	20
2.1 Thermodynamique de Bethe et relaxation	21
2.1.1 Limite thermodynamique	21
2.1.2 Statistique des macro-états : entropie de Yang-Yang	23
2.1.3 Équations intégrales de la TBA	26
3 Dynamique hors-équilibre et hydrodynamique généralisée	29
3.1 Hydrodynamique et régimes asymptotiques	29
3.1.1 Hydrodynamique classique des systèmes chaotiques	29
3.1.2 Hydrodynamique des systèmes intégrables et distribution de rapidité	29
3.1.3 Équation d'hydrodynamique généralisée (GHD)	29
4 Fluctuation de la distribution de rapidité dans des état d'équilibre	31
4.1 Fluctuation-réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés	32
4.1.1 Cadre général : GGE, observables et dérivées fonctionnelles	32
4.1.2 Corrélations spectrales et susceptibilité	34
4.1.3 Vérification numérique : susceptibilité vs corrélation spectrale	34
4.2 Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilités	35
4.2.1 Susceptibilités spectrales et structure variationnelle de l'entropie	35
4.2.2 Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique	36
4.2.3 Expression de la Hessienne	37
4.2.4 Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne	38
4.2.5 Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle	38
4.3 Lien entre dérivée fonctionnelle et réponse linéaire aux facteurs de Lagrange	39
4.3.1 Réponse linéaire des charges : dérivées fonctionnelles et projections	39
4.3.2 Vérification numérique thermique : énergie et nombre de particules	40
5 Protocoles expérimentale	43
5.1 Présentation de l'expérience	43
5.2 Refroidissement	43
5.3 Imagerie	43
5.3.1 Problème d'imagerie et idée numérique	43
5.4 Confinement transverse	43

5.5	Confinement longitudinal	43
5.5.1	Evolution logitudinale	43
5.6	Outil de sélection spatial	43
5.6.1	Mesure de distribution de rapidités locales $\rho(x, \theta)$ pour des systèmes en équilibre	43
6	Étude du protocole de bi-partition : Mesure de distribution de rapidités locales $\rho(x, \theta)$ pour des systèmes hors équilibre	45
6.1	Dynamique balistique d'un gaz 1D après une coupure bipartite	47
6.1.1	Préparation expérimentale et protocole de coupure	47
6.1.2	Dynamique balistique et cadre de la GHD	48
6.1.3	Validation expérimentale de la dynamique hydrodynamique	50
6.2	Sondre la distribution locale des rapidités	51
6.3	Sondre la distribution locale des rapidités	53
6.3.1	Sélection d'une tranche localisée après déformation du bord	54
6.3.2	Expansion de la tranche et observation d'une asymétrie	55
6.3.3	Simulations	56
6.3.4	Facteur d'occupation et distribution de rapidité à l'équilibre thermique	57
6.3.5	Dynamique du contour dans l'espace des phases (x, θ)	58
6.3.6	Simulation de la déformation du bord	58
6.3.7	Simulation de l'expansion	59
6.4	Détails sur les calculs	60
7	Mise en place d'un confinement longitudinal dipolaire	63
7.1	Transformation de jauge et simplification du Hamiltonien	63
7.2	Potentiel Dipolaire d'un atome à deux niveaux - généralité	64
7.2.1	Introduction	64
7.2.2	Système à deux niveaux et interaction avec le champ	64
7.2.3	Interprétation du traitement du second ordre : transition virtuelle et origine du potentiel dipolaire (AC-Stark)	65
7.2.4	Expression explicite du potentiel dipolaire	66
7.3	Piégeage dipolaire d'un atome à plusieurs niveaux	67
7.3.1	Atomes multiniveaux et origine du potentiel dipolaire dans le formalisme quantique	67
7.4	Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne	70
7.4.1	Structure électronique du Rubidium	70
7.4.2	Structure matricielle du potentiel dipolaire	71
7.4.3	Cas de désaccords très importants	71
7.4.4	Structure fine et base des états $ L, S; J, m_J\rangle$	73
7.5	Notre dispositif expérimental	75
7.5.1	Choix du laser pour le piégeage dipolaire	75
7.5.2	Amplification par Tapered Amplifier (TA)	78

Chapitre 1

Modèle de Lieb-Liniger et approche Bethe Ansatz

Contents

1.1	Description du modèle de Lieb-Liniger	4
1.1.1	Introduction au modèle de gaz de Bose unidimensionnel et Hamiltonien du modèle	4
1.1.2	Opérateurs nombre de particules et moment dans la formulation quantique du gaz de Lieb-Liniger	9
1.1.3	Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à 2 corps	10
1.2	Équation de Bethe et distribution de rapidité	13
1.2.1	Fonction d'onde dans le secteur ordonné et représentation de Gaudin	13
1.2.2	Conditions aux bords périodiques	13
1.2.3	Équations de Bethe exponentielles	14
1.2.4	Équations de Bethe logarithmiques	14
1.2.5	Interprétation physique	14
1.2.6	Thermodynamique du gaz de Lieb-Liniger à température nulle	14
1.2.7	Excitations élémentaires à température nulle	15

Introduction

Dans ce chapitre, nous introduisons progressivement le modèle de Lieb-Liniger et l'Ansatz de Bethe, outils fondamentaux pour décrire un gaz de bosons unidimensionnel avec interactions delta. L'objectif est d'accompagner pas à pas le lecteur depuis la formulation du problème quantique en champ de bosons jusqu'aux solutions exactes obtenues par l'Ansatz de Bethe.

Nous commençons par écrire l'équation du champ de bosons, exprimée à l'aide des opérateurs de création et d'annihilation en représentation de position. Pour des raisons pédagogiques, nous abordons d'abord le cas d'une seule particule, sans interaction. Cela permet d'introduire naturellement les états de position et leur évolution sous l'action du Hamiltonien libre.

Ensuite, nous étudions le cas de deux particules, cette fois en tenant compte de l'interaction locale. Cela nous amène à considérer les états de position dans le cas général, y compris lorsque les deux particules peuvent occuper la même position. Cette situation, bien plus subtile qu'il n'y paraît, met en évidence la complexité introduite par l'interaction, et justifie que l'on commence par analyser les configurations où les particules sont à des positions distinctes.

En passant au référentiel du centre de masse, le problème à deux corps avec interaction devient équivalent à un problème à une seule particule en interaction avec une barrière delta au centre. Cette reformulation permet d'interpréter l'effet de l'interaction comme une condition de raccord sur la fonction d'onde, tout en respectant la symétrie bosonique.

Nous revenons ensuite aux coordonnées du laboratoire afin d'introduire naturellement la forme des solutions imposée par l'Ansatz de Bethe. Cela nous conduit aux équations dites de Bethe, qui relient les quasimoments des particules à travers des conditions de périodicité modifiées par l'interaction.

Une fois les notations bien établies, nous généralisons le raisonnement au cas de N particules, pour obtenir l'Hamiltonien de Lieb-Liniger complet ainsi que la forme générale de l'Ansatz de Bethe. Les solutions ainsi construites permettent non seulement de déterminer le spectre de l'Hamiltonien, mais aussi de calculer des observables physiques importantes, telles que l'impulsion totale ou le nombre de particules.

Enfin, nous introduisons la notion de distribution de rapidité, outil essentiel dans l'étude des états d'énergie minimale (états fondamentaux) et dans la description thermodynamique du système. Ce cadre servira de base aux développements ultérieurs sur les gaz intégrables à température finie et les états stationnaires après quench quantique.

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 $\hat{p} \doteq -i\hbar\partial_x$, 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 :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}\psi, \quad (1.1)$$

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

Exemple : particule libre en une boîte à une dimension. Pour une particule libre de masse m en une dimension, l'hamiltonien est purement cinétique : $\hat{\mathcal{H}}_1 = \hat{p}^2/2m$. Les états propres stationnaires 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, solution de (1.1) soit de l'équation stationnaire $\hat{\mathcal{H}}_1 \varphi_k = \varepsilon(k)\varphi_k$ avec $\varepsilon(k) = \hbar^2 k^2/(2m)$ l'énergie associée à une onde plane de nombre d'onde k . Les fonctions propres spatiales $\varphi_k(x)$ de l'hamiltonien libre s'écrivent comme des combinaisons linéaires d'ondes planes $\varphi_k(x) = ae^{ikx} + be^{-ikx}$ avec $(a, b) \in \mathbb{C}^2$. 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 : $k \in \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}$. Les solutions générales de l'équation de Schrödinger s'écrivent alors comme une superposition d'états propres $\psi = \sum_k c_k \psi_k$. Le problème est équivalent à celui d'une particule libre sur un cercle de périmètre L .

On résume :

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \varphi_k = \varepsilon(k) \varphi_k, \quad \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \varphi_k(x) = ae^{-ikx} + be^{ikx}, \quad kL \in 2\pi\mathbb{Z}. \quad (1.2)$$

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

La fonction $\varphi_k(x)$ est supposée normalisée dans l'espace des états quantifiés (boîte finie) : $\int_0^L dx \varphi_{k'}^*(x) \varphi_k(x) = \delta_{k, \pm k'}$. avec $|a|^2 + |b|^2 = L^{-1}$. Et dans le sous espace engendré pas $x \mapsto e^{-ikx}$ et $x \mapsto e^{ikx}$ (de deux dimension si $k \neq 0$ et une dimension si $k = 0$), $x \mapsto \pm(b^* e^{-ikx} - a^* e^{ikx})$ est orthogonale à φ_k pour $k \neq 0$.

Remarque. On choisit $a = \frac{1}{\sqrt{L}}$ et $b = 0$, alors $\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$ est une onde plane.

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 : $\hat{\mathcal{H}}_1 |k\rangle = \varepsilon(k) |k\rangle$. En appliquant le bra $\langle x|$ de part et d'autre, on obtient : $\langle x| \hat{\mathcal{H}}_1 |k\rangle = \varepsilon(k) \langle x|k\rangle$, où $\varphi_k(x) = \langle x|k\rangle$ 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 :

$$|k\rangle = \int dx \varphi_k(x) |x\rangle, \quad |x\rangle = \sum_k \varphi_k^*(x) |k\rangle, \quad (1.3)$$

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.

Vers le Bethe ansatz. Ce formalisme devient particulièrement utile lorsque des interactions entre particules sont introduites. Dans le cas d'un **gaz de bosons en une dimension avec interactions de contact**, le système reste exactement soluble : la solution repose sur une **superposition cohérente d'ondes planes symétrisées**, ajustées par les conditions d'interaction.

C'est l'idée fondamentale du **Bethe ansatz**, qui généralise la solution d'une particule libre sur un cercle à N particules **avec collisions élastiques**. On y retrouve des relations de quantification du type :

$$k_j L + \sum_{\substack{\ell=1 \\ \ell \neq j}}^N \theta(k_j - k_\ell) = 2\pi n_j, \quad (1.4)$$

où θ est une phase de diffusion et les $n_j \in \mathbb{Z}$.

On passe ainsi des conditions de périodicité simples à des **conditions de type Bethe**, qui encodent les effets des interactions sous forme de **conditions de compatibilité entre les moments**.

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 :

$$|k\rangle = \hat{a}_k^\dagger |\emptyset\rangle = \text{état avec une particule dans le mode } k,$$

où $|\emptyset\rangle$ désigne le vide quantique de Fock, défini par :

$$\forall k \in \mathbb{R}: \quad \hat{a}_k |\emptyset\rangle = 0, \quad \langle \emptyset | \emptyset \rangle = 1. \quad (1.5)$$

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'anticommulation (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 :

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = [\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_{k'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger] = \hat{\delta}_{k,k'}, \quad (1.6)$$

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.

$$|x\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(x)|\emptyset\rangle = \text{état avec une particule en } x, \quad (1.7)$$

et $|\emptyset\rangle$ est le vide quantique de Fock défini par :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \hat{\Psi}(x)|\emptyset\rangle = 0. \quad (1.8)$$

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

$$[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(y)] = [\hat{\Psi}^\dagger(x), \hat{\Psi}^\dagger(y)] = 0, \quad [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(y)] = \hat{\delta}(x - y), \quad (1.9)$$

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

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

$$|\{k_1, \dots, k_N\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{b}_{k_1}^\dagger \cdots \hat{b}_{k_N}^\dagger |\emptyset\rangle, \quad |\{x_1, \dots, x_N\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\Psi}^\dagger(x_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(x_N) |\emptyset\rangle, \quad (1.10)$$

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 :

$$\hat{b}_k^\dagger = \int dx \varphi_k(x) \hat{\Psi}^\dagger(x), \quad \hat{\Psi}^\dagger(x) = \sum_k \varphi_k^*(x) \hat{b}_k^\dagger. \quad (1.11)$$

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 :

$$|\{k_1, \dots, k_N\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int dx_1 \cdots dx_N \varphi_{\{k_a\}}(x_1, \dots, x_N) \hat{\Psi}^\dagger(x_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(x_N) |\emptyset\rangle, \quad (1.12)$$

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

$$\varphi_{\{k_a\}}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \emptyset | \hat{\Psi}(x_1) \cdots \hat{\Psi}(x_N) | \{k_1, \dots, k_N\} \rangle. \quad (1.13)$$

Opérateur.

Opérateur à un corps. 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 . (Par construction, l'opérateur \hat{F} commute

avec les projecteurs de symétrisation $\hat{\mathbf{S}}_N$ (bosons) et d'antisymétrisation $\hat{\mathbf{A}}_N$ (fermions). On peut montrer que la somme des projecteurs agissant sur chaque particule s'identifie à une combinaison d'opérateurs de création et d'annihilation : $\sum_{i=1}^N |i:\lambda\rangle \langle i:\nu| = \hat{\mathbf{a}}_\lambda^\dagger \hat{\mathbf{a}}_\nu$, (où $\hat{\mathbf{a}}_\lambda$ peut ici estre une notation générique désignant $\hat{\mathbf{b}}_\lambda$ pour les bosons, ou $\hat{\mathbf{c}}_\lambda$ pour les fermions).

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

$$\hat{\mathbf{F}} = \sum_{\lambda,\nu} f_{\lambda\nu} \hat{\mathbf{a}}_\lambda^\dagger \hat{\mathbf{a}}_\nu. \quad (1.14)$$

Exemples d'opérateurs à un corps. 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 : $\hat{\mathbf{F}} = \sum_k f_k \hat{\mathbf{a}}_k^\dagger \hat{\mathbf{a}}_k = \sum_k f_k \hat{n}_k$, où $\hat{n}_k = \hat{\mathbf{a}}_k^\dagger \hat{\mathbf{a}}_k$ est l'opérateur nombre de particules dans le mode k . On obtient ainsi une forme diagonale de $\hat{\mathbf{F}}$ en seconde quantification.

Un exemple immédiat est celui des particules libres. Si l'on diagonalise le problème à une particule selon : $\hat{\mathcal{H}}_1 |k\rangle = \varepsilon(k) |k\rangle$, alors l'énergie totale du système correspond ici uniquement à son énergie cinétique, et s'écrit :

$$\hat{\mathbf{K}} = \sum_k \varepsilon(k) \hat{\mathbf{a}}_k^\dagger \hat{\mathbf{a}}_k. \quad (1.15)$$

Et pour N particules, en écrivant l'état sous la forme (1.10), en utilisant les relations de commutation (1.6) et la définition de l'état de Fock (1.5), on trouve que $|\{k_1, \dots, k_N\}\rangle$ est un état propre de $\hat{\mathbf{K}}$ associé à l'énergie $\left(\sum_{i=1}^N \varepsilon(k_i)\right)$, c'est-à-dire :

$$\hat{\mathbf{K}} |\{k_1, \dots, k_N\}\rangle = \left(\sum_{i=1}^N \varepsilon(k_i) \right) |\{k_1, \dots, k_N\}\rangle. \quad (1.16)$$

Forme champ des opérateurs à un corps. Les opérateurs à plusieurs corps peuvent être exprimés de manière remarquable à l'aide des opérateurs de champ, d'une façon physiquement transparente qui rappelle les formules bien connues du cas à une particule.

La forme générale d'un opérateur à un corps s'écrit :

$$\hat{\mathbf{F}} = \int dx dx' \hat{\Psi}^\dagger(x) \langle x | \hat{\mathbf{f}} | x' \rangle \hat{\Psi}(x'). \quad (1.17)$$

Énergie cinétique totale. Pour des particules non relativistes, l'énergie cinétique élémentaire s'écrit $\hat{f} = \frac{\hbar^2 \hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$. À l'échelle du champ quantique, l'énergie cinétique totale prend la forme opératorielle :

$$\hat{\mathbf{K}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\partial}_x^2 \hat{\Psi}(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \int dx \hat{\partial}_x \hat{\Psi}^\dagger(x) \cdot \hat{\partial}_x \hat{\Psi}(x). \quad (1.18)$$

Le champ quantique $\hat{\Psi}(x)$ est relié aux opérateurs de moment $\hat{\mathbf{b}}_k$ par une transformation de Fourier. En injectant l'expression (1.11) dans (1.18), on retrouve la forme discrète (1.15), cette fois exprimée en termes des opérateurs $\hat{\mathbf{b}}_k$.

Lorsque cet Hamiltonien agit sur l'état de Fock à N particules $|\{k_1, \dots, k_N\}\rangle$, les règles de commutation (1.9) ainsi que la définition des états de Fock (1.8) impliquent (cf. Annexe ??) :

$$\hat{\mathbf{K}} |\{k_1, \dots, k_N\}\rangle = \int d^N z \hat{\mathcal{K}}_N \varphi_{\{k_a\}}(z_1, \dots, z_N) \hat{\Psi}(z_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle \quad (1.19)$$

avec :

$$\hat{\mathcal{K}}_N = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m},$$

où $\hat{\mathbf{p}}_i$ désigne l'opérateur impulsion de la $i^{\text{ème}}$ particule.

Opérateurs à deux corps Nous considérons à présent les termes d'interaction impliquant deux particules, $\hat{\mathbf{v}}$, dont les éléments de matrices sont donnés par $v_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle 1:\alpha; 2:\beta | \hat{\mathbf{v}} | 1:\gamma; 2:\delta \rangle$, où $|i:\gamma; j:\delta\rangle$ représente

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

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\delta \hat{a}_\gamma. \quad (1.20)$$

Cette forme est particulièrement utile pour le traitement des interactions dans l'espace de Fock, notamment en théorie des champs et en physique des gaz quantiques.

Expression générale d'un terme à deux corps. Un terme d'interaction à deux corps général peut s'écrire :

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 dx'_1 dx'_2 \langle 1:x_1, 2:x_2 | \hat{v} | 1:x'_1, 2:x'_2 \rangle \hat{\Psi}^\dagger(x_1) \hat{\Psi}^\dagger(x_2) \hat{\Psi}(x'_2) \hat{\Psi}(x'_1) \quad (1.21)$$

Interactions ponctuelles. Dans le cas d'une interaction ne dépendant que de la distance relative entre deux particules, cette expression se simplifie : $\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \hat{v}(x_i - x_j) = \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 v(x_1 - x_2) \hat{\Psi}^\dagger(x_1) \hat{\Psi}^\dagger(x_2) \hat{\Psi}(x_2) \hat{\Psi}(x_1)$ soit pour des interactions ponctuelles :

$$\hat{V} = \frac{g}{2} \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x) \quad (1.22)$$

et quand on l'applique à l'état $|\{k_1, \dots, k_N\}\rangle$, les règles de commutations (1.9) et la définition d'état de Fock (1.8) impliquent que (cf Annex ??)

$$\hat{V} |\{k_1, \dots, k_N\}\rangle = \int d^N z \hat{\mathcal{V}}_N \varphi_{\{k_a\}}(z_1, \dots, z_N) \hat{\Psi}(z_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle \quad (1.23)$$

avec $\hat{\mathcal{V}}_N = g \sum_{1 \leq i < j \leq N} \hat{\delta}(x_i - x_j)$ où g est la constante de couplage.

Expression de l'Hamiltonien. L'hamiltonien dans ce formalisme s'écrit en termes des opérateurs de champ, par exemple pour l'énergie cinétique et les interactions ponctuelles avec $\hbar = m = 1$:

$$\hat{H} = \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \left[-\frac{1}{2} \hat{\partial}_x^2 + \frac{g}{2} \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \right] \hat{\Psi}(x). \quad (1.24)$$

Quand on l'applique à l'état $|\{\theta_1, \dots, \theta_N\}\rangle$, avec θ_i homogène à des nombres d'onde ou à des vitesses , il vient que

$$\hat{H} |\{\theta_1, \dots, \theta_N\}\rangle = \int d^N z \hat{\mathcal{H}}_N \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) \hat{\Psi}(z_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle \quad (1.25)$$

avec $\hat{\mathcal{H}}_N = \hat{\mathcal{K}}_N + \hat{\mathcal{V}}_N$.

Ce formalisme est ainsi adapté pour décrire des condensats de Bose, des gaz quantiques, ou la création/annihilation de particules dans les champs quantiques.

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

$$i\hat{\partial}_t \hat{\Psi} = [\hat{\Psi}, \hat{H}] \quad (1.26)$$

ce qui, après évaluation explicite du commutateur (1.9), conduit à :

$$i\hat{\partial}_t \hat{\Psi} = -\frac{1}{2} \hat{\partial}_x^2 \hat{\Psi} + g \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi} \quad (1.27)$$

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.

Conclusion

La première quantification est la base indispensable qui permet de 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 créant ou détruisant ces particules, ouvrant ainsi la voie à la physique quantique des champs et à de nombreuses applications modernes.

1.1.2 Opérateurs nombre de particules et moment dans la formulation quantique du gaz de Lieb-Liniger

Dans cette section, nous nous intéressons aux opérateurs fondamentaux que sont le *nombre total de particules* \hat{Q} et le *moment total* $\hat{\mathbf{P}}$, dans le cadre du gaz de bosons unidimensionnel décrit par l'Hamiltonien de Lieb-Liniger. Après avoir introduit ces opérateurs dans le langage de la seconde quantification, nous montrons qu'ils sont *conservés* par la dynamique, et qu'ils admettent les *mêmes états propres* que l'Hamiltonien. Nous donnons ensuite leur expression dans la représentation à N particules, ainsi que la forme explicite de leurs valeurs propres en fonction des *rapidités* θ_a , illustrant la structure polynomiale typique des intégrales du mouvement dans les systèmes intégrables.

Définition en seconde quantification

Les opérateurs du nombre total de particules \hat{Q} et du moment total $\hat{\mathbf{P}}$ s'écrivent en seconde quantification comme suit :

$$\hat{Q} = \int \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) dx, \quad \hat{\mathbf{P}} = -\frac{i}{2} \int \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\partial}_x \hat{\Psi}(x) - \left[\hat{\partial}_x \hat{\Psi}^\dagger(x) \right] \hat{\Psi}(x) \right\} dx \quad (1.28)$$

Ces deux opérateurs sont *hermitiens*, et représentent des observables physiques fondamentales : le nombre de particules et la quantité de mouvement du système.

Conservation et commutation

Ces opérateurs commutent avec l'Hamiltonien $\hat{\mathbf{H}}$ du modèle de Lieb-Liniger :

$$[\hat{\mathbf{H}}, \hat{Q}] = 0, \quad [\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{P}}] = 0. \quad (1.29)$$

Ils constituent ainsi des intégrales du mouvement. Cette propriété est une manifestation de la symétrie translationnelle du système (pour $\hat{\mathbf{P}}$) 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} , $\hat{\mathbf{P}}$ et $\hat{\mathbf{H}}$:

$$\hat{Q} |\{\theta_a\}\rangle = N |\{\theta_a\}\rangle, \quad \hat{\mathbf{P}} |\{\theta_a\}\rangle = \left(\sum_{a=1}^N \theta_a \right) |\{\theta_a\}\rangle, \quad \hat{\mathbf{H}} |\{\theta_a\}\rangle = \left(\frac{1}{2} \sum_{a=1}^N \theta_a^2 \right) |\{\theta_a\}\rangle. \quad (1.30)$$

Autrement dit, les valeurs propres associées à ces trois opérateurs sont données par :

$$N = \sum_{a=1}^N \theta_a^0, \quad p = \sum_{a=1}^N \theta_a, \quad e = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^N \theta_a^2. \quad (1.31)$$

Cela illustre que les trois premières intégrales du mouvement du système — nombre, moment, énergie — peuvent être exprimées comme des *moments successifs* des rapidités.

Forme en première quantification

En utilisant la représentation en espace de configuration $\{z_a\} \equiv \{z_1, \dots, z_N\}$, les opérateurs $\hat{\mathbf{Q}}$ et $\hat{\mathbf{P}}$ agissent comme suit sur les fonctions d'onde $\varphi_{\{\theta_a\}}(\{z_a\})$:

$$\hat{\mathbf{Q}}|\{\theta_a\}\rangle = \sqrt{N!} \int d^N z \hat{\mathcal{N}} \varphi_{\{\theta_a\}}(\{z_a\}) |\{z_a\}\rangle, \quad \hat{\mathbf{P}}|\{\theta_a\}\rangle = \sqrt{N!} \int d^N z \hat{\mathcal{P}}_N \varphi_{\{\theta_a\}}(\{z_a\}) |\{z_a\}\rangle \quad (1.32)$$

où les opérateurs associés agissant sur les fonctions d'onde à N particules sont :

$$\hat{\mathcal{N}} = \sum_{k=1}^N 1 = N, \quad \hat{\mathcal{P}}_N = -i \sum_{k=1}^N k = -i \sum_{k=1}^N \hat{\partial}_{z_k} \quad (1.33)$$

Ces formes découlent directement des règles de commutation canonique (1.9) et de la définition des opérateurs en seconde quantification (1.8) (cf. annexes ??).

Conclusion

Ainsi, les opérateurs $\hat{\mathbf{Q}}$, $\hat{\mathbf{P}}$ et $\hat{\mathbf{H}}$ 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 0e, 1er et 2e moments des rapidités. Cette structure permet de généraliser la construction à une hiérarchie complète d'observables conservées, qui seront présentées au chapitre suivant.

1.1.3 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 quantiques 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 :

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = \hat{\mathcal{K}}_2 + \hat{\mathcal{V}}_2, \quad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{K}}_2 = -\frac{1}{2} \partial_{z_1}^2 - \frac{1}{2} \partial_{z_2}^2, \quad \text{et} \quad \hat{\mathcal{V}}_2 = g \delta(z_1 - z_2). \quad (1.34)$$

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 :

$$\varepsilon(\theta_1) + \varepsilon(\theta_2) = \frac{\theta_1^2}{2} + \frac{\theta_2^2}{2}. \quad (1.35)$$

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 devient : $\partial_{z_1}^2 + \partial_{z_2}^2 = \frac{1}{2} \partial_Z^2 + 2 \partial_Y^2$. L'Hamiltonien (1.34) se décompose alors en la somme de deux Hamiltoniens agissant respectivement sur Z et Y :

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = -\frac{1}{4} \partial_Z^2 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{rel}}, \quad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{H}}_{\text{rel}} = -\partial_Y^2 + g \delta(Y). \quad (1.36)$$

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

$$-\partial_Y^2 \tilde{\varphi}(Y) + g \delta(Y) \tilde{\varphi}(Y) = \tilde{\varepsilon} \tilde{\varphi}(Y), \quad (1.37)$$

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 que celles d'un particules de masse $\tilde{m} = \frac{1}{2}$. Le système étant composé de particules bosoniques, on cherche une solution symétrique que l'on écrit sous la forme :

$$\tilde{\varphi}(Y) = a e^{i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} + b e^{-i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} \propto \sin\left(\frac{1}{2}(\tilde{\theta}|Y| + \Phi)\right). \quad (1.38)$$

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

$$\Phi(\tilde{\theta}) = 2 \arctan\left(\frac{1}{i} \frac{a+b}{a-b}\right), \quad (1.39)$$

car $a \exp(ix) + b \exp(-ix) = 2\sqrt{ab} \sin(x + \arctan(-i(a+b)/(a-b)))$. 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 (1.38) dans l'équation relative (1.37), 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

$$\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}) = \frac{1}{2} \tilde{m} \tilde{\theta}^2 = \frac{1}{2} \times \frac{1}{2} \tilde{\theta}^2 = \frac{\tilde{\theta}^2}{4}. \quad (1.40)$$

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.

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 $\bar{\theta} = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}$ et $\varepsilon(\theta) = \theta^2/2$.

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 :

$$\Phi(\tilde{\theta}) = 2 \arctan(\tilde{\theta}/g) \in [-\pi, +\pi]. \quad (1.41)$$

Cette relation exprime l'impact de l'interaction de type delta sur le déphasage de la fonction d'onde liée. 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 presque absente entre les deux particules.

Phase de diffusion à deux corps. En combinant les équations (1.39) et (1.41) avec l'identité analytique valable pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \{\pm i\}$, $2 \arctan(z) = i \ln\left(\frac{1-iz}{1+iz}\right) \Leftrightarrow e^{2i \arctan(z)} = \frac{1+iz}{1-iz}$, on obtient que le rapport des amplitudes a et b de la fonction d'onde relative (1.38) définit la *phase de diffusion* $\Phi(\tilde{\theta}) = i \ln(-\frac{b}{a})$. On introduit alors la *matrice de diffusion* (ou facteur de diffusion)

$$S(\tilde{\theta}) \doteq e^{i\Phi(\tilde{\theta})} = -\frac{a}{b} = \frac{1+i\tilde{\theta}/g}{1-i\tilde{\theta}/g}. \quad (1.42)$$

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

Lien entre phase de diffusion et décalage temporel : interprétation semi-classique. (à revoir) Il a été souligné par Eisenbud (1948) et Wigner (1955) que la phase de diffusion peut être interprétée, de manière semi-classique, comme un *décalage temporel*. Esquissons brièvement l'argument de Wigner (1955). Tout d'abord, notons que, pour une particule unique, une approximation simple d'un paquet d'ondes peut être obtenue en superposant deux ondes planes avec des moments $\tilde{\theta}/2$ et $\tilde{\theta}/2 + \delta\tilde{\theta}$, respectivement :

$$\tilde{\varphi}_{\text{inc}}(Y) \propto e^{i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} + e^{i\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|}. \quad (1.43)$$

Cette superposition évolue dans le temps comme :

$$\tilde{\varphi}_{\text{inc}}(Y, t) \propto e^{i(\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|-t\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}))} + e^{i(\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|-t\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta}))}. \quad (1.44)$$

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 $\tilde{\theta} = 1/2\varepsilon'(\tilde{\theta})$. Selon les équations (1.38) et (??), l'état sortant de la diffusion correspondant serait :

$$\tilde{\varphi}_{\text{outc}}(Y, t) \propto -e^{i\Phi(\tilde{\theta})}e^{-i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} - e^{i\Phi(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})}e^{-i\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|}. \quad (1.45)$$

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 .

$$|Y| \simeq \tilde{\theta}t - 2\Delta(\tilde{\theta}) \quad (1.46)$$

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

$$\Delta(\tilde{\theta}) \doteq \frac{d\Phi}{d\theta}(\theta) = \frac{2g}{g^2 + \theta^2}. \quad (1.47)$$

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

$$z_1 = Z + \frac{Y}{2} \simeq \theta_1 t - \Delta(\theta_1 - \theta_2), \quad z_2 = Z - \frac{Y}{2} \simeq \theta_2 t + \Delta(\theta_1 - \theta_2), \quad (1.48)$$

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 (1.38)) 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 :

$$\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2) \propto \begin{cases} (\theta_2 - \theta_1 - ig)e^{iz_1\theta_1 + iz_2\theta_2} - (\theta_1 - \theta_2 - ig)e^{iz_1\theta_2 + iz_2\theta_1} & \text{si } z_1 < z_2 \\ (z_1 \leftrightarrow z_2) & \text{si } z_1 > z_2 \end{cases} \quad (1.49)$$

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 / matrice diffusion $e^{i\Phi(\tilde{\theta})}$ à deux corps (??), reste inchangé :

$$S(\theta_1 - \theta_2) \doteq e^{i\Phi(\theta_1 - \theta_2)} = \frac{\theta_1 - \theta_2 - ig}{\theta_2 - \theta_1 - ig}. \quad (1.50)$$

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 revoir).

Périodicité en z_2 . On impose une condition de périodicité sur la fonction d'onde obtenue par ansatz de Bethe (voir équation (1.49)) : $\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2 = L) = \varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2 = 0)$, 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 (1.50) pour $z_1 < z_2$:

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

on obtient une condition quantique 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

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

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

$$\theta_1 L + \Phi(\theta_1 - \theta_2) = 2\pi I_1, \quad \theta_2 L + \Phi(\theta_2 - \theta_1) = 2\pi I_2, \quad (1.51)$$

où $I_1, I_2 \in \mathbb{Z}$ sont les nombres quantiques entiers (caractère bosonique).

Périodicité sur z_1 . Le raisonnement symétrique conduit exactement aux mêmes égalités (1.51).

Les équations (1.51) 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.

1.2 Équation de Bethe et distribution de rapidité

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

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) :

$$\begin{aligned} \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \emptyset | \hat{\Psi}(z_1) \dots \hat{\Psi}(z_N) | \{\theta_a\} \rangle \\ &\propto \sum_{\sigma} (-1)^{|\sigma|} \left(\prod_{1 \leq a < b \leq N} (\theta_{\sigma(b)} - \theta_{\sigma(a)} - ig) \right) e^{i \sum_{j=1}^N z_j \theta_{\sigma(j)}}, \end{aligned} \quad (1.52)$$

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 c . 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 :

$$\varphi_{\{\theta_a\}}(x_1, \dots, x_{N-1}, L) = \varphi_{\{\theta_a\}}(0, x_1, \dots, x_{N-1}). \quad (1.53)$$

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.

1.2.3 Équations de Bethe exponentielles

En imposant les conditions de périodicité sur la fonction d'onde de type Bethe (1.52), on obtient que chaque moment θ_a doit satisfaire l'équation :

$$e^{i\theta_a L} \prod_{b \neq a} S(\theta_a - \theta_b) = (-1)^{N-1}, \quad a = 1, \dots, N, \quad (1.54)$$

où la matrice diffusion $S(\theta) = \frac{\theta - ig}{-\theta - ig} = e^{i\Phi(\theta)}$ est l'amplitude de diffusion à deux corps, et $\Phi(\theta) = 2 \arctan(\frac{\theta}{c})$ est la phase associée (??). Le signe $(-1)^{N-1}$ vient du fait que chaque permutation change la signature du déterminant dans la représentation de Gaudin.

1.2.4 Équations de Bethe logarithmiques

En prenant le logarithme du membre gauche et du membre droit de l'équation (1.54), on obtient :

$$L\theta_a + \sum_{b=1}^N \Phi(\theta_a - \theta_b) = 2\pi I_a, \quad a = 1, \dots, N, \quad (1.55)$$

où les $I_a \in \mathbb{Z}$ (ou $\mathbb{Z} + \frac{1}{2}$) sont des nombres quantiques entiers (ou demi-entiers). Dans la configuration d'état fondamental (ou de type "mer de Fermi"), ces nombres sont pris de manière symétrique autour de zéro :

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

Ce choix garantit une distribution uniforme des θ_a à l'état fondamental.

1.2.5 Interprétation physique

Les équations de Bethe (1.55) 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.

1.2.6 Thermodynamique du gaz de Lieb–Liniger à température nulle

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 :

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

où D 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 (1.55).

Dans la limite thermodynamique, les valeurs de θ_a deviennent quasi-continues, avec un espace-ment $\theta_{a+1} - \theta_a = \mathcal{O}(1/L)$, et se condensent dans un intervalle symétrique autour de zéro :

$$\theta_a \in [-K, K],$$

où K est le paramètre de Fermi (ou rapidité maximale), défini par $K = \theta_N$. En supposant l'ordre $I_a \geq I_b \Rightarrow \theta_a \geq \theta_b$, 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

$$2\pi\rho_s(\theta_a) = \frac{2\pi}{L} \lim_{\text{therm}} \frac{|I_{a+1} - I_a|}{|\theta_{a+1} - \theta_a|} = \frac{2\pi}{L} \frac{\partial I}{\partial \theta}(\theta_a),$$

où $I(\theta_a) = I_a$. L'application des équations de Bethe sous forme logarithmique conduit alors à

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

ce qui relie ρ_s à la fonction d'interaction Δ entre les rapidités.

Intéressons-nous maintenant à la *densité de particules dans l'espace des moments*, notée $\rho(\theta)$, définie par

$$\rho(\theta_a) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \cdot \frac{1}{\theta_{a+1} - \theta_a} > 0.$$

Dans l'état fondamental, toutes les positions disponibles dans l'intervalle $[-K, K]$ sont occupées. On a donc :

$$\rho(\theta) = \rho_s(\theta). \quad (1.56)$$

La quantité $L\rho(\theta)d\theta$ représente le nombre de rapidités dans la cellule infinitésimale $[\theta, \theta + d\theta]$, tandis que $N = L \int_{-K}^K \rho(\theta) d\theta$ 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 :

$$\frac{1}{L} \sum_{b=1}^N \Delta(\theta_a - \theta_b) \longrightarrow \int_{-K}^K \Delta(\theta_a - \theta) \rho(\theta) d\theta.$$

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

$$2\pi\rho_s(\theta) = 1 + \int_{-K}^K \Delta(\theta - \theta') \rho(\theta') d\theta', \quad (1.57)$$

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

$$\rho(\theta) - \int_{-K}^K \frac{\Delta(\theta - \theta')}{2\pi} \rho(\theta') d\theta' = \frac{1}{2\pi}. \quad (1.58)$$

1.2.7 Excitations élémentaires à température nulle

Chapitre 2

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

Contents

2.0.1	Notion d'état d'équilibre généralisé (GGE)	17
2.0.2	Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales	20
2.1	Thermodynamique de Bethe et relaxation	21
2.1.1	Limite thermodynamique	21
2.1.2	Statistique des macro-états : entropie de Yang-Yang	23
2.1.3	Équations intégrales de la TBA	26

Introduction générale

Dans les modèles quantiques intégrables, l'évolution vers l'équilibre, à partir d'un état initial arbitraire (et typiquement hors d'équilibre), ne conduit pas à une thermique de Gibbs classique. En effet, du fait de l'existence d'une infinité de charges conservées en involution, les systèmes intégrables n'exploront qu'une sous-partie contrainte de l'espace des états accessibles. Ils relaxent alors vers un état stationnaire décrit par une *Ensemble Thermodynamique Généralisé* (GGE), qui encode la conservation de toutes ces quantités.

Cette section pose les fondations nécessaires à la description de ces états stationnaires dans le cadre de la **thermodynamique de Bethe** (TBA), qui généralise l'analyse au-delà de l'état fondamental. Nous considérons ici un régime macroscopique à température (ou entropie) finie, correspondant à des états hautement excités du spectre, mais toujours décrits dans le formalisme intégrable exact.

Notre point de départ est la relation constitutive entre la densité de *quasi-particules* (ou rapidités) $\rho(\theta)$ et la densité d'états disponibles $\rho_s(\theta)$, qui encode le spectre accessible en présence d'interactions. Nous introduisons ensuite une opération clé de la TBA, appelée *habillage* (*dressing*), qui intervient systématiquement dans le calcul des observables physiques et permet de prendre en compte de manière non perturbative les effets des interactions. Cette construction sera illustrée dans le cadre du modèle intégrable de Lieb-Liniger, qui décrit un gaz unidimensionnel de bosons avec interaction delta répulsive.

Les outils développés ici seront fondamentaux pour formuler dans la section suivante le concept d'ensemble généralisé (GGE), et pour décrire la dynamique de relaxation des systèmes intégrables.

2.0.1 Notion d'état d'équilibre généralisé (GGE)

Introduction.

Configuration des états. On désigne par $\{\theta_a\} \equiv \{\theta_1, \dots, \theta_N\}$ la *configuration de rapidités* caractérisant un état propre à $N = N(\{\theta_a\})$ 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 (?), on a vu que l'état $|\{\theta_a\}\rangle$ associé à cette configuration est une fonction propre des observables nombre et moment et énergie (?). Ces observables sont diagonales dans la base des états propres :

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

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

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 :

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

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 $Z^{(\mathcal{S})} = \text{Tr}[\exp(-\sum_i \beta_i \hat{Q}_i^{(\mathcal{S})})]$ 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 $\langle \hat{Q}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}} = \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})} \hat{Q}_i^{(\mathcal{S})}]$.

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 $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}$, et non vers celles d'un Gibbs thermique ordinaire [?][?]. On comprend ainsi pourquoi la *thermalisation habituelle* (canonique ou microcanonique) échoue : seul l'ensemble de Gibbs généralisé peut intégrer toutes les contraintes locales.

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

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

distribution asymptotique des vitesses des atomes après une expansion dans le guide 1D ", et qu'elle peut être extraite par l'hydrodynamique généralisée [?].

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

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 $\langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} = \text{Tr}[|\{\theta_a\}\rangle\langle\{\theta_a\}| \hat{Q}_i^{(S)}] = \langle\{\theta_a\}|\hat{Q}_i^{(S)}|\{\theta_a\}\rangle$:

$$\hat{Q}_i^{(S)} |\{\theta_a\}\rangle = \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} |\{\theta_a\}\rangle. \quad (2.3)$$

Probabilité d'un état à rapidités fixées. On peut alors définir la probabilité d'occurrence d'un état $|\{\theta_a\}\rangle$:

$$\mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(S)} = \text{Tr} \left[\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)} |\{\theta_a\}\rangle\langle\{\theta_a\}| \right] = \langle\{\theta_a\}|\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}|\{\theta_a\}\rangle = \frac{1}{Z^{(S)}} \exp \left(- \sum_i \beta_i \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} \right). \quad (2.4)$$

Moyenne d'un charges conservées locales et dérivées de $Z^{(S)}$. On peut écrire la moyenne d'une observable comme une somme pondérée par cette probabilité, ou encore comme une dérivée de la fonction de partition :

$$\langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \sum_{\{\theta_a\}} \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}} \mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(S)} = - \frac{1}{Z^{(S)}} \frac{\partial Z^{(S)}}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_j \neq i} = - \frac{\partial \ln Z^{(S)}}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_j \neq i} \quad (2.5)$$

Par le même raisonnement la moyenne de $(\hat{Q}_i^{(S)})^n$ s'écrit :

$$\langle (\hat{Q}_i^{(S)})^n \rangle = \sum_{\{\theta_a\}} (\langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\{\theta_a\}})^n \mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(S)} = (-1)^n \frac{1}{Z^{(S)}} \frac{\partial^n Z^{(S)}}{(\partial \beta_i)^n} \Big|_{\beta_j \neq i}. \quad (2.6)$$

Moments d'ordre supérieur et fluctuations. Le premier et second moments permettent d'accéder à la variance de l'observable :

$$\begin{aligned} \Delta_{\hat{Q}_i^{(S)}}^2 &= \left\langle \left(\hat{Q}_i^{(S)} - \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} \right)^2 \right\rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} = \langle (\hat{Q}_i^{(S)})^2 \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}} - \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}}^2 \\ &= \frac{1}{Z^{(S)}} \frac{\partial^2 Z^{(S)}}{\partial \beta_i^2} \Big|_{\beta_j \neq i} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z^{(S)}}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_j \neq i} \right)^2 \\ &= \frac{\partial}{\partial \beta_i} \left(\frac{1}{Z^{(S)}} \frac{\partial Z^{(S)}}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_j \neq i} \right)_{\beta_j \neq i} \\ &= \frac{\partial^2 \ln Z^{(S)}}{\partial \beta_i^2} \Big|_{\beta_j \neq i} = - \frac{\partial \langle \hat{Q}_i^{(S)} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}}}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_j \neq i}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

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

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

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

$$\langle \hat{\mathbf{Q}} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z^{(\mathcal{S})}}{\partial \mu} \Big)_{T,\dots}, \quad \Delta_{\hat{\mathbf{Q}}}^2 = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln Z^{(\mathcal{S})}}{\partial \mu^2} \Big)_{T,\dots} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle \hat{\mathbf{Q}} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}}}{\partial \mu} \Big)_{T,\dots} \quad (2.8)$$

$$\langle \hat{\mathbf{H}} - \mu \hat{\mathbf{Q}} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}} = - \frac{\partial \ln Z^{(\mathcal{S})}}{\partial \beta} \Big)_{\mu,\dots}, \quad \Delta_{\hat{\mathbf{H}} - \mu \hat{\mathbf{Q}}}^2 = \frac{\partial^2 \ln Z^{(\mathcal{S})}}{\partial \beta^2} \Big)_{\mu,\dots} = - \frac{\partial \langle \hat{\mathbf{H}} - \mu \hat{\mathbf{Q}} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}}}{\partial \beta} \Big)_{\mu,\dots}. \quad (2.9)$$

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

$$\langle \hat{\mathbf{H}} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}} = \left[\frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \Big)_{T,\dots} - \frac{\partial}{\partial \beta} \Big)_{\mu,\dots} \right] \ln Z^{(\mathcal{S})}, \quad \Delta_{\hat{\mathbf{H}}}^2 = \left[\frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \Big)_{T,\dots} - \frac{\partial}{\partial \beta} \Big)_{\mu,\dots} \right]^2 \ln Z^{(\mathcal{S})}. \quad (2.10)$$

2.0.2 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 $\theta_{a=1}^N$, les charges conservées classiques — telles que le nombre de particules, l'impulsion ou l'énergie — s'écrivent comme des sommes de puissances des rapidités : $\langle \hat{\mathbf{Q}} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^0$, $\langle \hat{\mathbf{P}} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^1$, et $\langle \hat{\mathbf{H}} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^2$. (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 :

$$\hat{\mathbf{Q}}_i^{(\mathcal{S})} |\{\theta_a\}\rangle \propto \sum_a \theta_a^i |\{\theta_a\}\rangle. \quad (2.11)$$

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

Charges conservées généralisées. À toute fonction régulière $w : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ — dorénavant appelée *poids spectral*, ou *énergie généralisée* — on associe un opérateur-charge généralisé :

$$\hat{\mathbf{Q}}^{(\mathcal{S})}[w] |\{\theta_a\}\rangle = \sum_{a=1}^N w(\theta_a) |\{\theta_a\}\rangle. \quad (2.12)$$

Les choix particuliers $w(\theta) = 1$, $w(\theta) = \theta$ et $w(\theta) = \theta^2/2$ redonnent respectivement le nombre $\hat{\mathbf{Q}} = \hat{\mathbf{Q}}_0^{(\mathcal{S})} = \hat{\mathbf{Q}}^{(\mathcal{S})}[1]$, l'impulsion $\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{Q}}_1^{(\mathcal{S})} = \hat{\mathbf{Q}}^{(\mathcal{S})}[\theta]$ et l'Hamiltonien $\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{Q}}_0^{(\mathcal{S})} = \hat{\mathbf{Q}}^{(\mathcal{S})}[\theta^2/2]$.

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

Expression de la matrice densité généralisée. La matrice densité généralisée s'écrit sous la forme :

$$\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}[w] = \frac{e^{-\hat{\mathbf{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]}}{Z^{(\mathcal{S})}[w]}, \text{ avec } e^{-\hat{\mathbf{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]} = \sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)} |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}|, \quad (2.13)$$

et la fonction de partition $Z^{(\mathcal{S})}[w]$ est définie par : $Z^{(\mathcal{S})}[w] = \sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}$.

Probabilité associée à une configuration de rapidités. La probabilité d'occuper l'état $|\{\theta\}\rangle$ est donc

$$\mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(\mathcal{S})} = \text{Tr} \left[\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}[w] |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}| \right] = \langle \{\theta_a\} | \hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}[w] | \{\theta_a\} \rangle = Z^{(\mathcal{S})}[w]^{-1} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}. \quad (2.14)$$

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

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\text{GGE}} \doteq \text{Tr}(\hat{\mathcal{O}} \hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}[w]) = \frac{\text{Tr}(\hat{\mathcal{O}} e^{-\hat{\mathbf{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]})}{\text{Tr}(e^{-\hat{\mathbf{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]})} = \frac{\sum_{\{\theta_a\}} \langle \{\theta_a\} | \hat{\mathcal{O}} | \{\theta_a\} \rangle e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}}{\sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}} \quad (2.15)$$

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 (2.12)). Cette construction conduit naturellement à la matrice densité généralisée $\hat{\rho}_{GGE}^{(S)}[w] \propto e^{-\hat{\mathcal{Q}}^{(S)}[w]}$ (cf. équations (2.13)), et à la moyenne d'un opérateur local $\hat{\mathcal{O}}$ donnée par $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{GGE} = \text{Tr}(\hat{\mathcal{O}} \hat{\rho}_{GGE}^{(S)}[w])$ (cf. équations (2.15)). 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.

2.1 Thermodynamique de Bethe et relaxation

2.1.1 Limite thermodynamique

Observables locales dans la limite thermodynamique. 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 :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \{\theta_a\} | \hat{\mathcal{O}} | \{\theta_a\} \rangle = \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]}, \quad (2.16)$$

où $\lim_{\text{therm.}}$ est la limite thermodynamique ($N, L \rightarrow \infty$ avec $N/L \rightarrow \text{const.}$).

Dans un ensemble général (GGE), la valeur moyenne de l'observable (2.15) devient alors :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{GGE} = \frac{\sum_{\rho}^{\rho} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]} \Omega[\rho] e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}}{\sum_{\rho}^{\rho} \Omega[\rho] e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}}, \quad (2.17)$$

où $\Omega[\rho]$ désigne le nombre de micro-états compatibles avec la distribution de rapidité ρ .

Avant d'étudier la fonction $\Omega[\rho]$, examinons d'abord la transformation des équations de Bethe dans cette limite.

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 (1.56) et (1.58) ne sont plus valides (en particulier $\rho \neq \rho_s$). Les équations discrètes de Bethe (1.57) se condensent alors en une équation intégrale pour les densités de rapidité :

$$2\pi\rho_s = 1 + \Delta \star \rho, \quad (2.18)$$

où le symbole \star désigne la convolution : $[\Delta \star \rho](\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} d\theta' \Delta(\theta - \theta') \rho(\theta')$.

Opération de dressing.

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

$$f^{\text{dr}} = f + \left[\frac{\Delta}{2\pi} \star (\nu f^{\text{dr}}) \right] \quad (2.19)$$

où $\nu = \rho/\rho_s$ est le *facteur d'occupation*, et $\Delta/2\pi$ est le noyau de diffusion du modèle.

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 $f(\theta)$. Dans le modèle de Lieb–Liniger, cette opération permet de déterminer : l'énergie habillée $\varepsilon^{\text{dr}}(\theta)$, l'impulsion habillée $p^{\text{dr}}(\theta)$, les susceptibilités thermodynamiques (cf. section ??).

Susceptibilités thermodynamiques. Les susceptibilités thermodynamiques décrivent la réponse linéaire du système à une variation infinitésimale de paramètres thermodynamiques conjugués aux charges conservées. Pour un système intégrable, elles mesurent la sensibilité des valeurs moyennes $\langle Q_i \rangle$ des charges conservées Q_i par rapport aux potentiels thermodynamiques μ_j associés à ces charges :

$$\chi_{ij} = \frac{\partial \langle Q_i \rangle}{\partial \mu_j}. \quad (2.20)$$

Dans le cadre de la thermodynamique de Bethe, ces susceptibilités s'expriment à l'aide des fonctions habillées. Si $q_i(\theta)$ est la densité de charge Q_i portée par une quasi-particule de rapidité θ , alors la densité totale de charge est donnée par :

$$\langle Q_i \rangle = \int d\theta \rho(\theta) q_i^{\text{dr}}(\theta), \quad (2.21)$$

où $q_i^{\text{dr}}(\theta)$ est la charge habillée, solution de l'équation de dressing :

$$q_i^{\text{dr}}(\theta) = q_i(\theta) + \int \frac{d\theta'}{2\pi} \Delta(\theta - \theta') \nu(\theta') q_i^{\text{dr}}(\theta'). \quad (2.22)$$

Par différentiation par rapport aux μ_j , on obtient :

$$\chi_{ij} = \int d\theta \rho_s(\theta) \nu(\theta) q_i^{\text{dr}}(\theta) q_j^{\text{dr}}(\theta), \quad (2.23)$$

où $\rho_s(\theta)$ est la densité de sites disponibles, $\nu(\theta) = \rho(\theta)/\rho_s(\theta)$ est le facteur d'occupation, et $\Delta(\theta)$ est le noyau issu de la phase de diffusion du modèle considéré.

Ces susceptibilités interviennent dans la théorie hydrodynamique généralisée (GHD) comme coefficients de la métrique thermodynamique et des corrélations à longue distance. Elles permettent également d'exprimer les fluctuations thermiques et les coefficients de transport linéaire (formules de Kubo généralisées).

Dans le modèle de Lieb–Liniger à couplage $g > 0$, les quasi-particules sont caractérisées par leur rapidité θ (proportionnelle à l'impulsion).

Phase de diffusion et noyau : la phase de diffusion entre deux particules de rapidité θ et θ' est :

$$\phi(\theta - \theta') = 2 \arctan \left(\frac{\theta - \theta'}{g} \right),$$

ce qui donne, par dérivation, le noyau de Bethe :

$$\Delta(\theta) = \frac{2g}{\theta^2 + g^2}.$$

Charge de nombre de particules : la densité de charge associée au nombre total de particules est $q(\theta) = 1$. Sa version habillée $q^{\text{dr}} = 1^{\text{dr}}$ satisfait :

$$1^{\text{dr}}(\theta) = 1 + \int \frac{d\theta'}{2\pi} \Delta(\theta - \theta') \nu(\theta') 1^{\text{dr}}(\theta').$$

Susceptibilité de compressibilité : La susceptibilité associée à cette charge, notée χ_{NN} (compressibilité isotherme), est alors donnée par :

$$\chi_{NN} = \int d\theta \rho_s(\theta) \nu(\theta) [1^{\text{dr}}(\theta)]^2.$$

Cette quantité mesure la variation du nombre de particules à l'équilibre lorsqu'on change le potentiel chimique, et encode les effets d'interactions à tous les ordres dans la phase d'équilibre.

Pour la charge énergie, la densité associée est $q(\theta) = \epsilon(\theta)$, avec :

$$\epsilon(\theta) = \theta^2,$$

dans le modèle de Lieb–Liniger (masse $m = 1/2$). Sa version habillée est $\epsilon^{\text{dr}}(\theta)$, solution de :

$$\epsilon^{\text{dr}}(\theta) = \epsilon(\theta) + \int \frac{d\theta'}{2\pi} \Delta(\theta - \theta') \nu(\theta') \epsilon^{\text{dr}}(\theta').$$

La **capacité thermique** (susceptibilité χ_{EE}) s'écrit :

$$\chi_{EE} = \int d\theta \rho_s(\theta) \nu(\theta) [\epsilon^{\text{dr}}(\theta)]^2.$$

Cela mesure la variation de l'énergie en réponse à un changement de température — incluant les effets d'interaction via le dressing.

La densité d'impulsion est $q(\theta) = p(\theta)$, avec :

$$p(\theta) = \theta,$$

(à masse $m = 1/2$ dans le Lieb–Liniger). Le dressing p^{dr} obéit à :

$$p^{\text{dr}}(\theta) = p(\theta) + \int \frac{d\theta'}{2\pi} \Delta(\theta - \theta') \nu(\theta') p^{\text{dr}}(\theta').$$

La susceptibilité χ_{PP} (fluctuation de l'impulsion totale) vaut :

$$\chi_{PP} = \int d\theta \rho_s(\theta) \nu(\theta) [p^{\text{dr}}(\theta)]^2.$$

Cette quantité intervient dans la description hydrodynamique et les corrélations à grande échelle des systèmes intégrables.

Exemple : densité de sites En prenant $f(\theta) = 1$ dans l'équation (2.19), on obtient : $1^{\text{dr}} = 1 + \frac{\Delta}{2\pi} \star (\nu 1^{\text{dr}})$ soit directement :

$$2\pi\rho_s = 1^{\text{dr}}, \quad (2.24)$$

ce qui n'est autre que la relation constitutive (2.18).

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.

2.1.2 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 :

$$\rho_{\text{eq}} \doteq \langle \rho \rangle \quad \text{et son lien fonctionnel avec } w.$$

La réponse fut donnée dans les travaux pionniers de YANG & YANG (1969). Leur approche repose sur l'analyse de la **structure statistique des états propres** partageant la même distribution $\rho(\theta)$.

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

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

Plus précisément, dans l'expression de moyenne des opérateurs locaux (2.17), apparaît le facteur $\Omega[\rho]$, qui compte ces états propres. La détermination de $\Omega[\rho]$ (ou équivallemment 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.

Dénombrément 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

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

La densité de niveaux $\rho_s(\theta)$ tient compte du fait que les moments sont quantifiés de manière discrète, en raison des équations de Bethe (voir équation (??)).

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 :

$$\Omega(\theta_a) \approx \binom{M_a}{N_a} = \frac{[L\rho_s(\theta)\delta\theta]!}{[L\rho(\theta)\delta\theta]![L\rho_s(\theta) - L\rho(\theta)]\delta\theta!}. \quad (2.25)$$

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

$$n! \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}, \quad (2.26)$$

composé du fonction logarithmique, il vient cette équivalence :

$$\ln n! \underset{n \rightarrow \infty}{\rightarrow} n \ln n - \underbrace{n + \ln \sqrt{2\pi n}}_{o(n \ln n)}, \quad (2.27)$$

$$\underset{n \rightarrow \infty}{\sim} n \ln n \quad (2.28)$$

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

$$\ln \Omega(\theta) \underset{\substack{\rho \delta\theta \rightarrow \infty \\ \rho(\theta) \leq \rho_s(\theta)}}{\sim} L[\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta)\delta\theta. \quad (2.29)$$

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 :

$$\ln \Omega[\rho] = \sum_a^{\theta-\text{cellules}} \ln \Omega(\theta_a), \quad (2.30)$$

$$\approx L\mathcal{S}_{YY}[\rho], \quad (2.31)$$

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

$$\mathcal{S}_{YY}[\rho] \doteq \sum_a^{\theta-\text{cellules}} [\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta_a) \delta\theta. \quad (2.32)$$

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 définit par :

$$L\mathcal{W}(\{\theta_a\}) \doteq \sum_{a=1}^N w(\theta_a) \underset{\text{therm.}}{\sim} L\mathcal{W}[\rho] \doteq L \sum_a^{\theta-\text{cellules}} w(\theta_a) \rho(\theta_a) \delta\theta. \quad (2.33)$$

Moyenne des Observables locales dans la limite thermodynamique. Dans un ensemble général (GGE), la valeur moyenne de l'observable (2.17) devient :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{GGE} \approx \frac{\sum_{\rho} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]} e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}{\sum_{\rho} e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}, \quad (2.34)$$

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 :

$$\mathcal{S}_{YY}[\rho] = \int d\theta [\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta), \quad (2.35)$$

$$\mathcal{W}[\rho] = \int w(\theta) \rho(\theta) d\theta \quad (2.36)$$

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 (2.34) s'écrit comme une intégrale fonctionnelle/de chemin :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{GGE} = \frac{\int \mathcal{D}\rho e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]}}{\int \mathcal{D}\rho e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}. \quad (2.37)$$

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.

2.1.3 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 (2.37). Il s'agit de la densité de rapidité la plus probable, solution d'un problème de maximisation. On obtient à l'ordre principal

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{GGE} \approx \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho_{eq}]} . \quad (2.38)$$

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.

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

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

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

$$\frac{\delta\mathcal{S}_{YY}}{\delta\rho} \Big|_{\rho=\rho_{eq}} = \frac{\delta\mathcal{W}}{\delta\rho} \Big|_{\rho=\rho_{eq}} . \quad (2.39)$$

Équation intégrale de la TBA. La condition de stationnarité au point selle $\rho = \rho_{eq}$ (2.39) implique :

$$\frac{\delta\mathcal{S}_{YY}}{\delta\rho(\theta)} \Big|_{\rho_{eq}} = \frac{\delta\mathcal{W}}{\delta\rho(\theta)} \Big|_{\rho_{eq}} \doteq w(\theta), \quad (2.40)$$

En utilisant l'expression explicite de l'entropie de Yang–Yang (2.35), on obtient l'identité fonctionnelle

$$w = \ln(\nu_{eq}^{-1} - 1) - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 - \nu_{eq}). \quad (2.41)$$

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

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

$$\beta\epsilon = \ln(\nu_{eq}^{-1} - 1), \quad \nu_{eq} = \frac{1}{1 + e^{\beta\epsilon}}. \quad (2.42)$$

En réinjectant (2.42) dans (2.41) on obtient l'équation intégrale canonique de la thermodynamique de Bethe :

$$\beta\epsilon = w - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 + e^{-\beta\epsilon}). \quad (2.43)$$

Les relations (2.42)–(2.43) 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 (2.38).

Résolution numérique de l'équation TBA. On se place à l'équilibre canonique, caractérisé par la température T et le potentiel chimique μ . Dans ce cadre, le poids spectral vaut

$$w(\theta) = \beta [\varepsilon(\theta) - \mu], \quad \beta = \frac{1}{T} (k_B = 1), \quad \varepsilon(\theta) = \frac{\theta^2}{2} (m = 1). \quad (2.44)$$

En injectant (2.44) dans l'équation intégrale pour lapseudo-énergie (2.43), on obtient l'équation non linéaire :

$$\beta\epsilon = \beta(\varepsilon - \mu) - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 + e^{-\beta\epsilon}),$$

Cette équation définit un opérateur contractant sur l'espace des fonctions $\varepsilon(\theta)$; 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 (2.45) est non linéaire; pour la résoudre numériquement, on utilise une méthode itérative de type Picard. On initialise $\epsilon_0 = \varepsilon - \mu$, puis on construit une suite de fonctions ε_n définie par

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

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

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 (2.42), 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 (2.24), rappelée ici pour mémoire : $2\pi\rho_{s,eq} = 1_{[\nu_{eq}]}^{\text{dr}}$.

L'opérateur de dressing (2.19) étant linéaire, il se résout numériquement sous la forme :

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

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

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

Ainsi, pour tout couple (T, μ) , l'algorithme fournit la pseudo-énergie ϵ , le facteur d'occupation ν_{eq} et la distribution de rapidité ρ_{eq} à l'équilibre thermique, prêts à être utilisés pour le calcul des observables.

Pour w quelconque, l'algorithme est identique.

Chapitre 3

Dynamique hors-équilibre et hydrodynamique généralisée

Contents

3.1 Hydrodynamique et régimes asymptotiques	29
3.1.1 Hydrodynamique classique des systèmes chaotiques	29
3.1.2 Hydrodynamique des systèmes intégrables et distribution de rapidité	29
3.1.3 Équation d'hydrodynamique généralisée (GHD)	29

3.1 Hydrodynamique et régimes asymptotiques

- 3.1.1 Hydrodynamique classique des systèmes chaotiques
- 3.1.2 Hydrodynamique des systèmes intégrables et distribution de rapidité
- 3.1.3 Équation d'hydrodynamique généralisée (GHD)

Chapitre 4

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

Contents

4.1	Fluctuation-réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés	32
4.1.1	Cadre général : GGE, observables et dérivées fonctionnelles	32
4.1.2	Corrélations spectrales et susceptibilité	34
4.1.3	Vérification numérique : susceptibilité vs corrélation spectrale	34
4.2	Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilités	35
4.2.1	Susceptibilités spectrales et structure variationnelle de l'entropie	35
4.2.2	Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique	36
4.2.3	Expression de la Hessienne	37
4.2.4	Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne	38
4.2.5	Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle	38
4.3	Lien entre dérivée fonctionnelle et réponse linéaire aux facteurs de Lagrange	39
4.3.1	Réponse linéaire des charges : dérivées fonctionnelles et projections	39
4.3.2	Vérification numérique thermique : énergie et nombre de particules	40

Introduction

(C'est un rappel ... mais on peu enlever) Considérons un système intégrable unidimensionnel, homogène, de longueur L . Comme dans le chapitre (2), faisons l'hypothèse que sa relaxation est un état stationnaire décrite par un *Generalized Gibbs Ensemble* (GGE). Dans la limite thermodynamique la moyenne d'une observable locale $\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}[w]}$ que pour plus de clairetais , dans les calcule future je noterais $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_w$ se formule alors comme une intégrale fonctionnelle sur les distributions de rapidité [1] :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}[w]} = \frac{\int \mathcal{D}\rho e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]}}{\int \mathcal{D}\rho e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}, \quad (4.1)$$

avec $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]}$ la valeur de l'observable dans un état propre caractérisé par la distribution de rapidité ρ , \mathcal{S}_{YY} l'entropie de Yang-Yang (2.35) et \mathcal{W} l'énergie généralisé par unité de longueur (2.36).

Dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$, cette moyenne fonctionnelle (4.1) sur tous les profils de rapidité ρ , avec un poids $\propto e^{(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}$. Dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$, cette intégrale est dominée par la configuration ρ_{eq} qui maximise le poids exponentiel, c'est-à-dire la distribution de rapidité la plus probable. Ainsi, la moyenne de l'observable s'écrit au premier ordre de la méthode du point selle :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}[w]} \approx \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho_{eq}]} \quad (4.2)$$

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

Toutefois, la seule connaissance de la distribution de rapidité moyenne ρ_{eq} ne permet pas, à elle seule, de confirmer la validité du GGE. En effet, plusieurs ensembles statistiques peuvent mener à une même valeur moyenne de $\rho(\theta)$. Pour lever cette ambiguïté, il est nécessaire d'étudier les **fluctuations** autour de la distribution typique, notées $\delta\rho$, définies par : $\rho = \rho_{\text{eq}} + \delta\rho$. Cela nécessite de pousser le développement fonctionnel de la *fonction thermodynamique effective* ($\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}[\rho]$) 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 à lire plus en détails mais voilà 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 [2]. 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 [3, 4].

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

Concrètement, cela consiste à analyser la dispersion des vitesses (ou rapidités) sur plusieurs répétitions expérimentales d'un même quench. Si la GGE décrit correctement l'état stationnaire, la variance et les corrélations des fluctuations de $\rho(\theta)$ devraient être en accord avec les prédictions du formalisme fluctuationnel issu de l'entropie $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(\mathcal{S})}$, cf. (2.2).

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 [5], 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. [2], 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 [3], ou de Caux et Konik [4], 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 [2].

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 régressant $\delta\rho$.

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

4.1.1 Cadre général : GGE, observables et dérivées fonctionnelles

Considérons un système intégrable dans un état d'équilibre généralisé (GGE). Comme nous l'avons vu au chapitre (2), un tel état est décrit par une matrice densité de la forme :

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

où $\hat{\mathbf{Q}}[w]$ est une charge généralisée déterminée par le poids/potentiel spectral $w(\theta)$.

Nous avons vu que l'espérance d'une charge généralisée $\hat{\mathbf{Q}}[f_1]$ dans cet état, notée au chapitre (2) $\langle \hat{\mathbf{Q}}^{(S)}[f_1] \rangle_{\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}[w]}$, peut être simplifiée, dans ce chapitre, en :

$$\langle \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \rangle_w = - \left. \frac{\delta \ln Z[w]}{\delta f_1} \right)_w = \text{Tr} \left[\hat{\rho}_{\text{GGE}}[w] \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \right] = \frac{1}{Z[w]} \text{Tr} \left[e^{-\hat{\mathbf{Q}}[w]} \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \right].$$

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

La dérivée fonctionnelle de l'espérance de $\hat{\mathbf{Q}}[f_1]$ par rapport à une autre fonction test f_2 , représentant un potentiel conjugué, donne la réponse linéaire croisée :

$$\chi_w[f_1, f_2] \doteq \left. \frac{\delta^2 \ln Z[w]}{\delta f_1 \delta f_2} \right)_w = - \left. \frac{\delta \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \rangle}{\delta f_2} \right)_w = C_w[f_1, f_2],$$

avec le fonction corrélation à deux points :

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

Autrement dit, la dérivée fonctionnelle seconde du logarithme de la fonction de partition fournit la covariance des charges $\hat{\mathbf{Q}}[f_1]$ et $\hat{\mathbf{Q}}[f_2]$, illustrant le principe de fluctuation-réponse dans ce contexte diagonal.

Démonstration. Pour établir le lien entre réponse linéaire et fluctuations, nous allons partir de l'expression intégrale des charges généralisées, puis montrer que la susceptibilité associée correspond bien à la fonction de corrélation des fluctuations de densité de rapidité.

Charge généralisé sous forme intégrale. Pour le démontrer on écrit la charge généralisé sous forme intégrale :

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

où $\hat{\rho}(\theta)$ est l'opérateur densité spectral , agissant comme : $\hat{\rho}(\theta) |\{\theta_a\}\rangle = \frac{1}{L} \sum \delta(\theta - \theta_a) |\{\theta_a\}\rangle$.

Dérivée fonctionnelle. On dérive cette expression par rapport à w_2 . En utilisant la dérivée d'un rapport : $\left. \frac{\delta}{\delta f_2} \left(\frac{A[w]}{Z[w]} \right) \right|_w = \frac{1}{Z[w]} \left. \frac{\delta A[w]}{\delta f_2} \right|_w - \frac{A[w]}{Z[w]^2} \left. \frac{\delta Z[w]}{\delta f_2} \right|_w$, avec $A[w] \equiv \text{Tr}[e^{-\hat{\mathbf{Q}}[w]} \hat{\mathbf{Q}}[f_1]]$, on obtient :

$$\left. \frac{\delta \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \rangle_w}{\delta f_2} \right)_w = \frac{1}{Z[w]} \frac{\delta A[w]}{\delta f_2} - \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \rangle_w \cdot \frac{1}{Z[w]} \frac{\delta Z[w]}{\delta f_2}.$$

Dérivées explicites. Utilisons la propriété démontrée précédemment : $\frac{\delta \hat{\mathbf{Q}}[w]}{\delta f_2} = \hat{\mathbf{Q}}[f_2]$. En notant que la dérivée d'une exponentielle diagonale est simple : $\frac{\delta}{\delta f_2} e^{-\hat{\mathbf{Q}}[w]} = -\hat{\mathbf{Q}}[f_2] e^{-\hat{\mathbf{Q}}[w]}$, on obtient :

$$\frac{\delta A[w]}{\delta f_2} = -\text{Tr} \left[\hat{\mathbf{Q}}[f_2] e^{-\hat{\mathbf{Q}}[w]} \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \right], \quad \frac{\delta Z[w]}{\delta f_2} = -\text{Tr} \left[\hat{\mathbf{Q}}[f_2] e^{-\hat{\mathbf{Q}}[w]} \right].$$

Regroupement. En regroupant les termes, on trouve :

$$\begin{aligned} \chi_w[f_1, f_2] &\doteq - \left. \frac{\delta \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \rangle_w}{\delta f_2} \right)_w \\ &= \frac{1}{Z[w]} \text{Tr} \left[\hat{\mathbf{Q}}[w_2] e^{-\hat{\mathbf{Q}}[w]} \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \right] - \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \rangle_w \cdot \frac{1}{Z[w]} \text{Tr} \left[\hat{\mathbf{Q}}[f_2] e^{-\hat{\mathbf{Q}}[w]} \right] \\ &= \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_2] \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \rangle_w - \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \rangle_w \langle \hat{\mathbf{Q}}[f_2] \rangle_w. \end{aligned}$$

Conclusion. Dans un état diagonal tel que le GGE, la susceptibilité est égale à la covariance entre charges généralisées, illustrant le principe de *fluctuation-réponse*. La matrice $\chi_w[f_1, f_2]$ s'interprète donc comme la covariance de la densité spectrale projetée sur les fonctions test f_1 et f_2 . Un cas particulier d'intérêt est la susceptibilité d'une seule charge :

$$\chi_w[f] \equiv \chi_w[f, f] = \text{Var}_w(\hat{\mathbf{Q}}[f]) = \langle \hat{\mathbf{Q}}[f]^2 \rangle_w - \langle \hat{\mathbf{Q}}[f] \rangle_w^2 = L^2 \iint d\theta d\theta' f(\theta) C_w(\theta, \theta') f(\theta').$$

4.1.2 Corrélations spectrales et susceptibilité

La susceptibilité fonctionnelle peut s'exprimer, dans la base des fonctions test, comme une forme bilinéaire projetée sur la fonction de corrélation spectrale :

$$\chi_w[f_1, f_2] = C_w[f_1, f_2] = L^2 \iint d\theta d\theta' f_1(\theta) C_w(\theta, \theta') f_2(\theta'),$$

où la fonction de corrélation spectrale $C_w(\theta, \theta')$ est définie comme la covariance des fluctuations de densité spectrale :

$$C_w(\theta, \theta') \doteq \langle \delta \hat{\rho}(\theta) \delta \hat{\rho}(\theta') \rangle_w = \langle \hat{\rho}(\theta) \hat{\rho}(\theta') \rangle_w - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w \langle \hat{\rho}(\theta') \rangle_w.$$

Par ailleurs, l'espérance de la densité spectrale s'obtient comme une dérivée fonctionnelle du logarithme de la fonction de partition :

$$\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w = -\frac{1}{L} \frac{\delta \ln Z[w]}{\delta w(\theta)},$$

et la susceptibilité spectrale, définie comme la réponse de $\langle \rho(\theta) \rangle_w$ à une variation de $w(\theta')$, s'écrit :

$$\chi_w(\theta, \theta') = \frac{1}{L^2} \frac{\delta^2 \ln Z[w]}{\delta w(\theta) \delta w(\theta')} = -\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\delta w(\theta')}.$$

Ainsi, dans l'état diagonal $\hat{\rho}_{\text{GGE}}[w]$, la susceptibilité spectrale coïncide avec la fonction de corrélation $C_w(\theta, \theta')$, illustrant le principe de *fluctuation-réponse*.

4.1.3 Vérification numérique : susceptibilité vs corrélation spectrale

Dans cette section, nous confrontons les deux expressions de la susceptibilité spectrale $\chi_w(\theta, \theta')$:

- d'une part, son interprétation comme covariance des fluctuations de la densité spectrale : $C_w(\theta, \theta')$,
- d'autre part, son expression comme dérivée fonctionnelle seconde du logarithme de la fonction de partition : $\chi_w(\theta, \theta') = -\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\delta w(\theta')}$.

L'objectif est de vérifier numériquement l'identité :

$$\chi_w(\theta, \theta') = C_w(\theta, \theta') \quad (\text{principe de fluctuation-réponse}),$$

en utilisant un algorithme de Monte Carlo basé sur les états propres du modèle de Lieb-Liniger.

Méthode numérique : on fixe un poids/potentiel spectral , par exemple quadratique

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

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

Les états propres du gaz sont obtenus par la résolution des équations de Bethe

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

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

À chaque étape du Monte Carlo :

1. on propose une nouvelle configuration $\{I_j\}$,
2. on résout les équations de Bethe pour obtenir $\{\theta_j\}$,

3. on accepte ou rejette la configuration selon le critère de Metropolis basé sur l'énergie $\sum w(\theta_j)$.

On enregistre à chaque étape la densité spectrale empirique :

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

en binant sur une grille $\{\theta_i\}$. Cela permet de construire numériquement :

- la moyenne $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$,
- la covariance spectrale $C_w(\theta, \theta')$.

Calcul numérique de $\chi_w(\theta, \theta')$ par dérivée fonctionnelle. Pour obtenir $\chi_w(\theta, \theta')$ comme dérivée de $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$ par rapport à $w(\theta')$, on procède de la manière suivante :

- on perturbe localement le poids/potentiel spectral $w(\theta) \rightarrow w(\theta) + \varepsilon \delta_{\theta'}(\theta)$,
- on relance le Monte Carlo avec ce nouveau potentiel pour obtenir $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_{w+\varepsilon \delta_{\theta'}}$,
- on approxime la dérivée par différences finies :

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

Comparaison numérique. On obtient ainsi deux matrices de taille `nbins` × `nbins` :

- la matrice de corrélation empirique $C_w(\theta, \theta')$,
- la matrice de susceptibilité $\chi_w(\theta, \theta')$ calculée par dérivée fonctionnelle.

On peut alors visualiser et comparer ces deux objets pour tester numériquement la validité du principe de fluctuation-réponse dans le cadre du GGE.

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

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

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

4.2 Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilités

4.2.1 Susceptibilités spectrales et structure variationnelle de l'entropie

Dans l'approximation thermodynamique, la moyenne de l'opérateur de densité de rapidité $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle$ est remplacé par sa valeur moyenne macroscopique $\rho_{\text{eq}}(\theta)$ (ie $\hat{\rho}(\theta) \rightarrow \rho(\theta)$), représentant la densité continue de quasi-particules dans l'état 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 d'une charge généralisée fixée. Le poids spectral w est fixé. On a vu dans les chapitre (2) que la condition d'équilibre s'écrit alors : $\left. \frac{\delta \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta)} \right|_{\rho=\rho_{\text{eq}}} = \left. \frac{\delta \mathcal{W}[\rho]}{\delta \rho(\theta)} \right|_{\rho=\rho_{\text{eq}}} = w(\theta)$.

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 :

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

où $\mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{YY})}$ est l'opérateur (généralement 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 :

$$\chi_w(\theta, \theta') \doteq -\frac{1}{L} \frac{\delta \rho_{\text{eq}}(\theta)}{\delta w(\theta')} = \left(L \mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{YY})} \right)^{-1}(\theta, \theta').$$

4.2.2 Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique

Une autre approche pour accéder aux fluctuations de la densité spectrale $\rho(\theta)$ 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 :

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

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

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

$$\begin{aligned} \langle \delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta') \rangle &= \frac{\int \mathcal{D}\delta\rho \delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta') \exp \left[-\frac{L}{2} \iint d\theta_1 d\theta_2 \delta \rho(\theta_1) \mathcal{H}(\theta_1, \theta_2) \delta \rho(\theta_2) \right]}{\int \mathcal{D}\delta\rho \exp \left[-\frac{L}{2} \iint d\theta_1 d\theta_2 \delta \rho(\theta_1) \mathcal{H}(\theta_1, \theta_2) \delta \rho(\theta_2) \right]}, \\ &= \frac{1}{L} \mathcal{H}^{-1}(\theta, \theta'), \end{aligned} \quad (4.3)$$

confirmant ainsi que la matrice de susceptibilité spectrale $\chi(\theta, \theta')$ 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 :

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

où

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

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

$$(\mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{H})(\theta, \theta') = (\mathcal{H} \cdot \mathcal{H}^{-1})(\theta, \theta') = \int d\theta'' \mathcal{H}(\theta, \theta'') \mathcal{H}^{-1}(\theta'', \theta') = \delta(\theta - \theta'), \quad (4.4)$$

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 (2.36). 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 (2.35) est donnée par :

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

où $\rho_s(\theta)$ désigne la densité d'états accessibles (ou densité totale) liée à ρ par les équations de Bethe.

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.

Interprétation. La matrice $\chi(\theta, \theta')$ possède plusieurs interprétations équivalentes :

- Elle mesure la réponse linéaire de la densité spectrale à une variation du potentiel conjugué :

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

- Dans un état diagonal (comme le GGE), elle coïncide avec la matrice de corrélation, selon le principe fluctuation-réponse :

$$\chi_w(\theta, \theta') = \langle \delta \hat{\rho}(\theta) \delta \hat{\rho}(\theta') \rangle_w$$

- Dans la limite thermodynamique, où $\hat{\rho}(\theta) \rightarrow \rho(\theta)$, on peut omettre les chapeaux :

$$\chi_w(\theta, \theta') = \langle \delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta') \rangle_w.$$

Résumé. L'équation variationnelle d'équilibre : $\frac{\delta S_{YY}[\rho_{eq}]}{\delta \rho(\theta)} \Big|_{\rho=\rho_{eq}} = w(\theta)$ implique, par différentiation fonctionnelle et inversion de l'opérateur $\mathcal{H}^{(S_{YY})}$, que :

$$\chi_w(\theta, \theta') = -\frac{1}{L} \frac{\delta \rho_{eq}(\theta)}{\delta w(\theta')} = \langle \delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta') \rangle_w = -\left(L \mathcal{H}^{(S_{YY})}\right)^{-1}(\theta, \theta').$$

En résumé, dans la limite thermodynamique, la matrice de susceptibilité spectrale $\chi(\theta, \theta')$ encode à la fois :

- la réponse linéaire de la densité d'équilibre à une variation du poids spectral $w(\theta)$;
- la covariance (ou corrélation) entre densités spectrales ;
- la courbure du potentiel thermodynamique générateur du GGE.

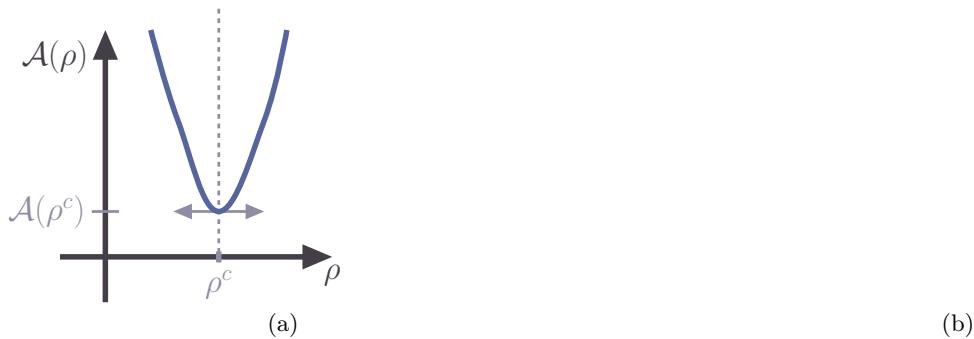


FIGURE 4.2

4.2.3 Expression de la Hessienne

La Hessienne $\mathcal{H}^{(S_{YY})}$ se décompose alors

$$\mathcal{H}^{(S_{YY})}(\theta, \theta') = \mathcal{D}(\theta, \theta') + \mathcal{V}(\theta, \theta') \quad (4.5)$$

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,

$$\mathcal{D}(\theta, \theta') = \left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta) \nu_{eq}(\theta) (1 - \nu_{eq}(\theta))} \right) \delta(\theta, \theta') \quad (4.6)$$

avec une partie symétrique régulière

$$\mathcal{V}(\theta, \theta') = - \left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta) (1 - \nu_{eq}(\theta))} + \frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta') (1 - \nu_{eq}(\theta'))} \right) \frac{\Delta(\theta - \theta')}{2\pi} \quad (4.7)$$

$$+ \int d\theta'' \frac{\nu_{eq}(\theta'')}{\rho_{s,eq}(\theta'') (1 - \nu_{eq}(\theta''))} \frac{\Delta(\theta - \theta'')}{2\pi} \frac{\Delta(\theta'' - \theta')}{2\pi} \quad (4.8)$$

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

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

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

$$\mathcal{H}^{-1}(\theta, \theta') = \mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta') + \mathcal{B}(\theta, \theta') \quad (4.9)$$

avec une partie diagonale irrégulière

$$\mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta') = (\rho_{s,eq}(\theta)\nu_{eq}(\theta)(1 - \nu_{eq}(\theta)))\delta(\theta, \theta') \quad (4.10)$$

tel que

$$(\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{D})(\theta, \theta') = (\mathcal{D} \cdot \mathcal{D}^{-1})(\theta, \theta') = \int d\theta'' \mathcal{D}(\theta, \theta'') \mathcal{D}^{-1}(\theta'', \theta') = \delta(\theta - \theta'), \quad (4.11)$$

avec une partie symétrique régulière \mathcal{B} .

Les équations (4.5), (4.9), (4.4) et (4.11), il vient que cette série d'implication

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

Du fait que tous ces fonctions (\mathcal{H} , \mathcal{D} , \mathcal{V} et inverse) soit symétriques alors l'équation ci-dessus ne forme qu'une et \mathcal{B} étant donc symétrique. Donc en utilisant (4.8) et (4.10)

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

où $(f \star g)(x)$ désigne la convolution $\int f(x-t)g(t)dt$. En injectant cette dernière équation et (4.9), dans (4.3), 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 $\rho(\theta)$.

4.2.5 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 $\rho_{eq}(\theta)$, la densité d'états $\rho_{s,eq}(\theta)$, et la fonction de remplissage $\nu_{eq}(\theta) = \rho_{eq}(\theta)/\rho_{s,eq}(\theta)$.

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 discréte pour obtenir la matrice

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

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

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

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

4.3.1 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 :

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

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

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

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

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

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

Ce résultat relie :

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

4.3.2 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 $f_{\hat{Q}}(\theta) = 1$, ce qui définit la charge associée :

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

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 :

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

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

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

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

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

On en déduit la susceptibilité thermique :

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

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. 4.4a).

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. 4.4b).

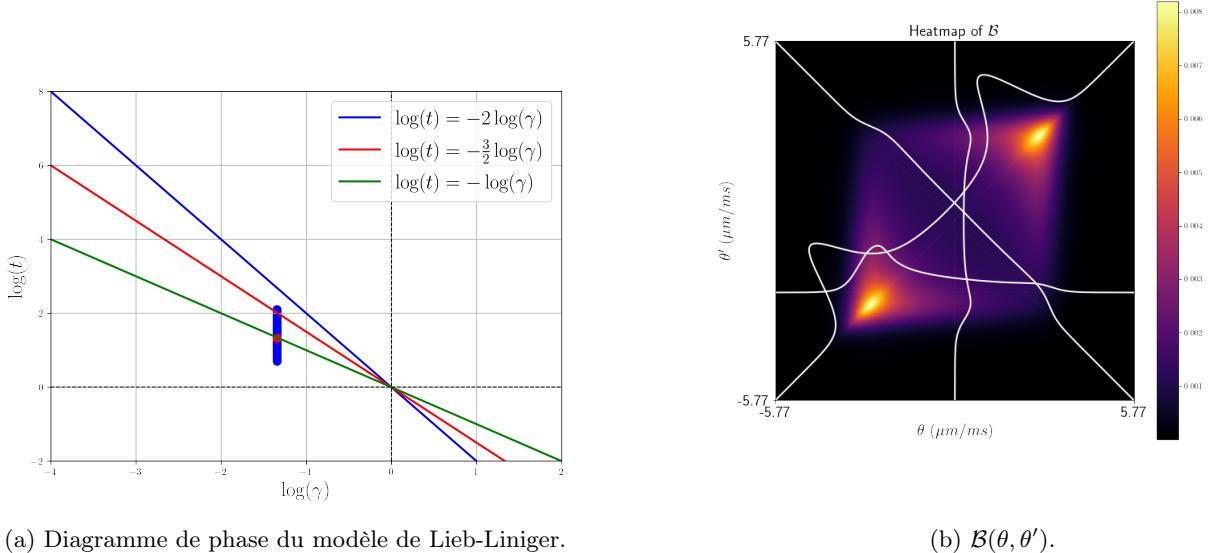


FIGURE 4.4 – (a) Diagramme de phase du modèle de Lieb-Liniger à l'équilibre thermique. Différents régimes asymptotiques sont séparés par des transitions progressives. Les points bleus représentent les fluctuations calculées numériquement pour différentes températures. Les coordonnées sont données par $\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 n}$ et $t = \frac{k_B T}{mg^2/\hbar^2}$. (b) Représentation en niveaux de couleur de la partie régulière \mathcal{B} des fluctuations $\delta\rho$ pour $T = 60$ nK et $\mu = 27$ nK (point rouge dans (a)) (courbes blanches à enlevé).

Comparaison avec les dérivées thermodynamiques. Les résultats obtenus à partir de l'analyse quadratique de l'action (fluctuations de ρ) sont comparés aux fluctuations extraites directement par différentiation des observables thermodynamiques $\langle \hat{Q} \rangle_w$ et $\langle \hat{H} \rangle_w$. Ces comparaisons sont présentées dans la Fig. 4.5 et révèlent une excellente concordance.

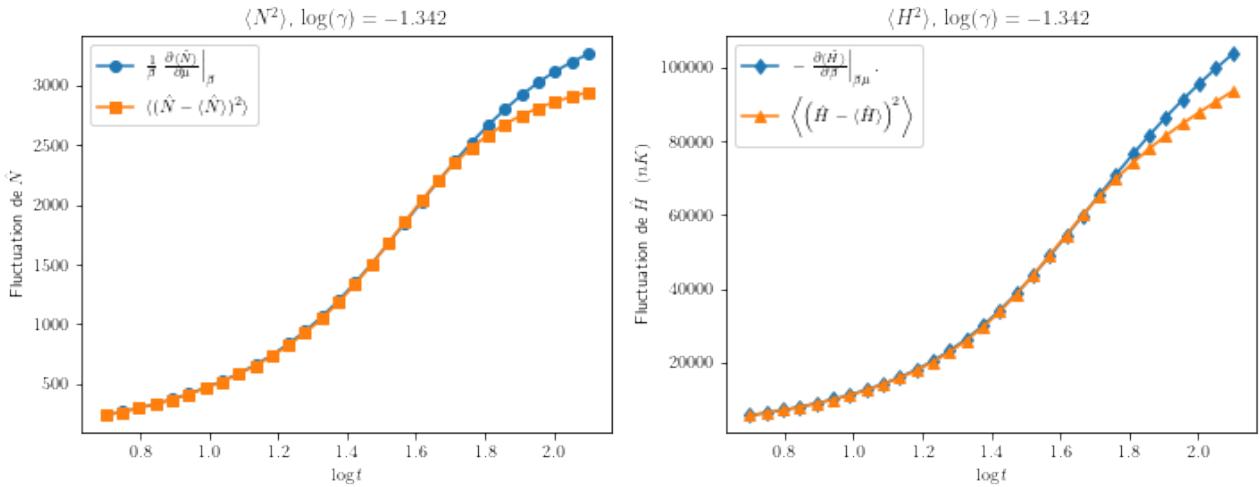


FIGURE 4.5 – Comparaison numérique entre les fluctuations calculées à partir de l'analyse quadratique de l'action (fluctuations de ρ) et celles obtenues par dérivées thermodynamiques des observables moyennes. (revoir titres shema)

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les fluctuations de la distribution de rapidité dans les états d'équilibre généralisés (GGE), en mettant en lumière le lien fondamental entre corrélations et réponse linéaire.

Nous avons d'abord introduit le formalisme général des GGE, dans lequel les observables macroscopiques sont dérivées fonctionnellement du potentiel conjugué $w(\theta)$. Dans ce cadre, nous avons montré que la matrice de susceptibilité spectrale $\chi_w(\theta, \theta')$ décrit à la fois la réponse linéaire de la densité spectrale moyenne à une

perturbation infinitésimale du potentiel, et les corrélations entre fluctuations de la densité, conformément au principe de fluctuation-réponse. Ce lien a été validé numériquement par des simulations de Monte-Carlo sur des ensembles de quasi-particules.

Nous avons ensuite approfondi l'étude de la limite thermodynamique, où les fluctuations autour de l'état d'équilibre deviennent gaussiennes. Dans cette approximation, les susceptibilités s'expriment comme l'inverse de la courbure fonctionnelle de l'entropie de Yang-Yang, formalisée par l'opérateur hessien $\mathcal{H}^{\mathcal{S}_{YY}}$. Nous avons donné une formulation explicite de cet opérateur, ainsi que de sa matrice inverse.

Enfin, nous avons relié ces objets locaux à des susceptibilités globales via une projection sur les fonctions test $f_i(\theta)$, en considérant le 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.

Chapitre 5

Protocoles experimentale

Contents

5.1	Présentation de l'expérience	43
5.2	Refroidissement	43
5.3	Imagerie	43
5.3.1	Prbleme d'iamgerie et idée numerique	43
5.4	Confinement transverse	43
5.5	Confinement longitudinale	43
5.5.1	Evolution logitudinale	43
5.6	Outil de sélection spatial	43
5.6.1	Mesure de distribution de rapidités locales $\rho(x, \theta)$ pour des systèmes en équilibre	43

5.1 Présentation de l'expérience

Introduction

5.2 Refroidissement

5.3 Imagerie

5.3.1 Prbleme d'iamgerie et idée numerique

5.4 Confinement transverse

5.5 Confinement longitudinale

5.5.1 Evolution logitudinale

5.6 Outil de sélection spatial

5.6.1 Mesure de distribution de rapidités locales $\rho(x, \theta)$ pour des systèmes en équilibre

Chapitre 6

Étude du protocal de bi-partition : Mesure de distribution de rapidités locales $\rho(x, \theta)$ pour des systèmes hors équilibre

Contents

6.1	Dynamique balistique d'un gaz 1D après une coupure bipartite	47
6.1.1	Préparation expérimentale et protocole de coupure	47
6.1.2	Dynamique balistique et cadre de la GHD	48
6.1.3	Validation expérimentale de la dynamique hydrodynamique	50
6.2	Sondre la distribution locale des rapidités	51
6.3	Sondre la distribution locale des rapidités	53
6.3.1	Sélection d'une tranche localisée après déformation du bord	54
6.3.2	Expansion de la tranche et observation d'une asymétrie	55
6.3.3	Simulations	56
6.3.4	Facteur d'occupation et distribution de rapidité à l'équilibre thermique	57
6.3.5	Dynamique du contour dans l'espace des phases (x, θ)	58
6.3.6	Simulation de la déformation du bord	58
6.3.7	Simulation de l'expansion	59
6.4	Détails sur les calculs	60

Introduction

Objectif de ce chapitre : Ce chapitre est consacré à l'étude de la dynamique hors équilibre d'un gaz quantique unidimensionnel intégrable, soumis à une discontinuité initiale de densité induite par un protocole de type **quench bipartite**. L'objectif principal est d'évaluer dans quelle mesure la Théorie Hydrodynamique Généralisée (GHD) permet de décrire cette dynamique, tant sur le plan théorique qu'expérimental. Nous nous appuyons sur une préparation initiale contrôlée, un protocole de coupure abrupte, et une analyse des profils de densité et des facteurs d'occupation pour tester les prédictions de la GHD.

Modèles intégrables et thermalisation généralisée : Les modèles intégrables jouent un rôle central dans l'étude des systèmes quantiques à plusieurs corps, notamment en régime hors équilibre. Leur caractéristique essentielle est la présence d'une infinité de constantes du mouvement, qui empêche l'évolution vers l'équilibre thermodynamique canonique. Cette contrainte mène à l'émergence d'un état d'équilibre généralisé, décrit non par l'ensemble canonique, mais par l'**Ensemble de Gibbs Général (GGE)**, qui maximise l'entropie sous contraintes intégrales multiples .

Une analogie classique : le pendule de Newton : Une illustration classique du comportement non diffusif des systèmes intégrables est fournie par le pendule de Newton : les chocs élastiques entre sphères de masses égales conduisent à une propagation balistique de l'énergie, sans diffusion. Cette analogie, bien que classique, capture l'essence du transport cohérent que l'on retrouve dans les systèmes intégrables quantiques.

Le problème de Riemann en hydrodynamique : Un test fondamental de la dynamique hors équilibre est fourni par le problème de Riemann, qui consiste à étudier l'évolution d'un système initialement préparé dans deux états homogènes juxtaposés. En hydrodynamique classique, cela se traduit par l'équation de conservation :

$$\partial_t u + \partial_x f(u) = 0,$$

avec une condition initiale par morceaux :

$$u(t=0, x) = \begin{cases} u_g & \text{si } x < x_0 \\ u_d & \text{si } x > x_0 \end{cases}.$$

La résolution de ce problème dans un cadre intégrable est longtemps restée partiellement ouverte.

Le problème de Riemann quantique : un cadre paradigmatic. Dans un système quantique intégrable, le problème de Riemann consiste à connecter brusquement deux régions préparées dans des états thermodynamiques différents, généralement homogènes. Ce scénario, dit de *quench bipartite*, constitue un cadre paradigmatic pour sonder la dynamique hors équilibre dans les gaz quantiques unidimensionnels [6, 7]. Contrairement au cas classique, la présence d'un nombre infini de constantes du mouvement empêche l'établissement d'un état thermique usuel. La relaxation locale conduit alors à un état d'équilibre généralisé, spécifique à chaque région de l'espace-temps. Le problème de Riemann quantique permet ainsi d'étudier la propagation balistique d'informations, l'émergence d'un régime autosimilaire stationnaire, et la structure fine des distributions locales de quasi-particules. Il offre un terrain théorique idéal pour tester la validité de la Théorie Hydrodynamique Généralisée [8, 9], tout en étant expérimentalement accessible grâce aux systèmes ultrafroids unidimensionnels.

Apparition de la Théorie Hydrodynamique Généralisée (GHD) : L'avènement de la GHD a marqué une avancée majeure dans la compréhension de la dynamique des systèmes intégrables. Introduite dans le contexte des théories des champs (modèle de Sinh-Gordon, modèle de Lieb-Liniger) et des chaînes quantiques (chaîne XXZ de Heisenberg) [références à insérer], elle permet de décrire analytiquement la propagation d'informations dans ces systèmes en intégrant les contraintes des charges conservées. Plusieurs solutions analytiques du problème de Riemann ont depuis été obtenues, notamment dans la chaîne XXZ et pour des gaz de sphères dures en 1D, confirmant la validité et la puissance prédictive de la GHD.

Notre système : un gaz de bosons 1D faiblement interactifs : Nous considérons un gaz quantique unidimensionnel de bosons faiblement interactifs, confiné dans une géométrie strictement 1D, et bien décrit par le modèle intégrable de Lieb-Liniger avec interactions répulsives. Ce système présente un comportement quantique collectif tout en restant dans un régime faiblement corrélé, ce qui en fait un candidat idéal pour tester les prédictions de la GHD.

Préparation expérimentale et protocole de coupure : La configuration initiale consiste à préparer un gaz homogène à densité constante n_0 , et à température contrôlée (voir Fig. 6.8). Un protocole de coupe abrupte est ensuite appliqué : la moitié gauche du système ($x < 0$) est vidée de ses atomes, tandis que la moitié droite ($x > 0$) reste occupée. Ce *quench bipartite* génère une discontinuité initiale de densité, analogue au problème de Riemann, mais dans un système quantique doté d'un nombre infini de lois de conservation. Ce protocole a déjà fait l'objet d'une première étude expérimentale dans la thèse de Léa Dubois [?], qui en a révélé le potentiel pour sonder la dynamique hors équilibre.

Observation d'une propagation balistique : Nous prolongeons cette étude en analysant la dynamique unitaire du gaz à l'aide des outils de la GHD. Nous montrons que la discontinuité initiale donne lieu à une propagation balistique, en bon accord avec la solution du problème de Riemann généralisé. Le profil de densité mesuré à différents temps révèle une frontière en déplacement linéaire, reproduite avec précision par les prédictions théoriques (voir Fig. 6.9 (e)-(g)). Des écarts résiduels, attribuables à des effets thermiques et à des imperfections expérimentales, sont toutefois observés.

Reconstruction de la distribution de rapidité : Un aspect central de notre approche repose sur la reconstruction de la distribution initiale de rapidité à partir des profils de densité mesurés dans la région de transition. Cette démarche s'apparente à une forme de *thermométrie généralisée*, et permet d'inférer des informations fines sur les états locaux du système.

Accès expérimental au facteur d'occupation $\nu(x, \theta)$: Nous développons également une méthode expérimentale originale permettant de mesurer localement le facteur d'occupation $\nu(x, \theta)$ dans la région de déformation. Cette quantité révèle une forte asymétrie : large et lisse du côté initialement occupé, abrupte et tronquée du côté initialement vide. Ce comportement reflète la nature hors équilibre du système, et s'accorde qualitativement avec les prédictions de la GHD, bien que la résolution spatiale expérimentale limite l'accès aux détails les plus fins.

Conclusion : Ce chapitre explore ainsi, à la fois théoriquement et expérimentalement, la dynamique d'un gaz intégrable soumis à une discontinuité initiale de densité. Il met en lumière la pertinence de la GHD pour décrire de telles dynamiques, et démontre la faisabilité d'outils d'analyse avancés comme la reconstruction de la distribution de rapidité ou la mesure locale du facteur d'occupation.

6.1 Dynamique balistique d'un gaz 1D après une coupure bipartite

Introduction

Dans cette section, nous étudions la dynamique hors équilibre d'un gaz quantique unidimensionnel de bosons soumis à une coupure bipartite. Ce protocole expérimental permet de générer une discontinuité nette dans le profil de densité initial, menant à une évolution balistique non triviale.

L'objectif est double :

- du point de vue expérimental, suivre en temps réel l'évolution du gaz et caractériser ses propriétés locales et globales ;
- du point de vue théorique, confronter ces observations aux prédictions de la Théorie Hydrodynamique Généralisée (GHD), qui fournit un cadre analytique pour décrire la relaxation de systèmes intégrables à grande échelle.

Cette étude constitue une illustration directe du problème de Riemann quantique, dans lequel un état initial composé de deux régions thermodynamiques différentes évolue selon une dynamique déterministe. Elle permet également d'accéder à des signatures locales de la distribution de quasi-particules (ou rapidités), jusque-là difficiles à sonder expérimentalement.

Nous structurons cette section en quatre sous-parties :

- Préparation et protocole expérimental : description du gaz unidimensionnel, du piège et de la méthode de coupure.
- Cadre théorique de la GHD : présentation des équations hydrodynamiques et de la solution auto-similaire du problème de Riemann.
- Confrontation avec les données expérimentales : validation de la structure auto-similaire et test de la théorie à température nulle.

6.1.1 Préparation expérimentale et protocole de coupure

Points clés :

- Réalisation d'un gaz unidimensionnel de bosons dans un piège quartique plat.
- Méthode d'illumination sélective à l'aide d'un DMD pour créer une discontinuité initiale.
- Passage à un régime d'expansion libre unidimensionnelle après suppression du confinement longitudinal.

Préparation d'un gaz unidimensionnel de bosons Nous utilisons un gaz ultra-froid de ^{87}Rb , piégé sur une puce atomique dans l'état hyperfin $|F = 2, m_F = 2\rangle$. Le confinement transverse est assuré par trois microfils parcourus par des courants RF, produisant un piège harmonique de fréquence $\omega_\perp/2\pi = 2,56 \text{ kHz}$. Après évaporation, on obtient un gaz à température $T \approx 100 \text{ nK}$, dans un régime 1D caractérisé par $\mu, k_B T \ll \hbar\omega_\perp$. Le couplage effectif en 1D est $g = 2a_{3D}\hbar\omega_\perp$, avec $a_{3D} = 5,3 \text{ nm}$.

Confinement longitudinal quartique Le confinement longitudinal est généré par quatre fils latéraux, dont les courants sont ajustés pour annuler les composantes linéaire, quadratique et cubique du potentiel. Il en résulte un confinement quartique $V(x) = a_4x^4$, produisant un profil de densité quasi-plat sur environ $250 \mu\text{m}$. Cette homogénéité est cruciale pour l'étude des dynamiques balistiques et pour l'application de la GHD.

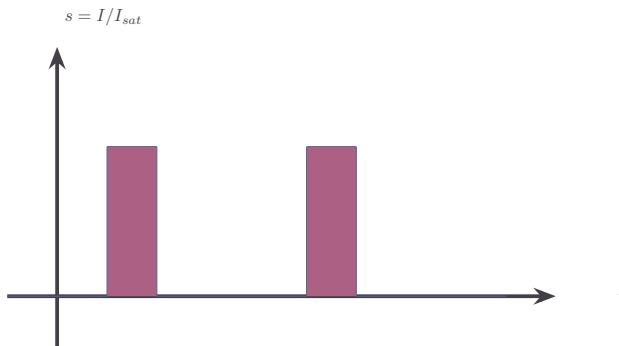


FIGURE 6.1 – Schéma synthétique du dispositif expérimental : cycles d’illumination, intensités de courant, géométrie du piège, et évolution du profil longitudinal au cours du protocole de coupure.

Coupure bipartite par sélection spatiale La bipartition initiale est réalisée en illuminant l’extrémité gauche du gaz par un faisceau quasi-résonant façonné par un DMD. Les atomes exposés sont expulsés du piège via pression de radiation. Cette méthode, développée dans [?], permet de créer une discontinuité nette du profil de densité, entre une région vide ($x < 0$) et une région remplie homogène ($x > 0$). La résolution spatiale est limitée par celle du système d’imagerie (quelques μm).

Évolution après coupure Une fois la coupure effectuée, le confinement longitudinal est supprimé tandis que le confinement transverse est maintenu. Le gaz évolue alors librement dans une direction, depuis une condition initiale non homogène analogue au problème de Riemann. L’évolution du profil de densité $n(x, t)$ est suivie par imagerie après différentes durées t d’évolution.

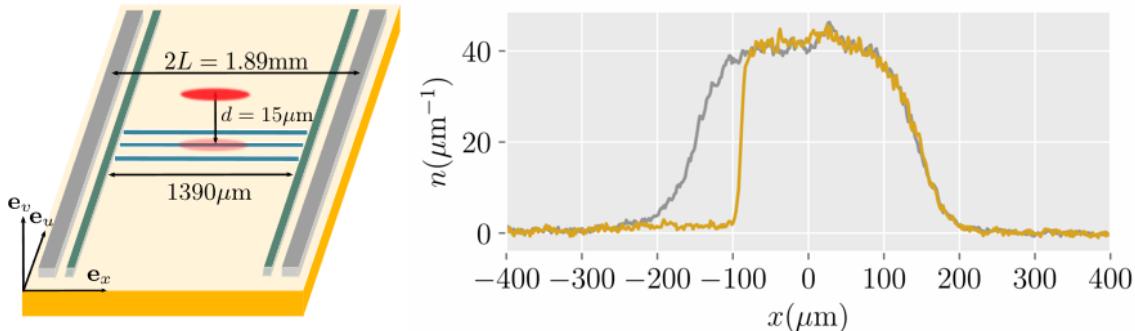


FIGURE 6.2 – (a) Géométrie de la puce atomique. (b) Profils de densité longitudinal : en gris, gaz initial confiné dans un potentiel quartique ; en jaune, après illumination sélective et 1 ms d’expansion libre.

Remarques Les aspects détaillés de l’imagerie, du piégeage et de la sélection spatiale sont décrits dans le chapitre ???. Ici, nous introduisons uniquement les éléments nécessaires à la compréhension du protocole de coupure et de la dynamique observée.

6.1.2 Dynamique balistique et cadre de la GHD

Points clés :

- Présentation du facteur d’occupation $\nu(x, \theta; t)$ comme variable hydrodynamique.
- Formulation de l’équation convective de GHD.
- Structure auto-similaire $\nu(x, \theta; t) = \nu^*(x/t, \theta)$ et résolution implicite via la vitesse effective.
- Prédictions analytiques pour le profil de densité $n(x, t)$.

Dans cette section, nous présentons le cadre théorique de la *Théorie Hydrodynamique Généralisée* (GHD) appliquée à l’expérience décrite précédemment. L’objectif est de décrire analytiquement la dynamique balistique induite par une coupure bipartite dans un gaz quantique unidimensionnel, en exploitant les équations de GHD appliquées au modèle de Lieb-Liniger.

Nous procédons en plusieurs étapes :

1. Nous introduisons la description hydrodynamique à l'échelle d'Euler.
2. Nous formulons les équations de GHD pour l'évolution du facteur d'occupation $\nu(x, \theta; t)$.
3. Nous analysons la structure auto-similaire de la solution en régime hydrodynamique.
4. Nous présentons la solution semi-analytique du problème de Riemann bipartite, ainsi que sa résolution graphique.

Description hydrodynamique à l'échelle d'Euler Dans un système intégrable, les états stationnaires sont entièrement caractérisés par leur distribution de rapidités $\rho(\theta)$ ou, de manière équivalente, par le facteur d'occupation $\nu(\theta)$. En régime hors équilibre, on suppose qu'à des échelles de temps longues et d'espace macroscopiques, le système évolue lentement vers un état localement stationnaire. Cela permet d'introduire une description hydrodynamique dans laquelle les quantités locales dépendent de la position et du temps : $\rho(x, \theta; t)$ ou $\nu(x, \theta; t)$.

La densité linéique atomique est obtenue à partir de la distribution de rapidités par :

$$n(x; t) = \int d\theta \rho(x, \theta; t). \quad (6.1)$$

Équation de GHD en termes de $\nu(x, \theta; t)$ L'évolution à grande échelle du système est gouvernée par les équations de GHD [?, ?], qui, dans leur forme convective, s'écrivent :

$$\partial_t \nu + v_{[\nu]}^{\text{eff}} \partial_x \nu = 0, \quad (6.2)$$

où $v_{[\nu]}^{\text{eff}}(\theta)$ est la vitesse effective des quasi-particules de rapidité θ , fonctionnelle non linéaire de ν .

Nous considérons ici une condition initiale de type « coupure bipartite », représentant un état homogène à droite ($x > 0$) et vide à gauche ($x < 0$) :

$$\nu(x, \theta; t = 0) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } x > 0, \\ 0 & \text{si } x < 0. \end{cases} \quad (6.3)$$

Ce type de condition correspond, à l'échelle d'Euler, à une version intégrable du problème de Riemann.

Structure auto-similaire de la solution Un point central de la GHD est l'invariance d'échelle des solutions de l'équation (6.2). En effet, si $\nu(x, \theta; t)$ est solution, alors $\nu(\alpha x, \theta; \alpha t)$ l'est également pour tout $\alpha > 0$. Sous hypothèse d'unicité, cette propriété implique que :

$$\nu(x, \theta; t) = \nu^* \left(\frac{x}{t}, \theta \right), \quad (6.4)$$

autrement dit, les solutions dépendent uniquement du rapport $v = x/t$, appelé *variable auto-similaire*. La dynamique est alors entièrement encodée dans la fonction $\nu^*(v, \theta)$, qui décrit la structure locale du gaz le long des rayons de vitesse v .

Résolution du problème de Riemann La solution $\nu^*(v, \theta)$ s'écrit comme une fonction en escalier paramétrée par une valeur de coupure θ^* :

$$\nu^*(v, \theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } \theta < \theta^*, \\ 0 & \text{si } \theta > \theta^*, \end{cases} \quad \text{où } v_{[\nu^*(v, \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta^*) = v. \quad (6.5)$$

Cette équation implicite peut être résolue numériquement pour obtenir θ^* à chaque v , puis en déduire $\nu^*(v, \theta)$ et, via l'équation (6.1), le profil de densité $n(x, t)$ à un instant donné.

Résumé Ainsi, dans le cadre de la GHD, la dynamique balistique résultant du quench bipartite est décrite par une solution auto-similaire paramétrée par une coupure en rapidité $\theta^*(v)$. Cette solution permet de prédire les profils de densité et d'occupation mesurables dans l'expérience. Elle fournit également un point de comparaison direct avec les données expérimentales obtenues à différents temps t , comme nous le verrons dans les sections suivantes.

6.1.3 Validation expérimentale de la dynamique hydrodynamique

Points clés :

- Observation directe des profils $n(x, t)$ à différents temps.
- Mise en évidence de l'auto-similarité en x/t dans un régime temporel intermédiaire.
- Comparaison quantitative avec la solution de GHD à température nulle.

Dans cette section, nous présentons les résultats expérimentaux obtenus après la coupure bipartite, et les comparons aux prédictions de la GHD à l'échelle d'Euler. L'objectif est de vérifier que la dynamique du gaz est bien décrite, à court et moyen terme, par une solution auto-similaire des équations hydrodynamiques.

Nous structurons cette analyse en quatre étapes :

1. Description du protocole expérimental de libération.
2. Mise en évidence d'une structure auto-similaire.
3. Délimitation du domaine de validité temporelle de la GHD.
4. Comparaison quantitative avec la solution théorique à température nulle.

Libération du gaz et expansion balistique. À l'issue du protocole de coupure décrit en section ??, le confinement longitudinal est entièrement supprimé, tandis que le confinement transverse est maintenu. Cette opération permet au gaz de s'étendre librement le long de l'axe longitudinal, tout en conservant un comportement unidimensionnel (cf. section ??).

L'évolution du profil de densité $n(x, t)$ est alors enregistrée à différents temps t après la libération, en utilisant une imagerie par absorption.

Mise en évidence de l'auto-similarité (régime d'Euler). Dans le cadre de la GHD à l'échelle d'Euler, il est attendu que les profils de densité présentent une forme auto-similaire :

$$n(x; t) = n^* \left(\frac{x}{t} \right), \quad (6.6)$$

où n^* est une fonction universelle qui ne dépend que de la variable réduite $v = x/t$.

Cette propriété est testée expérimentalement en superposant les profils mesurés à différents temps, après mise à l'échelle selon x/t . La Fig. 6.3(a) montre les profils normalisés mesurés entre $t = 10$ ms et $t = 18$ ms. L'excellent recouvrement obtenu confirme la validité du régime balistique et la pertinence de la description auto-similaire prédite par la GHD.

Domaine de validité temporelle de la GHD. La description par la GHD à l'échelle d'Euler est limitée à un domaine temporel intermédiaire $t \in [t_m, t_M]$:

- Pour $t > t_M \simeq 18$ ms, la densité maximale du gaz devient trop faible, et les effets de taille finie altèrent la validité de l'approximation d'un système semi-infini.
- Pour $t < t_m \simeq 6 \pm 2$ ms, plusieurs effets remettent en question la validité de la GHD :
 - La coupure initiale n'est pas parfaitement abrupte (longueur caractéristique $\sim 1 \mu\text{m}$).
 - La résolution de l'imagerie limite la détection fine du bord.
 - La GHD n'est valable qu'aux grandes échelles spatio-temporelles.

Ainsi, dans nos conditions expérimentales, le régime GHD est atteint de manière fiable pour des temps compris entre $t_m \approx 6$ ms et $t_M \approx 18$ ms.

Comparaison avec la prédition théorique à température nulle. Une fois la structure auto-similaire établie, il est possible de comparer directement les données expérimentales avec la prédition théorique de la GHD dans le régime de quasi-condensat à température nulle. Cette limite correspond à une solution exacte de l'équation (??), avec un paramètre de Lieb $\gamma \ll 1$.

La Fig. 6.3(b) présente une telle comparaison pour $t = 10$ ms et $\gamma = 4,6 \times 10^{-3}$. On observe une bonne correspondance entre le profil mesuré et la prédition théorique, confirmant que la dynamique observée est bien capturée par la GHD dans cette limite.

Conclusion Ces observations expérimentales confirment que la dynamique induite par une coupure bipartite est bien décrite par la GHD à l'échelle d'Euler, dans un régime temporel intermédiaire bien identifié. La mise à l'échelle en x/t permet une confrontation directe entre théorie et expérience, et ouvre la voie à des tests plus précis des effets thermiques et des corrections hors-échelle d'Euler.

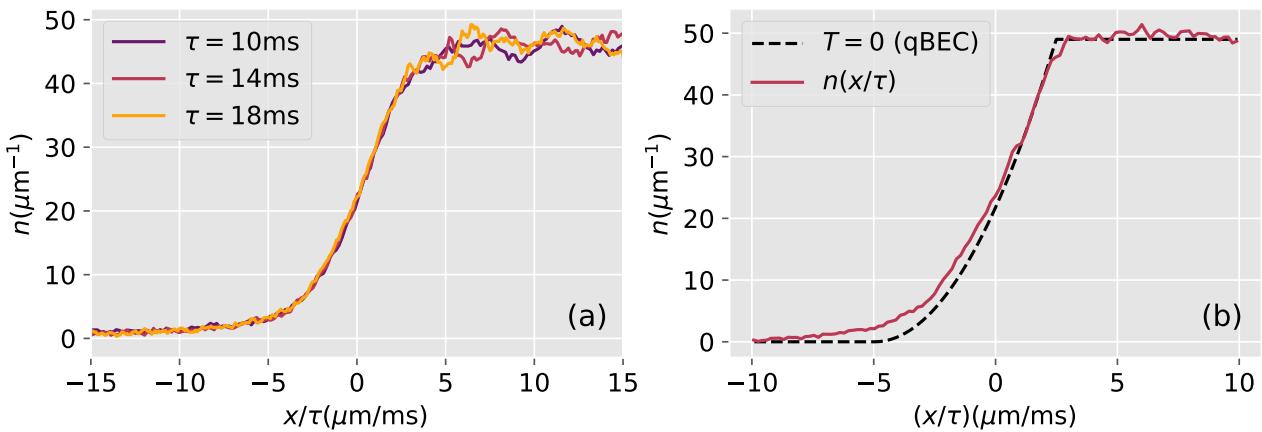


FIGURE 6.3 – (a) Profils de densité mesurés pour différents temps t , représentés en fonction de la variable x/t . L'excellent recouvrement des courbes confirme l'auto-similarité et la dynamique balistique.
(b) Comparaison entre un profil mesuré à $t = 10$ ms (points) et la prédition GHD à température nulle (ligne), pour un paramètre de Lieb $\gamma = 4,6 \times 10^{-3}$.

6.2 Sonder la distribution locale des rapidités

Points clés :

- Protocole expérimental pour extraire une tranche locale du gaz après évolution.
- Expansion 1D de la tranche sélectionnée et reconstruction de la distribution de rapidités $\Pi(\theta)$.
- Comparaison avec les prédictions GHD : asymétrie, effet de la largeur finie de la tranche, et limitations dues à la résolution et aux effets diffusifs.
- Discussion sur les écarts observés et les hypothèses du modèle.

Pour un état initial du gaz correspondant à un facteur d'occupation lisse $\nu(\theta)$ (par exemple un état thermique), le facteur d'occupation $\nu^*(x/t, \theta)$ à rapport x/t fixé est attendu comme étant fortement asymétrique en fonction de θ , selon l'équation (6.5). En effet, du côté droite, il présente une discontinuité du type saut, similaire à celle du facteur d'occupation de l'état fondamental, tandis que du côté gauche, il reste lisse. Afin de révéler ces caractéristiques particulières de l'état local du gaz, nous utilisons le protocole introduit dans la Réf. [?] pour sonder la distribution locale des rapidités, comme expliqué ci-après.

Nous laissons d'abord le gaz se dilater pendant un temps $t = 18$ ms, de sorte que le bord s'étale sur une large zone d'environ $350\text{ }\mu\text{m}$, comme illustré en Fig. 6.9 (e)-(f) et Fig. 6.7 (a). Nous sélectionnons ensuite une tranche du gaz comprise dans l'intervalle $[x_0 - \ell/2, x_0 + \ell/2]$, en éliminant tous les atomes situés hors de cette tranche à l'aide d'un faisceau de poussée [?](Fig 6.10 (a)-(c)).

En Fig. 6.7(a), nous présentons le profil de densité mesuré 1 ms après la sélection de la tranche. L'ajustement à une fonction rectangulaire lissée donne $x_0 = 18\text{ }\mu\text{m}$. Pour les calculs, la largeur ℓ sera déterminée à partir du nombre d'atomes sélectionnés (voir ci-dessous). Enfin, nous laissons cette tranche se dilater en 1D pendant un temps d'expansion τ , puis nous mesurons la densité longitudinale $\tilde{n}(x, \tau)$. Celle-ci reflète la distribution totale des rapidités dans la tranche $\Pi(\theta) = \int \rho(x, \theta; \tau > 0) dx = \int_{x_0 - \ell/2}^{x_0 + \ell/2} \rho(x, \theta; \tau = 0^+) dx$, car pour $\tau \rightarrow \infty$, on s'attend à ce que $\tau \tilde{n}(\tau * \theta - x_0; \tau) \simeq \Pi(\theta)$. L'asymétrie attendue de Π devrait ainsi induire une asymétrie de la densité $\tilde{n}(x, \tau)$ en fonction de x . Nous observons effectivement cette asymétrie dans nos profils d'expansion, comme illustré en Fig. 6.7(b) pour un temps d'expansion $\tau = 30$ ms.

Pour aller au-delà de cette observation qualitative, nous effectuons un calcul GHD à l'échelle d'Euler du profil d'expansion, en supposant que l'état initial est thermique. La température est obtenue par ajustement du profil de bord avant la sélection de la tranche, comme indiqué en Fig. 6.7(a), ce qui donne $T = 560\text{ nK}$. Le potentiel chimique est ajusté afin que la densité linéaire initiale corresponde à celle mesurée dans la région $x > 0$, avant l'élargissement du bord. À partir du profil initial, nous simulons à la fois l'élargissement du bord et l'expansion de la tranche en GHD, en supposant une découpe parfaite, c'est-à-dire $\nu(x, \theta) = 0$ pour $|x - x_0| > \ell/2$ et $\nu(x, \theta)$ inchangé sinon. La largeur ℓ est ajustée de sorte que le nombre d'atomes sélectionnés dans la simulation corresponde à celui mesuré expérimentalement après expansion, et on obtient $\ell = 24\text{ }\mu\text{m}$.

Le profil d'expansion simulé est montré en Fig. 6.11(a). Il présente une forte asymétrie, comme attendu, avec un bord droit abrupt et une densité nulle au-delà d'un certain point. Cependant, cette chute est moins marquée que celle prédictive pour la distribution locale des rapidités $\rho(x_0, \theta)$ à $x = x_0$. Deux effets contribuent à cet élargissement : (i) la distribution en rapidité n'est pas homogène à l'intérieur de la tranche, si bien que

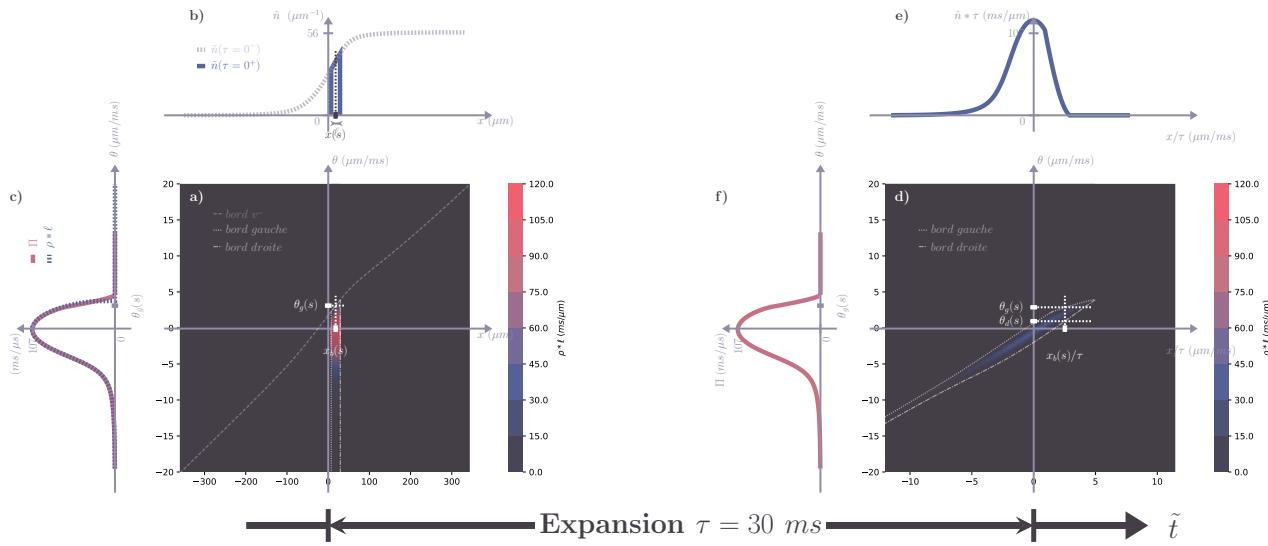


FIGURE 6.4 – (a) À l'instant $\tau = 0^+$, immédiatement après la sélection de la tranche centrée en $x = x_0$ et de largeur ℓ , la distribution de rapidité localement résolue est donnée par $\rho(x, \theta; \tau = 0^+) = \nu(x, \theta; t = 18 \text{ ms}) \rho_s(x, \theta; t = 18 \text{ ms})$ pour $|x - x_0| < \ell/2$, et est nulle pour $|x - x_0| > \ell/2$. Le bord gauche immédiatement après la sélection est représenté en pointillés par l'ensemble des points $(x_g(s; \tau = 0^+), \theta_g(s; \tau = 0^+))$, et le bord droit en tiret-point par l'ensemble des points $(x_d(s; \tau = 0^+), \theta_d(s; \tau = 0^+))$. Le bord complet est donc la concaténation de ces deux ensembles. (b) Densité linéaire spatiale $\tilde{n}(x)$: en pointillés, $n(x; t = 18 \text{ ms})$ juste avant la sélection ; en ligne pleine, $\tilde{n}(x; \tau = 0^+)$, égal à $n(x; t = 18 \text{ ms})$ pour $|x - x_0| < \ell/2$ et nul ailleurs. (c) Distribution de rapidité après sélection, $\Pi(\theta) = \int \rho(x, \theta; \tau) dx$, invariante sous l'évolution unidimensionnelle, représentée en rouge. La distribution localement résolue en $x_b(s; \tau = 0^+)$, $\rho(x_b(s; \tau = 0^+), \theta; \tau = 0^+)$, est représentée en pointillés. Cette distribution est localement conservée, i.e., $\rho(x(s; \tau), \theta(s; \tau))$ reste inchangée au cours de l'évolution unidimensionnelle, indépendamment de τ . (e) Distribution localement résolue $\rho(x, \theta; \tau = 30 \text{ ms})$ après une évolution unidimensionnelle de 30 ms. Le bord gauche est représenté en pointillés par les points $(x_g(s; \tau = 30 \text{ ms}), \theta(s; \tau = 30 \text{ ms}))$, et le bord droit en tiret-point par $(x_d(s; \tau = 30 \text{ ms}), \theta(s; \tau = 30 \text{ ms}))$. (f) Densité spatiale $\tilde{n}(x; \tau = 30 \text{ ms})$. (g) Distribution de rapidité $\Pi(\theta)$ après la sélection (identique à celle de (c)).

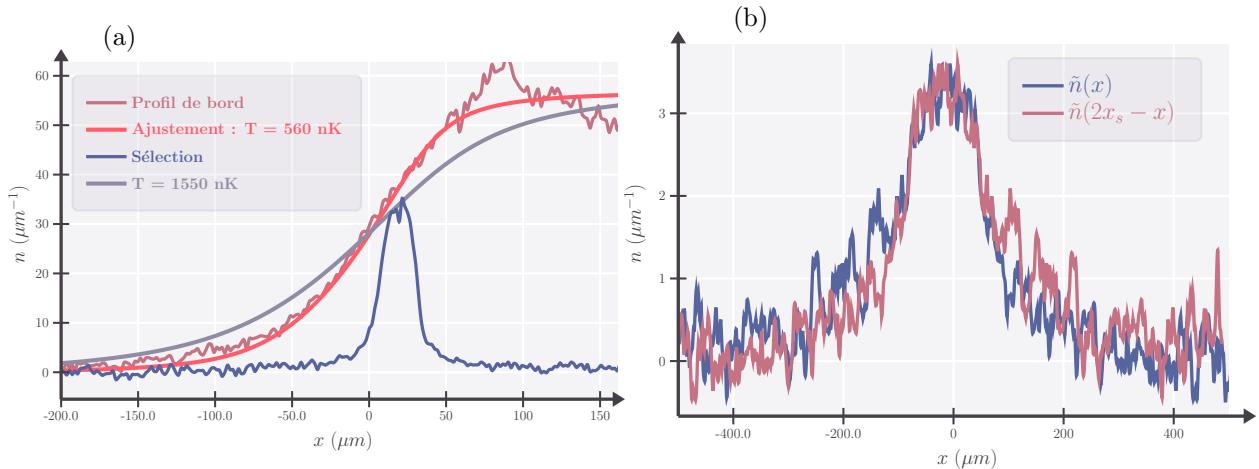


FIGURE 6.5 – (a) Profil de bord et tranche sélectionnée. Le profil de bord après 18 ms est montré en rouge. L'ajustement thermique donne une température $T = 560 \text{ nK}$ (orange). Le profil de densité mesuré 1 ms après la sélection de la tranche est en bleu. (b) Asymétrie du profil d'expansion de la tranche. Le profil de densité après une expansion pendant $\tau = 30 \text{ ms}$ est comparé à son image miroir. Le centre de symétrie $x_s = -17 \mu\text{m}$ minimise la distance quadratique $\delta^2 = \int dx (\tilde{n}(x) - \tilde{n}(2x_s - x))^2$.

$\Pi(\theta)$ diffère de $\ell\rho(x_0, \theta)$, comme le montre la comparaison entre la ligne marron pleine et la ligne pointillée en Fig. 6.11(a) ; (ii) le temps d'expansion est fini, de sorte que le profil observé $\tilde{n}(x, \tau)$ ne correspond pas exactement à $\Pi((x - x_0)/\tau)/\tau$, comme le montre la comparaison entre les courbes marron et rouge.

Nous comparons ensuite le profil d'expansion simulé par la GHD avec les données expérimentales. Comme

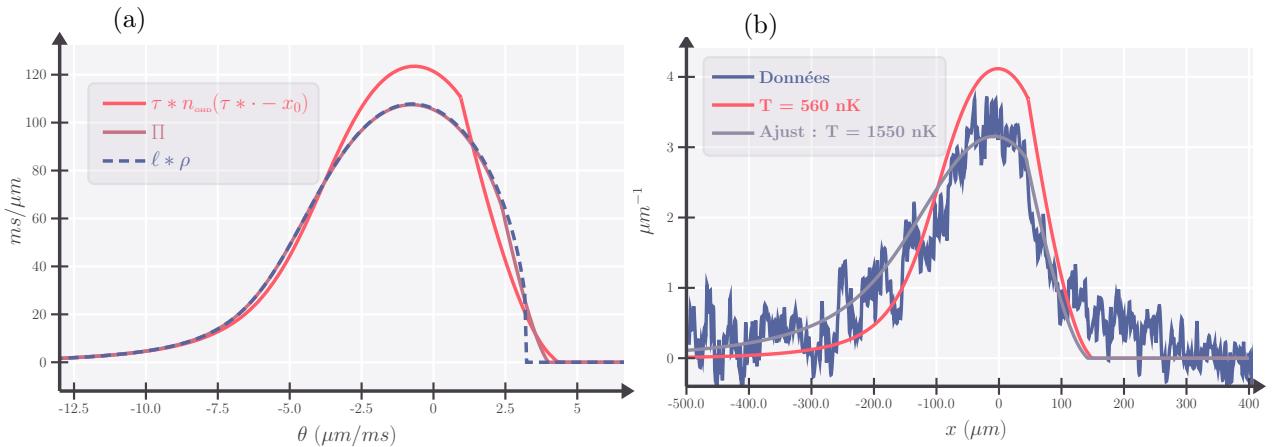


FIGURE 6.6 – (a) *Profil de densité après expansion de la tranche : effets de la largeur finie et du temps d’expansion fini.* Courbe orange : profil obtenu par simulation GHD après expansion pendant $\tau = 30 \text{ ms}$, avec $T = 560 \text{ nK}$. Courbe marron : distribution asymptotique $\Pi((x - x_0)/\tau)/\tau$. Courbe pointillée noire : approximation $\ell\rho(x_0, (x - x_0)/\tau)/\tau$ dans le cas d’une tranche étroite. (b) *Comparaison aux données expérimentales.* En bleu : profil expérimental après expansion pendant $\tau = 30 \text{ ms}$. En orange : simulation GHD avec $T = 560 \text{ nK}$. En magenta : ajustement du profil expérimental donnant $T = 1550 \text{ nK}$.

montré en Fig. 6.11(b), le profil prédit reproduit les principales caractéristiques du profil d’expansion observé expérimentalement. Des écarts atteignant 25 % sont cependant visibles dans la partie centrale du profil. Afin d’obtenir un meilleur accord entre données et calculs, nous avons ajusté le profil d’expansion expérimental avec le calcul GHD en utilisant la température de l’état initial comme paramètre d’ajustement. Le résultat, représenté par la ligne magenta dans la Fig. 6.11(b), donne une température $T = 1550 \text{ nK}$, plus de deux fois supérieure à celle obtenue en ajustant le profil au bord. Le profil au bord calculé pour cette température n’est pas compatible avec le profil expérimental, comme le montre la Fig. 6.11(b).

Une des raisons de l’échec de nos tentatives de reproduction du profil de densité après l’expansion de la tranche réside dans la présence de queues à droite du profil expérimental — voir le profil de densité dans la Fig. 6.11(b). Ces queues sont absentes des calculs GHD à l’échelle d’Euler car la fonction d’occupation dans la tranche s’annule strictement au-delà d’une certaine rapidité. L’origine de ces queues reste incertaine. Elles pourraient être dues à des effets de bord associés à la procédure de sélection de tranche, les atomes en bordure étant chauffés par le faisceau de poussée. Il est également possible qu’un effet diffusif, non pris en compte dans la GHD à l’échelle d’Euler, intervienne au début de la déformation du bord, lorsque les gradients sont importants.

6.3 Sonder la distribution locale des rapidités

Points clés :

- Protocole expérimental pour extraire une tranche locale du gaz après évolution.
- Expansion 1D de la tranche sélectionnée et reconstruction de la distribution de rapidités $\Pi(\theta)$.
- Comparaison avec les prédictions GHD : asymétrie, effet de la largeur finie de la tranche, et limitations dues à la résolution et aux effets diffusifs.
- Discussion sur les écarts observés et les hypothèses du modèle.

Introduction

Dans le scénario de jonction bipartite — où deux parties du gaz, initialement préparées dans des états thermodynamiques distincts, sont soudainement mises en contact — la dynamique engendre des profils locaux fortement hors équilibre. En particulier, lorsque l’état initial consiste en un gaz homogène à droite et une région vide à gauche, la GHD prédit qu’à grand temps le système atteint un régime stationnaire autosimilaire, dans lequel les observables locales dépendent uniquement du rapport $\zeta = x/t$. Dans ce régime, la distribution locale des quasi-particules est décrite par un facteur d’occupation $\nu^*(\zeta, \theta)$, solution d’une équation de type (6.5).

Une prédiction remarquable de ce cadre est la présence, du côté droit du système, d’une discontinuité abrupte dans la distribution en rapidité du facteur d’occupation $\nu^*(\zeta, \theta)$ — signature d’un état local proche du fondamental. À l’inverse, du côté gauche (où le gaz est initialement absent), la distribution reste lisse en rapidité,

ce qui indique un état localement excité, distinct d'un état fondamental. Ce contraste fort entre les deux régions — l'une présentant une distribution lisse, l'autre une discontinuité abrupte — reflète la propagation balistique des quasi-particules, conséquence directe de l'intégrabilité du système. En effet, dans un système intégrable, les quasi-particules conservent leur individualité et se propagent à vitesse bien définie sans diffusion, ce qui permet de maintenir à grand temps des structures non thermalisées comme des discontinuités, absentes dans les systèmes non intégrables.

L'objectif de cette section est de confronter ces prédictions théoriques à l'expérience, en accédant à la distribution locale de rapidités du gaz. Pour cela, nous mettons en œuvre un protocole expérimental inspiré de la Réf. [?], permettant de mesurer indirectement cette distribution via l'expansion libre d'une tranche localisée du gaz. En parallèle, nous réalisons des simulations numériques de la dynamique à l'aide de la GHD, ce qui nous permet de comparer les distributions mesurées avec les prédictions théoriques, et ainsi de tester la présence effective de la discontinuité attendue.

Nous structurons cette analyse en quatre étapes principales :

- Sélection d'une tranche localisée du gaz après un temps d'évolution donné.
- Observation du profil de vitesse après expansion libre, révélant une éventuelle asymétrie.
- Simulation théorique de la distribution locale de rapidité à l'aide de la GHD.
- Comparaison entre les mesures expérimentales et les prédictions théoriques.

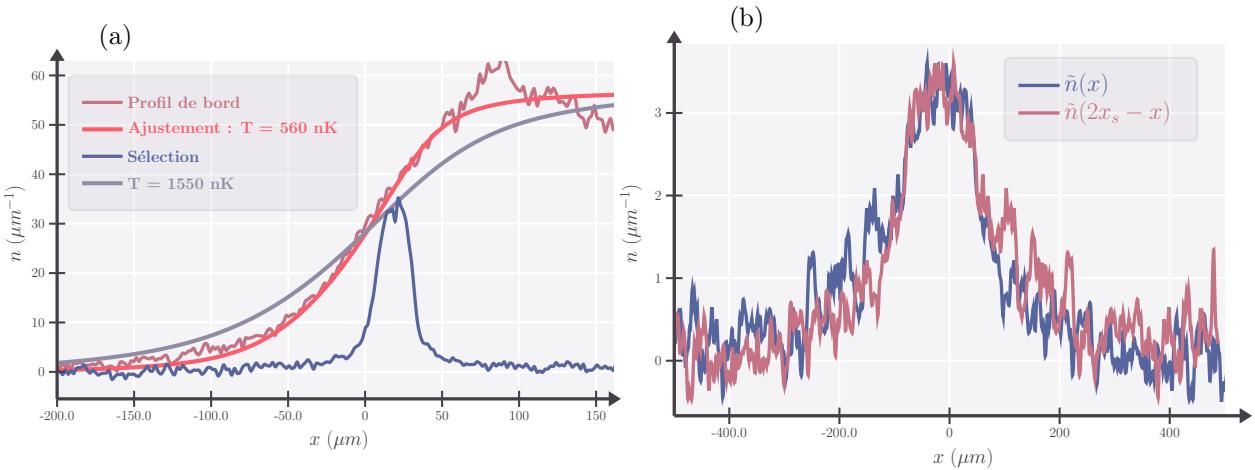


FIGURE 6.7 – (a) *Profil de bord et tranche sélectionnée*. Le profil de bord après 18 ms est montré en rouge. L'ajustement thermique donne une température $T = 560 \text{ nK}$ (orange). Le profil de densité mesuré 1 ms après la sélection de la tranche est en bleu. (b) *Asymétrie du profil d'expansion de la tranche*. Le profil de densité après une expansion pendant $\tau = 30 \text{ ms}$ est comparé à son image miroir. Le centre de symétrie $x_s = -17 \mu\text{m}$ minimise la distance quadratique $\delta^2 = \int dx (\tilde{n}(x) - \tilde{n}(2x_s - x))^2$.

6.3.1 Sélection d'une tranche localisée après déformation du bord

Nous laissons d'abord le gaz se dilater pendant un temps $t = 18 \text{ ms}$, de sorte que le bord s'étale sur une large zone d'environ $350 \mu\text{m}$, comme illustré en Fig. 6.9 (e)-(f) et Fig. 6.7 (a). Nous sélectionnons ensuite une tranche du gaz comprise dans l'intervalle $[x_0 - \ell/2, x_0 + \ell/2]$, en éliminant tous les atomes situés hors de cette tranche à l'aide d'un faisceau de poussée [?] (Fig. 6.10 (a)-(c)).

Sélection locale d'une tranche du gaz. Afin d'accéder localement à la distribution de rapidité, nous exploitons le fait qu'après un temps $t = 18 \text{ ms}$, le bord du gaz s'étale sur plusieurs centaines de microns — environ $350 \mu\text{m}$ — comme illustré en Fig. 6.9(e)-(f) et Fig. 6.7(a). Cette large extension spatiale permet d'identifier des régions à la fois assez étendues pour être sélectionnées expérimentalement, et suffisamment étroites pour que le gaz puisse y être considéré comme localement homogène dans le cadre de l'hydrodynamique généralisée.

Pour isoler une telle région, un **faisceau de poussée** est appliqué afin d'**éliminer tous les atomes situés hors d'un intervalle spatial** centré en $x_0 = 18 \mu\text{m}$ et de largeur ℓ . Cette technique, inspirée de la Réf. [?], permet de ne conserver qu'une **tranche localisée du gaz**, dont la distribution en rapidité reflète l'état local $\rho(x, \theta)$ aux abords de $x \approx x_0$, comme illustré en Fig. 6.10(a)-(c).

Contrôle expérimental du faisceau de sélection. La sélection spatiale du gaz est réalisée à l'aide d'un dispositif à micro-miroirs (DMD), qui permet de contrôler finement la forme du faisceau de poussée utilisé pour éliminer les atomes hors d'un intervalle centré en x_0 . Ce dispositif est piloté via une interface logicielle développée au sein de l'équipe, basée sur les outils CICERO-Iso et SPARTACUS. Le DMD est commandé par une série de paramètres expérimentaux transmis à ces logiciels, dont certains (comme la position x_0) sont enregistrés systématiquement au cours de l'expérience. En revanche, d'autres paramètres, notamment la largeur effective ℓ du faisceau, n'ont pas été archivés dans la base de données associée aux séquences expérimentales. Ainsi, dans les paragraphes précédents, nous avons pu indiquer précisément la valeur de x_0 (ici $x_0 = 18 \mu\text{m}$), mais non celle de ℓ . Cette valeur sera déterminée a posteriori par analyse des profils expérimentaux, et jouera un rôle essentiel dans les simulations numériques présentées plus loin.

Inhomogénéité de la tranche sélectionnée Dans l'idéal, on souhaiterait que l'intervalle de sélection soit suffisamment fin pour garantir l'homogénéité de la densité locale au sein de la tranche. Toutefois, comme la valeur exacte de ℓ n'a pas été enregistrée, nous ne pouvons pas l'estimer directement à partir des données de Fig. 6.7(a), qui représente l'état du système avant sélection. Néanmoins, cette même figure montre également le profil de densité mesuré une milliseconde après la sélection. Or, comme nous le verrons dans la suite, les simulations GHD montrent que, dans cet intervalle de temps, la distribution en espace réel ne subit ni déplacement significatif, ni déformation notable. Il est donc raisonnable d'utiliser ce profil post-sélection comme estimation fidèle de la densité initiale dans la tranche.

Estimation de la largeur ℓ et conséquences À partir de cette analyse, nous pouvons estimer que la largeur ℓ de la tranche sélectionnée est de l'ordre de 20 à 30 μm . Or, pour une position centrale $x_0 \approx 18 \mu\text{m}$, la densité atomique $\tilde{n}(x; \tau = 0)$ varie sensiblement sur cette échelle. La tranche sélectionnée n'est donc pas localement homogène, et la distribution de rapidité mesurée correspond en réalité à une moyenne spatiale de $\rho(x, \theta)$ sur un intervalle de largeur ℓ centré en x_0 . Cette observation est essentielle pour l'interprétation des données et sera prise en compte dans la suite, en particulier dans les comparaisons avec les simulations hydrodynamiques.

6.3.2 Expansion de la tranche et observation d'une asymétrie

Principe de l'expansion et lien avec la distribution en rapidité Après la sélection, la tranche est laissée en expansion libre unidimensionnelle pendant un temps τ , puis son profil de densité longitudinal $\tilde{n}(x, \tau)$ est mesuré. Cette expansion permet de convertir l'information spatiale en une information sur la distribution en rapidité. En effet, pour un temps τ suffisamment grand, on s'attend à ce que la densité observée soit proportionnelle à la distribution totale des rapidités dans la tranche :

$$\tau \tilde{n}(\tau\theta - x_0; \tau) \xrightarrow[\tau \rightarrow \infty]{} \Pi(\theta), \quad (6.7)$$

où

$$\Pi(\theta) = \int \rho(x, \theta; \tau \geq 0) dx = \int_{x_0 - \ell/2}^{x_0 + \ell/2} \rho(x, \theta; \tau = 0) dx. \quad (6.8)$$

Autrement dit, $\Pi(\theta)$ correspond à la distribution de rapidité intégrée sur la tranche sélectionnée, conservée lors de l'expansion.

Observation expérimentale de l'asymétrie La théorie prédit que la distribution locale de quasi-particules $\rho(x, \theta)$ est fortement asymétrique en θ . Cette asymétrie se retrouve dans $\Pi(\theta)$ et doit donc se manifester dans le profil d'expansion $\tilde{n}(x, \tau)$. Cette asymétrie est effectivement observée dans nos données expérimentales, comme illustré en Fig. 6.7(b) pour un temps d'expansion $\tau = 30 \text{ ms}$.

Quantification de l'asymétrie par symétrisation. La figure 6.7(b) présente deux courbes : le profil mesuré $\tilde{n}(x)$ (abréviation de $\tilde{n}(x, \tau)$) et son image par symétrie par rapport à un axe $x = 2x_s$. L'objectif est de rendre visible et de quantifier l'asymétrie du profil. Pour ce faire, nous considérons une décomposition naturelle du profil autour d'un centre $x = x_s$:

$$\tilde{n}(x) = \tilde{n}_{\text{pair}}^{(x_s)}(x) + \tilde{n}_{\text{impair}}^{(x_s)}(x), \quad \text{où} \quad \begin{cases} \tilde{n}_{\text{pair}}^{(x_s)}(x) &= \frac{\tilde{n}(x) + \tilde{n}(2x_s - x)}{2}, \\ \tilde{n}_{\text{impair}}^{(x_s)}(x) &= \frac{\tilde{n}(x) - \tilde{n}(2x_s - x)}{2}. \end{cases} \quad (6.9)$$

Cette décomposition correspond à une projection du profil sur les fonctions paires et impaires centrées en $x = x_s$.

L'asymétrie du profil est directement liée à la composante impaire. Pour la quantifier, nous cherchons la valeur de x_s qui minimise la norme L^2 de la partie impaire :

$$\delta^2(x_s) = \int dx [\tilde{n}(x) - \tilde{n}(2x_s - x)]^2. \quad (6.10)$$

La valeur optimale de x_s minimise cette fonctionnelle $\delta^2(x_s)$ et fournit un axe de symétrie effectif pour le profil. Cette méthode permet de comparer de manière robuste différentes conditions expérimentales, ou différents temps d'expansion, en s'affranchissant d'un ajustement arbitraire de centre.

Effet de l'homogénéité de la tranche sélectionnée Plus la densité atomique est homogène dans la tranche sélectionnée, plus l'expansion est asymétrique et restitue fidèlement la distribution de rapidité au point x_0 . En effet, si $\rho(x, \theta)$ est uniforme sur la largeur ℓ , on obtient :

$$\Pi(\theta) \simeq \ell \rho(x_0, \theta) \Rightarrow \tau \tilde{n}(\tau\theta - x_0; \tau) \simeq \ell \rho(x_0, \theta), \quad (6.11)$$

ce qui permet d'accéder directement à la distribution locale, y compris à d'éventuelles discontinuités.

Deux stratégies permettent d'améliorer cette homogénéité :

- Diminuer la largeur ℓ de la sélection,
- Augmenter le temps t de déformation du bord avant sélection, pour étendre la région d'intérêt spatialement.

Cependant, ces deux approches ont des limitations : une plus petite valeur de ℓ réduit le nombre d'atomes sélectionnés, ce qui diminue le rapport signal/bruit, et des temps t trop longs font sortir le système du régime semi-infini, introduisant des effets de bord non désirés (voir Fig. [à insérer]).

Limites sur le temps d'expansion Allonger le temps d'expansion τ permet d'approcher plus fidèlement le régime asymptotique $\tau \rightarrow \infty$ où la correspondance avec $\Pi(\theta)$ est exacte. Toutefois, cette expansion est limitée expérimentalement par la taille longitudinale du confinement 1D, de l'ordre de 1 mm, correspondant à la taille typique des triplets de microfils. Comme illustré en Fig. 6.7(b), le nuage atteint cette taille à $\tau \sim 30$ ms, ce qui constitue une limite pratique. Par ailleurs, des simulations GHD (voir Ref. [?]) montrent que des temps significativement plus longs seraient nécessaires pour que $\tau \tilde{n}$ converge véritablement vers $\Pi(\theta)$.

Renforcer l'asymétrie observée Enfin, une asymétrie plus marquée peut être obtenue en modifiant l'état initial du gaz. En particulier, une bipartition réalisée à partir d'un état initial plus excité (c'est-à-dire moins proche du fondamental) du côté gauche renforcerait le contraste entre les deux côtés. Cette stratégie permettrait d'amplifier la discontinuité attendue dans la distribution de rapidité, et donc dans le profil d'expansion.

[Figure : asymétries observées pour différents états initiaux]

6.3.3 Simulations

Pour aller au-delà de cette observation qualitative, nous effectuons un calcul GHD à l'échelle d'Euler du profil d'expansion, en supposant que l'état initial est thermique. La température est obtenue par ajustement du profil de bord avant la sélection de la tranche, comme indiqué en Fig. 6.7(a), ce qui donne $T = 560$ nK. Le potentiel chimique est ajusté afin que la densité linéaire initiale corresponde à celle mesurée dans la région $x > 0$, avant l'élargissement du bord. À partir du profil initial, nous simulons à la fois l'élargissement du bord et l'expansion de la tranche en GHD, en supposant une découpe parfaite, c'est-à-dire $\nu(x, \theta) = 0$ pour $|x - x_0| > \ell/2$ et $\nu(x, \theta)$ inchangé sinon. La largeur ℓ est ajustée de sorte que le nombre d'atomes sélectionnés dans la simulation corresponde à celui mesuré expérimentalement après expansion, et on obtient $\ell = 24 \mu\text{m}$.

Le profil d'expansion simulé est montré en Fig. 6.11(a). Il présente une forte asymétrie, comme attendu, avec un bord droit abrupt et une densité nulle au-delà d'un certain point. Cependant, cette chute est moins marquée que celle prédictive pour la distribution locale des rapidités $\rho(x_0, \theta)$ à $x = x_0$. Deux effets contribuent à cet élargissement : (i) la distribution en rapidité n'est pas homogène à l'intérieur de la tranche, si bien que $\Pi(\theta)$ diffère de $\ell \rho(x_0, \theta)$, comme le montre la comparaison entre la ligne marron pleine et la ligne pointillée en Fig. 6.11(a) ; (ii) le temps d'expansion est fini, de sorte que le profil observé $\tilde{n}(x, \tau)$ ne correspond pas exactement à $\Pi((x - x_0)/\tau)/\tau$, comme le montre la comparaison entre les courbes marron et rouge.

Cette section présente en détail les étapes nécessaires à la résolution numérique de l'équation de GHD dans le cadre des simulations effectuées. Dans un premier temps, nous explicitons le calcul du facteur d'occupation $\nu(\theta)$ et de la densité de rapidité $\rho(\theta)$ à l'équilibre thermique, obtenus à partir d'un couple (T, μ) donné. Nous décrivons ensuite la procédure permettant d'ajuster le potentiel chimique afin de reproduire la densité atomique mesurée expérimentalement. Enfin, nous détaillons le calcul de la dynamique du contour délimitant la région occupée dans l'espace (x, θ) , en exploitant la conservation lagrangienne du facteur d'occupation.

Simulation de gas homogène infinie spatial

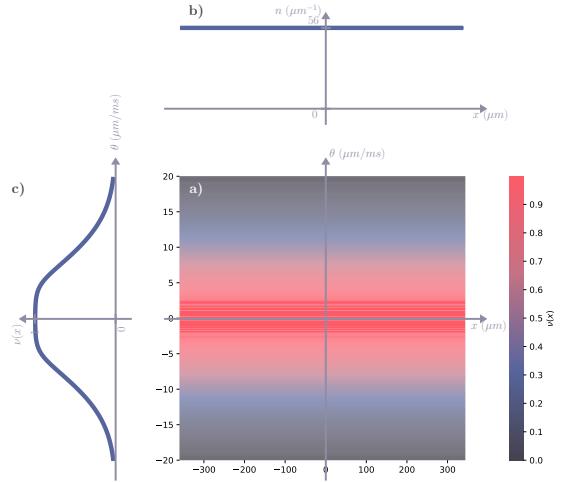


FIGURE 6.8 – a) Facteur d’occupation initial $\nu(x, \theta) = \nu_0(\theta)$ correspondant à un état d’équilibre thermique à la température $T = 560 \text{ nK}$, pour une densité linéaire homogène $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$. Ces paramètres correspondent à une potentiel chimique $\mu = 65 \text{ nK}$. b) Densité spatiale linéaire $n(x) = \int \rho_{[\nu]}(x, \theta) d\theta$, constante et égale à $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$. c) Facteur d’occupation $\nu_0(\theta)$ correspondant à la distribution thermique illustrée en a).

Cette section présente en détail les étapes nécessaires à la résolution numérique de l’équation de GHD dans le cadre des simulations effectuées. Dans un premier temps, nous explicitons le calcul du facteur d’occupation $\nu(\theta)$ et de la densité de rapidité $\rho(\theta)$ à l’équilibre thermique, obtenus à partir d’un couple (T, μ) donné. Nous décrivons ensuite la procédure permettant d’ajuster le potentiel chimique afin de reproduire la densité atomique mesurée expérimentalement. Enfin, nous détaillons le calcul de la dynamique du contour délimitant la région occupée dans l’espace (x, θ) , en exploitant la conservation lagrangienne du facteur d’occupation.

6.3.4 Facteur d’occupation et distribution de rapidité à l’équilibre thermique

On suppose ici que le système est à l’équilibre thermique, caractérisé par une température T et un potentiel chimique μ . Dans ce cadre, la fonction $w(\theta)$, qui paramétrise l’opérateur de charge (cf. réf. ??), vérifie l’expression

$$w(\theta) = \beta(\varepsilon(\theta) - \mu), \quad (6.12)$$

avec $\beta = (k_B T)^{-1}$ et $\varepsilon(\theta) = \frac{m\theta^2}{2}$. On peut réécrire cette relation en minimisant l’entropie de Yang-Yang (cf. ??) et en injectant la forme du facteur d’occupation

$$\nu_0 \doteq \rho/\rho_s = \frac{1}{1 + e^{\beta\varepsilon}}, \quad (6.13)$$

et (6.12) dans (??), on obtient une équation intégrale de type point fixe :

$$\beta\varepsilon = \beta\varepsilon_0 - \frac{\Delta}{2\pi} * \ln(1 + e^{-\beta\varepsilon}),$$

avec $\varepsilon_0 = \varepsilon - \mu$. Cette équation est bien définie et converge (cf. ??). Pour s’en convaincre, on peut calculer la norme du déterminant du jacobien de l’application. Si elle est inférieure à 1, on est assuré de la convergence.

L’équation étant non linéaire, pour garantir la convergence vers la bonne solution (éitant les cycles), on itère la suite suivante :

$$\beta\varepsilon_{n+1} = \beta\varepsilon_n - \frac{\Delta}{2\pi} * \ln(1 + e^{-\beta\varepsilon_n}),$$

jusqu’à ce que la distance entre deux itérations successives soit suffisamment petite : ici $\beta\|\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n\| < 10^{-12}$. Ainsi, en fixant le couple (μ, T) , on obtient ε , puis ν avec (6.13), puis enfin ρ_s via :

$$2\pi\rho_s = \frac{m}{\hbar} * 1_{[\nu_0]}^{\text{dr}},$$

où la fonction "habillée" f^{dr} est définie par :

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

ce qui est une équation linéaire. Numériquement, on la résout sous la forme :

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

La densité physique est alors obtenue par $\rho = \nu_0 * \rho_s$.

Ainsi, à partir d'un couple (T, μ) , on détermine entièrement les distributions $\nu_0(\theta)$ et $\rho(\theta)$ correspondant à l'équilibre thermique.

Détermination de μ à température fixée Cependant, dans le cadre expérimental, la quantité accessible est la densité homogène n_0 , par exemple $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$ (voir Fig. 6.8). On veux donc passer du couple (T, n_0) au couple (T, μ) . Pour cela on fixe la température T , on ajuste donc le potentiel chimique μ pour satisfaire la contrainte :

$$n_0 = \int \rho(\theta) d\theta.$$

6.3.5 Dynamique du contour dans l'espace des phases (x, θ)

Une fois le facteur d'occupation initial $\nu_0(\theta)$ déterminé, on calcule l'évolution temporelle du contour délimitant la région occupée dans l'espace des phases (x, θ) .

En effet, l'équation fondamentale de la GHD (cf. Eq. 6.5) implique que

$$\nu(x(s; t), \theta(s; t)) = \nu(x(s; 0), \theta(s; 0)),$$

ce qui signifie que ν est constant au cours du temps si on suit le couple $(x(s; t), \theta(s; t))$ — c'est la vision lagrangienne en hydrodynamique. La graduation fixe des axes donne la vision eulérienne. Cela implique également :

$$\partial_t \begin{pmatrix} x(s; t) \\ \theta(s; t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{[\nu]}^{\text{eff}}(\theta(s; t)) \\ 0 \end{pmatrix},$$

d'où $\theta(s; t) = \theta(s; 0) \equiv \theta(s)$.

On introduit alors le contour dynamique $\Gamma_t \doteq \{(x(s; t), \theta(s)) \text{ délimitant, à l'instant } t, \text{ la région où le facteur d'occupation est non nul}\}$. Par hypothèse initiale, $\nu(x, \theta; 0) = \nu_0(\theta)$ à l'intérieur du contour initial Γ_0 et nul à l'extérieur. Par conservation lagrangienne, cette propriété est préservée au cours du temps, et l'on a donc pour tout t :

$$\nu(x, \theta; t) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } (x, \theta) \text{ à l'intérieur de } \Gamma_t, \\ 0 & \text{si } (x, \theta) \text{ à l'extérieur de } \Gamma_t \end{cases} \quad (6.14)$$

La dynamique de Γ_t est ainsi entièrement déterminée par la vitesse efficace $v_{[\nu]}^{\text{eff}}(\theta)$ associée au facteur d'occupation initial ν_0 . Cela permet de suivre l'évolution de la région occupée dans l'espace des phases (x, θ) à partir des seules données initiales.

6.3.6 Simulation de la déformation du bord

Dans la partie "déformation du bord" (Fig. 6.9), initialement, l'intérieur du contour correspond à $x > 0$. Il est donc suffisant d'étudier l'évolution du bord initialement situé en $(x_b(s, t=0) = 0, \theta_b(s))$. La bijectivité du contour — c'est à dire de $x_b(s; t) \mapsto \theta_b(s; t)$ avec $(x_b(s; t), \theta_b(s; t))$ dans le bord, reste bijective au cours du temps — implique que la vitesse effective soit constante de $\theta : v_{[\nu]}^{\text{eff}}(\theta) = v$, d'où pour une particule quelconque de position $(x(s; t), \theta(s))$

$$\frac{x(s; t)}{t} = v_{[\nu^*(v(s), \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta(s)) = v(s),$$

avec la mise à l'échelle $x \rightarrow v = x/t$:

$$\nu(x(s, t), \theta(s)) = \nu^*(v(s), \theta(s)),$$

νu^* est indépendante du temps. De plus (6.14) deviens

$$\nu^*(x_b(s; t)/t, \theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } \theta < \theta_b(s) \\ 0 & \text{si } \theta > \theta_b(s) \end{cases}. \quad (6.15)$$

Ainsi, pour simuler la déformation du bord, il suffit de calculer la vitesse effective :

$$v_{[\nu^*]}^{\text{eff}}(\theta) = \frac{i\text{id}_{[\nu^*]}^{\text{dr}}(\theta)}{1_{[\nu^*]}^{\text{dr}}(\theta)}.$$

Une fois cette vitesse effectif obtenue, on peut en déduire la position du bord après un temps t de déformation :

$$x(s; t) = v_{[\nu^*]}^{\text{eff}}(\theta(s)) \cdot t.$$

Connaissant le bord $(x_b(s; t), \theta_b(s))$ au temps t , on en déduit le facteur d'occupation ν avec (6.15) (Fig. 6.9(e)(g)), puis $\rho_{s[\nu]} = \hbar/m1_{[\nu]}^{\text{dr}}$ et $\rho_{[\nu]} = \nu * \rho_{s[\nu]}$ et donc la densité linéique $n_{[\nu]}(x; t) = \int \rho_{[\nu]}(x, \theta; t) d\theta$ (Fig. 6.9(e)(f)).

Sachant que $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$ et que μ dépend de T et de n_0 , on ajuste la température des simulations GHD sur les données expérimentales de la déformation du bord (Fig. 6.7). Cet ajustement donne $T = 560 \text{nK}$.

6.3.7 Simulation de l'expansion

Nous effectuons une sélection du système après la déformation du bord (Fig. 6.10(a)) et nous procédons à une expansion unidimensionnelle de cette tranche (Fig. 6.10(e)). Contrairement au cas de la déformation du bord, le contour n'est ici pas bijectif. La vitesse effective $v_{[\nu(x(s; \tau), \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta(s))$ dépend donc du temps d'expansion τ .

Pour contourner cela, nous découpons le contour en deux parties : le bord gauche $(x_g(s; t), \theta_g(s))$ et le bord droit $(x_d(s; t), \theta_d(s))$, de sorte que ces deux bords soient bijectifs (Fig. 6.10(a) et (e)). Avec cette découpe, après une expansion unidimensionnelle d'une durée τ , (6.14) devient :

$$\nu(x(s; \tau), \theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } \theta \in [\theta_g(s), \theta_d(s)] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Ayant la connaissance de $v_{[\nu(x(s; \tau), \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta(s))$, on peut suivre l'évolution du contour, et donc de la densité spatiale $n(x; t)$ (Fig. 6.10(f)).

Après avoir réalisé une simulation GHD avec $T = 560 \text{nK}$, valeur obtenue via l'ajustement sur la déformation du bord, on compare cette simulation aux données expérimentales après $\tau = 30 \text{ ms}$ d'expansion. On compare alors la courbe orange aux données en bleu dans la Fig. 6.11(b).

La simulation ne reproduit pas bien les données, comme attendu : certains phénomènes physiques ne sont pas pris en compte dans les simulations GHD. Cela se manifeste notamment autour de $\pm 350 \mu\text{m}$.

Nous avons donc effectué un ajustement direct de T sur les données après expansion (courbe grise de la Fig. 6.11(b)).

Simulation GHD de l'expansion de la tranche

Pour interpréter quantitativement les profils mesurés, nous simulons le protocole complet à l'aide de la GHD à l'échelle d'Euler. L'état initial est supposé **thermique**, avec une température ajustée sur le profil du bord mesuré avant la sélection (Fig. 6.7(a)), ce qui conduit à $T = 560 \text{nK}$.

La tranche est modélisée par une découpe parfaite de la distribution $\nu(x, \theta)$: elle est mise à zéro hors de $[x_0 - \ell/2, x_0 + \ell/2]$, et laissée inchangée à l'intérieur. La largeur ℓ est déterminée pour reproduire le nombre total d'atomes sélectionnés, et vaut $\ell = 24 \mu\text{m}$ dans notre cas.

La simulation reproduit les principales caractéristiques du profil d'expansion, notamment l'**asymétrie nette** de la distribution (Fig. 6.11(a)). Néanmoins, deux effets élargissent le profil simulé par rapport à une hypothétique reconstruction directe de $\rho(x_0, \theta)$:

1. $\Pi(\theta)$ intègre des contributions de $\rho(x, \theta)$ sur tout l'intervalle $[x_0 - \ell/2, x_0 + \ell/2]$ — elle n'est donc pas strictement locale.
2. Le temps d'expansion τ est fini, ce qui introduit un élargissement cinématique.

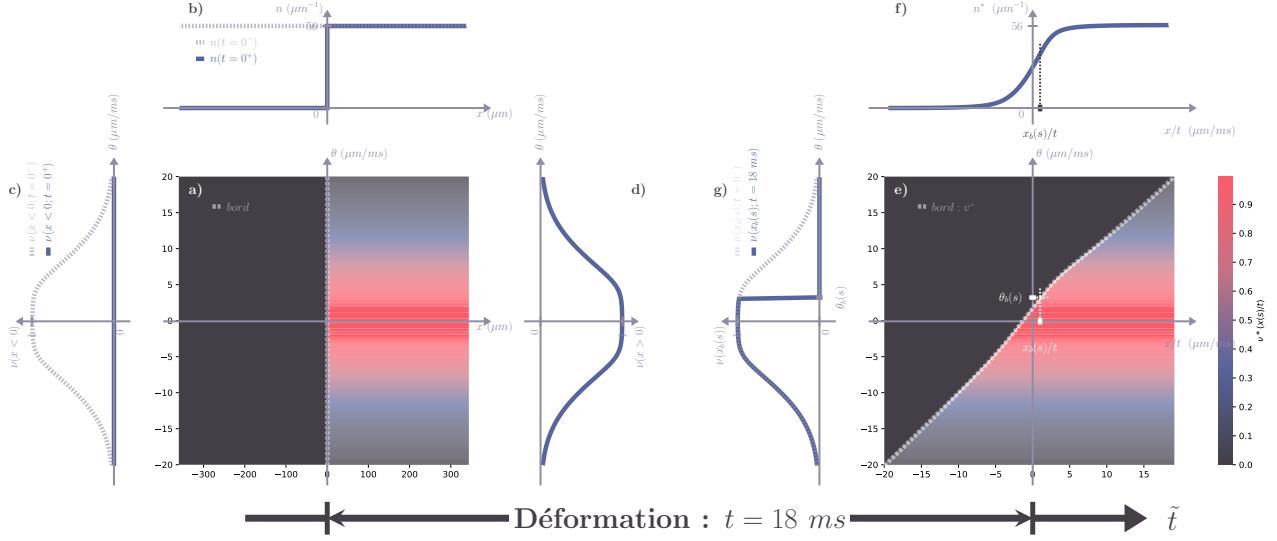


FIGURE 6.9 – (a) À l'instant $t = 0^+$, immédiatement après le « quench bipartite » en $x = 0$, le facteur d'occupation est donné par $\nu(x, \theta; t = 0^+) = \nu_0(\theta)$ pour $x > 0$ et est nul pour $x < 0$. Le bord initial représenté en tirets par l'ensemble des points $(x_b(s; t = 0^+) = 0, \theta(s; t = 0^+))$. (b) Densité spatiale linéique $n(x)$: en pointillés, $n(x; t = 0^-) = \int \rho(x, \theta; t = 0^-) d\theta = n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$ juste avant le quench ; en ligne pleine, $n(x; t = 0^+) = n_0$ pour $x > 0$ et 0 pour $x < 0$. (c) À gauche de la coupure ($x < 0$) : en pointillés, $\nu(x, \theta; t = 0^-) = \nu_0(\theta)$; en ligne pleine, $\nu(x, \theta; t = 0^+) = 0$. (d) À droite de la coupure ($x > 0$), le facteur d'occupation reste inchangé : $\nu(x, \theta; t = 0^+) = \nu_0(\theta)$. (e) À l'instant $t = 18 \text{ ms}$, après l'évolution balistique post-quench, le facteur d'occupation est donné par $\nu^*(x_b(s; t)/t, \theta) = \nu_0(\theta)$ pour $\theta < \theta_b(s; t)$, et nul pour $\theta > \theta_b(s; t)$, résolvant l'équation (6.5), pour $t > 0$. $\nu(x(s; t), \theta(s; t)) = \nu^*(x(s; t)/t, \theta(s; t))$ est invariant de la déformation ie de $t > 0$. Le bord représenté en tirets par l'ensemble des points $(x_b(s; t)/t, \theta(s; t))$. Étant donné que la coupure initiale est en $x = 0$ et que l'évolution du bord est balistique, cette courbe résoud $v_{[\nu^*(x(s; t)/t, \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta(s; t)) = x(s; t)/t = v(s)$ (6.2). (f) Densité spatiale $n^*(x/t)$ en régime hydrodynamique (scaling). (g) Pour les atomes à droite de la coupure : en pointillés, $\nu^*(x(s; t)/t, \theta) = \nu_0(\theta)$; en ligne pleine, $\nu^*(x_b(s; t)/t, \theta) = \nu_0(\theta)$ pour $\theta < \theta_b(s; t)$ et nul pour $\theta > \theta_b(s; t)$. Le raisonnement est similaire pour les atomes à gauche de la coupure.

4. Comparaison aux données expérimentales et discussion La comparaison entre le profil mesuré et celui prédit par la GHD à $T = 560 \text{ nK}$ est présentée en Fig. 6.11(b). Bien que la forme globale soit reproduite, des écarts significatifs subsistent, notamment dans la partie centrale du profil (jusqu'à 25 %).

Un ajustement du profil d'expansion avec la température comme paramètre libre donne une température apparente de $T = 1550 \text{ nK}$. Toutefois, cette valeur surestime nettement la température initiale déduite du profil du bord, et ne permet pas de reproduire l'ensemble des observations.

Ces écarts peuvent s'expliquer par des effets hors du cadre de la GHD eulérienne :

- **Présence de queues à droite du profil expérimental** : absentes dans les prédictions, elles pourraient résulter d'un chauffage local par le faisceau de poussée utilisé pour la sélection.
- **Effets diffusifs** : dans les régions à forts gradients, comme le bord du gaz, des corrections non eulériennes — telles que des termes de diffusion — pourraient devenir significatives.

Conclusion Ce protocole permet de sonder la structure locale de la distribution en rapidité d'un gaz 1D hors équilibre, et met en évidence une forte asymétrie cohérente avec les prédictions de la GHD. La comparaison avec la théorie permet de quantifier les limites de l'approche eulérienne, et suggère des pistes pour affiner la modélisation, notamment en incluant des effets de diffusion ou des perturbations induites par la manipulation expérimentale.

6.4 Détails sur les calculs

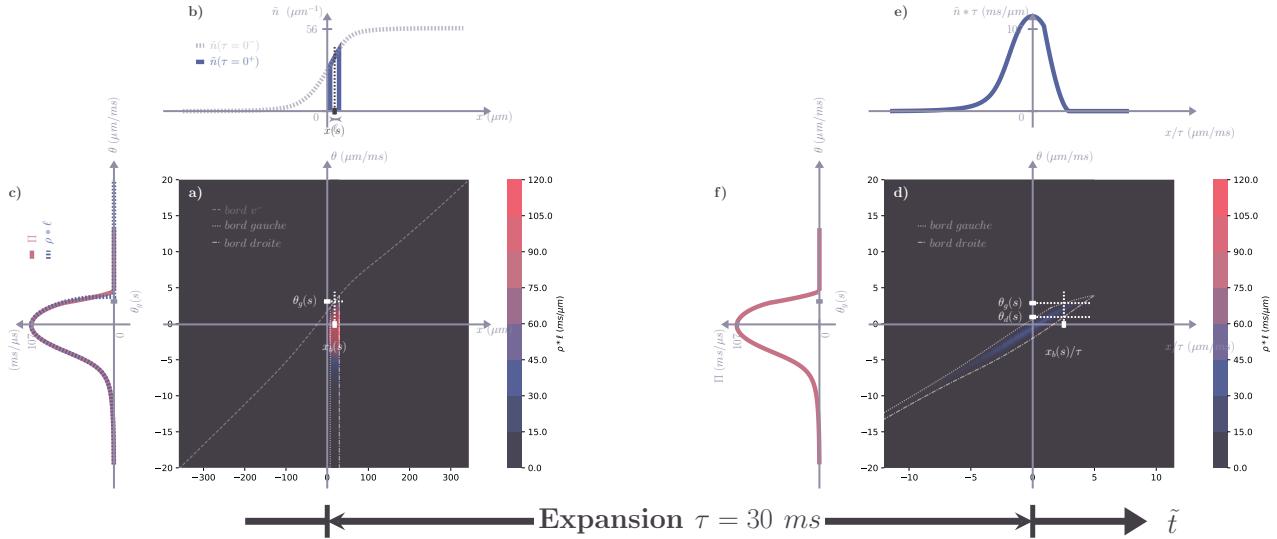


FIGURE 6.10 – (a) À l'instant $\tau = 0^+$, immédiatement après la sélection de la tranche centrée en $x = x_0$ et de largeur ℓ , la distribution de rapidité localement résolue est donnée par $\rho(x, \theta; \tau = 0^+) = \nu(x, \theta; t = 18 \text{ ms}) \rho_s(x, \theta; t = 18 \text{ ms})$ pour $|x - x_0| < \ell/2$, et est nulle pour $|x - x_0| > \ell/2$. Le bord gauche immédiatement après la sélection est représenté en pointillés par l'ensemble des points $(x_g(s; \tau = 0^+), \theta_g(s; \tau = 0^+))$, et le bord droit en tiret-point par l'ensemble des points $(x_d(s; \tau = 0^+), \theta_d(s; \tau = 0^+))$. Le bord complet est donc la concaténation de ces deux ensembles. (b) Densité linéique spatiale $\tilde{n}(x)$: en pointillés, $n(x; t = 18 \text{ ms})$ juste avant la sélection ; en ligne pleine, $\tilde{n}(x; \tau = 0^+)$, égal à $n(x; t = 18 \text{ ms})$ pour $|x - x_0| < \ell/2$ et nul ailleurs. (c) Distribution de rapidité après sélection, $\Pi(\theta) = \int \rho(x, \theta; \tau) dx$, invariante sous l'évolution unidimensionnelle, représentée en rouge. La distribution localement résolue en $x_b(s; \tau = 0^+)$, $\rho(x_b(s; \tau = 0^+), \theta; \tau = 0^+)$, est représentée en pointillés. Cette distribution est localement conservée, i.e., $\rho(x(s; \tau), \theta(s; \tau))$ reste inchangée au cours de l'évolution unidimensionnelle, indépendamment de τ . (e) Distribution localement résolue $\rho(x, \theta; \tau = 30 \text{ ms})$ après une évolution unidimensionnelle de 30 ms. Le bord gauche est représenté en pointillés par les points $(x_g(s; \tau = 30 \text{ ms}), \theta_g(s; \tau = 30 \text{ ms}))$, et le bord droit en tiret-point par $(x_d(s; \tau = 30 \text{ ms}), \theta_d(s; \tau = 30 \text{ ms}))$. (f) Densité spatiale $\tilde{n}(x; \tau = 30 \text{ ms})$. (g) Distribution de rapidité $\Pi(\theta)$ après la sélection (identique à celle de (c)).

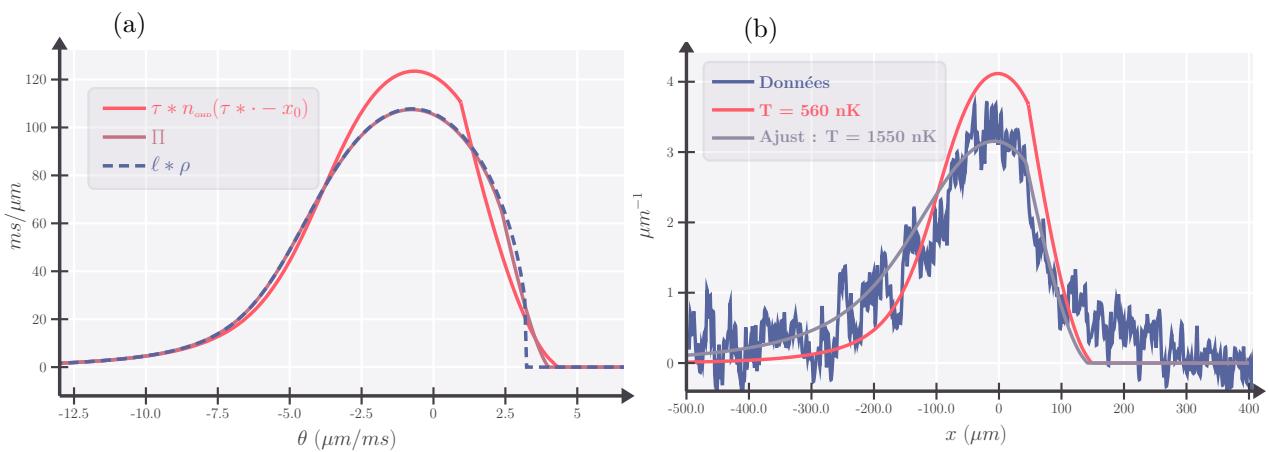


FIGURE 6.11 – (a) Profil de densité après expansion de la tranche : effets de la largeur finie et du temps d'expansion fini. Courbe orange : profil obtenu par simulation GHD après expansion pendant $\tau = 30 \text{ ms}$, avec $T = 560 \text{ nK}$. Courbe marron : distribution asymptotique $\Pi((x - x_0)/\tau)/\tau$. Courbe pointillée noire : approximation $\ell\rho(x_0, (x - x_0)/\tau)/\tau$ dans le cas d'une tranche étroite. (b) Comparaison aux données expérimentales. En bleu : profil expérimental après expansion pendant $\tau = 30 \text{ ms}$. En orange : simulation GHD avec $T = 560 \text{ nK}$. En magenta : ajustement du profil expérimental donnant $T = 1550 \text{ nK}$.

Chapitre 7

Mise en place d'un confinement longitudinale dipolaire

Contents

7.1	Transformation de jauge et simplification du Hamiltonien	63
7.2	Potentiel Dipolaire d'un atome à deux niveaux - généralité	64
7.2.1	Introduction	64
7.2.2	Système à deux niveaux et interaction avec le champ	64
7.2.3	Interprétation du traitement du second ordre : transition virtuelle et origine du potentiel dipolaire (AC-Stark)	65
7.2.4	Expression explicite du potentiel dipolaire	66
7.3	Piégeage dipolaire d'un atome à plusieurs niveaux	67
7.3.1	Atomes multiniveaux et origine du potentiel dipolaire dans le formalisme quantique	67
7.4	Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne	70
7.4.1	Structure électronique du Rubidium	70
7.4.2	Structure matricielle du potentiel dipolaire	71
7.4.3	Cas de désaccords très importants	71
7.4.4	Structure fine et base des états $ L, S; J, m_J\rangle$	73
7.5	Notre dispositif expérimental	75
7.5.1	Choix du laser pour le piégeage dipolaire	75
7.5.2	Amplification par Tapered Amplifier (TA)	78

Introduction

Dans cette section, nous présentons l'implémentation expérimentale et théorique d'un piégeage dipolaire dans le bleu, permettant de confiner des atomes de rubidium froids à l'aide de deux barrières de potentiel. Contrairement au cas plus standard du piégeage rouge, où les atomes sont attirés vers les maxima d'intensité, un piégeage dans le bleu ($\Delta > 0$) repousse les atomes vers les minima d'intensité lumineuse, créant ainsi des barrières efficaces.

Le formalisme utilisé repose sur une description quantique du couplage dipolaire entre un champ laser classique quasi-monochromatique et un atome à deux niveaux. Nous déduisons l'Hamiltonien effectif en seconde quantification sans faire appel à des transformations de jauge. L'objectif est d'obtenir une expression exploitable pour le potentiel optique ressenti par les atomes dans le régime de grand désaccord.

[Insérer ici un schéma des niveaux d'énergie du Rubidium (transitions D1 et D2, base fine)]

7.1 Transformation de jauge et simplification du Hamiltonien

Cadre sans potentiel vecteur. Soit une particule de masse m couplée à un champ électromagnétique. Dans une jauge $\mathcal{J} \equiv (\vec{A}, \Phi)$, le quadivecteur potentiel s'écrit $A^\mu = \{A^0 \equiv \Phi/c, A^i \equiv \vec{A}\}$. Si l'on définit la dérivée

covariante comme $\mathcal{D}_\mu = \partial_\mu + \frac{iq}{\hbar} A_\mu = \{\mathcal{D}_t \equiv \partial_t + \frac{iq}{\hbar} \Phi, \vec{\mathcal{D}} = \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar} \vec{A}\}$, l'équation de Schrödinger régissant l'évolution de la fonction d'onde $|\psi\rangle$ prend la forme manifestement invariante :

$$i\hbar \mathcal{D}_t |\psi\rangle = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\mathcal{D}} \right)^2 |\psi\rangle, \text{ soit } i\hbar \partial_t |\psi\rangle = H_{\mathcal{J}} |\psi\rangle, \text{ avec } H_{\mathcal{J}} = \frac{1}{2m} (\vec{P} - q\vec{A})^2 + q\Phi$$

Hamiltonien simplifié. Dans une autre jauge \mathcal{J}' , le potentiel s'écrit $A'^\mu = \{\Phi'/c, \vec{A}'\}$ avec $A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu \chi$, où χ est une fonction scalaire dépendant de l'espace et du temps. Un argument rapide pour garantir que cette transformation conserve les équations de Maxwell est que le tenseur électromagnétique $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ est invariant par changement de jauge. Dans cette nouvelle jauge, la dérivé corariante s'écrit $\mathcal{D}'_\mu = \partial_\mu + \frac{iq}{\hbar} A'_\mu = \{\mathcal{D}'_t \equiv \partial_t + \frac{iq}{\hbar} (\Phi - \partial_t \chi), \vec{\mathcal{D}}' \equiv \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar} (\vec{A} + \vec{\nabla} \chi)\}$, l'équation de Schrödinger s'écrit

$$i\hbar \mathcal{D}'_t |\psi'\rangle = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\mathcal{D}}' \right)^2 |\psi'\rangle, \text{ soit } i\hbar \partial_t |\psi'\rangle = H_{\mathcal{J}'} |\psi'\rangle, \text{ avec } H_{\mathcal{J}'} = -q\partial_t \chi + \tilde{H}_{\mathcal{J}},$$

avec $|\psi'\rangle = \hat{T}_\chi(t) |\psi\rangle$, $\hat{T}_\chi(t) \equiv \exp\left(\frac{iq}{\hbar} \chi(\vec{R}, t)\right)$ et $\tilde{H}_{\mathcal{J}} = \hat{T}_\chi H_{\mathcal{J}} \hat{T}_\chi^\dagger = \frac{1}{2m} (\vec{P} - q(\vec{A} + \vec{\nabla} \chi))^2 + q\Phi$. Je choisis $\chi = -\vec{R} \cdot \vec{A}$ (ie $\mathcal{J}' \equiv (\vec{A})$). $\hat{T}_\chi(t)$ devient un opérateur translation de $iq\vec{A}$ dans l'espace des impulsion, et l'opérateur champs électrique transverse étant $\vec{E}_\perp = -\partial_t \vec{A}$. L'Hamiltonien $H_{\mathcal{J}'}$ devient :

$$\hat{H}_{\mathcal{J}'} = \tilde{H}_{\mathcal{J}} + \hat{H}_{\text{int}},$$

avec $\tilde{H}_{\mathcal{J}} = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + q\Phi$. L'opérateur de couplage atome-rayonnement quantifié est donné par : $\hat{H}_{\text{int}} = -\vec{D} \cdot \vec{E}_\perp$, où \vec{D} est l'opérateur de moment dipolaire électrique, défini par : $\vec{D} = q\vec{R}$.

Conclusion – Simplification par transformation de jauge La transformation de jauge que nous avons appliquée permet de travailler dans un cadre où le potentiel vecteur est nul. Dans cette jauge particulière, le Hamiltonien du système est considérablement simplifié, car le couplage au champ électromagnétique ne se fait plus par le terme de couplage minimal $(\vec{P} - q\vec{A})^2$, mais uniquement à travers un potentiel scalaire effectif.

Cette simplification rend l'analyse théorique plus accessible et facilite l'interprétation physique du rôle du champ électromagnétique, en le ramenant à une simple modulation de l'énergie potentielle.

7.2 Potentiel Dipolaire d'un atome à deux niveaux - généralité

7.2.1 Introduction.

Un atome neutre placé dans un champ électrique \vec{E}_\perp développe un moment dipolaire induit $\vec{D}(t)$. Si le champ varie lentement devant la dynamique interne de l'atome, le moment dipolaire reste aligné avec la composante transverse du champ, $\vec{E}_\perp(t)$, et l'énergie potentielle d'interaction s'écrit $\hat{H}_{\text{int}}(t) = -\vec{D}(t) \cdot \vec{E}_\perp(t)$.

Dans cette configuration, l'énergie potentielle est minimale là où l'intensité du champ est maximale. L'atome est alors attiré vers les régions de forte intensité du champ électrique : on parle de *piège dipolaire optique*, ou encore de *pince optique*.

7.2.2 Système à deux niveaux et interaction avec le champ.

Considérons un atome modélisé par deux états, le fondamental $|g\rangle$ d'énergie $\hbar\omega_g$ et l'excité $|e\rangle$ d'énergie $\hbar\omega_e$, couplés par le champ électrique $\vec{E}_\perp(\vec{r}, t) = \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) \cos(\omega t)$. Le champ laser est loin de la résonance avec l'état excité $|e\rangle$, c'est-à-dire que le désaccord $\Delta = \omega - \omega_{e \rightarrow g}$ (avec la fréquence de transition $\omega_{g \rightarrow e} = \omega_e - \omega_g$) est grand comparé à la fréquence de Rabi définissant le couplage entre le dipôle et le champ

$$\Omega(\vec{r}) = -\langle e | \vec{D} \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) | g \rangle / \hbar = -\vec{d}_{g \leftrightarrow e} \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) / \hbar,$$

avec $\vec{d}_{g \leftrightarrow e} = \langle e | \vec{D} | g \rangle$ l'élément de matrice dipolaire réel entre $|g\rangle$ et $|g\rangle$.

[Insérer ici un schéma des niveaux d'énergie du Rubidium (transitions D1 et D2, base fine)]

7.2.3 Interprétation du traitement du second ordre : transition virtuelle et origine du potentiel dipolaire (AC-Stark)

Transition virtuelle et suppression des transitions réelles. Lorsque le champ laser est fortement dé-tuné par rapport à la résonance atomique, c'est-à-dire que le désaccord $\Delta = \omega - \omega_{g \rightarrow e}$ vérifie $|\Delta| \gg \Gamma$, l'excitation réelle de l'atome devient négligeable. En effet, le paramètre Γ désigne la *largeur naturelle* de la transition $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$, c'est-à-dire le taux d'émission spontanée d'un photon par un atome excité. Elle est liée à la durée de vie τ de l'état $|e\rangle$ par $\Gamma = 1/\tau$, et dans le cas d'une transition dipolaire électrique peut être calculée à partir de l'électrodynamique quantique selon la formule :

$$\Gamma = \frac{\omega_{e \rightarrow g}^3}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3} |\vec{d}_{e \leftrightarrow g}|^2, \quad (7.1)$$

où ε_0 est la permittivité du vide, et c la vitesse de la lumière.

La probabilité d'exciter réellement l'atome vers l'état $|e\rangle$ devient négligeable : le champ ne peut pas induire une véritable transition $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$.

Effet de second ordre : origine du potentiel dipolaire. Toutefois, même si le champ laser ne permet pas de peupler réellement l'état excité, il peut induire des transitions *virtuelles* via l'interaction dipolaire $\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}}$. Le système passe temporairement par l'état $|e\rangle$ sans s'y stabiliser :

$$|g\rangle \xrightarrow{\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}}} |e\rangle \xrightarrow{\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}}} |g\rangle,$$

Ce processus modifie l'énergie propre de l'état $|g\rangle$, générant un **décalage AC-Stark**, interprété comme un *potentiel dipolaire*.

Ce phénomène s'interprète naturellement comme un effet de second ordre en théorie des perturbations indépendantes du temps. La correction d'énergie associée à l'état $|g\rangle$ s'écrit :

$$\delta E_g^{(2)} = \frac{|\langle e | \hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} | g \rangle|^2}{\hbar\Delta}. \quad (7.2)$$

Cette correction est responsable de l'apparition d'un potentiel effectif ressenti par l'atome, appelé *potentiel dipolaire optique*.

Analyse perturbative à différents ordres :

- **Ordre 0** — énergie non perturbée : L'atome est dans l'état fondamental $|g\rangle$. Son énergie propre est simplement :

$$E_g^{(0)} = E_g.$$

- **Ordre 1** — pas de correction diagonale :

Dans l'approximation des grandes longueurs d'onde $\lambda \gg \langle \vec{r} \rangle$, c'est-à-dire lorsque la longueur d'onde du champ laser est grande devant la taille de l'atome, l'interaction lumière-matière se décrit par le *Hamiltonien dipolaire électrique*. Dans ce cadre, la correction d'énergie au premier ordre est donnée par :

$$\delta E_g^{(1)} = \langle g | \hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} | g \rangle.$$

Or, pour un champ oscillant typiquement de la forme $\vec{E}_\perp(t) = \frac{1}{2}\vec{\mathcal{E}}e^{-i\omega t} + \text{c.c.}$, ce terme est rapide et oscille à la fréquence du laser. De plus, dans une base d'états propres de parité définie (comme c'est le cas pour les niveaux atomiques), l'opérateur \vec{D} étant de parité impaire, son **élément diagonal est nul** :

$$\langle g | \vec{D} | g \rangle = 0 \Rightarrow \langle g | \hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} | g \rangle = 0.$$

Ainsi, non seulement $\delta E_g^{(1)}(t) \sim \cos(\omega t)$ est une oscillation à haute fréquence, mais sa moyenne temporelle est aussi nulle :

$$\langle \delta E_g^{(1)} \rangle_t = 0.$$

Par conséquent, il n'y a **aucun décalage d'énergie net à l'ordre 1** : c'est uniquement à l'ordre 2 que l'interaction induit un potentiel stationnaire, correspondant au déplacement AC-Stark.

- **Ordre 2** — transition virtuelle : On applique alors la théorie des perturbations au second ordre, ce qui donne la correction :

$$\delta E_g^{(2)} = \frac{|\langle e | \hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} | g \rangle|^2}{\hbar \Delta}, \quad (7.3)$$

Cette correction donne lieu à un *potentiel effectif* ressenti par l'atome dans son état fondamental, appelé **potentiel dipolaire optique**.

7.2.4 Expression explicite du potentiel dipolaire

Champ électrique appliqué. On considère un champ électrique de la forme :

$$\vec{E}_\perp(\vec{r}, t) = \frac{1}{2} \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) e^{-i\omega t} + \text{c.c.}, \quad \text{avec } \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) = \mathcal{E}(\vec{r}) \vec{u} \quad (7.4)$$

où \vec{u} est un vecteur de polarisation unitaire, et $\mathcal{E}(\vec{r})$ est l'amplitude complexe spatiale du champ.

Potentiel dipolaire. La correction d'énergie à l'ordre 2 s'écrit alors :

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) = \delta E_g^{(2)} = \frac{\hbar \Omega^2(\vec{r})}{4\Delta}, \quad (7.5)$$

et en exprimant la fréquence de Rabi Ω via Γ et I_{sat} , on obtient la forme opérationnelle suivante du potentiel :

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) = \frac{\hbar \Gamma^2}{8I_{\text{sat}}} \cdot \frac{I(\vec{r})}{\Delta}, \quad (7.6)$$

où : $I(\vec{r}) = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c |\vec{\mathcal{E}}(\vec{r})|^2$ est l'intensité locale du champ laser et $I_{\text{sat}} = \frac{\hbar \omega_{e \rightarrow g}^3 \Gamma}{12\pi c^2}$ est l'intensité de saturation.

Cette forme montre que le potentiel dipolaire est proportionnel à l'intensité lumineuse locale.

Ce potentiel permet de décrire le confinement des atomes dans des régions où $I(\vec{r})$ est élevé (ou faible, selon le signe de Δ), formant ainsi des barrières optiques contrôlables avec une résolution sub-micronique.

Conditions de validité. Les expressions (7.5) et (7.6) pour le potentiel dipolaire sont obtenues sous les hypothèses suivantes, qui assurent la validité du modèle à deux niveaux et du traitement perturbatif :

- **Réduction à un sous-espace résonant** : le champ est quasi-résonant avec une seule transition atomique, ce qui suppose que le désaccord est faible devant les fréquences optiques impliquées, i.e. $|\Delta| \ll \omega, \omega_{g \rightarrow e}$. Cela permet de restreindre le système à deux niveaux et d'ignorer les autres transitions dipolaires.
- **Régime de grand désaccord en fréquence (large détuning)** : lorsque $|\Delta| \gg \Gamma$, c'est-à-dire lorsque le désaccord est grand devant la largeur naturelle de la transition, les excitations réelles vers l'état excité sont fortement supprimées. L'interaction lumière-matière peut alors être traitée en perturbation du second ordre : l'atome reste majoritairement dans son état fondamental, et l'effet du champ lumineux se manifeste sous la forme d'un potentiel effectif induit par des couplages virtuels.
- **Régime de faible saturation** : on suppose que la fréquence de Rabi Ω est beaucoup plus faible que le désaccord, i.e. $\Omega \ll |\Delta|$. Cette condition garantit que la population de l'état excité reste négligeable, ce qui justifie l'approximation adiabatique sur l'état fondamental.

Interprétation physique. Le potentiel $U_{\text{dip}}(\vec{r})$ représente une énergie potentielle effective induite par l'interaction entre un atome neutre et le champ laser. Il dépend explicitement de la position \vec{r} via l'intensité locale du champ lumineux $I(\vec{r})$. Ce potentiel guide ainsi la dynamique de l'atome comme le ferait un potentiel externe classique.

La direction du mouvement dépend du signe du désaccord $\Delta = \omega - \omega_{e \rightarrow g}$:

- Si $\Delta < 0$ (désaccord rouge), le potentiel est attractif : les atomes sont attirés vers les zones de forte intensité lumineuse.
- Si $\Delta > 0$ (désaccord bleu), le potentiel est répulsif : les atomes sont repoussés vers les régions de faible intensité.

Ce phénomène est à la base des pièges dipolaires optiques, largement utilisés dans les expériences de refroidissement et de confinement d'atomes ultrafroids.

Confinement optique. Le potentiel dipolaire $U_{\text{dip}}(\vec{r})$, dépendant de la position via l'intensité du champ laser, permet de confiner des atomes neutres en créant des paysages de potentiel contrôlés. Selon la géométrie du champ lumineux, on peut générer des régions de potentiel attractif ou répulsif.

Dans le cas d'un désaccord bleu ($\Delta > 0$), les atomes sont repoussés des zones de forte intensité. On peut alors façonner des *barrières de potentiel* en structurant l'intensité lumineuse, par exemple à l'aide de faisceaux interférents ou d'optiques diffractives. Cela permet de créer des cavités, des guides ou des réseaux où les atomes sont confinés entre les zones lumineuses, sans nécessairement focaliser le faisceau.

Diffusion spontanée résiduelle. Un autre aspect important de l'interaction lumière-matière est la diffusion spontanée induite par le champ lumineux. Même lorsque le champ est fortement dé-tuné et que l'état excité n'est que virtuellement peuplé, une faible probabilité de transition réelle subsiste. Elle conduit à l'émission spontanée de photons, accompagnée d'un transfert aléatoire d'impulsion à l'atome, ce qui génère un chauffage du nuage atomique.

Le taux de diffusion spontanée dans le régime dispersif s'écrit :

$$\Gamma_{\text{sp}}(\vec{r}) = \frac{\Gamma \Omega^2(\vec{r})}{4\Delta^2} = \frac{\Gamma^3}{8I_{\text{sat}}} \cdot \frac{I(\vec{r})}{\Delta^2}. \quad (7.7)$$

Il est donc crucial, pour limiter le réchauffement, de travailler à fort désaccord $|\Delta| \gg \Gamma$, tout en maintenant une intensité suffisante pour produire un potentiel dipolaire profond.

Optimisation du régime dispersif pour un potentiel donné. À partir des expressions (7.6) et (7.7), on peut analyser comment minimiser le taux de diffusion spontanée Γ_{sp} , sous la contrainte de produire un potentiel dipolaire U_{dip} fixé.

On observe en effet que :

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) \propto \frac{I(\vec{r})}{\Delta}, \quad \text{tandis que} \quad \Gamma_{\text{sp}}(\vec{r}) \propto \frac{I(\vec{r})}{\Delta^2}.$$

À potentiel U_{dip} fixé, cela implique que :

$$I(\vec{r}) \propto \Delta \quad \Rightarrow \quad \Gamma_{\text{sp}}(\vec{r}) \propto \frac{1}{\Delta}.$$

Autrement dit, pour produire un potentiel donné, le taux de diffusion diminue linéairement avec $|\Delta|$. Il est donc avantageux de travailler à grand désaccord : plus Δ est grand, plus l'intensité requise est élevée, mais moins le taux de diffusion est important.

Ce raisonnement montre que l'on n'a pas véritablement un « compromis » entre I et Γ_{sp} , mais plutôt une *stratégie optimale* : à potentiel fixé, augmenter le désaccord est toujours bénéfique vis-à-vis du chauffage.

7.3 Piégeage dipolaire d'un atome à plusieurs niveaux

7.3.1 Atomes multiniveaux et origine du potentiel dipolaire dans le formalisme quantique

Le modèle à deux niveaux est suffisant pour introduire le concept de piégeage dipolaire, mais il reste limité pour décrire les détails réels d'un atome comme le ^{87}Rb , qui possède une structure hyperfine et fine complexe. Dans ce contexte, le potentiel dipolaire dépend du sous-niveau quantique occupé par l'atome, et le traitement doit être généralisé.

Description quantique de l'atome et du champ laser

Considérons un atome immobile possédant un état fondamental $|g\rangle$ et une série d'états excités $|e_i\rangle$, d'énergies respectives $\hbar\omega_g$ et $\hbar\omega_i$. Le champ laser est quantifié dans un volume V , polarisé selon \vec{u} , et d'expression

$$\vec{E}_\perp(t) = \hat{\mathcal{E}} \vec{u} \cos(\omega t) \quad \longrightarrow \quad \hat{E}_\perp = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 V}} \vec{u} (\hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}^\dagger),$$

où $\hat{\mathbf{a}}$ et $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ sont les opérateurs d'annihilation et de création de photons à la fréquence ω .

L'hamiltonien total du système « atome + champ » s'écrit alors :

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}_{\text{at}} + \hat{\mathbf{H}}_{\text{L}} + \hat{\mathbf{H}}_{\text{int}},$$

dans le formalisme **atome + champ quantifié**, aussi appelé **formalisme de l'atome habillé**, avec :

- $\hat{H}_{\text{at}} = \sum_i \hbar\omega_i |e_i\rangle\langle e_i|$ l'hamiltonien de l'atome. Il décrit les états propres internes (typiquement les niveaux électroniques) sans interaction avec le champ. Ici, chaque état excité $|e_i\rangle$ est associé à une énergie $\hbar\omega_i$;
- $\hat{H}_{\text{L}} = \hbar\omega (\hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} + \frac{1}{2})$ l'hamiltonien du **champ électromagnétique quantifié** dans un mode unique (celui du laser). Il est représenté comme un oscillateur harmonique quantique avec énergie $\hbar\omega$ par photon, et opérateurs $\hat{\mathbf{a}}$, $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ de création/annihilation de photons. Le terme $\frac{1}{2}\hbar\omega$ est l'énergie du vide (qui peut être ignorée dans la plupart des cas) ;
- $\hat{H}_{\text{int}} = -\vec{D} \cdot \vec{E}_\perp$: interaction **dipolaire quantifiée** entre l'atome et le champ électrique transverse \vec{E}_\perp . L'Hamiltonien décrivant cette interaction, dans l'*approximation des grandes longueurs d'onde* ($\lambda \gg \langle \vec{r} \rangle$, où \vec{r} est la position relative de l'électron par rapport au noyau), prend la forme de l'**Hamiltonien dipolaire électrique** [?, ?]. L'opérateur de moment dipolaire atomique \vec{D} s'écrit : $\vec{D} = \sum_{e_i} \vec{d}_{g \rightarrow e_i} |g\rangle\langle e_i| + \text{h.c.}$ où $\vec{d}_{g \rightarrow e_i} = \langle g|\vec{D}|e_i\rangle$ est l'élément de matrice dipolaire entre les états $|g\rangle$ et $|e_i\rangle$, et "h.c." désigne le terme hermitien conjugué. Cette forme exprime que seules les transitions dipolaires électriques autorisées par les règles de sélection (parité, moment angulaire) contribuent au couplage.

États habillés et structure des niveaux

Les états propres de l'Hamiltonien non-interactif $\hat{H}_{\text{at}} + \hat{H}_{\text{L}}$ sont les produits tensoriels $|g, N\rangle$ et $|e_i, N\rangle$, décrivant un atome dans l'état $|g\rangle$ ou $|e_i\rangle$ avec N photons dans le mode du champ laser. Leurs énergies respectives sont $E_g = \hbar\omega_g + N\hbar\omega$ et $E_i = \hbar\omega_{e_i} + N\hbar\omega$.

On parle d'« états habillés » pour désigner cette base atomique + champ, qui servira à construire les états propres du système complet en présence d'interaction. L'interaction dipolaire $\hat{H}_{\text{int}} = -\vec{D} \cdot \vec{E}_\perp$ couple les états $|g, N+1\rangle$ et $|e_i, N\rangle$ via l'absorption d'un photon. Ce sont les seules transitions significatives, les autres étant très hors-résonance et négligées dans l'approximation séculaire.

Traitements perturbatifs et décalage d'énergie

Le champ étant loin de la résonance avec les états $|e_i\rangle$, on applique la théorie des perturbations indépendantes du temps au second ordre. L'interaction induit un décalage de l'énergie de l'état $|f\rangle$ donné par :

$$\delta E_f^{(2)} = \sum_{e_i} \frac{|\langle e_i, N | \hat{H}_{\text{int}} | g, N+1 \rangle|^2}{E_i - E_g}.$$

Annulation de la correction d'énergie au premier ordre

Dans le cadre de la théorie des perturbations indépendantes du temps, la correction d'énergie au premier ordre pour un état $|i\rangle$ est donnée par :

$$\delta E_i^{(1)} = \langle i | \hat{H}_{\text{int}} | i \rangle.$$

Dans le cas de l'interaction dipolaire, l'opérateur d'interaction $\hat{H}_{\text{int}} = -\vec{D} \cdot \vec{E}_\perp$ est de nature vectorielle, donc *de parité impaire*. En revanche, les états électroniques $|g\rangle$, $|e_i\rangle$, etc., sont des états de parité définie.

Or'un opérateur de parité impaire possède des éléments diagonaux nuls dans une base d'états de parité bien définie. Ainsi :

$$\langle g | \hat{H}_{\text{int}} | g \rangle = 0, \quad \langle e_i | \hat{H}_{\text{int}} | e_i \rangle = 0.$$

De manière générale, \hat{H}_{int} ne couple que des états de parité opposée : il est donc purement hors-diagonal dans la base des états propres de \hat{H}_{at} .

Il en résulte que la correction d'énergie au premier ordre est strictement nulle :

$$\delta E_i^{(1)} = 0.$$

La première contribution non nulle provient donc du second ordre, qui décrit des transitions virtuelles, telles que $|g\rangle \rightarrow |e_i\rangle \rightarrow |g\rangle$, responsables du décalage AC-Stark (ou potentiel dipolaire optique).

Approximation séculaire et sélection des transitions pertinentes

Dans le cadre du piégeage dipolaire, nous faisons l'hypothèse que le champ laser est **quasi-résonant** avec un **nombre restreint de transitions atomiques**. Autrement dit, la fréquence du laser ω est suffisamment proche de certaines transitions $\omega_{g \rightarrow e_i} = \omega_{e_i} - \omega_g$ de l'atome, de sorte que le désaccord $\Delta_i = \omega - \omega_{g \rightarrow e_i}$ est **petit devant les fréquences optiques** elles-mêmes : $|\Delta_i| \ll \omega_L, \omega_{g \rightarrow e_i}$. Cette hypothèse permet de simplifier l'analyse perturbative de l'interaction atome-laser : dans la somme intervenant dans la correction

d'énergie au second ordre, seuls les **termes proches de la résonance** (i.e., pour lesquels $E_g \simeq E_i \pm \hbar\omega$) contribuent significativement à la somme. En effet, pour ces termes, le dénominateur devient **petit**, ce qui rend leur contribution **dominante**. Les autres transitions, très éloignées en énergie, ont des dénominateurs très grands, et leur influence devient négligeable. Cette **troncature de la somme perturbative** constitue l'**approximation séculaire**.

Dans ce régime, l'interaction dipolaire sélectionne efficacement les couplages entre les états atomiques et photoniques **ayant une différence d'un seul photon** :

$$\hat{H}_{\text{int}} : |d, N+1\rangle \longleftrightarrow |e_i, N\rangle,$$

où $|f, N+1\rangle$ est un état fondamental avec $N+1$ photons, et $|e_i, N\rangle$ un état excité e_i avec N photons.

Dans notre cas spécifique, nous utilisons un **faisceau laser à environ 770 nm**, soit légèrement **au bleu** des raies principales du rubidium 87 :

- raie **D2** : $\lambda = 780$ nm, correspondant à la transition $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$,
- raie **D1** : $\lambda = 795$ nm, correspondant à la transition $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2}$.

Le faisceau à environ 770 nm est donc **hors résonance**, mais **pas trop éloigné** de ces transitions (désaccord de l'ordre de quelques dizaines de THz), ce qui garantit que la structure hyperfine peut être **négligée** dans un premier temps, et que l'interaction est bien décrite par la contribution dominante des raies D1 et D2. Dans ce régime de désaccord modéré, le potentiel dipolaire est obtenu comme une somme pondérée des contributions des transitions proches, et les autres transitions atomiques (plus énergétiques) peuvent être ignorées.

Expression des éléments de matrice dans l'interaction atome-champ cohérent

Les éléments intervenant dans l'équation de second ordre, qui donne la correction d'énergie d'un état atomique sous l'effet du champ laser, sont des éléments de matrice du type :

$$-\langle e_i, N | \vec{D} \cdot \vec{E}_\perp | g, N+1 \rangle.$$

Champ cohérent et états de Fock. Le champ électromagnétique émis par le laser est un état **cohérent**, noté $|\alpha\rangle$, qui est une superposition d'états de Fock $|N\rangle$ avec une distribution de Poisson centrée autour d'une valeur moyenne $\langle N \rangle$. Cela signifie que les composantes principales du champ se trouvent dans une bande étroite $\Delta N \ll \langle N \rangle$. Dans cette situation, les amplitudes de transition impliquant des changements d'un seul photon, comme $\langle N | \vec{E}_\perp | N+1 \rangle$, varient très peu avec N , et l'on peut faire l'approximation :

$$\langle N | \vec{E}_\perp | N+1 \rangle \approx \mathcal{E} \sqrt{N+1} \simeq \mathcal{E} \sqrt{\langle N \rangle}.$$

Ainsi, l'élément de matrice global devient simplement proportionnel à l'amplitude classique du champ.

Équivalence entre champ quantique et champ classique Considérons un champ électromagnétique monochromatique de fréquence ω , quantifié dans un volume V , contenant en moyenne $\langle N \rangle$ photons.

- Du point de vue quantique, l'énergie moyenne d'un champ dans un seul mode est donnée par : $\langle \hat{H}_L \rangle = \hbar\omega (\langle N \rangle + \frac{1}{2})$. En négligeant l'énergie du point zéro $\frac{1}{2}\hbar\omega$, qui ne contribue pas aux transitions physiques, on obtient :

$$E_{\text{quantique}} = \langle N \rangle \hbar\omega.$$

- Du point de vue classique, une onde électromagnétique de champ électrique $\vec{E}_\perp(t) = \mathcal{E} \cos(\omega t) \vec{u}$ transporte une densité d'énergie électrique : $u_E = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathcal{E}^2$, ce qui donne une énergie totale dans le volume V :

$$E_{\text{classique}} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathcal{E}^2 V.$$

En identifiant ces deux expressions dans un seul mode, on obtient la relation fondamentale :

$$\langle N \rangle \hbar\omega = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathcal{E}^2 V,$$

qui permet d'exprimer l'amplitude du champ électrique E_0 en fonction du nombre moyen de photons $\langle N \rangle$ dans le champ laser.

Conclusion. En conséquence, l'élément de matrice d'interaction s'écrit finalement :

$$\langle e_i, N | -\vec{D} \cdot \vec{E}_\perp | g, N+1 \rangle = -\frac{\mathcal{E}}{2} \langle e_i | \vec{D} \cdot \vec{u} | g \rangle.$$

Ce terme relie l'état atomique $|g\rangle$ au niveau excité $|e_i\rangle$, avec un couplage proportionnel à l'amplitude du champ classique et à l'élément de matrice dipolaire entre les deux états. C'est ce terme qui entre au numérateur dans l'expression de la correction d'énergie au second ordre, ce qui donne lieu au potentiel dipolaire optique.

(pour d on travaille avec L)

Structure des états électroniques et théorème de Wigner-Eckart

Les états électroniques d'un atome sont caractérisés par des nombres quantiques liés à leur structure fine. Un état est noté $|n, J, m\rangle$, où :

- n est le nombre quantique principal, qui détermine l'énergie orbitale globale ;
- J est le moment angulaire total (résultant du couplage spin-orbite $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$) ;
- $m \in [-J, J]$ est la projection du moment angulaire total sur un axe de quantification, généralement pris comme l'axe z .

L'opérateur dipolaire électrique \vec{D} est une observable vectorielle, c'est-à-dire un opérateur de rang 1 au sens des tenseurs sphériques. Cela permet d'utiliser le **théorème de Wigner-Eckart** pour factoriser les éléments de matrice en une partie géométrique et une partie dynamique. Pour une transition entre deux états électroniques $|n_g, J_g, m_{J_g}\rangle$ et $|n_e, J_e, m_{J_e}\rangle$, l'élément de matrice dipolaire projeté sur une direction de polarisation \vec{e} s'écrit :

$$\langle n_e, J_e, m_{J_e} | \vec{D} \cdot \vec{u} | n_g, J_g, m_g \rangle = d_{n_g J_g \leftrightarrow n_e J_e} \cdot \langle J_g, 1; m_g, q | J_e, m_e \rangle,$$

où :

- $d_{n_g J_g \leftrightarrow n_e J_e}$ est l'élément de matrice réduit. Il ne dépend pas des projections m , ni du type de polarisation, mais uniquement des orbitales atomiques et du moment angulaire total. Il contient l'information dynamique de la transition, souvent calculée ou mesurée expérimentalement.
- $\langle J_g, 1; m_g, q | J_e, m_e \rangle$ est un **coefficent de Clebsch-Gordan**, qui encode les règles de sélection angulaires et dépend :
 - de $q = 0, \pm 1$, indexant la composante du champ selon les polarisations π ($q = 0$) ou σ^\pm ($q = \pm 1$) ;
 - des valeurs de J_g, J_e , et des projections m_g, m_e .

Ainsi, l'amplitude de transition dépend à la fois :

1. du couplage entre les enveloppes électroniques (contenu dans $d_{n_g J_g \leftrightarrow n_e J_e}$) ;
2. de la géométrie angulaire (par la polarisation du champ et les sous-niveaux magnétiques des états).

Ce formalisme est essentiel pour calculer précisément les amplitudes de transition et les forces dipolaires induites par un champ laser polarisé, notamment dans des atomes à structure fine/ hyperfine comme le Rubidium 87. Il permet de traiter l'ensemble des transitions atomiques pertinentes dans un gaz d'atomes refroidis et piégés, sans avoir à traiter individuellement chaque sous-niveau magnétique.

7.4 Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne

7.4.1 Structure électronique du Rubidium

L'atome de Rubidium (^{87}Rb) est un **élément alcalin**, c'est-à-dire qu'il possède une configuration électronique de la forme $[\text{Kr}] 5s^1$, avec un unique électron de valence situé dans la couche $5s$. Cela implique que la structure énergétique de l'atome est essentiellement déterminée par ce seul électron périphérique, interagissant avec un cœur atomique fermé (couche interne complète).

En première approximation, on peut donc modéliser le Rubidium comme un système à un électron, à la manière de l'atome d'hydrogène, mais avec un potentiel effectif tenant compte du blindage dû aux électrons du cœur. Ce modèle permet de comprendre la structure fine et les transitions optiques dominantes de l'atome.

La structure des niveaux d'énergie est ensuite raffinée par les effets suivants :

- **Structure fine** : Elle résulte du couplage spin-orbite entre le moment angulaire orbital \vec{L} et le spin \vec{S} de l'électron de valence. Ce couplage divise chaque niveau orbital (par exemple, le niveau $5p$) en deux sous-niveaux caractérisés par le moment angulaire total $J = L \pm \frac{1}{2}$. Ainsi, la transition $5s \leftrightarrow 5p$ donne naissance aux deux raies bien connues : D1 (transition $5s_{1/2} \rightarrow 5p_{1/2}$ à 795 nm) et D2 (transition $5s_{1/2} \rightarrow 5p_{3/2}$ à 780 nm).

- **Structure hyperfine (non traitée ici)** : Elle résulte du couplage entre le moment angulaire total de l'électron (\vec{J}) et celui du noyau (\vec{I}), introduisant une subdivision supplémentaire des niveaux d'énergie. Bien que cette structure hyperfine soit essentielle dans certains contextes (résonances hyperfines, refroidissement laser, etc.), elle ne sera pas considérée ici car nous nous limitons à l'étude des effets associés à la structure fine.

Ce modèle à un électron actif simplifie grandement l'analyse des interactions entre le Rubidium et un champ laser, en particulier dans le cadre du piégeage dipolaire et des transitions induites par effet Stark.

7.4.2 Structure matricielle du potentiel dipolaire

Lorsque la base hyperfine est prise en compte — en particulier dans le contexte du piégeage optique spin-dépendant ou vectoriel — le potentiel dipolaire ne se réduit plus à une simple fonction scalaire, mais devient un opérateur agissant dans l'espace des états internes de l'atome. Dans le cas le plus simple où seuls deux états internes sont pertinents (par exemple deux sous-niveaux hyperfins ou Zeeman), le potentiel dipolaire peut être représenté par une matrice 2×2 :

$$U_{\text{dip}} = U_{\text{scal}}^{(0)} \cdot \text{id}_2 + U_{\text{vec}}^{(1)}. \quad (7.8)$$

- **Terme scalaire** : $U_{\text{scal}}^{(0)}$ génère un décalage isotrope du niveau atomique qui est indépendant du sous-niveau de J (ou F). Ce décalage est la composante « classique » de l'effet Stark AC, proportionnelle à l'intensité lumineuse, et n'entraîne pas de structure fine dépendant de la polarisation de la lumière. Ce terme domine dans la plupart des configurations expérimentales, notamment avec un champ lumineux polarisé rectiligne, comme c'est le cas ici.
- **Terme vectoriel (Zeeman optique)** : $U_{\text{vec}}^{(1)}$ agit comme un champ magnétique fictif (optical Zeeman effect) le long de $\vec{B}_{\text{fict}} \propto i(\vec{E}^* \times \vec{E})$. En effet, il est proportionnelle à l'opérateur $i(\vec{u}^* \times \vec{u}) \cdot \vec{J}$ se comportant comme $\vec{J} \cdot \vec{B}_{\text{fict}}$. Ainsi, la polarisation circulaire du champ ($i[\vec{u}^* \times \vec{u}] \neq 0$) donne un décalage dépendant de l'orientation de \vec{J} (analogue à un effet Zeeman), alors que pour une polarisation rectiligne (\vec{u} réel) ce produit vectoriel s'annule et ce terme vectoriel disparaît. On parle souvent de champ fictif parce que, en convention, le terme vectoriel du Hamiltonien d'interaction s'écrit formellement $\mu_B g_J (\vec{J} \cdot \vec{B}_{\text{fict}})$. Dans notre cas (polarisation rectiligne), ce terme est donc négligeable.
- **Terme tensoriel** : $U_{\text{tens}}^{(2)}$ introduit une anisotropie du potentiel selon l'orientation du moment angulaire par rapport à la polarisation du champ. Ce terme est proportionnel à une combinaison quadrupolaire des composantes de \vec{J} :

$$\frac{3[(\vec{u}^* \cdot \vec{J})(\vec{u} \cdot \vec{J}) + (\vec{u} \cdot \vec{J})(\vec{u}^* \cdot \vec{J})] - 2\vec{J}^2}{2J(2J-1)}.$$

Il ne contribue que pour les états atomiques ayant un moment cinétique total $J \geq 1$. Dans le cas des atomes alcalins, comme le rubidium 87, l'état fondamental est un état S avec $J = 1/2$, et ce terme est donc strictement nul.

Cette structure matricielle du potentiel dipolaire joue un rôle central dans la manipulation cohérente des états internes de l'atome, la réalisation de barrières optiques dépendantes du spin, ou encore la mise en œuvre de qubits dans des réseaux d'atomes piégés. Elle permet également d'exploiter des phénomènes comme les transitions Raman induites optiquement ou la séparation de spin dans des pièges optiques.

7.4.3 Cas de désaccords très importants

Lorsque le désaccord du laser est très grand (i.e. $|\Delta| \gg$ structure fine, typiquement de l'ordre de 15 nm pour le rubidium), les différentes composantes de la structure fine ne peuvent plus être résolues par le champ lumineux. Autrement dit, les photons du faisceau laser ne "voient" plus la séparation entre, par exemple, les niveaux $5P_{1/2}$ et $5P_{3/2}$. Dans ce régime de désaccord très important, les niveaux excités sont décrits uniquement par leur moment angulaire orbital L , sans distinction de J ou F . Ce régime permet de simplifier la description du couplage lumière-matière : seules les transitions entre niveaux caractérisés par les nombres quantiques orbitaux L et leurs projections m_L sont pertinentes.

[Insérer ici un schéma de transition entre niveaux m_L avec $q = 0$]

Décalage d'énergie au second ordre. On considère des états électroniques notés $|g\rangle = |nL\rangle$ et $|e\rangle = |n'L'\rangle$. Dans le régime de désaccord important, l'effet de la lumière sur ces états peut être traité par la théorie des perturbations indépendantes du temps au second ordre. Cette perturbation implique le carré de l'opérateur dipolaire et donne naissance au potentiel dipolaire. On note que l'interaction ne couple que les sous-niveaux orbitaux via des règles de sélection simples sur L et m_L .

Dans ce contexte, il est utile de travailler dans la base $|L, m_L\rangle$, propre au moment angulaire orbital. Les amplitudes de transition sont alors gouvernées par les coefficients de Clebsch–Gordan. Une transition de type $S \rightarrow P$ (i.e. $L = 0 \rightarrow L' = 1$) se comporte, pour une polarisation donnée, comme une transition entre deux niveaux effectifs.

Structure orbitale et opérateur dipolaire. L'opérateur dipolaire, en tant que vecteur, peut être exprimé dans la base sphérique :

$$\vec{D} = \sum_{q=-1}^{+1} D_q \vec{u}_q,$$

où $q = 0, \pm 1$ désigne respectivement les composantes de polarisation rectiligne (π), circulaire droite (σ^+) et circulaire gauche (σ^-), et \vec{u}_q est le vecteur de polarisation associé.

Dans cette base, seule la composante D_q correspondant au changement $m_L \rightarrow m'_L = m_L + q$ est active :

$$\langle m'_L | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | m_L \rangle \propto \delta_{m'_L, m_L + q}.$$

Application du théorème de Wigner-Eckart. Le théorème de Wigner-Eckart permet d'évaluer les éléments de matrice de l'opérateur dipolaire entre états de moment angulaire en factorisant la dépendance radiale et angulaire :

$$\langle L', m'_L | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | L, m_L \rangle = \langle L' || \vec{D} || L \rangle \cdot \langle L, 1; m_L, q | L', m'_L \rangle, \quad (7.9)$$

où $\langle L' || \vec{D} || L \rangle$ est l'élément de matrice réduit, qui encode la dépendance radiale (par exemple $d_{5S \rightarrow 5P}$ pour le rubidium), et $\langle L, 1; m_L, q | L', m'_L \rangle$ est le coefficient de Clebsch-Gordan associé à la conservation du moment cinétique orbital projeté.

Application au cas $5S \rightarrow 5P$ et avec une polarisation π . Prenons le cas spécifique de la transition $5S \rightarrow 5P$, pour une polarisation rectiligne ($q = 0$). On s'intéresse au couplage entre l'état fondamental $|L = 0, m_L = 0\rangle$ et un état excité $|L' = 1, m'_L\rangle$. L'élément de matrice devient alors :

$$\langle L' = 1, m'_L | \vec{D} \cdot \vec{u}_{q=0} | L = 0, m_L = 0 \rangle = d_{5S \leftrightarrow 5P} \cdot \langle L = 0, 1; m_L = 0, q = 0 | 1, m'_L \rangle. \quad (7.10)$$

Le coefficient de Clebsch-Gordan impose $m'_L = 0$, ce qui implique que seule la composante $q = 0$ (polarisation rectiligne) contribue à cette transition spécifique :

$$\Rightarrow \langle L' = 1, m'_L = 0 | \vec{D} \cdot \vec{u}_{q=0} | L = 0, m_L = 0 \rangle = d_{5S \leftrightarrow 5P} \cdot \delta_{m'_L, m_L + q}. \quad (7.11)$$

Cette analyse met en évidence le rôle de la polarisation du champ lumineux dans la sélection des transitions permises, et montre que dans le régime de très grand désaccord, la structure fine peut être ignorée au profit d'une description plus simple en termes de nombres quantiques orbitaux.

Valeur de l'élément de matrice réduit. L'expression (7.9) reste valable pour les éléments de matrice réduits [?]. Dans le cas du rubidium 87, on peut ainsi déterminer numériquement la valeur de l'élément $\langle L' || \vec{D} || L \rangle$, noté $d_{5S \leftrightarrow 5P}$, à partir des données spectroscopiques expérimentales (fréquence de transition, largeur naturelle, etc.).

$$d_{5S \leftrightarrow 5P} \approx 2,5 \times 10^{-29} \text{ C} \cdot \text{m}. \quad (7.12)$$

Cette valeur est essentielle pour quantifier les amplitudes de transition, les forces radiatives et les potentiels dipolaires induits par un champ laser, dans les expériences de manipulation optique d'atomes de rubidium.

7.4.4 Structure fine et base des états $|L, S; J, m_J\rangle$.

Le moment angulaire électronique total J résulte du couplage entre le moment angulaire orbital total L et le moment angulaire de spin S des électrons, selon la relation $J = L + S$. Dans le cas des atomes alcalins, on ne considère que l'électron de valence, pour lequel le spin est fixé à $S = 1/2$.

Lorsque le désaccord du faisceau laser devient comparable à la séparation entre les doublets de structure fine, il est nécessaire de prendre en compte le couplage spin-orbite. Celui-ci donne lieu à une levée de dégénérescence des niveaux d'énergie, conduisant à ce que l'on appelle la structure fine de l'atome. Dans ce régime, les états propres du système s'écrivent dans la base couplée $|L, S; J, m_J\rangle$, où m_J est la projection de J sur l'axe de quantification. Ces niveaux sont représentés sur la figure 1.2.

[Insérer ici un schéma de transition]

Décalage d'énergie au second ordre. En notant $\hbar\omega_{5S_{1/2} \rightarrow 5P_{J'}} = \hbar\omega_{5P_{J'}} - \hbar\omega_{5S_{1/2}}$ la différence d'énergie entre les états excités $|e\rangle \equiv |5P_{J'}\rangle$ et l'état fondamental $|g\rangle \equiv |5S_{1/2}\rangle$, le décalage d'énergie induit par un champ lumineux de polarisation **rectiligne** s'écrit, au second ordre en perturbation (voir équation (??)) :

$$\delta E_{5S_{1/2}}^{(2)} = \frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \sum_{J' \in \left\{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\}} \frac{|\langle 5P_{J'} | \vec{u} \cdot \vec{D} | 5S_{1/2} \rangle|^2}{\omega - \omega_{5S_{1/2} \rightarrow 5P_{J'}}}. \quad (7.13)$$

Ce décalage est purement scalaire dans le cas d'un champ à polarisation linéaire, car les contributions vectorielles (champ fictif) disparaissent lorsque \vec{u} est réel. De plus, le terme tensoriel est nul dans l'état fondamental $5S_{1/2}$ du rubidium 87, qui a $J = \frac{1}{2}$.

Projection dans la base découpée. Pour calculer les déplacements lumineux induits par un champ électromagnétique sur chacun des niveaux de structure fine, il est utile d'exprimer les états de la base couplée $|L, S; J, m_J\rangle$ dans la base découpée $|L, S; m_L, m_S\rangle$. Cette décomposition permet de faire apparaître explicitement les composantes orbitales et de spin, ce qui facilite l'évaluation des éléments de matrice du moment dipolaire.

On utilise pour cela les coefficients de Clebsch-Gordan, qui relient les deux bases selon la relation :

$$|L, S; J, m_J\rangle = \sum_{\substack{m_L + m_S = m_J \\ -L \leq m_L \leq L, \\ -S \leq m_S \leq S}} \langle L, m_L; S, m_S | J, m_J \rangle |L, m_L; S, m_S\rangle. \quad (7.14)$$

On calcule alors à l'aide de cette décomposition :

$$\begin{aligned} & \langle L', S'; J', m'_J | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | L, S; J, m_J \rangle \\ &= \sum_{\substack{m'_L + m'_S = m'_J \\ -L' \leq m'_L \leq L', \\ -S' \leq m'_S \leq S'}} \sum_{\substack{m_L + m_S = m_J \\ -L \leq m_L \leq L, \\ -S \leq m_S \leq S}} \overbrace{\langle L', m'_L; S', m'_S | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | L, m_L; S, m_S \rangle}^{\propto \delta_{m'_L, m_L} \delta_{m'_S, m_S}} \langle J', m'_J | L', m'_L; S', m'_S \rangle \langle L, m_L; S, m_S | J, m_J \rangle \quad (7.15) \\ &= \sum_{\substack{m_L + m_S = m_J, \\ m_L + q + m_S = m'_J \\ -L \leq m_L \leq L, \\ -S \leq m_S \leq S}} \langle L', m_L + q | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | L, m_L \rangle \langle J', m_L + q + m_S | L', m_L + q; S', m_S \rangle \langle L, m_L; S, m_S | J, m_J \rangle \quad (7.17) \end{aligned}$$

Application au cas $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2, 3/2}$ avec $q = 0$. Le moment angulaire électronique total J résulte du couplage entre le moment angulaire orbital L et le spin électronique S , selon la relation $J = L + S$. Dans le cas des atomes alcalins, on ne considère que l'électron de valence, pour lequel $S = \frac{1}{2}$.

Considérons l'état fondamental $|5^2S_{1/2}, m_J = \pm \frac{1}{2}\rangle$, que l'on peut écrire de manière équivalente comme :

$$|5^2S_{1/2}, m_J = \pm \frac{1}{2}\rangle \equiv |5S, J = \frac{1}{2}, m_J = \pm \frac{1}{2}\rangle \equiv |n = 5; L = 0, S = \frac{1}{2}; J = \frac{1}{2}, m_J = \pm \frac{1}{2}\rangle.$$

Dans le but de faciliter les calculs, nous projetons cet état dans la base découpée $|L, m_L; S, m_S\rangle$. Étant donné que $L = 0$ pour l'état S , on a $m_L = 0$ nécessairement. L'état se réécrit donc simplement :

$$|5^2S_{1/2}, m_J = \pm \frac{1}{2}\rangle = |m_L = 0, m_S = \pm \frac{1}{2}\rangle$$

Plusieurs notations sont utilisées afin de s'adapter aux préférences des lecteurs et de lever toute ambiguïté. On remarque ici que, dans le cas $L = 0$, l'état couplé coïncide avec l'état découpé, car le moment orbital ne contribue pas à la somme vectorielle du moment angulaire total.

Continuons avec les états exités $|5^2P_{1/2}, m'_J\rangle$, que l'on peut écrire de manière équivalente comme :

$$|5^2P_{J'}, m'_J\rangle \equiv |5P, J', m'_J\rangle \equiv |n = 5; L' = 1, S' = \frac{1}{2}; J', m'_J\rangle.$$

Pour rappel, les opérateurs de montée/descente agissant sur les états propres du moment angulaire vérifient la relation générale :

$$\hat{\mathbf{A}}_{\pm}|n, A, m_A\rangle = \hbar\sqrt{A(A+1) - m_A(m_A \pm 1)}|n, A, m_A \pm 1\rangle \quad (7.18)$$

où l'opérateur $\hat{\mathbf{A}} \in \{\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{J}}, \dots\}$.

Donc

$$\begin{aligned} |5^2P_{1/2}, m'_J = \pm\frac{1}{2}\rangle &= \mp\sqrt{\frac{1}{3}}|m'_L = 0, m'_S = \pm\frac{1}{2}\rangle \pm \sqrt{\frac{2}{3}}|m'_L = \pm 1, m'_S = \mp\frac{1}{2}\rangle, \\ |5^2P_{3/2}, m'_J = \pm\frac{1}{2}\rangle &= +\sqrt{\frac{2}{3}}|m'_L = 0, m'_S = \pm\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|m'_L = \pm 1, m'_S = \mp\frac{1}{2}\rangle, \\ |5^2P_{3/2}, m'_J = \pm\frac{3}{2}\rangle &= +|m'_L = \pm 1, m'_S = \pm\frac{3}{2}\rangle. \end{aligned}$$

Cette notation sera utile par la suite pour analyser les transitions permises et les amplitudes associées lors de l'interaction dipolaire avec une lumière polarisée ($q = 0$ correspondant à une polarisation π). En se rappelant que dans ce cas

$$d_{5S \rightarrow 5P} \doteq \langle L' = 1 | \vec{D} | L = 1 \rangle = \langle L' = 1, m'_L = 0 | \vec{D} \cdot \vec{u} | L = 0, m_L = 0 \rangle$$

il vient que

$$\begin{aligned} \langle 5^2P_{1/2}, m'_J = \pm\frac{1}{2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | 5^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2} \rangle &= \mp\sqrt{\frac{1}{3}}d_{5S \rightarrow 5P}, \\ \langle 5^2P_{3/2}, m'_J = \pm\frac{1}{2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | 5^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2} \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}d_{5S \rightarrow 5P}, \\ \langle 5^2P_{3/2}, m'_J = \pm\frac{3}{2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | 5^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2} \rangle &= 0. \end{aligned}$$

Potentiel dipolaire Potentiel dipolaire s'écrit :

$$\begin{aligned} U_{\text{dip}}(\vec{r}) &= \frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \left(\frac{|\langle 5^2P_{1/2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | 5^2S_{1/2} \rangle|^2}{\Delta_1} + \frac{|\langle 5^2P_{3/2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | 5^2S_{1/2} \rangle|^2}{\Delta_2} \right) \\ &= \frac{d_{5S \rightarrow 5P}^2 |\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2} \right) \\ &= \frac{\hbar\Gamma^2}{8I_{\text{sat}}} \left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2} \right) I(\vec{r}), \end{aligned}$$

avec $\Delta_1 = \omega - \omega_{5S_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2}}$ et $\Delta_2 = \omega - \omega_{5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}}$.

Taux d'émission spontanée Le même hamiltonien d'interaction qui génère le potentiel dipolaire est aussi responsable des processus de diffusion de photons (absorption suivie de réémission spontanée), qui conduisent à des effets dissipatifs.

Dans le cas d'un champ à polarisation linéaire et avec un grand désaccord par rapport aux transitions D1 et D2, le **taux d'émission spontanée** est donné par :

$$\Gamma_{\text{sc}}(\vec{r}) = \frac{\Gamma^3}{8I_{\text{sat}}} \left(\frac{1}{3\Delta_1^2} + \frac{2}{3\Delta_2^2} \right) I(\vec{r}). \quad (7.19)$$

Ce résultat repose sur les hypothèses suivantes :

- **Désaccords** $\Delta_{1,2}$ grands devant la largeur naturelle Γ ,
- **État fondamental unique** $|5S_{1/2}\rangle$,
- **Décomposition des contributions** de D1 et D2 avec poids 1/3, 2/3 respectivement, comme dans le potentiel dipolaire,
- **Polarisation linéaire du champ**, ce qui annule les composantes vectorielles du potentiel.

7.5 Notre dispositif expérimental

7.5.1 Choix du laser pour le piégeage dipolaire

Notre objectif est de réaliser un piégeage dipolaire optique pour des atomes de rubidium-87 confinés dans une géométrie unidimensionnelle. Pour cela, nous utilisons un potentiel dipolaire induit par un faisceau laser décalé vers le bleu des transitions atomiques D1 ($5S_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2}$, à $\lambda_{D1} = 794.98$ nm) et D2 ($5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$, à $\lambda_{D2} = 780.24$ nm). Le décalage spectral $\Delta > 0$ garantit que les atomes sont repoussés des zones d'intensité maximale, ce qui permet de construire une "boîte" optique où les atomes sont piégés entre plusieurs faisceaux divergents.

[Insérer ici un schéma des faisceaux bleus repoussant les atomes dans une boîte au centre]

Dans cette configuration, les faisceaux lasers génèrent un potentiel optique conservatif $U_{dip}(\vec{r})$ et induisent un taux de diffusion spontané $\Gamma_{sp}(\vec{r})$, tous deux proportionnels à l'intensité locale $I(\vec{r})$. Ces deux effets ont des conséquences opposées sur les atomes : le premier permet de les confiner, le second les chauffe et peut entraîner leur perte. Il est donc crucial d'optimiser ce compromis

Critères de sélection

Deux critères fondamentaux guident notre choix de laser :

- Le **potentiel dipolaire** au niveau des atomes, $U_{dip}(0)$, doit être supérieur à une valeur minimale $U_{dip}^{(min)}$, fixée à :

$$U_{dip}(0) \geq U_{dip}^{(min)} = k_B \times 1\mu K.$$

Cette valeur garantit une barrière suffisante pour confiner les atomes contre leur agitation thermique résiduelle ou leur expansion quantique.

- Le **taux de diffusion spontané** au point x^* défini par $U_{dip}(x^*) = U_{dip}(0)/2$ doit rester inférieur à une valeur seuil pour limiter l'échauffement et les pertes :

$$\Gamma_{sp}(x^*) \leq 2\pi \times 1 s^{-1}.$$

Ce critère conduit, en utilisant le fait que le potentiel $U_{dip}^{(min)}(\vec{r})$ et le taux de diffusion spontanée $\Gamma_{sp}(\vec{r})$ soit proportionnelle à l'intensité $I(\vec{r})$, à la borne stricte suivante :

$$\Gamma_{sp}(0) \leq \Gamma_{sp}^{(max)} = 2\pi \times 2 s^{-1}.$$

Figure de mérite : ratio potentiel / diffusion

Le compromis entre profondeur de piège et diffusion est quantifié par la figure de mérite suivante :

$$\frac{U_{dip}(\vec{r})}{\hbar\Gamma_{sp}(\vec{r})} = \frac{1}{\Gamma} \cdot \frac{\left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2}\right)}{\left(\frac{1}{3\Delta_1^2} + \frac{2}{3\Delta_2^2}\right)} \geq \frac{U_{dip}^{(min)}}{\hbar\Gamma_{sp}^{(max)}} \quad (7.20)$$

Un calcul numérique montre que, sous ces contraintes, il est nécessaire de sélectionner des lasers dont la longueur d'onde est inférieure à une valeur maximale

$$\lambda_{abs}^{(max)} \simeq 778,4 \text{ nm.}$$

Contraintes sur la puissance laser

Le faisceau utilisé est gaussien, avec un waist typique $w_0 \sim 1 \mu\text{m}$. À première vue, cela peut sembler contre-intuitif dans le cadre d'un piégeage **blue-detuned**, où les atomes sont repoussés des régions d'intensité maximale. En effet, dans les pièges conventionnels (red-detuned), les atomes sont attirés vers les maxima d'intensité ; on cherche alors à maximiser l'intensité en utilisant des waists petits.

Dans notre cas, les atomes sont confinés dans la région **centrale de faible intensité**, située entre deux faisceaux focalisés. Le piégeage repose donc sur la présence de **parois optiques abruptes** générées par les faisceaux blue-detuned. Cela impose que chaque faisceau présente un fort gradient d'intensité, ce qui nécessite un waist petit.

Pour créer une boîte optique efficace, il faut que :

- Les bords du piège (créés par les faisceaux) soient bien localisés spatialement — ce qui nécessite un fort gradient transverse, donc un waist réduit ;
- L'intensité décroît rapidement en dehors de l'axe focal pour garantir un minimum central bien sombre, où les atomes restent piégés avec un faible taux de diffusion.

Ainsi, un waist de l'ordre du micron permet de :

- Générer des barrières optiques fines mais suffisamment hautes,
- Définir une boîte de largeur contrôlable à l'échelle micrométrique,
- Réduire l'exposition des atomes à la lumière dans la région centrale, limitant ainsi les pertes par diffusion spontanée.

Ce choix est également compatible avec les contraintes expérimentales : il est accessible avec des objectifs à grande ouverture numérique ($\text{NA} \sim 0.32$) tout en restant compatible avec un montage sur fibre ou lentille asphérique. Il correspond aux valeurs couramment utilisées pour les expériences de piégeage unidimensionnel, typiquement $w_0 \sim 1 \mu\text{m}$.

L'intensité maximale atteinte au centre du faisceau est donnée par :

$$I(0) = \frac{2P}{\pi w_0^2}$$

avec P la puissance incidente. Cette expression relie directement la puissance requise aux contraintes de piégeage, et sera utilisée pour définir les bornes admissibles sur $P(\lambda)$ pour une longueur d'onde donnée.

En reportant cette intensité dans les expressions standards du potentiel et de la diffusion, on obtient les bornes admissibles pour la puissance :

$$\underbrace{U_{dip}^{(min)} \cdot \frac{\pi w_0^2}{2} \frac{8I_{sat}}{\Gamma^2} \cdot \left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2} \right)^{-1}}_{P^{(min)}(\lambda)} \leq P(\lambda) \leq \underbrace{\Gamma_{sc}^{(max)} \cdot \frac{\pi w_0^2}{2} \frac{8I_{sat}}{\Gamma^3} \cdot \left(\frac{1}{3\Delta_1^2} + \frac{2}{3\Delta_2^2} \right)^{-1}}_{P^{(max)}(\lambda)}$$

[Insérer ici une figure avec les courbes $P^{(min)}(\lambda)$ et $P^{(max)}(\lambda)$, et la zone autorisée]

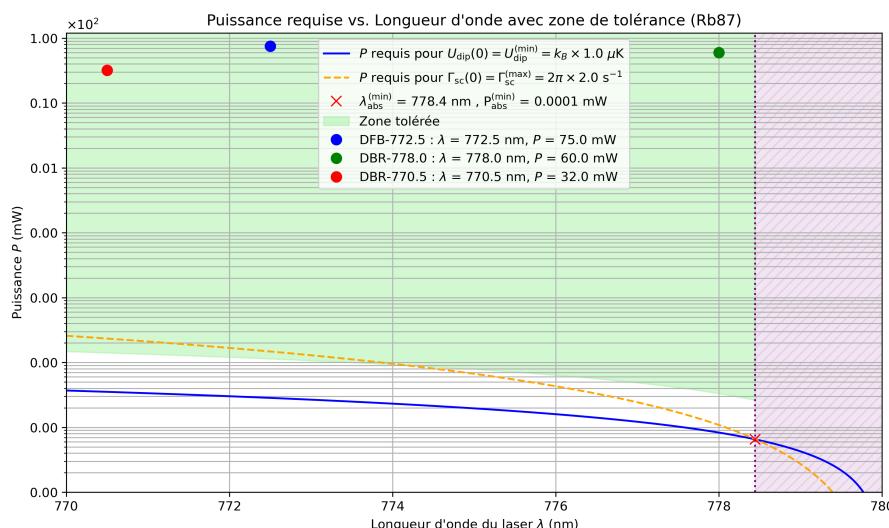


FIGURE 7.1 – $P^{(min)}(\lambda)$ et $P^{(max)}(\lambda)$

L'intersection de ces courbes définit une **zone de faisabilité expérimentale** dans l'espace (λ, P) . Le croisement des courbes fournit la longueur d'onde maximale admissible :

$$\lambda_{abs}^{(max)} \simeq 778.4 \text{ nm}, \quad P_{abs}^{(min)} \simeq 0.0001 \text{ mW}$$

Un premier filtrage des sources laser admissibles impose que la longueur d'onde soit inférieure à $\lambda_{abs}^{(max)}$ et que la puissance disponible dépasse $P_{abs}^{(min)}$.

Prise en compte des pertes optiques

L'ensemble des éléments optiques traversés par le faisceau — incluant la sortie de fibre, les lentilles de collimation et de focalisation, les miroirs de redirection, les diaphragmes, ainsi que le diviseur de faisceau — induit des pertes cumulées non négligeables. Une estimation réaliste, fondée sur les caractéristiques typiques des composants et l'expérience de montage, indique que les pertes globales s'élèvent à environ 60 à 75%.

Ces pertes doivent être prises en compte dès le dimensionnement initial du système laser, afin de garantir que la puissance effectivement disponible au niveau des atomes soit suffisante pour atteindre les profondeurs de piège souhaitées. En pratique, on modélise cette efficacité par un facteur global η , défini comme :

$$P_{\text{utile}} = \eta \cdot P_{\text{laser}}, \quad \text{avec } \eta \simeq 0.25.$$

Ce coefficient sera utilisé dans la suite pour évaluer les puissances minimales requises des sources laser candidates. Une marge de sécurité est également conservée pour pallier les éventuels désalignements ou dégradations optiques en conditions expérimentales réelles.

Sources laser utilisées et pureté spatiale

Trois sources laser ont été sélectionnées pour la réalisation de la boîte optique blue-detuned destinée au piégeage dipolaire du Rubidium-87, dont deux répondent aux conditions de puissance admissibles $P^{(min)}(\lambda)$ et $P^{(max)}(\lambda)$.

- **DFB** à $\lambda = 772.5$ nm, puissance $P = 75$ mW.
- **DBR** à $\lambda = 778.0$ nm, puissance $P = 60$ mW.
- **DBR** à $\lambda = 770.5$ nm, puissance $P = 32$ mW (également utilisé pour certaines étapes du montage).

Le laser DFB (Distributed Feedback) intègre un réseau de Bragg directement dans la région active, ce qui permet un couplage efficace entre la rétroaction optique et le gain, assurant une émission monomode stable tant sur le plan spectral que spatial. Cette architecture confère au DFB une excellente stabilité et une robustesse appréciées en physique atomique.

Le laser DBR (Distributed Bragg Reflector), quant à lui, dispose d'un réseau de Bragg séparé de la région active. Cette configuration offre une plus grande flexibilité dans le réglage de la longueur d'onde, mais entraîne généralement une stabilité spectrale un peu moindre par rapport aux lasers DFB.

Ces diodes sont pigtaillées sur des fibres monomodes à maintien de polarisation (type PM780-HP), assurant un profil spatial très pur. En effet, bien que des modes transverses supérieurs puissent être émis par la puce laser, la fibre ne guide que le mode fondamental LP₀₁, équivalent au mode gaussien TEM₀₀, dans la gamme spectrale 770–780 nm. Cette configuration agit comme un filtre spatial puissant, garantissant une sortie de faisceau gaussien avec une pureté supérieure à 99.5% en puissance.

Cette haute pureté spatiale est cruciale pour obtenir une focalisation optimale et des gradients de champ suffisamment intenses dans la zone de piégeage, tout en minimisant les pertes optiques et les effets parasites liés à la présence de modes non fondamentaux.

Enfin, les trois lasers se situent dans la zone de tolérance définie par les conditions sur la puissance minimale et maximale en fonction de la longueur d'onde, validant leur adéquation pour la construction de notre boîte optique blue-detuned.

Avec un waist de $w_0 = 1 \mu\text{m}$, les puissances minimales requises pour satisfaire les conditions $U_{dip}^{(min)}$ et $\Gamma_{sp}^{(max)}$ sont extrêmement faibles : environ 1.1 μW pour la DFB à 772.5 nm, 0.3 μW pour la DBR à 778.0 nm, et 1.4 μW pour la DBR à 770.5 nm. Ces valeurs sont très largement inférieures aux puissances disponibles pour chacun de ces lasers, même en tenant compte des pertes optiques, ce qui confirme la faisabilité expérimentale du dispositif.

Choix initial du waist. Lors de la sélection initiale des lasers, une hypothèse conservative a été faite en supposant un waist focalisé de $w_0 = 300$ nm au niveau des atomes. Ce choix était motivé par une estimation de l'échelle typique des variations du potentiel dans la boîte optique, et visait à garantir une intensité suffisante à petite échelle.

Avec le recul, cette valeur s'est avérée trop pessimiste. Le système optique finalement mis en place permet des waists plus larges (de l'ordre du micron), mieux adaptés à la géométrie expérimentale et aux contraintes de focalisation. Cette hypothèse initialement sous-estimée a toutefois eu pour effet bénéfique de conduire à une surévaluation des puissances requises, fournissant une marge de sécurité bienvenue dans le dimensionnement des sources laser.

Avec un waist de $w_0 = 300 \mu\text{m}$, les puissances minimales requises augmentent considérablement en raison de la baisse d'intensité au centre du faisceau. On obtient alors des puissances nécessaires de l'ordre de 102 mW pour la DFB à 772.5 nm, 30 mW pour la DBR à 778.0 nm, et 127 mW pour la DBR à 770.5 nm. Seul le laser à 778.0 nm satisfait cette condition sans amplification supplémentaire. En revanche, les deux autres lasers se trouvent sous-dimensionnés dans ce scénario, ce qui justifie le recours à un amplificateur optique dans le cas du laser à 770.5 nm.

Ce constat a notamment motivé l'ajout d'un amplificateur optique (TA — Tapered Amplifier) en sortie du laser à 770.5 nm, afin de compenser la puissance disponible limitée et garantir des conditions de piégeage satisfaisantes malgré les pertes optiques du système.

[Photos laser à 770.5 nm]

7.5.2 Amplification par Tapered Amplifier (TA)

Principe et motivation

Afin de compenser le déficit de puissance du laser DBR à 770.5 nm — notamment dans le scénario initialement envisagé avec un waist focalisé important — un amplificateur optique de type *Tapered Amplifier* (TA) a été ajouté en aval de la source laser.

Un TA est un semi-conducteur optique amplificateur non résonant, composé d'une région d'entrée étroite (guidée) et d'une région de sortie évasée (tapered), permettant d'amplifier efficacement un faisceau monomode tout en conservant un profil spatial de bonne qualité. Contrairement aux lasers, le TA n'oscille pas par lui-même : il agit uniquement sur un signal incident (seed). Il peut amplifier des puissances faibles (quelques mW) en entrée jusqu'à plusieurs centaines de mW, voire au-delà, en sortie.

Ce dispositif est particulièrement adapté aux expériences de piégeage optique, où une puissance laser relativement élevée est nécessaire tout en maintenant une bonne qualité spatiale.

Contraintes et précautions

L'utilisation d'un TA s'accompagne de plusieurs contraintes expérimentales importantes :

- **Sensibilité aux rétro-réflexions** : la puce du TA ne supporte pas les retours optiques parasites, qui peuvent entraîner des instabilités, des dégradations de performance, voire endommager le composant. Un **isolateur optique** est donc placé en sortie pour bloquer tout retour de lumière vers le TA.
- **Sensibilité à l'alignement** : une injection efficace du faisceau dans la zone guidée d'entrée du TA requiert un alignement très précis. Celui-ci est réalisé à l'aide de deux miroirs montés sur des supports à réglage fin, offrant 4 degrés de liberté (translations X-Y, inclinaisons θ_x, θ_y).
- **Émission multi-modes en sortie** : malgré une injection monomode, la sortie du TA présente parfois plusieurs lobes d'intensité dus à la géométrie évasée. Un diaphragme ou une **pinhole** de 50 μm (à ajuster selon le profil observé) est donc utilisé pour filtrer spatialement le mode fondamental TEM₀₀.

Mise en œuvre expérimentale

Le schéma global de l'amplification est présenté sur la figure ?? (non incluse ici).

- ▷ **Laser seed** : le laser DBR à 770.5 nm est stabilisé en température et en courant à l'aide du contrôleur Thorlabs ITC-510, et injecté dans le TA à l'aide d'une optique de couplage sur table optique.
- ▷ **Boîtier de protection et régulation thermique** : le TA est installé dans un boîtier métallique maison, conçu pour assurer à la fois une protection mécanique et une stabilité thermique. Ce boîtier intègre un module Peltier et une thermistance pour la régulation active de la température, pilotés par un contrôleur thermique (Arrow OEM). L'ensemble est alimenté par une alimentation dédiée (Delta Electronics), garantissant un fonctionnement stable du système de refroidissement. Cette stabilisation thermique est cruciale pour limiter les dérives du TA et préserver la qualité spatiale du faisceau amplifié.

- ▷ **Filtrage spatial** : une pinhole positionnée en sortie du TA permet de sélectionner le mode spatial fondamental.
- ▷ **Isolateur optique** : un isolateur optique est placé immédiatement après le TA pour éviter tout retour de lumière vers la puce.
- ▷ **Modulation de puissance** : un modulateur acousto-optique (AOM) est inséré juste avant la fibre optique, permettant de couper la lumière à la demande (switch rapide) ou de moduler dynamiquement l'intensité laser. Cela permet un contrôle fin de l'illumination au niveau des atomes.
- ▷ **Mesure de puissance** : une photodiode ou un power meter placé après l'AOM permet de calibrer précisément la puissance en fonction du courant injecté dans le TA, et de corriger les effets d'instabilité si besoin.

Caractérisation et performance

La diode laser et le Tapered Amplifier (TA) sont asservis à une température stable de 25°C. Une courbe de puissance de sortie du TA en fonction du courant injecté a été mesurée (voir figure 7.2), avec la diode laser fonctionnant à 25°C et délivrant une puissance maximale d'environ 31.2 mW, tandis que le TA est testé jusqu'à un courant d'injection de 2.5 A.

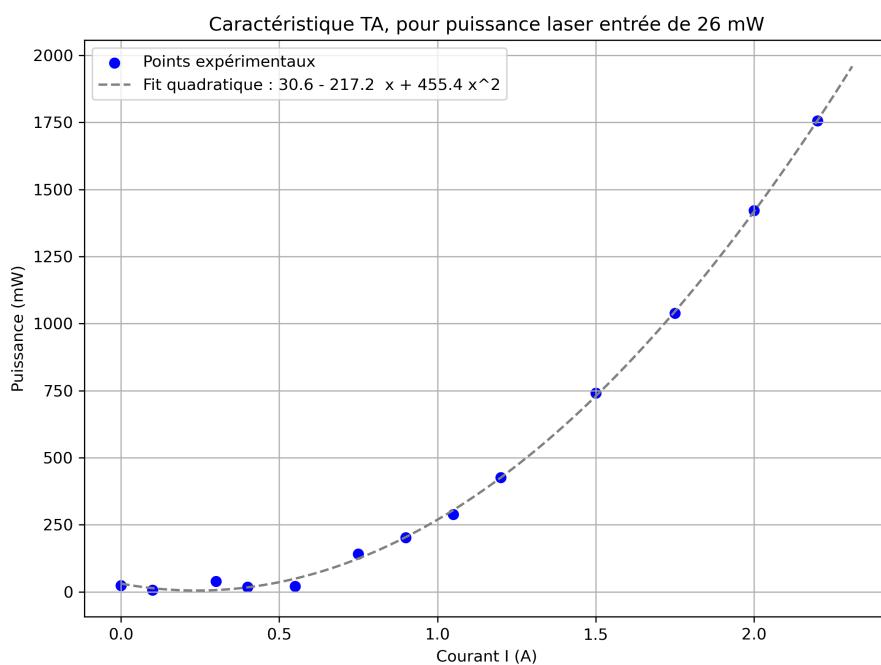


FIGURE 7.2 – Puissance de sortie du Tapered Amplifier (TA) en fonction du courant d'injection, pour une puissance d'entrée provenant de la diode laser fixée à 25 mW.

Afin d'éviter une dégradation prématuée des composants, il a été choisi de ne pas les faire fonctionner à leurs limites maximales. La diode laser est ainsi réglée pour fournir une puissance d'environ 25 mW (courant $I_{\text{diode}} = 150.6 \text{ mA}$) et le TA est exploité avec un courant d'environ 1.5 A. Cette configuration assure un bon compromis entre puissance de sortie et longévité des dispositifs, tout en garantissant une amplification stable et un profil spatial préservé.

Pour un courant d'injection de 1.5 A dans le TA, la puissance mesurée en sortie, après passage dans le modulateur acousto-optique (AOM), atteint environ 62 mW.

L'AOM génère plusieurs ordres de diffraction : le mode zéro (non diffracté), les modes ± 1 , etc. Afin d'optimiser le transfert d'énergie dans un mode diffracté souhaité (par exemple le premier ordre ± 1), le cristal AOM a été ajusté finement en rotation. Ce réglage permet de maximiser la puissance dans ce mode non nul.

Le faisceau correspondant à ce mode diffracté, qui concentre la majorité de la puissance utile, est ensuite injecté dans une fibre monomode à maintien de polarisation.

Ainsi, l'AOM est configuré de manière à transférer efficacement la puissance vers le mode diffracté utile, avec une puissance d'environ 62 mW disponible à l'entrée de la fibre, garantissant une qualité spatiale et une polarisation stables pour l'expérience.

Le système ainsi mis en place permet d'obtenir, de manière stable, une puissance suffisante en sortie pour alimenter la fibre de piégeage, même en tenant compte des pertes optiques du système.

Bibliographie

- [1] Chen-Ning Yang and C. P. Yang. Thermodynamics of one-dimensional system of bosons with repulsive delta function interaction. *J. Math. Phys.*, 10 :1115–1122, 1969.
- [2] 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.
- [3] G. Goldstein and N. Andrei. Equilibration and generalized gge in the lieb-liniger gas. *arXiv preprint*, 2013.
- [4] Jean-Sébastien Caux and Robert Konik. Constructing the generalized gibbs ensemble after a quantum quench. *Phys. Rev. Lett.*, 109 :175301, 2012.
- [5] 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.
- [6] Benjamin Doyon. Lecture notes on generalized hydrodynamics, 2017. <https://www.damtp.cam.ac.uk/user/db275/GHDlectures.pdf>.
- [7] Bruno Bertini, Mario Collura, Jacopo De Nardis, and Maurizio Fagotti. Transport in out-of-equilibrium xxz chains : Exact profiles of charges and currents. *Physical Review Letters*, 117(20) :207201, 2016.
- [8] Olalla A Castro-Alvaredo, Benjamin Doyon, and Takato Yoshimura. Emergent hydrodynamics in integrable quantum systems out of equilibrium. *Physical Review X*, 6(4) :041065, 2016.
- [9] Benjamin Doyon and Herbert Spohn. Generalized hydrodynamics of the classical toda system. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2017(7) :073210, 2017.