

# Table des matières

<b>1 Modèle de Lieb-Liniger et approche Bethe Ansatz</b>	<b>3</b>
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
<b>2 Relaxation et Équilibre dans les Systèmes Quantiques Intégrables : Une Approche par la Thermodynamique de Bethe</b>	<b>17</b>
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
<b>3 Dynamique hors-équilibre et hydrodynamique généralisée</b>	<b>29</b>
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
<b>4 Fluctuation de la distribution de rapidité dans des état d'équilibre</b>	<b>31</b>
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
<b>5 Protocoles expérimentale</b>	<b>43</b>
5.1 Présentation de l'expérience . . . . .	43
5.1.1 Piégeage transverses et longitudinale . . . . .	43
5.2 Outil de sélection spatial . . . . .	43

<b>6 Étude du protocole de bi-partition : Mesure de distribution de rapidités locales <math>\rho(x, \theta)</math> pour des systèmes hors équilibre</b>	<b>45</b>
6.1 Dispositif expérimental . . . . .	46
6.1.1 Préparation et Confinement du Gaz Ultra-Froid de $^{87}\text{Rb}$ . . . . .	47
6.1.2 Confinement Longitudinal et Stabilisation du Piège Quartique . . . . .	47
6.1.3 Sélection Spatiale et Réalisation de la Coupure Bipartite . . . . .	47
6.1.4 Dynamique Après Coupure . . . . .	48
6.2 Prédiction de la GHD . . . . .	48
6.3 Données expérimentales . . . . .	50
6.4 Sonder la distribution locale des rapidités . . . . .	50
6.5 Détails sur les calculs . . . . .	53
6.5.1 Facteur d'occupation et distribution de rapidité à l'équilibre thermique . . . . .	53
6.5.2 Dynamique du contour dans l'espace des phases $(x, \theta)$ . . . . .	54
6.5.3 Simulation de la déformation du bord . . . . .	54
6.5.4 Simulation de l'expansion . . . . .	55
<b>7 Mise en place d'un confinement longitudinal dipolaire</b>	<b>57</b>
7.1 Transformation de jauge et simplification du Hamiltonien . . . . .	57
7.2 Potentiel Dipolaire d'un atome à deux niveaux - généralité . . . . .	58
7.2.1 Introduction . . . . .	58
7.2.2 Système à deux niveaux et interaction avec le champ . . . . .	58
7.2.3 Interprétation du traitement du second ordre : transition virtuelle et origine du potentiel dipolaire (AC-Stark) . . . . .	59
7.2.4 Expression explicite du potentiel dipolaire . . . . .	60
7.3 Piégeage dipolaire d'un atome à plusieurs niveaux . . . . .	61
7.3.1 Atomes multiniveaux et origine du potentiel dipolaire dans le formalisme quantique . . . . .	61
7.4 Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne . . . . .	64
7.4.1 Structure électronique du Rubidium . . . . .	64
7.4.2 Structure matricielle du potentiel dipolaire . . . . .	65
7.4.3 Cas de désaccords très importants . . . . .	65
7.4.4 Structure fine et base des états $ L, S; J, m_J\rangle$ . . . . .	67
7.5 Notre dispositif expérimental . . . . .	69
7.5.1 Choix du laser pour le piégeage dipolaire . . . . .	69

# Chapitre 1

# Modèle de Lieb-Liniger et approche Bethe Ansatz

## Contents

---

<b>1.1</b>	<b>Description du modèle de Lieb-Liniger</b>	<b>4</b>
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
<b>1.2</b>	<b>Équation de Bethe et distribution de rapidité</b>	<b>13</b>
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  $\varphi_k$  pour  $k \neq 0$ .

*Remarque.* On choisie  $a = \frac{1}{\sqrt{L}}$  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  $\varphi_k$  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  $\theta$  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  $\hat{a}_\lambda$  représente ici de manière générique soit l'opérateur  $\hat{b}_\lambda$  pour les bosons, soit  $\hat{c}_\lambda$  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  $i^{\text{e}}$  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  $i^{\text{e}}$  particule est dans l'état  $\lambda$ . (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  $\hat{\mathbf{f}}$ , c'est-à-dire si l'on peut écrire :  $\hat{\mathbf{f}} = \sum_k f_k |k\rangle\langle k|$ , alors l'opérateur à  $N$  corps associé s'écrit :  $\hat{\mathbf{F}} = \sum_k f_k \hat{\mathbf{a}}_k^\dagger \hat{\mathbf{a}}_k = \sum_k f_k \hat{\mathbf{n}}_k$ , où  $\hat{\mathbf{n}}_k = \hat{\mathbf{a}}_k^\dagger \hat{\mathbf{a}}_k$  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  $\hat{\mathbf{f}} = \frac{\hbar^2 \hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$ . 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  $i^{\text{e}}$  particules est dans l'état  $\gamma$  et la  $j^{\text{e}}$  dans l'état  $\delta$ . 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  $i^{\text{e}}$  et  $j^{\text{e}}$  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  $\theta_i$  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*  $\theta_a$ , 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  $\Phi$  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  $\Phi$ .** Et en évaluant la discontinuité de sa dérivée au point  $Y = 0$ , on trouve que la phase  $\Phi$  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  $\Phi$  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  $\Phi$  tend vers  $\pi$  (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,

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

**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  $\theta_1$  et  $\theta_2$ , 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  $\sigma$  de  $\{1, \dots, N\}$ . Le facteur  $(-1)^{|\sigma|}$  est la signature de la permutation, et les amplitudes dépendent des différences de quasi-moments  $\theta_j$  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  $\theta_a$  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  $\Phi(\theta) = 2 \arctan\left(\frac{\theta}{c}\right)$  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  $\theta_a$  à l'état fondamental.

### 1.2.5 Interprétation physique

Les équations de Bethe (1.55) représentent une *quantification des pseudo-impulsions*  $\theta_a$  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  $\theta_a$  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  $\rho_s$  à la fonction d'interaction  $\Delta$  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
<b>2.1</b>	<b>Thermodynamique de Bethe et relaxation . . . . .</b>	<b>21</b>
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  $\beta_i$  thermodynamiques (une « température » par charge) [?].

*Interprétation des multiplicateurs de Lagrange.* Les multiplicateurs de Lagranges  $\beta_i$  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  $\beta_i$  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  $\mu$  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  $\beta$ .

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  $\rho$ .

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  $\mu_j$  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  $\theta$ , 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  $\mu_j$ , 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  $\theta$  (proportionnelle à l'impulsion).

**Phase de diffusion et noyau :** la phase de diffusion entre deux particules de rapidité  $\theta$  et  $\theta'$  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  $\chi_{NN}$  (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  $\chi_{EE}$ ) 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  $p^{\text{dr}}$  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  $\chi_{PP}$  (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  $\theta_a$ . 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  $\theta$  à l'**entropie** associée à la cellule autour de  $\theta_a$ .

**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  $\rho$

**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  $\rho$  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  $\rho_{eq}$  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**  $\epsilon$  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  $\rho_{eq}$  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*,  $\rho_{eq}$ , 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  $\mu$ . 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  $\epsilon_0 = \epsilon - \mu$ , puis on construit une suite de fonctions  $\varepsilon_n$  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  $L^\infty$  (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  $\epsilon$  dans l'équation (2.42), ce qui donne  $\nu_{eq}$ .

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  $\theta$ , 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  $(T, \mu)$ , l'algorithme fournit la pseudo-énergie  $\varepsilon$ , le facteur d'occupation  $\nu_{eq}$  et la distribution de rapidité  $\rho_{eq}$  à l'équilibre thermique, prêts à être utilisés pour le calcul des observables.



## Chapitre 3

# Dynamique hors-équilibre et hydrodynamique généralisée

### Contents

---

<b>3.1 Hydrodynamique et régimes asymptotiques</b> . . . . .	<b>29</b>
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

---

<b>4.1</b>	<b>Fluctuation-réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés</b>	<b>32</b>
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
<b>4.2</b>	<b>Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilités</b>	<b>35</b>
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
<b>4.3</b>	<b>Lien entre dérivée fonctionnelle et réponse linéaire aux facteurs de Lagrange</b>	<b>39</b>
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 clarté, dans les calculs futurs 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  $\rho$ ,  $\mathcal{S}_{YY}$  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  $\rho$ , 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  $\rho_{eq}$  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  $\rho_{\text{eq}}$  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*  $\beta_i$  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  $\chi_w$  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  $\rho$ . 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  $\rho$  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  $\rho_{\text{eq}}$ .

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  $\rho$  :

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

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  $\rho$  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 :

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

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

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

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.

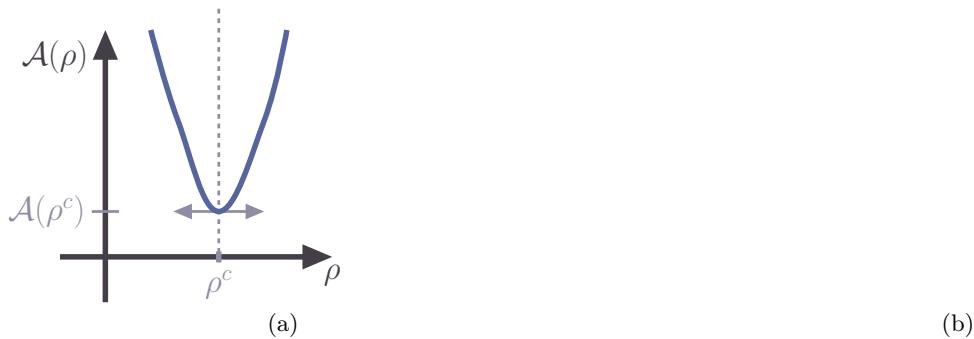


FIGURE 4.2

### 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 boso-nique, conséquence de l'exclusion statistique induite par l'intégrabilité,

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

avec une partie symétrique régulière

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

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

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

#### 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  $\nu_{eq}$ , 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 :  $\chi_w$  par inversion de la courbure. Centre :  $\chi_w$  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  $\beta_j$  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  $\beta_j$ .** 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*  $\chi_{ij}$  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  $\beta_j$ ,
- 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  $\mu$ . 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).

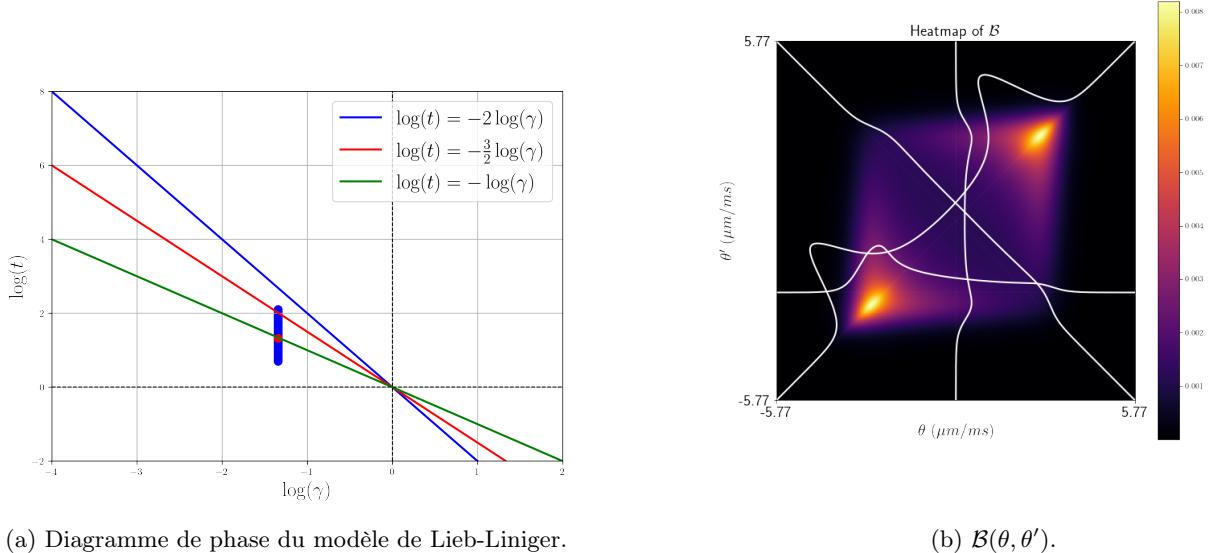


FIGURE 4.4 – (a) Diagramme de phase du modèle de Lieb-Liniger à l'équilibre thermique. Différents régimes asymptotiques sont séparés par des transitions progressives. Les points bleus représentent les fluctuations calculées numériquement pour différentes températures. Les coordonnées sont données par  $\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 n}$  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  $\rho$ ) 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.

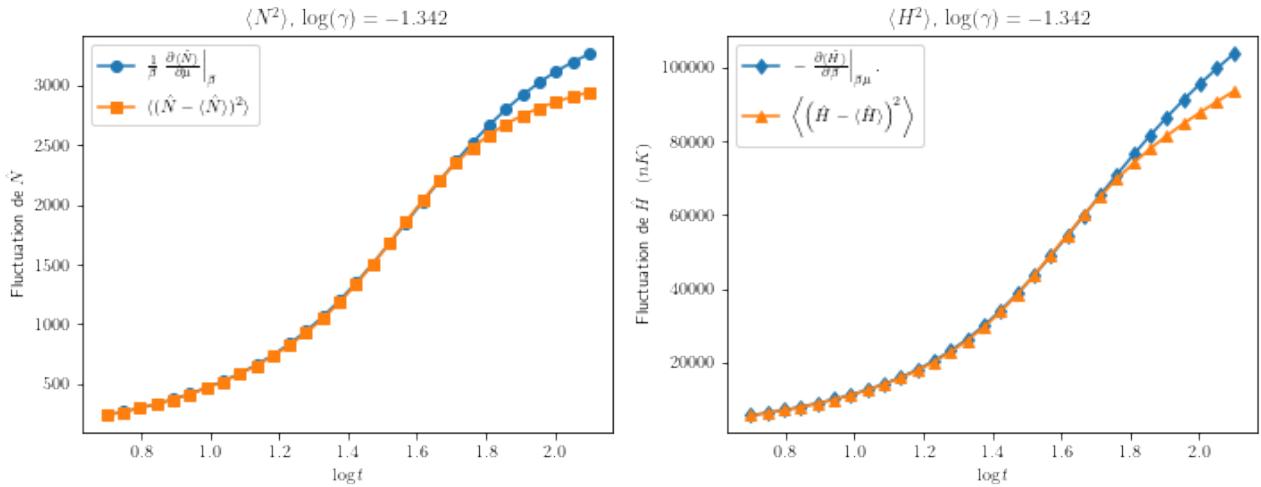


FIGURE 4.5 – Comparaison numérique entre les fluctuations calculées à partir de l'analyse quadratique de l'action (fluctuations de  $\rho$ ) et celles obtenues par dérivées thermodynamiques des observables moyennes. (revoir titres shema)

## 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  $\beta_i$  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

---

<b>5.1 Présentation de l'expérience</b> . . . . .	<b>43</b>
5.1.1 Piégeage transverses et longitudinale . . . . .	43
<b>5.2 Outil de sélection spatial</b> . . . . .	<b>43</b>

---

### 5.1 Présentation de l'expérience

#### 5.1.1 Piégeage transverses et longitudinale

### 5.2 Outil de sélection spatial



# Chapitre 6

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

### Contents

---

<b>6.1 Dispositif expérimental</b>	46
6.1.1 Préparation et Confinement du Gaz Ultra-Froid de $^{87}\text{Rb}$	47
6.1.2 Confinement Longitudinal et Stabilisation du Piège Quartique	47
6.1.3 Sélection Spatiale et Réalisation de la Coupure Bipartite	47
6.1.4 Dynamique Après Coupure	48
<b>6.2 Prédictions de la GHD</b>	48
<b>6.3 Données expérimentales</b>	50
<b>6.4 Sonder la distribution locale des rapidités</b>	50
<b>6.5 Détails sur les calculs</b>	53
6.5.1 Facteur d'occupation et distribution de rapidité à l'équilibre thermique	53
6.5.2 Dynamique du contour dans l'espace des phases $(x, \theta)$	54
6.5.3 Simulation de la déformation du bord	54
6.5.4 Simulation de l'expansion	55

---

### Introduction

Parmi les systèmes à N corps, les modèles intégrables occupent une place particulière, notamment dans le contexte des dynamiques hors d'équilibre et de la thermalisation généralisée. Contrairement aux systèmes génériques, ces modèles présentent une infinité de constantes du mouvement, empêchant la thermalisation au sens usuel. Cette contrainte conduit à l'émergence d'une thermalisation généralisée, décrite non par l'ensemble canonique, mais par un ensemble à entropie maximale sous contraintes, souvent formalisé par l'Ensemble de Gibbs Général (GGE).

Un exemple classique pour illustrer la dynamique non diffusante typique des systèmes intégrables est celui du pendule de Newton, où des chocs élastiques entre sphères de masses égales propagent l'énergie cinétique sans dissipation. Bien que ce système soit classique, il incarne le comportement régulier que l'on retrouve dans les systèmes intégrables quantiques, où les excitations se déplacent sans diffusion.

Dans ce cadre, le problème de Riemann en hydrodynamique — c'est-à-dire l'évolution d'un système à partir de deux états homogènes juxtaposés —

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

avec initialement  $u$  constante par morceau :

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

constitue un test fondamental de compréhension des équations d'évolution dans les systèmes intégrables. Sa résolution complète, longtemps restée partiellement ouverte, a été rendue possible par l'avènement de la

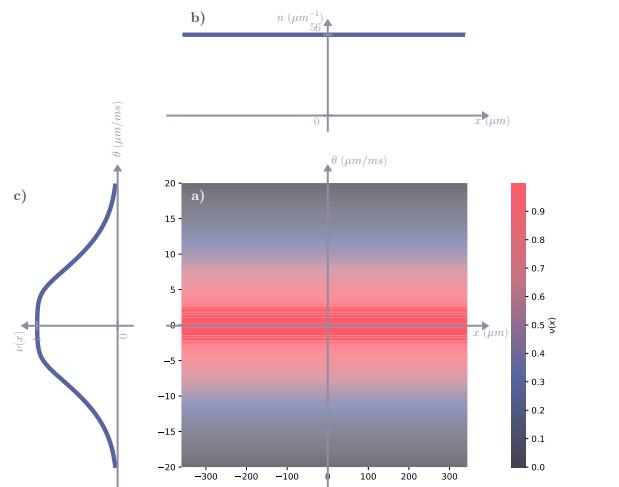


FIGURE 6.1 – a) Facteur d’occupation initial  $\nu(x, \theta) = \nu_0(\theta)$  correspondant à un état d’équilibre thermique à la température  $T = 560 \text{ nK}$ , pour une densité linéaire homogène  $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$ . Ces paramètres correspondent à une potentiel chimique  $\mu = 65 \text{ nK}$ . 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).

Théorie Hydrodynamique Généralisée (GHD). Introduite dans le contexte des théories des champs intégrables (modèle de Sinh-Gordon, modèle de Lieb-Liniger) [??] et des chaînes quantiques (chaîne XXZ de Heisenberg) [??], la GHD a permis une avancée analytique majeure pour la description des dynamiques hors équilibre dans ces systèmes.

Depuis, plusieurs solutions analytiques du problème de Riemann ont été obtenues. En particulier, une solution exacte pour un état initial particulier dans la chaîne XXZ [??], ainsi qu’une solution plus générale pour un gaz 1D de sphères dures, ont confirmé l’efficacité de la GHD pour décrire les processus de propagation balistique et de relaxation généralisée.

Dans ce contexte, nous étudions la dynamique hors équilibre d’un gaz quantique unidimensionnel de bosons faiblement interactifs, confinés dans une géométrie 1D. Le système est décrit par le modèle intégrable de Lieb-Liniger, avec des interactions faibles et répulsives permettant l’émergence d’effets quantiques collectifs tout en restant dans un régime faiblement corrélé.

La préparation initiale consiste à créer un gaz homogène à profil de densité constant (Fig.6.1), à température contrôlée. Une opération de coupe abrupte est ensuite réalisée : la moitié gauche du système ( $x < 0$ ) est vidée, tandis que la moitié droite ( $x > 0$ ) reste occupée (Fig.6.4). Ce protocole, dit quench bipartite, engendre une discontinuité initiale dans la densité atomique, analogue au problème de Riemann pour un système doté d’un nombre infini de lois de conservation. Ce type de dynamique, qualifiée de domain wall dynamics, a été étudié dans la thèse de Léa Dubois [?], qui a permis une première analyse expérimentale de ce protocole.

Nous poursuivons et approfondissons cette étude, en analysant la dynamique unitaire du gaz à l’aide des outils de la GHD. Nous montrons que la propagation balistique de la discontinuité observée expérimentalement est bien capturée par la solution GHD du problème de Riemann, à température nulle comme finie. Le profil de densité mesuré à différents temps révèle une frontière qui se propage de manière linéaire, en bon accord avec les prédictions de la GHD (Fig. 6.4 (e)-(g)). Des écarts résiduels sont néanmoins observés, que nous attribuons à des effets thermiques et à des imperfections instrumentales.

Un aspect central de notre approche repose sur l’exploitation des solutions GHD pour reconstruire la distribution initiale de rapidités à partir des profils de densité mesurés dans la région de transition. Cette démarche constitue une forme de thermométrie généralisée et fournit un outil puissant pour sonder les états locaux du gaz.

Enfin, nous développons une méthode expérimentale inédite permettant de mesurer localement le facteur d’occupation  $\nu(x, \theta)$  dans la région de déformation. Nous observons une forte asymétrie de cette distribution : large et lisse du côté initialement occupé, coupée et abrupte du côté initialement vide, révélant ainsi la nature fondamentalement hors équilibre du système. Cette observation est en bon accord avec les prédictions théoriques de la GHD, même si la résolution spatiale limite la finesse des détails observables.

## 6.1 Dispositif expérimental

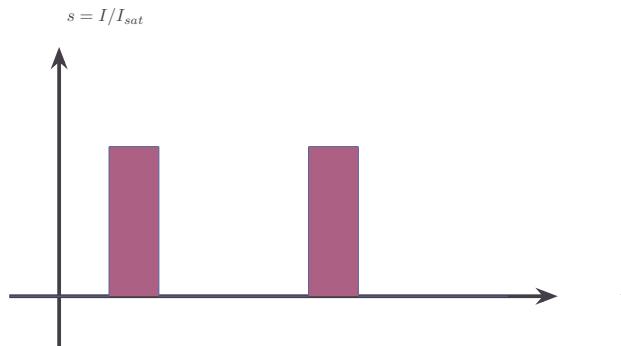


FIGURE 6.2 – Schéma à compléter, comprenant plusieurs parties : deux diagrammes temporels montrant l’intensité lumineuse du pulse DMD et de la sonde imageuse, l’intensité des courants de piégeage longitudinal et transverse, un schéma 3D du piège avec un schéma du nuage atomique, un diagramme du DMD similaire à celui de l’article sur la sélection spatiale, un schéma du DMD, ainsi que des schémas 2D représentant l’évolution du nuage à différentes étapes.

### 6.1.1 Préparation et Confinement du Gaz Ultra-Froid de $^{87}\text{Rb}$

Nous préparons un gaz ultra-froid d’atomes bosoniques de  $^{87}\text{Rb}$  dans l’état  $|F = 2, m_F = 2\rangle$  à l’aide d’un piège magnétique combinant un confinement transverse intense et un confinement longitudinal contrôlé par des courants dans des fils situés à la surface d’une puce atomique. Le système de confinement transverse est réalisé par trois microfils parallèles déposés sur la puce (Fig.6.3(a)), parcourus par des courants alternatifs modulés à 400 MHz. Cette configuration permet de compenser les effets de rugosité des fils et de maintenir une indépendance entre les confinements longitudinal et transverse [?].

Les atomes sont piégés à une distance de  $7\ \mu\text{m}$  de la surface de la puce et à  $15\ \mu\text{m}$  des microfils, garantissant ainsi un confinement transverse très intense. Le potentiel transverse est bien décrit par un potentiel harmonique de fréquence  $\omega_\perp/2\pi = 2,56\ \text{kHz}$ . Un refroidissement par évaporation par radiofréquence permet d’obtenir un nuage atomique à une température d’environ  $T \approx 100\ \text{nK}$ , pour un potentiel chimique  $\mu/k_B = 45\ \text{nK}$ .

Les rapports  $\mu/(\hbar\omega_\perp) = 0,4$  et  $k_BT/(\hbar\omega_\perp) = 0,8$  placent le gaz dans un régime unidimensionnel. Le couplage effectif en 1D est donné par  $g = 2a_{3D}\hbar\omega_\perp$ , avec  $a_{3D} = 5,3\ \text{nm}$ , la longueur de diffusion tridimensionnelle du  $^{87}\text{Rb}$  [?]. Des détails supplémentaires sur l’expérience sont disponibles dans [?]. Le gaz se trouve profondément dans le régime de quasicondensat, avec un paramètre sans dimension de Lieb  $\gamma = mg/(\hbar^2n_0)$  dans l’intervalle  $[0,4, 0,7] \times 10^{-2}$ , tandis que la température satisfait l’inégalité  $T \ll n_0^{3/2}\sqrt{\hbar^2g/m}/k_B$ . Ainsi, les gaz obtenus se trouvent profondément dans le régime de quasicondensat [?].

### 6.1.2 Confinement Longitudinal et Stabilisation du Piège Quartique

Le piégeage longitudinal est assuré par des courants continus circulant dans quatre fils placés de part et d’autre des trois microfils de confinement transverse, comme illustré sur la Fig.6.3(a). Étant donné que ces fils sont situés loin du centre du nuage atomique, le potentiel longitudinal peut être développé en série polynomiale :  $V(x) = \sum_{i=1}^4 a_i x^i$ . Les quatre premiers coefficients  $a_i$  peuvent être ajustés en modulant les courants dans ces fils. Il est ainsi possible d’annuler les termes linéaire, quadratique et cubique ( $a_1 = a_2 = a_3 = 0$ ), de sorte que le terme dominant du potentiel soit quartique :  $V(x) = a_4 x^4$ . Une telle forme de potentiel permet d’obtenir une densité atomique quasi homogène sur une région relativement étendue, condition essentielle à l’étude de dynamiques hors équilibre telles que le protocole de coupure bipartite, qui suppose un système semi-infini. Un exemple de profil de densité linéaire obtenu dans ce potentiel quartique est représenté en gris sur la Fig.6.3(b). La densité linéaire  $n_0$  y reste constante à 10% près sur une distance d’environ  $250\ \mu\text{m}$ .

Les paramètres du piège longitudinal incluent un champ magnétique homogène  $B_0 = 3,36\ \text{G}$  et des courants dans les fils de confinement :  $I_D = 1.400\ \text{A}$ ,  $I_{D'} = 1.100\ \text{A}$ ,  $I_d = 1.090\ \text{A}$ , et  $I_{d'} = 0.875\ \text{A}$ . Cette configuration permet de garantir un confinement longitudinal très précis et stable, essentiel pour l’étude des dynamiques des gaz en régime unidimensionnel.

### 6.1.3 Sélection Spatiale et Réalisation de la Coupure Bipartite

Pour réaliser expérimentalement une bipartition initiale nette, nous utilisons la méthode de sélection spatiale introduite dans [?]. Une partie du nuage, initialement dans un état stationnaire global dans le piège quartique, est illuminée à son extrémité gauche par un faisceau lumineux quasi résonant avec la transition  $F = 2 \rightarrow F' = 3$  de la raie D2, se propageant perpendiculairement à l’axe  $x$ . Les atomes exposés subissent une pression de radiation :

après  $30 \mu\text{s}$  d'illumination, correspondant à environ 15 cycles absorption/réémission, ces atomes acquièrent une énergie suffisante pour quitter le piège. Le faisceau est façonné spatialement à l'aide d'un dispositif à micromiroirs numériques (DMD) afin de ne cibler qu'un bord du gaz. Ce protocole produit une frontière nette entre une région vide et un gaz quasi homogène, rendue possible par l'utilisation du piège quartique. La résolution de cette coupure est limitée principalement par la résolution du système d'imagerie (quelques microns). L'éventuelle réabsorption des photons diffusés par les atomes non illuminés est réduite en désaccordant le faisceau pousseur de  $15\text{MHz}$  par rapport à la transition D2. Un exemple de profil de densité après application de ce protocole est illustré en jaune sur la Fig.6.3(b).

#### 6.1.4 Dynamique Après Coupure

Une fois la coupure réalisée, le confinement longitudinal est supprimé, mais le confinement transverse est maintenu. La frontière initialement abrupte s'élargit au cours du temps. Cette dynamique est étudiée en enregistrant les profils de densité longitudinale  $n(x; t)$  pour différentes durées d'évolution  $t$ .

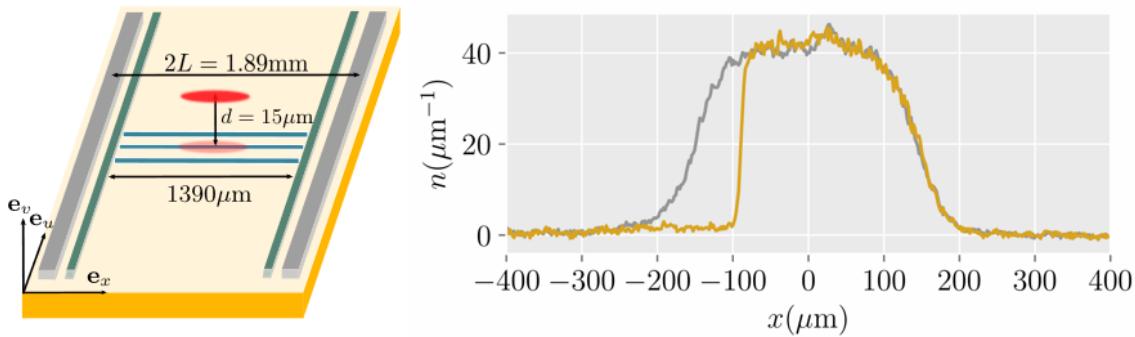


FIGURE 6.3 – (a) Schéma de la puce atomique. Les 3 fils bleus assurent le confinement transverse, les 4 autres fils (gris) génèrent le potentiel longitudinal. Le nuage atomique, représenté par une ellipse rouge, est piégé à  $12 \mu\text{m}$  au-dessus des fils. (b) Profils de densité linéaire extraits par imagerie par absorption. En gris : gaz piégé dans un potentiel quartique. En jaune : après application du faisceau pousseur pendant  $30 \mu\text{s}$ , suivi d'un temps de vol de  $1 \text{ ms}$ .

## 6.2 Prédictions de la GHD

Le dispositif expérimental décrit ci-dessus peut être analysé théoriquement comme suit. Au cours de l'évolution temporelle, la frontière nette initiale du nuage devient plus lisse et les dérivées temporelles des quantités locales diminuent. Après un certain temps, après un lissage, on s'attend à ce que le gaz puisse être décrit localement par des états stationnaires.

Les états stationnaires du modèle de Lieb-Liniger sont complètement caractérisés par leur distribution de rapidité  $\rho(\theta)$ . Alternativement, ces états peuvent être caractérisés par le facteur d'occupation  $\nu(\theta)$ .

Puisque nous supposons une stationnarité locale, le système dans son ensemble est décrit par une distribution de rapidité dépendante du temps et de la position  $\rho(x, \theta; t)$ , ou équivalemment par le facteur d'occupation dépendant du temps et de la position  $\nu(x, \theta; t)$ . Ce dernier conduit à des calculs plus simples, tandis que le premier est particulièrement utile pour extraire la densité linéaire, qui est donnée par

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

Les équations de GHD [?, ?] prédisent l'évolution temporelle de  $\rho(x, \theta; t)$ , ou équivalement de  $\nu(x, \theta; t)$ . Lorsqu'elles sont écrites en termes du facteur d'occupation  $\nu(x, \theta; t)$ , les équations de GHD prennent la forme d'une équation convective :

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

avec la vitesse effective  $v_{[\nu]}^{\text{eff}}$  comme une fonctionnelle de la fonction d'occupation (cf. ??). Cette équation est un cas particulier particulier du problème de Riemann (??) avec initialement un facteur d'occupation :

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

Soit  $\nu(x, \theta; t)$  une solution de l'équation hydrodynamique (Eq. 6.2) vérifiant la condition initiale donnée en (Eq. 6.3). Considérons un changement d'échelle spatio-temporel :  $x \rightarrow x' = \alpha x$ ,  $t \rightarrow t' = \alpha t$ . Alors,  $\nu(x', \theta, t')$  est

également solution des équations hydrodynamiques avec les mêmes conditions initiales. En supposant l'unicité de la solution [?], il en résulte que :

$$\forall \alpha > 0: \quad \nu(x, \theta; t) = \nu(\alpha x, \theta; \alpha t) = \nu\left(\frac{x}{\tau}, \theta; 1\right). \quad (6.4)$$

Cette propriété de similarité est universelle pour les systèmes décrits par une dynamique hydrodynamique à l'échelle d'Euler.

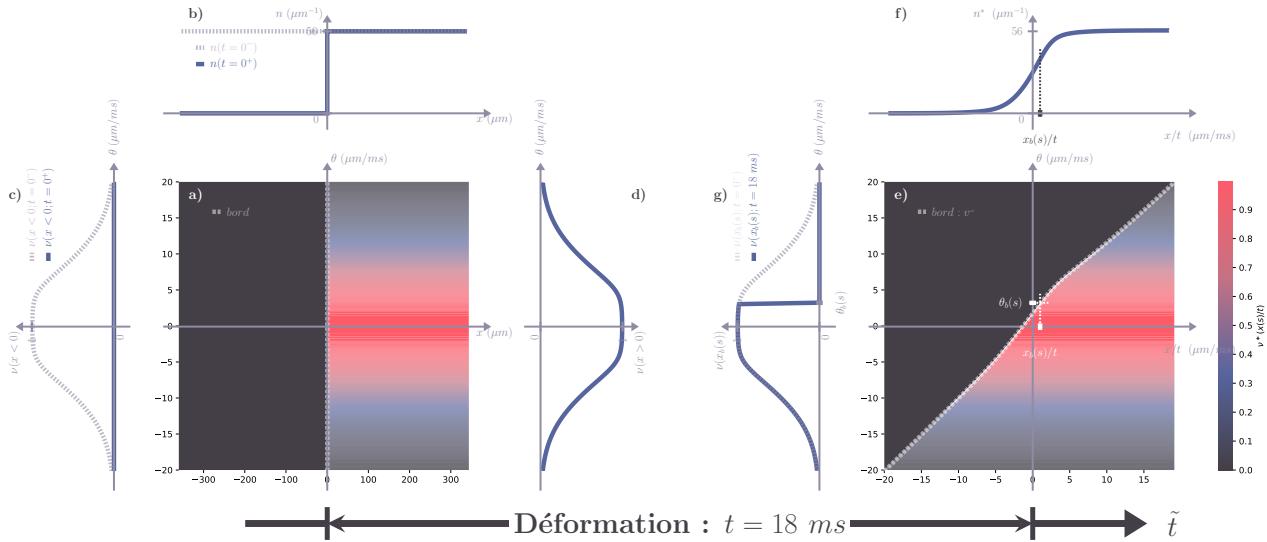


FIGURE 6.4 – (a) À l'instant  $t = 0^+$ , immédiatement après le « quench bipartite » en  $x = 0$ , le facteur d'occupation est donné par  $\nu(x, \theta; t = 0^+) = \nu_0(\theta)$  pour  $x > 0$  et est nul pour  $x < 0$ . Le bord initial représenté en tirets par l'ensemble des points  $(x_b(s; t = 0^+) = 0, \theta(s; t = 0^+))$ . (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 (6.6), 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.

Autrement dit, pour une bipartition initiale dont la discontinuité est située à  $x = 0$ , la solution de (??) est invariante le long des rayons de vitesse constante  $x/t$  [?, ?]. En d'autres termes, l'équation (??) implique que, pour cette classe d'états initiaux, la distribution du facteur d'occupation local et donc toutes les propriétés locales du gaz, dépendent de  $x$  et  $t$  uniquement à travers la quantité  $v = x/t$ . La solution de l'équation (??) peut donc être écrite en utilisant le facteur d'occupation le long des rayons  $\nu^*(v, \theta)$  tel que

$$\nu(x, \theta; t) = \nu^*(x/t, \theta). \quad (6.5)$$

Pour la situation considérée dans cet article, où initialement un état de vide est situé pour  $x < 0$  et un état de distribution du facteur d'occupation  $\nu_0$  pour  $x > 0$ , la solution  $\nu^*(v, \theta)$  est paramétrée par une rapidité de bord  $\theta^*$  selon [?, ?]

$$\nu^*(v, \theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } \theta < \theta^* \\ 0 & \text{si } \theta > \theta^* \end{cases} \quad \text{où } v_{[\nu^*(v, \cdot)]}^{\text{eff}}(\theta^*) = v. \quad (6.6)$$

Cette équation peut être résolue numériquement pour toute distribution initiale donnée  $\nu_0(\theta)$ , voir la Fig. 6.4 pour un exemple. Avec l'équation (6.5), elle décrit entièrement le système à l'échelle d'Euler. Notez que, pour calculer la densité linéaire  $n(x, t)$  afin de comparer avec les profils de densité expérimentaux, on utilise l'équation (6.1).

### 6.3 Données expérimentales

L'état initial est préparé selon le protocole décrit en section ???. Une fois cet état établi, le confinement longitudinal est supprimé, tandis que le confinement transverse est maintenu, permettant ainsi d'étudier l'expansion du gaz le long de l'axe longitudinal.

Conformément aux prédictions hydrodynamiques à l'échelle d'Euler, la dynamique du système à long temps peut être caractérisée par une forme auto-similaire des profils de densité en bord, de la forme :

$$n(x; t) = n^* \left( \frac{x}{t} \right). \quad (6.7)$$

Cette propriété résulte de l'invariance d'échelle des équations de la GHD et se vérifie pour tout système régissant une dynamique eulérienne.

Cette préiction a été testée expérimentalement en superposant les profils de densité en bord, obtenus à partir d'un même état initial, pour différents temps de déformation  $t$ , en les représentant en fonction de la variable réduite  $v = x/t$ . Les profils ainsi mis à l'échelle sont présentés en Fig. 6.5(a) pour des temps compris entre  $t = 10$  ms et  $t = 18$  ms. L'excellent recouvrement des courbes confirme que le régime balistique est atteint dans cet intervalle de temps.

En effet, cette description hydrodynamique à l'échelle d'Euler n'est valable que dans un domaine temporel restreint  $t \in [t_m, t_M]$ , qui dépend notamment des paramètres initiaux du système, tels que la taille du nuage ou la température. Pour des temps  $\tau > t_M$ , estimés autour de 18ms dans notre cas, la modélisation fondée sur une déformation d'un bord semi-infini devient inadaptée, la densité maximale du gaz ayant diminué de manière significative, ce qui rend les effets de taille finie non négligeables. Inversement, pour des temps  $t < t_m$ , l'accord avec la GHD se détériore également, ce qui peut s'expliquer par le caractère non parfaitement abrupt de la coupure initiale — effective sur une échelle de l'ordre du micron —, par la résolution limitée du système d'imagerie (supérieure à  $1 \mu\text{m}$ ) qui empêche de distinguer les détails du bord à très court terme, et enfin par la nature même des équations de la GHD, qui ne sont rigoureusement valables que dans la limite des grandes échelles spatio-temporelles ; dans nos conditions expérimentales, on estime cette borne inférieure à  $t_m = 6 \pm 2$  ms.

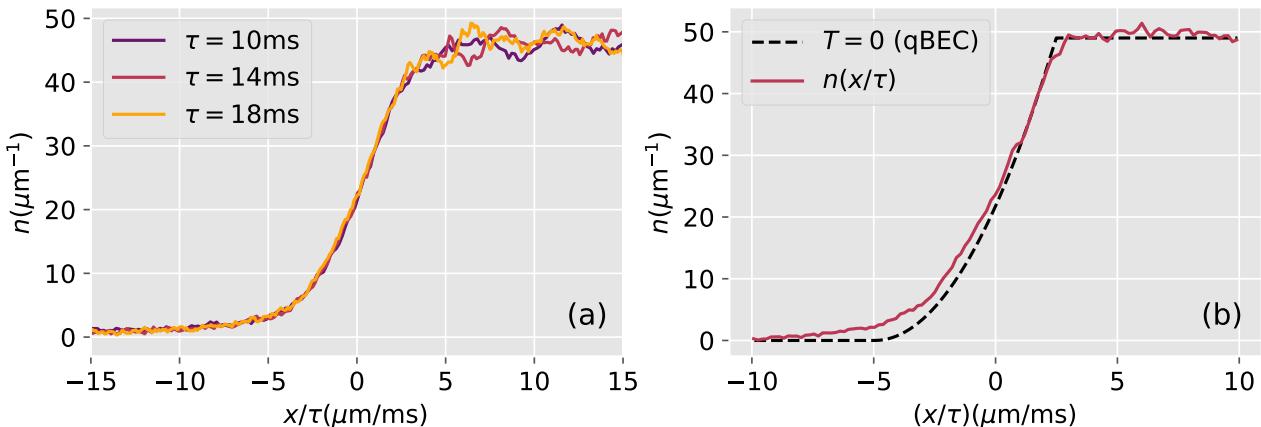


FIGURE 6.5 – (a) Profils de densité aux bords obtenus pour différents temps de déformation  $t$ , représentés en fonction de la variable réduite  $x/t$ . Le bon recouvrement des profils témoigne d'une dynamique balistique conforme à la GHD à l'échelle d'Euler. (b) Comparaison d'un profil mesuré à  $t = 10$  ms avec la prédition à température nulle de la GHD dans le régime de quasi-condensat (équation (??)), pour un paramètre de Lieb  $\gamma = 4,6 \times 10^{-3}$ .

### 6.4 Sonder la distribution locale des rapidités

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  $\theta$ , selon l'équation (6.6). 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  $350 \mu\text{m}$ , comme illustré en Fig. 6.4 (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 6.6 (a)–(c)).

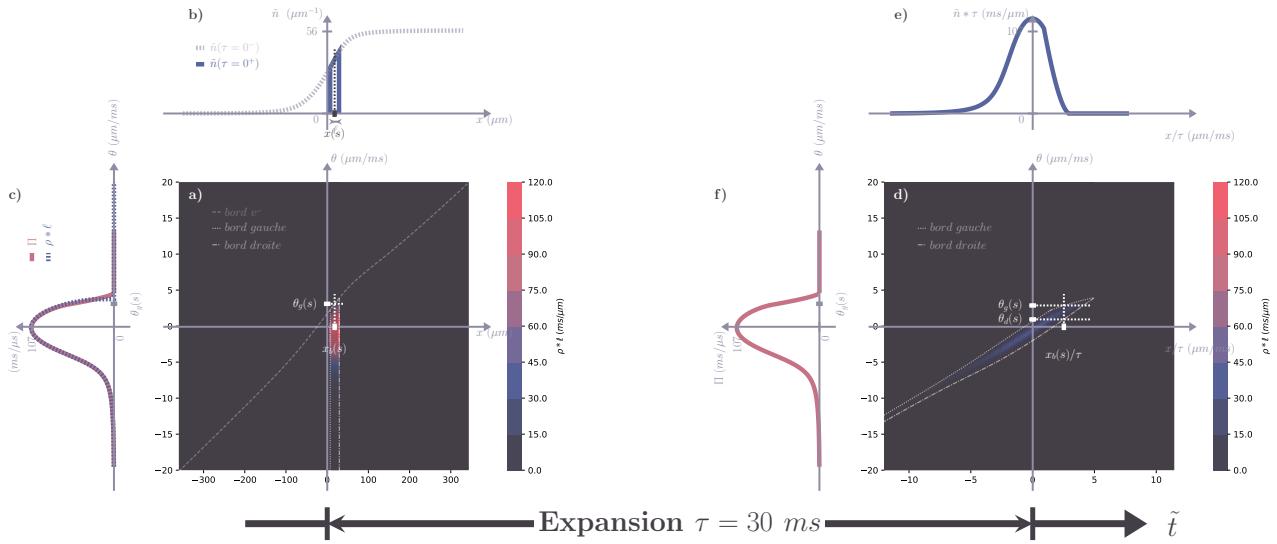


FIGURE 6.6 – (a) À l'instant  $\tau = 0^+$ , immédiatement après la sélection de la tranche centrée en  $x = x_0$  et de largeur  $\ell$ , la distribution de rapidité localement résolue est donnée par  $\rho(x, \theta; \tau = 0^+) = \nu(x, \theta; t = 18 \text{ ms}) \rho_s(x, \theta; t = 18 \text{ ms})$  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  $\tau$ . (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)).

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  $x_0 = 18 \mu\text{m}$ . Pour les calculs, la largeur  $\ell$  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  $\tau$ , 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  $\Pi$  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  $\tau = 30 \text{ ms}$ .

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  $\ell$  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. 6.8(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. 6.8(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

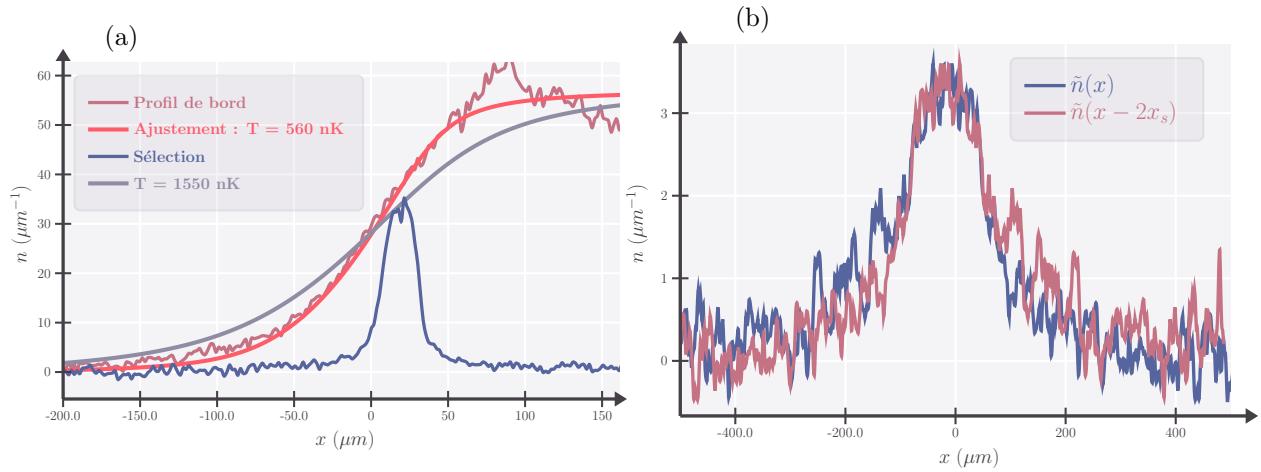


FIGURE 6.7 – (a) *Profil de bord et tranche sélectionnée.* Le profil de bord après 18 ms est montré en rouge. L’ajustement thermique donne une température  $T = 560 \text{ nK}$  (orange). Le profil de densité mesuré 1 ms après la sélection de la tranche est en bleu. (b) *Asymétrie du profil d’expansion 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  $\delta^2 = \int dx (\tilde{n}(x) - \tilde{n}(2x_s - x))^2$ .

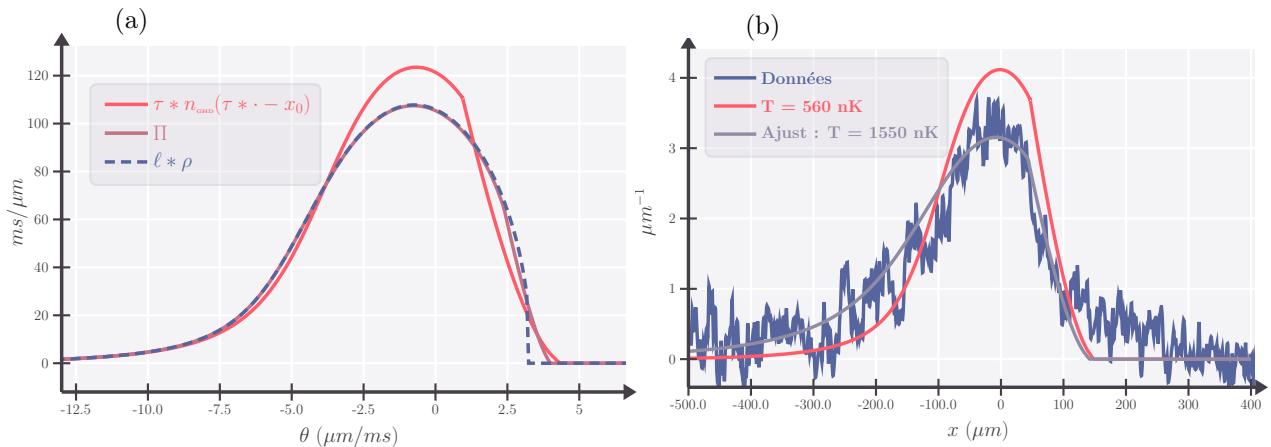


FIGURE 6.8 – (a) *Profil de densité après expansion de la tranche : effets de la largeur finie et du temps d’expansion fini.* Courbe orange : profil obtenu par simulation GHD après expansion pendant  $\tau = 30 \text{ ms}$ , avec  $T = 560 \text{ nK}$ . Courbe marron : distribution asymptotique  $\Pi((x - x_0)/\tau)/\tau$ . 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. 6.8(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. 6.8(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. 6.8(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. 6.8(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.

## 6.5 Détails sur les calculs

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  $(T, \mu)$  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  $(x, \theta)$ , en exploitant la conservation lagrangienne du facteur d'occupation.

### 6.5.1 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  $\mu$ . Dans ce cadre, la fonction  $w(\theta)$ , qui paramétrise l'opérateur de charge (cf. réf. ??), vérifie l'expression

$$w(\theta) = \beta (\varepsilon(\theta) - \mu), \quad (6.8)$$

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

$$\nu_0 \doteq \rho/\rho_s = \frac{1}{1 + e^{\beta\epsilon}}, \quad (6.9)$$

et (6.8) dans (??), on obtient une équation intégrale de type point fixe :

$$\beta\epsilon = \beta\epsilon_0 - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 + e^{-\beta\epsilon}),$$

avec  $\epsilon_0 = \varepsilon - \mu$ . 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 :

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

jusqu'à ce que la distance entre deux itérations successives soit suffisamment petite : ici  $\beta\|\epsilon_{n+1} - \epsilon_n\| < 10^{-12}$ . Ainsi, en fixant le couple  $(\mu, T)$ , on obtient  $\epsilon$ , puis  $\nu$  avec (6.9), puis enfin  $\rho_s$  via :

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

où la fonction "habillée"  $f^{\text{dr}}$  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  $(T, \mu)$ , on détermine entièrement les distributions  $\nu_0(\theta)$  et  $\rho(\theta)$  correspondant à l'équilibre thermique.

**Détermination de  $\mu$  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. 6.1). On veux donc passer du couple  $(T, n_0)$  au couple  $(T, \mu)$ . Pour cela on fixe la température  $T$ , on ajuste donc le potentiel chimique  $\mu$  pour satisfaire la contrainte :

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

### 6.5.2 Dynamique du contour dans l'espace des phases $(x, \theta)$

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  $(x, \theta)$ .

En effet, l'équation fondamentale de la GHD (cf. Eq. 6.6) implique que

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

ce qui signifie que  $\nu$  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  $\Gamma_0$  et nul à l'extérieur. Par conservation lagrangienne, cette propriété est préservée au cours du temps, et l'on a donc pour tout  $t$  :

$$\nu(x, \theta; t) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } (x, \theta) \text{ à l'intérieur de } \Gamma_t, \\ 0 & \text{si } (x, \theta) \text{ à l'extérieur de } \Gamma_t \end{cases} \quad (6.10)$$

La dynamique de  $\Gamma_t$  est ainsi entièrement déterminée par la vitesse efficace  $v_{[\nu]}^{\text{eff}}(\theta)$  associée au facteur d'occupation initial  $\nu_0$ . Cela permet de suivre l'évolution de la région occupée dans l'espace des phases  $(x, \theta)$  à partir des seules données initiales.

### 6.5.3 Simulation de la déformation du bord

Dans la partie "déformation du bord" (Fig. 6.4), 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  $x \rightarrow v = x/t$  :

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

$\nu u^*$  est indépendante du temps. De plus (6.10) deviens

$$\nu^*(x_b(s; t)/t, \theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } \theta < \theta_b(s) \\ 0 & \text{si } \theta > \theta_b(s) \end{cases}. \quad (6.11)$$

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

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

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  $\nu$  avec (6.11) (Fig. 6.4(e)(g)), puis  $\rho_{s[\nu]} = \hbar/m 1_{[\nu]}^{\text{dr}}$  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. 6.4(e)(f)).

Sachant que  $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$  et que  $\mu$  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  $T = 560 \text{ nK}$ .

### 6.5.4 Simulation de l'expansion

Nous effectuons une sélection du système après la déformation du bord (Fig. 6.6(a)) et nous procérons à une expansion unidimensionnelle de cette tranche (Fig. 6.6(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  $\tau$ .

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. 6.6(a) et (e)). Avec cette découpe, après une expansion unidimensionnelle d'une durée  $\tau$ , (6.10) 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. 6.6(f)).

Après avoir réalisé une simulation GHD avec  $T = 560$  nK, valeur obtenue via l'ajustement sur la déformation du bord, on compare cette simulation aux données expérimentales après  $\tau = 30$  ms d'expansion. On compare alors la courbe orange aux données en bleu dans la Fig. 6.8(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. 6.8(b)).



## Chapitre 7

# Mise en place d'un confinement longitudinal dipolaire

### Contents

---

<b>7.1</b>	<b>Transformation de jauge et simplification du Hamiltonien</b>	<b>57</b>
<b>7.2</b>	<b>Potentiel Dipolaire d'un atome à deux niveaux - généralité</b>	<b>58</b>
7.2.1	Introduction . . . . .	58
7.2.2	Système à deux niveaux et interaction avec le champ . . . . .	58
7.2.3	Interprétation du traitement du second ordre : transition virtuelle et origine du potentiel dipolaire (AC-Stark) . . . . .	59
7.2.4	Expression explicite du potentiel dipolaire . . . . .	60
<b>7.3</b>	<b>Piégeage dipolaire d'un atome à plusieurs niveaux</b>	<b>61</b>
7.3.1	Atomes multiniveaux et origine du potentiel dipolaire dans le formalisme quantique . . . . .	61
<b>7.4</b>	<b>Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne</b>	<b>64</b>
7.4.1	Structure électronique du Rubidium . . . . .	64
7.4.2	Structure matricielle du potentiel dipolaire . . . . .	65
7.4.3	Cas de désaccords très importants . . . . .	65
7.4.4	Structure fine et base des états $ L, S; J, m_J\rangle$ . . . . .	67
<b>7.5</b>	<b>Notre dispositif expérimental</b>	<b>69</b>
7.5.1	Choix du laser pour le piégeage dipolaire . . . . .	69

---

### 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  $\chi$  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  $\Gamma$  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  $\tau$  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  $\varepsilon_0$  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  $\Omega$  via  $\Gamma$  et  $I_{\text{sat}}$ , 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  $\Delta$ ), 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  $\Omega$  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  $\Gamma_{\text{sp}}$ , sous la contrainte de produire un potentiel dipolaire  $U_{\text{dip}}$  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  $U_{\text{dip}}$  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  $\Delta$  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  $\Gamma_{\text{sp}}$ , 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  $^{87}\text{Rb}$ , 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  $\omega$ .

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  $\hbar\omega_i$  ;
- $\hat{H}_L = \hbar\omega (\hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} + \frac{1}{2})$  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  $\hat{H}_{\text{at}} + \hat{H}_L$  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,  $\hat{H}_{\text{int}}$  ne couple que des états de parité opposée : il est donc purement hors-diagonal dans la base des états propres de  $\hat{H}_{\text{at}}$ .

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  $\omega$  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  $\omega$ , 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  $\pi$  ( $q = 0$ ) ou  $\sigma^\pm$  ( $q = \pm 1$ ) ;
  - 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 ( $^{87}\text{Rb}$ ) 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  $2 \times 2$  :

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

- **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 ( $\pi$ ), circulaire droite ( $\sigma^+$ ) et circulaire gauche ( $\sigma^-$ ), 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  $\pi$ .* 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  $\pi$ ). 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  $\Gamma$ ,
- **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  $w_0$  de quelques centaines de nanomètres (typiquement  $w_0 \sim 1 \mu\text{m}$ ), ce qui permet de générer des gradients de champ suffisamment intenses à petite échelle pour créer une boîte. L'intensité maximale vaut :

$$I(0) = \frac{2P}{\pi w_0^2}$$

avec  $P$  la puissance incidente. 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]

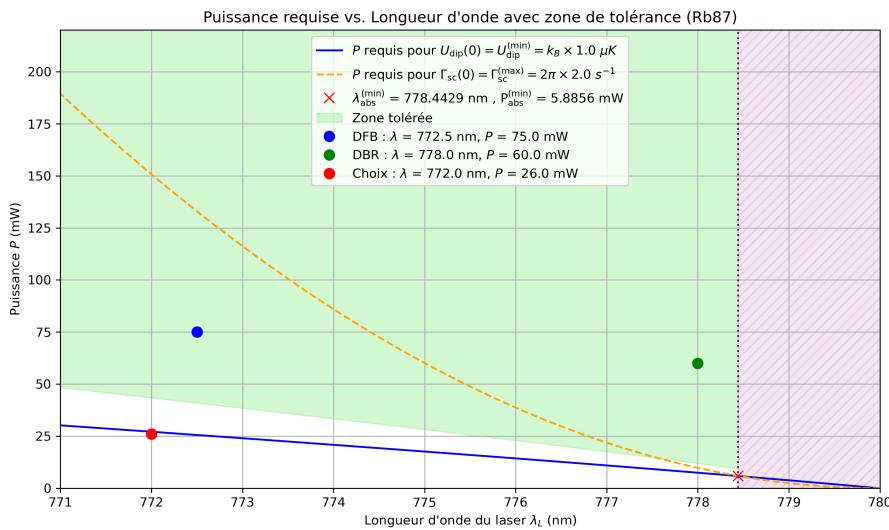


FIGURE 7.1 –  $P^{(min)}(\lambda)$  et  $P^{(max)}(\lambda)$

L'intersection de ces courbes définit une **zone de faisabilité expérimentale** dans l'espace  $(\lambda, P)$ . Le croisement des courbes fournit la longueur d'onde maximale admissible :

$$\lambda_{abs}^{(max)} \simeq 778.4 \text{ nm}, \quad P_{abs}^{(min)} \simeq$$

Un premier filtrage des sources laser admissibles impose que la longueur d'onde soit inférieure à  $\lambda^{(max)}_{abs} \simeq 778.4$  nm et que la puissance disponible dépasse  $P^{(min)}_{abs}$ .

### Prise en compte des pertes optiques

L'ensemble des éléments optiques (fibres, lentilles, miroirs, diviseurs de faisceaux) entraîne une perte totale estimée à environ 40~50%, ce qui doit être compensé dès le choix des sources laser. En pratique, la puissance utile disponible au niveau des atomes est :

$$P_{utile} = \eta \cdot P_{laser} \quad \text{avec } \eta = 0.5.$$

Un facteur de sécurité supplémentaire est nécessaire si l'on envisage de moduler l'intensité ou d'utiliser des optiques à densité variable.

- **DFB (Distributed Feedback)** à  $\lambda = 772.5$  nm, puissance  $P = 75$  mW : ce type de diode intègre un réseau de Bragg directement dans la cavité pour assurer une émission monomode stable. C'est un choix très répandu pour les applications atomiques.
- **DBR (Distributed Bragg Reflector)** à  $\lambda = 778.0$  nm, puissance  $P = 60$  mW : ici, le réseau est séparé de la région active, ce qui offre une certaine souplesse de réglage, bien que la stabilité spectrale puisse être légèrement inférieure à celle des DFB.

[Ajouter une figure montrant les points expérimentaux des lasers DFB et DBR sur le diagramme  $(\lambda, P)$ ]

Les deux lasers sélectionnés se situent dans la zone admissible définie par les conditions  $P^{(min)}(\lambda)$  et  $P^{(max)}(\lambda)$ . Cela valide leur usage pour construire notre boîte optique bleue destinée au piégeage dipolaire de Rubidium-87.

### Quelle longueur d'onde ?



# 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.