

# 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 Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à N corps . . . . .	5
1.1.3 Opérateurs conservés (intégrales du mouvement) . . . . .	12
1.2 Équation de Bethe et distribution de rapidité . . . . .	12
1.2.1 Condition aux bords périodiques et équation de Bethe Ansatz . . . . .	12
1.2.2 Thermodynamique du gaz de Lieb-Liniger à température nulle . . . . .	13
1.2.3 Excitations élémentaires à température nulle . . . . .	14
<b>2 Relaxation et Équilibre dans les Systèmes Quantiques Intégrables : Une Approche par la Thermodynamique de Bethe</b>	<b>15</b>
2.1 Dynamique hors équilibre et notions d'équilibre . . . . .	15
2.1.1 Limit Thermodynamique . . . . .	15
2.1.2 Notion d'état d'équilibre généralisé (GGE) . . . . .	16
2.1.3 Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales . . . . .	17
2.2 Thermodynamique de Bethe et relaxation . . . . .	20
2.2.1 Statistique des macro-états : entropie de Yang-Yang et moyennes dans le GGE	20
2.2.2 Équations intégrales de la TBA . . . . .	22
<b>3 Dynamique hors-équilibre et hydrodynamique généralisée</b>	<b>25</b>
3.1 Hydrodynamique et régimes asymptotiques . . . . .	25
3.1.1 Hydrodynamique classique des systèmes chaotiques . . . . .	25
3.1.2 Hydrodynamique des systèmes intégrables et distribution de rapidité . . . . .	25
3.1.3 Équation d'hydrodynamique généralisée (GHD) . . . . .	25
<b>4 Fluctuation de la distribution de rapidité dans des état d'équilibre</b>	<b>27</b>
4.1 Développement autour du point selle . . . . .	28
4.2 Définition de la fonction de corrélation . . . . .	28
4.3 Fluctuations autour de la distribution moyenne et rôle de la Hessienne . . . . .	29
4.4 Fluctuations autour de la distribution moyenne . . . . .	30
4.5 Fonction correlation du nombre d'atomes et de l'énergie . . . . .	31
<b>5 Protocoles expérimentale</b>	<b>33</b>
5.1 Présentation de l'expérience . . . . .	33
5.1.1 Piégeage transverses et longitudinale . . . . .	33
5.2 Outil de sélection spatial . . . . .	33
<b>6 Étude du protocol de bi-partition : Mesure de distribution de rapidités locales <math>\rho(x, \theta)</math> pour des systèmes hors équilibre</b>	<b>35</b>
6.1 Dispositif expérimental . . . . .	37
6.1.1 Préparation et Confinement du Gaz Ultra-Froid de $^{87}\text{Rb}$ . . . . .	37
6.1.2 Confinement Longitudinal et Stabilisation du Piège Quartique . . . . .	37
6.1.3 Sélection Spatiale et Réalisation de la Coupure Bipartite . . . . .	38
6.1.4 Dynamique Après Coupure . . . . .	38
6.2 Prédictions de la GHD . . . . .	38
6.3 Données expérimentales . . . . .	39

6.4	Sonder la distribution locale des rapidités . . . . .	41
6.5	Détails sur les calculs . . . . .	43
6.5.1	Facteur d'occupation et distribution de rapidité à l'équilibre thermique . .	43
6.5.2	Dynamique du contour dans l'espace des phases $(x, \theta)$ . . . . .	44
6.5.3	Simulation de la déformation du bord . . . . .	45
6.5.4	Simulation de l'expansion . . . . .	46
<b>7</b>	<b>Mise en place d'un confinement longitudinal dipolaire</b>	<b>47</b>
7.1	calculs . . . . .	47
7.1.1	Transformation de jauge et simplification du Hamiltonien . . . . .	47
7.1.2	Effet Stark dynamique et interaction dipolaire atomique . . . . .	48
7.1.3	Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne . . . . .	50
7.1.4	Quelle longueur d'onde du laser ? . . . . .	54
7.1.5	Quelle Puissance du laser ? . . . . .	55
7.2	laser , MOPA, etc .. Données . . . . .	56
<b>A</b>	<b>Calculs Hamiltonien à N fixés</b>	<b>59</b>
A.1	deux particules . . . . .	59
A.2	N particules . . . . .	60
<b>B</b>	<b>Exemple : action de <math>\hat{P}</math> sur l'état <math> \psi_N\rangle</math></b>	<b>63</b>
<b>C</b>	<b>Action de <math>\hat{H}</math> sur l'état <math> \psi_N\rangle</math></b>	<b>65</b>
<b>D</b>	<b>Vérification explicite de la condition aux limites</b>	<b>67</b>
<b>E</b>	<b>Lien avec les équations de Bethe</b>	<b>69</b>
<b>F</b>	<b>Energie</b>	<b>71</b>
<b>G</b>	<b>Taux</b>	<b>73</b>
G.0.1	Le taux de décroissance radiative . . . . .	73
<b>Index</b>		<b>79</b>
<b>Index des noms propres</b>		<b>81</b>

## Pourquoi en 1D ?

*Explication classique à l'aide d'un modèle chaotique : la thermalisation en 2D, illustrée par l'exemple de l'eau en ébullition, avec comme paramètres  $T$ ,  $E$ ,  $N$ . Modélisation par des sphères dures et introduction du modèle ergodique : en 1D, l'intégrabilité du modèle de sphères dures dans un espace réduit entraîne un simple échange de vitesses, sans modifier la distribution des vitesses.*

## Pourquoi en 1D quantique ?

*Le gaz de Bose unidimensionnel avec interactions ponctuelles (la version quantique de l'équation de Schrödinger non linéaire) est l'un des modèles intégrables les plus fondamentaux, pouvant être résolu par la méthode de l'Ansatz de Bethe (ref). Ce modèle a fait l'objet d'études approfondies (ref).*

*Après avoir décrit le modèle de Lieb-Liniger et analysé ses asymptotiques ainsi que les théories linéarisées (Gross-Pitaevskii et Bogoliubov) dans le chapitre 1, nous poursuivons par la construction des fonctions propres de l'Hamiltonien dans un volume fini.*

*Cette construction, détaillée dans le chapitre 1, met en évidence la forme explicite des fonctions propres et leur réductibilité au cas à deux particules, une caractéristique commune des modèles résolubles par l'Ansatz de Bethe. Enfin, dans la dernière section, nous imposons des conditions aux limites périodiques à*

# 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	Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à N corps	5
1.1.3	Opérateurs conservés (intégrales du mouvement)	12
<b>1.2</b>	<b>Équation de Bethe et distribution de rapidité</b>	<b>12</b>
1.2.1	Condition aux bords périodiques et équation de Bethe Ansatz	12
1.2.2	Thermodynamique du gaz de Lieb-Liniger à température nulle	13
1.2.3	Excitations élémentaires à température nulle	14

---

### 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

#### 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.

#### Expression de l'Hamiltonien

Le Hamiltonien du modèle est donné par

$$\hat{H} = \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \left[ -\frac{1}{2} \hat{\partial}_x^2 + \frac{c}{2} \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \right] \hat{\Psi}(x) \quad (1.1)$$

où  $c$  est la constante de couplage. Dans ce chapitre, nous considérons uniquement les propriétés du système à un instant donné, de sorte que la dépendance temporelle des champs est omise pour alléger l'écriture.

#### Commutation canonique

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

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(y)] &= \delta(x-y) \\ [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(y)] &= [\hat{\Psi}^\dagger(x), \hat{\Psi}^\dagger(y)] = 0 \end{aligned} \quad (1.2)$$

Ces relations traduisent la nature bosonique des excitations du champ.

#### Équation du mouvement associée

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

$$i\hat{\partial}_t \hat{\Psi} = [\hat{\Psi}, \hat{H}] \quad (1.3)$$

ce qui, après évaluation explicite du commutateur (1.2), conduit à :

$$i\hat{\partial}_t \hat{\Psi} = -\frac{1}{2} \hat{\partial}_x^2 \hat{\Psi} + c \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi} \quad (1.4)$$

est appelée l'équation de .

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

---

### 1.1.2 Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à N corps

**Cas d'une particule libre dans une boîte périodique : base des états propres à une particule**

**Contexte physique du système.** Le système considéré est constitué d'une seule particule quantique confinée dans une boîte unidimensionnelle de taille finie  $L$ , avec des conditions aux limites périodiques. Ce cadre sert de base pour l'étude ultérieure de systèmes à plusieurs corps. En absence d'interactions (i.e.,  $c = 0$ ), l'Hamiltonien se réduit à sa composante cinétique, et le problème devient celui d'une particule libre sur un cercle.

**Détermination des états propres.** Nous cherchons à déterminer les états propres  $|\theta\rangle$  de l'Hamiltonien  $\hat{H}$ , associés au quasi-moment/mode  $\theta$ , qui satisfont l'équation de Schrödinger stationnaire.

$$\hat{H}|\theta\rangle = \varepsilon(\theta)|\theta\rangle. \quad (1.5)$$

**État à une particule dans la base de Fock.** L'état à une particule peut être exprimé dans la base positionnelle de Fock :

$$|\theta\rangle = \int dz |z\rangle \langle z|\theta\rangle = \int dz \varphi_{\{\theta\}}(z) \hat{\Psi}^\dagger(z) |0\rangle, \quad (1.6)$$

où l'opérateur  $\hat{\Psi}^\dagger(z)$  crée une particule à la position  $z$ , la base spatial

$$|z\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(z) |0\rangle, \quad (1.7)$$

et  $|0\rangle$  est le vide de Fock défini par :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \hat{\Psi}(x) |0\rangle = 0, \quad \langle 0|0 \rangle = 1. \quad (1.8)$$

**Orthonormalité de la base.** La base  $|z\rangle$  est orthonormale car avec en utilisant les relations de commutation (1.2) et la définition du vide de Fock (1.8) , il vient que

$$\langle z|z'\rangle = \delta_{z,z'}. \quad (1.9)$$

**Fonction d'onde à une particule.** La fonction d'onde associée  $\varphi_{\{\theta\}}(z)$  est définie comme la projection :

$$\varphi_{\{\theta\}}(z) = \langle 0|\hat{\Psi}(z)|\theta\rangle, \quad (1.10)$$

et normalisée selon :

$$\langle \theta'| \theta \rangle = \int dz \varphi_{\{\theta'\}}^*(z) \varphi_{\{\theta\}}(z) = \delta_{\theta,\theta'}. \quad (1.11)$$

**Hamiltonien dans le cas à une particule.** L'Hamiltonien (1.1) peut être réécrit en effectuant une intégration par parties. Dans le cas d'un seul boson, seul le terme cinétique contribue, car le terme d'interaction s'annule (ce dernier étant nul pour une seule particule) :

$$\hat{H} = - \int dx \left[ \frac{1}{2} \hat{\partial}_x^2 \hat{\Psi}^\dagger(x) \right] \hat{\Psi}(x). \quad (1.12)$$

**Hamiltonien dans le cas à une particule et Action de l'Hamiltonien.** Lorsque l'on agit avec l'Hamiltonien (1.12) sur  $|1\rangle$ , et en utilisant les relations de commutation (1.2) et la définition du vide de Fock (1.8), on obtient :

$$\hat{H}|\theta\rangle = \int dz \left[ \hat{\mathcal{H}}_1 \varphi_{\{\theta\}}(z) \right] \hat{\Psi}^\dagger(z)|0\rangle, \quad (1.13)$$

avec

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = -\frac{1}{2}\partial_z^2$$

**Équation de Schrödinger différentielle.** En reportant cela dans l'équation de Schrödinger, on obtient une équation différentielle linéaire :

$$-\frac{1}{2}\partial_z^2 \varphi_{\{\theta\}}(z) = \varepsilon(\theta) \varphi_{\{\theta\}}(z). \quad (1.14)$$

**Résolution avec conditions périodiques.** Il s'agit de l'équation de Schrödinger stationnaire pour une particule libre en une dimension. Dans notre cas, la particule est confinée dans une boîte unidimensionnelle de longueur  $L$ , avec des conditions aux limites périodiques. Ce problème est donc équivalent à celui d'une particule libre sur un cercle de périmètre  $L$ .

La fonction d'onde  $\varphi_{\{\theta\}}(z)$  doit alors satisfaire :

$$\varphi_{\{\theta\}}(z + L) = \varphi_{\{\theta\}}(z), \quad (1.15)$$

ce qui impose une \*\*périodicité\*\* stricte. Les solutions admissibles de (1.14) sont alors des ondes planes :

$$\varphi_{\{\theta\}}(z) = a e^{i\theta z} + b e^{-i\theta z}, \quad (1.16)$$

avec  $\theta \in \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}$ , imposé par la condition :

$$e^{i\theta(z+L)} = e^{i\theta z} \Rightarrow e^{i\theta L} = 1 \Rightarrow \theta = \frac{2\pi n}{L}, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (1.17)$$

..... Ce choix se justifie rigoureusement car l'espace de Hilbert pertinent,  $L^2([0, L])$  avec conditions aux limites périodiques, est engendré par les exponentielles complexes  $e^{i\theta z}$ . Celles-ci forment une base orthonormée complète de cet espace (c'est l'objet du théorème de Fourier). Toute fonction périodique de carré intégrable peut donc s'écrire comme une combinaison linéaire (ou série de Fourier) de ces fonctions.

Autrement dit, les seules fonctions propres  $\varphi_{\{\theta\}}(z)$  compatibles avec la structure mathématique imposée par les conditions périodiques sont de la forme :  $\varphi_{\{\theta\}}(z) \propto e^{i\theta z}$ . Il suffit donc d'étudier ces modes pour capturer l'ensemble des solutions admissibles. ..

**Énergies quantifiées.** L'énergie associée à une onde plane est donnée par :

$$\varepsilon(\theta) = \frac{\theta^2}{2}, \quad (1.18)$$

ce qui exprime l'énergie cinétique d'une particule libre de masse  $m = 1$ , en fonction de son quasi-moment  $\theta$ .

**Notation adoptée et interprétation.** Dans le cas à une particule, l'état propre de l'Hamiltonien s'écrit naturellement dans la base des quasi-moment comme un état  $|\theta\rangle$ , où  $\theta$  désigne la quantité de mouvement de la particule.

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.

## Deux particules

**Introduction au système à deux bosons avec interaction de contact.** Nous considérons à présent le cas de deux bosons quantiques dans la même boîte unidimensionnelle de longueur  $L$ , avec des conditions aux limites périodiques. Contrairement au cas à une particule, le terme d'interaction à contact intervient dans la dynamique.

**Forme générale de l'état à deux particules dans la base de Fock** On cherche à déterminer les états propres  $|\{\theta_1, \theta_2\}\rangle$ , où  $\theta_1$  est le quasi-moment d'une particule et  $\theta_2$  celui de l'autre, associés à l'Hamiltonien  $\hat{H}$ , satisfaisant l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\hat{H}|\{\theta_1, \theta_2\}\rangle = \varepsilon(\theta_1, \theta_2)|\{\theta_1, \theta_2\}\rangle. \quad (1.19)$$

**Définition et orthonormalisation de la base positionnelle bosonique.** L'état à deux particules peut être écrit dans la base positionnelle de Fock sous la forme :

$$|\{\theta_1, \theta_2\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \iint dz_1 dz_2 |z_1, z_2\rangle \langle z_1, z_2| \{\theta_1, \theta_2\} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \iint dz_1 dz_2 \varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2) |z_1, z_2\rangle \quad (1.20)$$

où l'état  $|z_1, z_2\rangle$  représente **un état à deux particules bosoniques localisées en  $z_1$  et  $z_2$** . En base Fock, cela correspond à l'action de deux opérateurs de création :

$$|z_1, z_2\rangle = \prod_z \frac{(\hat{\Psi}^\dagger(z))^{n_z}}{\sqrt{n_z!}} |0\rangle, \quad |z_1 \neq z_2\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\Psi}^\dagger(z_2) |0\rangle, \quad |z_1 = z_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\Psi}^\dagger(z_1))^2 |0\rangle \quad (1.21)$$

où  $\prod_z$  est **un produit formelle sur les position**  $z$  possibles et  $n_z \in \mathbb{N}$  est le nombre de particule à la position  $z$  tel que  $\int n_z = 2$ , et orthonormalisée car avec en utilisant les relations de commutation (1.2) et la définition du vide de Fock (1.8) il vient que

$$\langle z_1, z_2 | z'_1, z'_2 \rangle = \prod_z \delta_{n_z, n'_z}, \quad \langle z_1 < z_2 | z'_1 < z'_2 \rangle = \delta_{z_1, z'_1} \delta_{z_2, z'_2}, \quad \langle z_1 = z_2 | z'_1 = z'_2 \rangle = \delta_{z_1, z'_1} \quad (1.22)$$

**Symétrie et normalisation de la fonction d'onde à deux particules.** La fonction d'onde à deux particules est la fonction d'onde symétrique :

$$\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2) = \langle z_1, z_2 | \{\theta_1, \theta_2\} \rangle, \quad \varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2) = \varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_2, z_1), \quad (1.23)$$

et normalisée selon :

$$\langle \{\theta'_1, \theta'_2\} | \{\theta_1, \theta_2\} \rangle = \int dz_1 dz_2 \varphi_{\{\theta'_1, \theta'_2\}}^*(z_1, z_2) \varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2) = \prod_\theta \delta_{n_\theta, n'_\theta}. \quad (1.24)$$

où  $\prod_\theta$  est **un produit formelle sur le modes**  $\theta$  possibles et  $n_\theta \in \mathbb{N}$  est le nombre de particule au mode  $\theta$  tel que  $\int n_\theta = 2$ .

**Réécriture de l'Hamiltonien du champ.** L'Hamiltonien (1.1) peut être réécrit en effectuant une intégration par parties.

$$\hat{H} = \int dx \left\{ - \left[ \frac{1}{2} \hat{\partial}_x^2 \hat{\Psi}^\dagger(x) \right] \hat{\Psi}(x) + \frac{c}{2} \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x) \right\}. \quad (1.25)$$

**Action de l'Hamiltonien sur l'état à deux particules et Forme explicite de l'Hamiltonien effectif à deux corps** L'action de  $\hat{H}$  sur  $|\{\theta_1, \theta_2\}\rangle$  fournit une équation de Schrödinger pour la fonction d'onde à deux particules. Les règles de commutations (1.2) et la définition d'état de Fock (1.8) impliquent que (cf Annex A.1)

$$\hat{H}|\{\theta_1, \theta_2\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \iint dz_1 dz_2 [\hat{\mathcal{H}}_2 \varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2)] |z_1, z_2\rangle \quad (1.26)$$

avec

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = -\frac{1}{2} \partial_{z_1}^2 - \frac{1}{2} \partial_{z_2}^2 + c\delta(z_1 - z_2). \quad (1.27)$$

Après développement en utilisant les relations de commutation bosoniques et les propriétés du vide de Fock, on obtient l'équation suivante :

$$\hat{\mathcal{H}}_2 \varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2) = \varepsilon(\theta_1, \theta_2) \varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2). \quad (1.28)$$

**Changement de variables : coordonnées du centre de masse et relatives.** En première quantification, en utilisant les coordonnées du centre de masse et relatives  $Z = (z_1 + z_2)/2$  et  $Y = z_1 - z_2$ ,

$$\frac{1}{2} \partial_Z^2 + 2\partial_Y^2 = \partial_{z_1}^2 + \partial_{z_2}^2$$

l'hamiltonien (1.27) se divise en une somme de deux problèmes indépendants à une seule particule.

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = -\frac{1}{4} \partial_Z^2 - \partial_Y^2 + c\delta(Y) \quad (1.29)$$

**Résolution du problème de centre de masse et de coordonnée relative.** Les états propres de l'hamiltonien du centre de masse de masse 2,  $-\frac{1}{4}\partial_Z^2$ , sont des ondes planes, et l'hamiltonien pour la coordonnée relative  $Y$  correspond à celui d'une particule de masse réduite 1/2 en présence d'un potentiel delta en  $Y = 0$ .

$$-\partial_Y^2 \tilde{\varphi}(Y) + c\delta(Y)\tilde{\varphi}(Y) = \tilde{\varepsilon}\tilde{\varphi}(Y) \quad (1.30)$$

**Forme symétrique de la fonction d'onde pour bosons.** Dans le référentiel du centre de masse. Le système est le même que que ceux d'un particules de masse 1/2. Le système étant composé de particules bosoniques, on cherche une solution symétrique que l'on écrit sous la forme :

$$\tilde{\varphi}(Y) = a e^{i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} + b e^{-i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} \propto \sin\left(\frac{1}{2}(\tilde{\theta}|Y| + \Phi)\right), \quad (1.31)$$

avec

$$\Phi(\tilde{\theta}) = 2 \arctan\left(\frac{1}{i} \frac{a+b}{a-b}\right), \quad (1.32)$$

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'équation (1.31) dans l'équation (1.30), on obtient l'énergie réduite propre de l'état lié

Et l'énergie réduite propre de l'état lié s'écrit

$$\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}) = \frac{1}{2} \frac{\tilde{\theta}^2}{2}, \quad (1.33)$$

la masse réduite étant 1/2.

**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 :

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

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

**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 :

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

(à revoir) Cette relation exprime l'impact de l'interaction delta sur le déphasage de la solution liée. On en déduit que plus le couplage  $c$  est fort, plus la phase  $\Phi$  tend vers  $\pi$ , ce qui correspond à une fonction d'onde présentant un maximum en  $Y = 0$ . En revanche, dans la limite d'interaction faible ( $c \rightarrow 0$ ), la phase  $\Phi$  tend vers zéro et la fonction d'onde devient nulle en  $Y = 0$ .

**Phase de diffusion à un corp. (à revoir)** Les équations (1.32) et (1.34) donne rapport entre leurs amplitudes définit la phase de diffusion :

$$e^{i\Phi(\tilde{\theta})} = -\frac{a}{b} = \frac{1 + i\tilde{\theta}/c}{1 - i\tilde{\theta}/c}, \quad (1.34)$$

car  $\exp(2i \arctan(x)) = (1 + ix)/(1 - ix)$ .

**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 :

$$\tilde{\psi}_{\text{inc}}(Y) \propto e^{i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} + e^{i\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|}. \quad (1.35)$$

Cette superposition évolue dans le temps comme :

$$\tilde{\psi}_{\text{inc}}(Y, t) \propto e^{i(\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y| - t\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}))} + e^{i(\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y| - t\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta}))}. \quad (1.36)$$

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 (1.31) et (1.46), l'état sortant de la diffusion correspondant serait :

$$\tilde{\psi}_{\text{outc}}(Y, t) \propto -e^{i\Phi(\tilde{\theta})} e^{-i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} - e^{i\Phi(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})} e^{-i\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|}. \quad (1.37)$$

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  $t$ .

$$|Y| \simeq \tilde{\theta}t - 2\Delta(\tilde{\theta}) \quad (1.38)$$

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

$$\Delta(\theta) \doteq \frac{d\Phi}{d\theta}(\theta) = \frac{2c}{c^2 + \theta^2}. \quad (1.39)$$

**Retour aux coordonnées du laboratoire.** En revenant aux coordonnées d'origine (celles du laboratoire), on constate que la fonction d'onde à deux corps

$$\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2) = \langle 0 | \hat{\Psi}(z_1) \hat{\Psi}(z_2) | \{\theta_1, \theta_2\} \rangle, \quad (1.40)$$

avec  $z_1 < z_2$ , (ie  $Y > 0$ ). Et le centre de masse sur le mouvement

$$Z = \bar{\theta}t, \quad (1.41)$$

avec  $\bar{\theta}$  la vitesse de groupe dans le référentiel de laboratoire.

Nous constatons que la position des deux particules semiclassiques après la collision sera

$$z_1 = Z + \frac{Y}{2} \simeq \theta_1 t - \Delta(\theta_1 - \theta_2), \quad z_2 = Z - \frac{Y}{2} \simeq \theta_2 t + \Delta(\theta_1 - \theta_2), \quad (1.42)$$

avec les vitesses  $\theta_1$  et  $\theta_2$  définies tel que

$$\tilde{\theta} = \theta_1 - \theta_2, \quad \bar{\theta} = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}. \quad (1.43)$$

En remarquant que

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

Ce qui nous rassure car rappelons-nous que la masse un centre de masse est 2 et la masse réduite est  $1/2$ .

Ce qui nous motive à multiplier la fonction d'onde dans le référentiel du centre de masse (1.31) par  $\exp(2iZ\bar{\theta})$  pour obtenir

$$\varphi_{\{\theta_1, \theta_2\}}(z_1, z_2) \propto \begin{cases} (\theta_2 - \theta_1 - ic)e^{iz_1\theta_1 + iz_2\theta_2} - (\theta_1 - \theta_2 - ic)e^{iz_1\theta_2 + iz_2\theta_1} & \text{si } z_1 < z_2 \\ (z_1 \leftrightarrow z_2) & \text{si } z_1 > z_2 \end{cases} \quad (1.44)$$

correspondant aux valeurs propres

$$\varepsilon(\theta_1, \theta_2) = \overbrace{\bar{\theta}^2}^{\bar{\varepsilon}(\bar{\theta})} + \frac{1}{4}\tilde{\theta}^2 = \frac{\theta_1}{2} + \frac{\theta_2}{2}. \quad (1.45)$$

Pour  $\theta_1 > \theta_2$ , les deux termes  $e^{iz_1\theta_1 + iz_2\theta_2}$  et  $e^{iz_1\theta_2 + iz_2\theta_1}$  correspondent aux paires de particules entrantes et sortantes dans un processus de diffusion à deux corps. Le rapport de leurs amplitudes est la phase de diffusion à deux corps (1.46) reste inchangé

$$e^{i\Phi(\theta_1 - \theta_2)} = -\frac{a}{b} = \frac{\theta_1 - \theta_2 - ic}{\theta_2 - \theta_1 - ic}. \quad (1.46)$$

### Cas général à $N$ particules : l'Ansatz de Bethe

Pour un plus grand nombre de particules, les états propres de l'Hamiltonien  $\hat{\mathbf{H}}$  (1.2) sur la ligne infinie sont des états de Bethe  $|\{\theta_a\}\rangle$  étiquetés par un ensemble de  $N$  nombres  $\{\theta_a\}_{a \in \llbracket 1, N \rrbracket}$ , appelés les rapidités.

$$\hat{\mathbf{H}}|\{\theta_a\}\rangle = \varepsilon(\{\theta_a\})|\{\theta_a\}\rangle \quad (1.47)$$

L'état à deux particules peut être écrit dans la base positionnelle de Fock sous la forme :

$$|\{\theta_a\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^N z |z_1, \dots, z_N\rangle \langle z_1, \dots, z_N| \{\theta_a\} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^N z \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) |z_1, \dots, z_N\rangle \quad (1.48)$$

où la base spatiale à deux particule bosomique  $|z_1, \dots, z_N\rangle$  s'écrit

$$|z_1, \dots, z_N\rangle = \prod_z \frac{(\hat{\Psi}^\dagger(z))^{n_z}}{\sqrt{n_z!}} |0\rangle, \quad (1.49)$$

$$|z_1 < \dots < z_N\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |0\rangle, \quad (1.50)$$

$$|z_1 < \dots < z_i = z_{i+1} < \dots < z_N\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \dots \frac{(\hat{\Psi}^\dagger(z_i))^2}{\sqrt{2}} \hat{\Psi}^\dagger(z_{i+2}) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |0\rangle \quad (1.51)$$

où  $\prod_z$  est un produit formelle sur les position  $z$  possibles et  $n_z \in \mathbb{N}$  est le nombre de particule à la position  $z$  tel que  $\int n_z = 2$ , et orthonormalisée car car avec en utilisant les relations de commutation (1.2) et la définition du vide de Fock (1.8) il vient que

$$\langle z_1, \dots, z_N | z'_1, \dots, z'_N \rangle = \prod_z \delta_{n_z, n'_z}, \quad \langle z_1 < \dots < z_N | z'_1 < \dots < z'_N \rangle = \delta_{z_1, z'_1} \dots \delta_{z_N, z'_N}. \quad (1.52)$$

$\varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N)$  tel que

$$\varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) = \langle 0 | \prod_z \frac{(\hat{\Psi}(z))^{n_z}}{\sqrt{n_z!}} | \{\theta_a\} \rangle \quad (1.53)$$

est la fonction d'onde symétrique :

$$\varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_i, \dots, z_j, \dots, z_N) = \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_i, \dots, z_j, \dots, z_N), \quad (1.54)$$

et normalisée selon :

$$\langle \{\theta'_a\} | \{\theta_a\} \rangle = \int d^N z \varphi_{\{\theta'_a\}}(z_1, \dots, z_N) \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) = \prod_z \delta_{n_\theta, n'_{\theta}}. \quad (1.55)$$

L'action de  $\hat{H}$  (1.25) sur  $|\{\theta_a\}\rangle$  fournit une équation de Schrödinger pour la fonction d'onde à deux particules. Les règles de commutations (1.2) et la définition d'état de Fock (1.8) impliquent que (cf Annex A.2)

$$\hat{H} |\psi(\theta_1, \dots, \theta_N)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^N z \left[ \hat{\mathcal{H}}_N \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) \right] \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |0\rangle \quad (1.56)$$

avec

$$\hat{\mathcal{H}}_N = - \sum_{i=1}^N \partial_{z_i}^2 + c \sum_{1 \leq i < j \leq N} \hat{\delta}(z_i - z_j) \quad (1.57)$$

Dans le domaine  $z_1 < z_2 < \dots < z_N$ , la fonction d'onde est (Gaudin 2014, Korepin et al. 1997, Lieb anz Liniger 1963) :

$$\begin{aligned} \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) &= \langle 0 | \Psi(z_1) \dots \Psi(z_N) | \{\theta_a\} \rangle \\ &\propto \sum_{\sigma} (-1)^{|\sigma|} \left( \prod_{1 \leq a < b \leq N} (\theta_{\sigma(b)} - \theta_{\sigma(a)} - ic) \right) e^{i \sum_j z_j \theta_{\sigma(j)}}, \end{aligned} \quad (1.58)$$

et elle est étendue à d'autres domaines par symétrie  $z_i \leftrightarrow z_j$ . Ici, la somme s'étend à toutes les permutations  $\sigma$  des  $N$  éléments (donc il y a  $N!$  termes) et  $(-1)^{|\sigma|}$  est la signature de la permutation.

### 1.1.3 Opérateurs conservés (intégrales du mouvement)

#### Opérateurs nombre de particules $\hat{Q}$ et moment $\hat{P}$

L'opérateur du nombre de particules  $\hat{Q}$  et l'opérateur de moment  $\hat{P}$  sont définis comme

$$\hat{Q} = \int \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) dx \quad (1.59)$$

$$\hat{P} = -\frac{i}{2} \int \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\partial}_x \hat{\Psi}(x) - \left[ \hat{\partial}_x \hat{\Psi}^\dagger(x) \right] \hat{\Psi}(x) \right\} dx \quad (1.60)$$

#### Propriétés

Ce sont des opérateurs hermitiens et ils constituent des intégrales du mouvement

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = [\hat{H}, \hat{P}] = O. \quad (1.61)$$

Il convient de noter que dans le chapitre 2, nous allons construire un nombre infini d'intégrales du mouvement.

#### L'état propre

Les fonctions propres  $|\{\theta_a\}\rangle$  de l'Hamiltonien  $\hat{H}$ , le sont aussi pour  $\hat{Q}$  et  $\hat{P}$  :  
L'équation aux valeurs propres

$$\hat{H}|\{\theta_a\}\rangle = \varepsilon(\{\theta_a\})|\{\theta_a\}\rangle, \quad \hat{P}|\{\theta_a\}\rangle = p(\{\theta_a\})|\{\theta_a\}\rangle, \quad \hat{Q}|\{\theta_a\}\rangle = N|\{\theta_a\}\rangle, \quad (1.62)$$

conduit au fait que  $|\{\theta_a\}\rangle$  est une fonction propre à la fois de l'Hamiltonien mécanique quantique  $\hat{\mathcal{H}}_N$ , de l'opérateur du nombre de particule  $\hat{\mathcal{N}}$  et de l'opérateur du moment mécanique quantique  $\hat{\mathcal{P}}_N$  :

$$\hat{\mathcal{N}} = \sum_{k=1}^N 1, \quad \hat{\mathcal{P}}_N = -i \sum_{k=1}^N \hat{\partial}_{z_k} \quad (1.63)$$

associés valeurs propres

$$N = \sum_{a=1}^N \theta_a^0, \quad p(\{\theta_a\}) = \sum_{a=1}^N \theta_a^1, \quad \varepsilon(\{\theta_a\}) = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^N \theta_a^2. \quad (1.64)$$

## 1.2 Équation de Bethe et distribution de rapidité

### 1.2.1 Condition aux bords périodiques et équation de Bethe Ansatz

Dans les deux sous-sections précédentes, nous avons étudié un nombre fini de bosons sur la droite réelle infinie, ce qui correspond à une densité de particules nulle. Cependant, pour accéder aux propriétés thermodynamiques du modèle, il est nécessaire de considérer une densité finie  $N/L$ . Cela peut être réalisé en imposant des conditions aux bords périodiques, en identifiant les points  $x = 0$  et  $x = L$  du système.

Imposer des conditions périodiques sur la fonction d'onde de Bethe (1.48), c'est-à-dire

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

mène aux équations de Bethe suivantes :

$$e^{i\theta_a L} \prod_{b \neq a} e^{i\Phi(\theta_a - \theta_b)} = (-1)^{N-1}, \quad a = 1, \dots, N, \quad (1.65)$$

où  $\Phi(\theta_a - \theta_b)$  désigne la phase de diffusion à deux corps, définie à l'équation (??).

En prenant le logarithme de chaque côté, on obtient un système de  $N$  équations couplées non linéaires :

$$L\theta_a + \sum_{b=1}^N \Phi(\theta_a - \theta_b) = 2\pi I_a, \quad (1.66)$$

où les nombres fermionique  $I_a = a - (N+1)/2$  et  $a \in \llbracket 1, N \rrbracket$  (ref ??).

### 1.2.2 Thermodynamique du gaz de Lieb-Liniger à température nulle

Dans la limite thermodynamique, le nombre de particules  $N$  et le volume (la longueur de la boîte)  $L$  tendent vers l'infini de sorte que leur rapport  $D = \frac{N}{L}$  reste fini :

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

Considérons le système à température nulle. Rappelons que l'état d'énergie minimale dans le secteur avec un nombre fixe de particules correspond aux solutions  $j$  des équations de Bethe ((1.66)) suivantes :

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

Dans la limite thermodynamique, les valeurs de  $\theta_a$  se condensent ( $\theta_{a+1} - \theta_a = \mathcal{O}(1/L)$ ), et remplissent l'intervalle symétrique, la mer de Dirac/sphère de Fermi  $\llbracket -K, K \rrbracket$  où  $K = \theta_N$  (ici  $I_a \geq I_b \Rightarrow \theta_a \geq \theta_b$ )

La quantité  $\rho_s$  tel que (manque une intro avant )

$$2\pi\rho_s(\theta_a) = \frac{2\pi}{L} \lim_{\text{therm}} \frac{|I_{a+1} - I_a|}{|\theta_{a+1} - \theta_a|} = \frac{2\pi}{L} \frac{\partial I}{\partial \theta}(\theta_a) = 1 + \frac{1}{L} \sum_{b=1}^N \Delta(\theta_a - \theta_b)$$

représente la densité de vacances que l'on appellera densité d'état avec  $I(\theta_a) = I_a$  et  $\Delta(\theta) = \Phi'(\theta) = \frac{2c}{c^2 + \theta^2}$

Maintenant intéressons-nous à la densité de particules dans l'espace des moments  $\rho(\theta)$ , définie de la manière suivante :

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

À l'état fondamental tous les vacances dans  $\llbracket -K, +K \rrbracket$  sont occupés donc

$$\rho = \rho_s.$$

La quantité  $L\rho(\theta)d\theta$  est le nombre de rapidité dans la cellule  $[\theta, \theta + d\theta]$ . La quantité  $L \int_{-K}^{+K} \rho(\theta) d\theta$  est le nombre de particule  $N$ . On remplace la somme par une intégrale :

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

Donc

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

ce qui conduit à l'équation linéaire pour  $\rho$  :

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

**1.2.3 Excitations élémentaires à température nulle**

## Chapitre 2

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

### Contents

---

<b>2.1</b>	<b>Dynamique hors équilibre et notions d'équilibre</b>	<b>15</b>
2.1.1	Limit Thermodynamique	15
2.1.2	Notion d'état d'équilibre généralisé (GGE)	16
2.1.3	Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales	17
<b>2.2</b>	<b>Thermodynamique de Bethe et relaxation</b>	<b>20</b>
2.2.1	Statistique des macro-états : entropie de Yang-Yang et moyennes dans le GGE	20
2.2.2	Équations intégrales de la TBA	22

---

### 2.1 Dynamique hors équilibre et notions d'équilibre

#### 2.1.1 Limit Thermodynamique

**Limite**

$$2\pi\rho_s = 1 + \Delta * \rho$$

#### The dressing

Dans les manipulations thermodynamiques, il s'avère que l'opération suivante est omniprésente : à une fonction  $f(\theta)$ , on associe sa contrepartie « habillée »  $f^{dr}(\theta)$ , définie par l'équation intégrale :

$$f^{dr}(\theta) = f(\theta) + \int \frac{1}{2\pi} \Delta(\theta - \theta') \nu(\theta') f^{dr}(\theta') d\theta' \quad (2.1)$$

$$= f(\theta) + \left\{ \frac{\Delta}{2\pi} * (\nu * f^{dr}) \right\}(\theta) \quad (2.2)$$

où  $\Delta(\theta - \theta')/2\pi$  est un noyau de convolution spécifique qui dépend du problème considéré. Cette équation permet de capturer les effets de l'interaction entre les particules et de rendre compte des corrections « habillées » à la fonction initiale  $f(\theta)$ . En résolvant cette équation, on obtient la fonction habillée  $f^{dr}(\theta)$  associée à la fonction donnée  $f(\theta)$ . Cette opération est couramment utilisée

RELAXATION ET ÉQUILIBRE DANS LES SYSTÈMES QUANTIQUES INTÉGRABLES : UNE  
dans les calculs thermodynamiques pour prendre en compte les interactions et les corrections aux  
propriétés des systèmes physiques.

Bien que cela ne soit pas explicite dans la notation,  $f^{\text{dr}}(\theta)$  est toujours fonctionnelle de la distribution de rapidité, à travers sa dépendance vis-à-vis du rapport d'occupation de Fermi. Par exemple, avec cette définition, l'équation constitutive (??) est reformulée comme suit :

$$2\pi\rho_s(\theta) = 1^{\text{dr}}(\theta) \quad (2.3)$$

où  $1(\theta) = 1$  est la fonction constante.

### 2.1.2 Notion d'état d'équilibre généralisé (GGE)

**Configuration des états à N particules.** On introduit la configuration  $\theta_{a \in [1, N]}$  des rapidités pour un nombre fixe  $N$  de particules, et les états propres associés.

**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 énergie (??). Ces observables sont diagonales dans la base des états propres :

$$\hat{\mathcal{N}} = \sum_{\{\theta_a\}} \left( \sum_{a=1}^N 1 \right) |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}|, \quad (2.4)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_N = \sum_{\{\theta_a\}} \left( \sum_{a=1}^N \varepsilon(\theta_a) \right) |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}|, \quad (2.5)$$

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

**Définition générale d'observables conservées.** On introduit une famille d'observables  $\hat{\mathcal{O}}_i$  telles que les états  $|\theta_a\rangle$  soient aussi fonctions propres de chacune de ces observables, avec pour valeurs propres  $\langle \hat{\mathcal{O}}_i \rangle_{\{\theta_a\}} = \langle \{\theta_a\} | \hat{\mathcal{O}}_i | \{\theta_a\} \rangle$  :

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

**Principe de maximisation de l'entropie.** On cherche à maximiser l'entropie de Shannon/von Neuman de l'état statistique :

$$\mathcal{S} = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}), \quad (2.7)$$

sous la contrainte que les moyennes des observables soient fixées :

$$\langle \hat{\mathcal{O}}_i \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\mathcal{O}}_i), \quad (2.8)$$

où  $\langle \hat{\mathcal{O}}_i \rangle$  est la moyenne de l'observable  $\hat{\mathcal{O}}_i$ .

**Définition de la matrice densité et de la fonction de partition.** Pour résoudre ce problème, on introduit les multiplicateurs de Lagrange  $\beta_i$  pour chaque contrainte. Cela conduit à une matrice densité de la forme :

$$\hat{\rho} = Z^{-1} \exp \left( - \sum_i \beta_i \hat{\mathcal{O}}_i \right), \quad (2.9)$$

avec la fonction de partition

$$Z = \text{Tr} \left[ \exp \left( - \sum_i \beta_i \hat{\mathcal{O}}_i \right) \right]. \quad (2.10)$$

**Interprétation physique 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  $\langle \hat{\mathcal{O}}_i \rangle$ .

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

$$\mathbb{P}(\{\theta_a\}) = \text{Tr}[\hat{\rho}|\{\theta_a\}\rangle\langle\{\theta_a\}|] = \langle\{\theta_a\}|\hat{\rho}|\{\theta_a\}\rangle = Z^{-1} \exp\left(-\sum_i \beta_i \langle\hat{\mathcal{O}}_i\rangle_{\{\theta_a\}}\right). \quad (2.11)$$

**Moyenne d'un observable et dérivées de  $Z$ .** 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 :

$$\langle\hat{\mathcal{O}}_i\rangle = \sum_{\{\theta_a\}} \langle\hat{\mathcal{O}}_i\rangle_{\{\theta_a\}} \mathbb{P}(\{\theta_a\}) = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_j \neq i} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_j \neq i} \quad (2.12)$$

Par le même raisonnement la moyenne de  $\hat{\mathcal{O}}_i^n$  s'écrit :

$$\langle\hat{\mathcal{O}}_i^n\rangle = \sum_{\{\theta_a\}} \langle\hat{\mathcal{O}}_i\rangle_{\{\theta_a\}}^n \mathbb{P}(\{\theta_a\}) = (-1)^n \frac{1}{Z} \frac{\partial^n Z}{(\partial \beta_i)^n} \Big|_{\beta_j \neq i}. \quad (2.13)$$

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

$$\Delta_{\hat{\mathcal{O}}_i}^2 = \left\langle \left( \hat{\mathcal{O}}_i - \langle\hat{\mathcal{O}}_i\rangle \right)^2 \right\rangle = \langle\hat{\mathcal{O}}_i^2\rangle - \langle\hat{\mathcal{O}}_i\rangle^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta_i^2} \Big|_{\beta_j \neq i} - \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_j \neq i} \right)^2 \quad (2.14)$$

$$= \frac{\partial}{\partial \beta_i} \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_j \neq i} \right) = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta_i^2} \Big|_{\beta_j \neq i} = -\frac{\partial \langle\hat{\mathcal{O}}_i\rangle}{\partial \beta_i} \Big|_{\beta_j \neq i}. \quad (2.15)$$

**Cas particulier de l'équilibre thermique.** – Si  $\hat{\mathcal{O}}_i = \hat{\mathcal{N}}$  alors  $\beta_i = -\beta\mu$  et si  $\hat{\mathcal{O}}_i = \hat{\mathcal{H}}_N - \mu\hat{\mathcal{N}}$  alors  $\beta_i = \beta = T^{-1}$ . Avec  $\mu$  le potentiel chimique et  $T$  la température pour un équilibre thermique–.

Dans le cas d'un équilibre thermique, on identifie certains multiplicateurs à des grandeurs thermodynamiques classiques comme l'inverse de la température et le potentiel chimique :

$$\langle\hat{\mathcal{N}}\rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} \Big|_{T,\dots}, \quad \Delta_{\hat{\mathcal{N}}}^2 = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \mu^2} \Big|_{T,\dots} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle\hat{\mathcal{N}}\rangle}{\partial \mu} \Big|_{T,\dots} \quad (2.16)$$

$$\langle\hat{\mathcal{H}}_N - \mu\hat{\mathcal{N}}\rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \Big|_{\mu,\dots}, \quad \Delta_{\hat{\mathcal{H}}_N - \mu\hat{\mathcal{N}}}^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \Big|_{\mu,\dots} = -\frac{\partial \langle\hat{\mathcal{H}}_N - \mu\hat{\mathcal{N}}\rangle}{\partial \beta} \Big|_{\mu,\dots} \quad (2.17)$$

Soit pour l'énergie,

$$\langle\hat{\mathcal{H}}_N\rangle = \left[ \frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \Big|_{T,\dots} - \frac{\partial}{\partial \beta} \Big|_{\mu} \right] \ln Z, \quad \Delta_{\hat{\mathcal{H}}_N}^2 = \left[ \frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \Big|_{T,\dots} - \frac{\partial}{\partial \beta} \Big|_{\mu,\dots} \right]^2 \ln Z \quad (2.18)$$

### 2.1.3 Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales

Dans les systèmes intégrables, l'état stationnaire atteint après une évolution hors d'équilibre n'est généralement pas décrit par un état de Gibbs classique, mais par un ensemble généralisé de Gibbs (GGE). Celui-ci est construit à partir de toutes les charges conservées du système

RELAXATION ET ÉQUILIBRE DANS LES SYSTÈMES QUANTIQUES INTÉGRABLES : UNE  
 APPROCHE PAR LA THERMODYNAMIQUE DE BETHE

**18** **Écriture des observables thermodynamiques comme sommes sur les rapidités.** Pour des systèmes à  $N$  particules caractérisées par des rapidités  $\{\theta_a\}_{a=1}^N$ , les charges locales classiques — comme le nombre de particules ou l'énergie — s'expriment comme des sommes de puissances des rapidités :

$$\langle \hat{N} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^0 \quad \text{et} \quad \langle \hat{\mathcal{H}}_N \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^2.$$

Par analogie, la combinaison pondérée des valeurs moyennes d'un ensemble d'observables  $\hat{\mathcal{O}}_{ii} \in \mathbb{N}$ , associée aux multiplicateurs de Lagrange  $\beta_i$ , peut être réécrite sous la forme :

$$\sum_{i=1}^{\infty} \beta_i \langle \hat{\mathcal{O}}_i \rangle_{\{\theta_a\}} = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i \sum_{a=1}^N \theta_a^i \quad (2.19)$$

où les coefficients  $\alpha_i$  résultent d'une recombinaison des  $\beta_i$ .

**Interprétation fonctionnelle et échange des sommes.** Pour chaque  $a \in \llbracket 1, N \rrbracket$ , la série  $\sum_i \alpha_i \theta_a^i$  converge pour des  $\theta_a$  dans un domaine convenable, ce qui autorise l'échange de l'ordre des deux sommes :

$$\sum_{i=1}^{\infty} \beta_i \langle \hat{\mathcal{O}}_i \rangle_{\{\theta_a\}} = \sum_{a=1}^N w(\theta_a) \quad (2.20)$$

avec

$$w(\theta) = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i \theta^i. \quad (2.21)$$

La fonction  $w(\theta)$  agit comme une fonction génératrice de poids associée aux charges conservées du système.

**Expression de la matrice densité généralisée.** La matrice densité peut alors être formulée sous la forme :

$$\hat{\rho}[w] = \frac{e^{-\hat{\mathcal{Q}}[w]}}{Z[w]}, \quad (2.22)$$

$$e^{-\hat{\mathcal{Q}}[w]} = \sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)} |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}| \quad (2.23)$$

où l'opérateur de charge associé à  $w$  s'écrit :

$$\hat{\mathcal{Q}}[w] = \sum_{\{\theta_a\}} \left( \sum_{a=1}^N w(\theta_a) \right) |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}|, \quad (2.24)$$

et la fonction de partition  $Z[w]$  est donnée par :

$$Z[w] = \sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}. \quad (2.25)$$

**Probabilité associée à une configuration de rapidités.** La probabilité d'occuper un état à  $N$  particules caractérisé par les rapidités  $\theta_a$  est alors :

$$\mathbb{P}_{\{\theta_a\}} = \text{Tr} [\hat{\rho}[w] |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}|] = \langle \{\theta_a\} | \hat{\rho}[w] | \{\theta_a\} \rangle = Z[w]^{-1} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}. \quad (2.26)$$

Cela montre que le poids statistique d'une configuration factorise naturellement sur les pseudo-moments, avec un poids local  $w(\theta)$  attribué à chaque particule.

**Moyennes d'observables dans le GGE.** La valeur moyenne d'un observable  $\hat{\mathcal{O}}$  dans l'ensemble généralisé s'écrit :

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{GGE} \doteq \text{Tr}(\hat{\mathcal{O}} \hat{\rho}[w]) = \frac{\text{Tr}(\hat{\mathcal{O}} e^{-\hat{\mathcal{Q}}[w]})}{\text{Tr}(e^{-\hat{\mathcal{Q}}[w]})} = \frac{\sum_{\{\theta_a\}} \langle \{\theta_a\} | \hat{\mathcal{O}} | \{\theta_a\} \rangle e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}}{\sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^N w(\theta_a)}} \quad (2.27)$$

Cette expression formelle montre que la connaissance de  $w(\theta)$  suffit à déterminer les propriétés statistiques de toutes les observables diagonales dans cette base, incluant les charges conservées elles-mêmes.

**Interpretation.** Dans les systèmes intégrables, l'abondance de quantités conservées impose des contraintes fortes sur la dynamique et les états d'équilibre atteints à long temps. Contrairement aux systèmes non intégrables, dont l'état d'équilibre est entièrement caractérisé par les quelques charges globales (comme l'énergie ou le nombre de particules), les systèmes intégrables nécessitent la prise en compte d'une **famille infinie de charges conservées**, notées  $(\hat{\mathcal{O}}_i)_{i \in \mathbb{N}}$ , afin de décrire correctement leur relaxation vers un état stationnaire.

On distingue principalement deux types de charges conservées :

- Les **charges locales extensives**, dont la densité est strictement localisée dans l'espace (ou sur le réseau) et dont l'intégrale donne une quantité extensive ;
- Les **charges quasi-locales**, dont la densité n'est pas strictement locale mais reste suffisamment bien localisée pour que l'intégrale sur l'espace soit bien définie et extensive. Ces charges sont typiquement associées à des opérateurs dont le support s'étale sur une longueur finie, mais non nulle, et dont la décroissance spatiale rapide (souvent exponentielle) garantit une bonne intégrabilité.

D'un point de vue formel, les charges quasi-locales peuvent être vues comme des fonctionnelles analytiques  $\hat{\mathcal{Q}}[w]$ , définies par une densité dépendant d'une fonction test  $w(\theta)$ , à travers l'expression :

$$\hat{\mathcal{Q}}[w] = \sum_{\{\theta_a\}} \left( \sum_{a=1}^N w(\theta_a) \right) |\{\theta_a\}\rangle \langle \{\theta_a\}|.$$

L'introduction de ces charges quasi-locales dans la construction de la matrice densité d'équilibre permet de décrire plus finement les propriétés thermodynamiques et dynamiques des états stationnaires, notamment après des quenches quantiques. C'est ce qui motive leur inclusion dans la formulation du **GGE (Generalized Gibbs Ensemble)**, au-delà des seules charges strictement locales.

**Rôle dans le formalisme GGE.** Dans un état d'équilibre généralisé (GGE), on maximise l'entropie sous contrainte de toutes les charges conservées. La forme générale de la matrice densité est :

$$\hat{\rho}_{GGE} \propto \exp \left( - \sum_i \beta_i \hat{\mathcal{O}}_i \right)$$

Si l'on se limite aux charges locales, cela peut suffire pour certains systèmes. Mais **dans les systèmes intégrables, cela n'est pas toujours suffisant** pour capturer l'état stationnaire post-quench. Il faut alors inclure les **charges quasi-locales**, qui jouent un rôle crucial dans la relaxation vers le GGE.

**D'un point de vue mathématique.** Les charges quasi-locales peuvent être représentées par des fonctions analytiques bien choisies  $w(\theta)$ , comme dans ta section. La convergence de la série :

$$w(\theta) = \sum_i \alpha_i \theta^i$$

correspond à une densité de charge extensible mais non strictement locale. Cela permet de construire une famille de matrices densité  $\hat{\rho}[w]$  qui incorporent correctement l'effet des charges quasi-locales.

RELAXATION ET ÉQUILIBRE DANS LES SYSTÈMES QUANTIQUES INTÉGRABLES : UNE  
 20 APPROCHE PAR LA THERMODYNAMIQUE DE BETHE

## 2.2 Thermodynamique de Bethe et relaxation

### 2.2.1 Statistique des macro-états : entropie de Yang-Yang et moyennes dans le GGE

**I. Macro-états et entropie dans la TBA.** Dans la sous-section précédente, nous avons vu que, dans la limite thermodynamique, les observables physiques deviennent des fonctionnelles de la distribution de rapidité  $\rho(\theta)$ . Cette description est efficace car elle permet d'échapper au détail de chaque état propre. Toutefois, cette simplification laisse en suspens une question cruciale : **quelle est la distribution de rapidité d'un système à l'équilibre thermique à température finie ?** Pour répondre à cette question, nous devons comprendre la **structure statistique des états propres** associés à une 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  $\theta_a$  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  $\rho(\theta)$  ?**

**Dénombrement local des configurations microcanoniques.** Pour répondre à cette question, on subdivise l'axe des rapidités en petites tranches ou cellules de largeur  $\delta\theta$ , chacune centrée en un point  $\theta_a$ . 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 (??)).

Sous l'hypothèse que 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 :

$$\#\text{conf.}(\theta_a) \approx \binom{M_a}{N_a} = \frac{[L\rho_s(\theta)\delta\theta]!}{[L\rho(\theta)\delta\theta]![L\rho_s(\theta) - L\rho(\theta)]!}. \quad (2.28)$$

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

$$n! \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}, \quad (2.29)$$

composé du fonction logarithmique, il vient cette équivalence :

$$\ln n! \underset{n \rightarrow \infty}{\rightarrow} n \ln n - \underbrace{n + \ln \sqrt{2\pi n}}_{o(n \ln n)}, \quad (2.30)$$

$$\underset{n \rightarrow \infty}{\sim} n \ln n \quad (2.31)$$

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

$$\ln \#\text{conf.}(\theta) \underset{\substack{\rho \delta \theta \rightarrow \infty \\ \rho(\theta) \leq \rho_s(\theta)}}{\sim} L[\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta) \delta\theta. \quad (2.32)$$

Cette expression donne la contribution à l'**entropie locale** (par unité de  $\theta$ ) associée à la cellule autour de  $\theta_a$ .

**Entropie de Yang-Yang : définition .** Le nombre total de micro-états compatibles avec une distribution macroscopique  $\rho(\theta)$  est donné par le produit des nombres de configurations pour chaque cellule de rapidité  $[\theta, \theta + \delta\theta]$ .

En prenant le logarithme et en remplaçant la somme par une intégrale, on obtient l'entropie totale de Yang-Yang. Pour alléger la notation, cette somme sur les tranches est notée :

$$\sum_a^{\theta-\text{tranches}} \quad (2.33)$$

où chaque  $a$  indexe une cellule de rapidité  $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta]$ . On obtient :

$$\ln \#\text{micro-états.} = \sum_a^{\theta-\text{tranches}} \ln \#\text{conf.}(\theta_a), \quad (2.34)$$

$$\approx L \mathcal{S}_{YY}[\rho], \quad (2.35)$$

avec

$$\mathcal{S}_{YY}[\rho] \doteq \sum_a^{\theta-\text{tranches}} [\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta_a) \delta\theta. \quad (2.36)$$

**Énergie généralisée.** Les variations de  $w(\theta)$  étant négligeables sur chaque tranche de largeur  $\delta\theta$ , on peut approximer l'énergie généralisée comme :

$$\mathcal{W} = \sum_{a=1}^N w(\theta_a) \sim L \mathcal{W}[\rho] = L \sum_a^{\theta-\text{tranches}} w(\theta_a) \rho(\theta_a) \delta\theta. \quad (2.37)$$

**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 seulement de la distribution de rapidité. On écrit donc :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \{\theta_a\} | \hat{\mathcal{O}} | \{\theta_a\} \rangle = \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]}, \quad (2.38)$$

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 devient :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{GGE} = \frac{\sum_{\rho} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]} \# \text{micro-états.} e^{-L\mathcal{W}[\rho]}}{\sum_{\rho} \# \text{micro-états.} e^{-L\mathcal{W}[\rho]}} \approx \frac{\sum_{\rho} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]} e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}{\sum_{\rho} e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}, \quad (2.39)$$

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 :

$$\sum_a^{\theta-\text{tranches}} \delta\theta \xrightarrow{\delta\theta \rightarrow 0} \int d\theta, \quad (2.40)$$

et l'entropie de Yang-Yang ainsi que l'énergie généralisée prennent la forme :

$$\mathcal{S}_{YY}[\rho] = \int d\theta [\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta), \quad (2.41)$$

$$\mathcal{W}[\rho] = \int w(\theta) \rho(\theta) d\theta \quad (2.42)$$

**Formule fonctionnelle pour les moyennes.** Finalement, la moyenne d'une observable dans le GGE s'écrit comme une intégrale fonctionnelle/ de chemin :

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\rho e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])} \mathcal{O}[\rho]}{\int \mathcal{D}\rho e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}, \quad (2.43)$$

où  $\mathcal{O}[\rho]$  est la valeur de l'observable dans un état propre caractérisé par la distribution  $\rho$ .

## 2.2.2 Équations intégrales de la TBA

**Moyenne des observables dans l'ensemble généralisé de Gibbs.**

**Approximation au point selle.** Dans la limite thermodynamique  $L \rightarrow \infty$ , cette intégrale est dominée par la configuration  $\langle \rho \rangle$  qui maximise le poids exponentiel. Il s'agit de la densité de rapidité la plus probable, solution d'un problème de maximisation :

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle \approx \mathcal{O}[\langle \rho \rangle]. \quad (2.44)$$

Cette approximation correspond à une méthode de *selle statique*, où l'on développe l'action effective au voisinage de la distribution dominante.

**Développement fonctionnel au premier ordre.** On effectue un développement de Taylor fonctionnel de l'action à l'ordre linéaire :

$$\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho] \approx \mathcal{S}_{YY}[\langle \rho \rangle] - \mathcal{W}[\langle \rho \rangle] + \left. \frac{\delta(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}{\delta \rho} \right|_{\rho=\langle \rho \rangle} (\delta \rho),$$

La condition de stationnarité au point selle impose :

$$\delta(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}) = 0$$

soit

$$\left. \frac{\delta \mathcal{S}_{YY}}{\delta \rho} \right|_{\rho=\langle \rho \rangle} = \left. \frac{\delta \mathcal{W}}{\delta \rho} \right|_{\rho=\langle \rho \rangle}. \quad (2.45)$$

**Équation intégrale de la TBA.** Cette égalité donne naissance à une équation intégrale pour le poids effectif  $w$ , défini comme la dérivée fonctionnelle de l'énergie généralisée :

$$w = \frac{\delta\mathcal{W}[\rho]}{\delta\rho} \Big|_{\rho=\langle\rho\rangle} = \frac{\delta\mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta\rho} \Big|_{\rho=\langle\rho\rangle} = \ln(\langle\nu\rangle^{-1} - 1) - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 - \langle\nu\rangle)$$

où  $\star$  désigne la *convolution* sur l'espace des rapidités. La densité de rapidité moyenne et la fonction d'occupation vérifient :

$$\langle\rho\rangle = \langle\nu\rangle \cdot \langle\rho_s\rangle \quad (2.46)$$

et

$$\langle\nu\rangle = \frac{1}{1 + e^{\beta\epsilon(\theta)}} \quad (2.47)$$

Cette dernière équation relie la fonction d'occupation  $\langle\nu\rangle$  à une pseudo-énergie  $\epsilon(\theta)$ , caractéristique de la théorie thermodynamique de Bethe (TBA).



## Chapitre 3

# Dynamique hors-équilibre et hydrodynamique généralisée

### Contents

---

<b>3.1</b>	<b>Hydrodynamique et régimes asymptotiques</b>	<b>25</b>
3.1.1	Hydrodynamique classique des systèmes chaotiques	25
3.1.2	Hydrodynamique des systèmes intégrables et distribution de rapidité	25
3.1.3	Équation d'hydrodynamique généralisée (GHD)	25

---

### 3.1 Hydrodynamique et régimes asymptotiques

#### 3.1.1 Hydrodynamique classique des systèmes chaotiques

#### 3.1.2 Hydrodynamique des systèmes intégrables et distribution de rapidité

#### 3.1.3 Équation d'hydrodynamique généralisée (GHD)



## Chapitre 4

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

### Contents

---

4.1	Développement autour du point selle . . . . .	28
4.2	Définition de la fonction de corrélation . . . . .	28
4.3	Fluctuations autour de la distribution moyenne et rôle de la Hessienne	29
4.4	Fluctuations autour de la distribution moyenne . . . . .	30
4.5	Fonction correlation du nombre d'atomes et de l'énergie . . . . .	31

---

### Introduction

Considérons un système homogène de taille  $L$ . Faisons l'hypothèse qu'après relaxation, le système est décrite par un ensemble généralisé de Gibbs (GGE). On a vus dans le chapire d'avant que la valeur moyenne des observables  $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle$  dans un ensemble statistique s'écrit comme une intégrale formelle

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\rho e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])} \mathcal{O}[\rho]}{\int \mathcal{D}\rho e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}, \quad (4.1)$$

avec  $\mathcal{O}[\rho]$  la valeur de l'observable dans un état propre caractérisé par la distribution de rapidité  $\rho$ ,  $\mathcal{S}_{YY}$  l'entropie de Yang-Yang et  $\mathcal{W}$  l'énergie généralisé. Cette moyenne fonctionnelle 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  $\langle \rho \rangle$  qui maximise le poids exponentiel, c'est-à-dire la distribution de rapidité la plus probable. Ainsi, la moyenne de l'observable s'écrit à première approximation :

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle \approx \mathcal{O}[\langle \rho \rangle] \quad (4.2)$$

L'hypothèse selon laquelle, après relaxation, le système est décrit par un ensemble généralisé de Gibbs (GGE) constitue un fondement majeur de notre compréhension des dynamiques hors équilibre dans les systèmes intégrables. Cette hypothèse a des implications théoriques profondes et mérite d'être testée expérimentalement. Toutefois, la seule connaissance de la distribution de rapidité moyenne  $\langle \rho \rangle$  ne permet pas de confirmer l'adéquation du GGE. En effet, plusieurs ensembles statistiques peuvent mener à une même valeur moyenne de  $\rho$ . Pour lever cette ambiguïté, il est nécessaire d'étudier les fluctuations autour de la distribution typique, notées  $\delta\rho$ , définies par

$$\rho = \langle \rho \rangle + \delta\rho.$$

alors voila pourquoi on est motivé pour pousser les calcule à l'ordre 2

## 4.1 Développement autour du point selle

Cette configuration vérifie donc l'**équation de point selle** :

$$\frac{\delta \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho} \Big|_{\rho=\langle \rho \rangle} = \frac{\delta \mathcal{W}[\rho]}{\delta \rho} \Big|_{\rho=\langle \rho \rangle}.$$

On développe de Taylor-Young à l'ordre quadratique :

$$\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho] \approx \mathcal{S}_{YY}[\langle \rho \rangle] - \mathcal{W}[\langle \rho \rangle] + \frac{1}{2} \frac{\delta^2(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}{(\delta \rho)^2} \Big|_{\rho=\langle \rho \rangle} (\delta \rho)^2,$$

avec  $-\frac{\delta^2(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}{(\delta \rho)^2} \Big|_{\rho=\langle \rho \rangle}$  désigne la forme bilinéaire symétrique définie positive.  
Cette approximation fait de l'intégrale une **intégrale gaussienne**.

## 4.2 Définition de la fonction de corrélation

Soient deux observables macroscopiques  $\hat{\mathcal{A}}$  et  $\hat{\mathcal{B}}$ . On s'intéresse à leur corrélation connectée (ou fonction de corrélation à deux points), définie par :

$$C_{\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}} = \langle (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle)(\hat{\mathcal{B}} - \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle) \rangle = \langle \hat{\mathcal{A}} \cdot \hat{\mathcal{B}} \rangle - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle. \quad (4.3)$$

Considérons à présent le développement à l'ordre linéaire de la valeur propre d'une observable fonctionnelle  $\hat{\mathcal{A}}$  autour de la densité moyenne  $\langle \rho \rangle$  :

$$\mathcal{A}[\rho] = \int d\theta \mathbf{a}(\theta) \rho(\theta),$$

où  $\mathbf{a}(\theta)$  désigne la densité spectrale associée à l'observable  $\mathcal{A}$ .

Une variation linéaire de  $\rho$  induit alors une fluctuation de l'observable donnée par :

$$\mathcal{A}[\rho] - \mathcal{A}[\langle \rho \rangle] \approx \frac{\delta \mathcal{A}}{\delta \rho} \Big|_{\rho=\langle \rho \rangle} \delta \rho = \delta \mathcal{A}[\rho] = \int d\theta \mathbf{a}(\theta) \delta \rho(\theta),$$

En s'appuyant sur les équations (4.1), (4.2) et (4.3), et en remarquant que l'intégrale fonctionnelle est dominée par la contribution gaussienne autour du point selle, on obtient que la corrélation (4.3) est donnée par la formule des **fluctuations gaussiennes** :

$$C_{\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}} = \iint d\theta d\theta' \mathbf{a}(\theta) \mathbf{b}(\theta') \langle \delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta') \rangle. \quad (4.4)$$

Sous l'approximation gaussienne autour du point col, la covariance des fluctuations est donnée par :

$$\begin{aligned} \langle \delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta') \rangle &= \frac{\int \mathcal{D} \delta \rho \delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta') \exp \left[ \frac{L}{2} \iint \delta \rho(\theta_1) \frac{\delta^2(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}{\delta \rho(\theta_1) \delta \rho(\theta_2)} \Big|_{\rho=\langle \rho \rangle} \delta \rho(\theta_2) \right]}{\int \mathcal{D} \delta \rho \exp \left[ \frac{L}{2} \iint \delta \rho(\theta_1) \frac{\delta^2(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}{\delta \rho(\theta_1) \delta \rho(\theta_2)} \Big|_{\rho=\langle \rho \rangle} \delta \rho(\theta_2) \right]}, \\ &= -\frac{1}{L} \left( \frac{\delta^2(\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}{\delta \rho(\cdot) \delta \rho(\cdot)} \Big|_{\rho=\langle \rho \rangle} \right)^{-1}(\theta, \theta'), \end{aligned} \quad (4.5)$$

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.

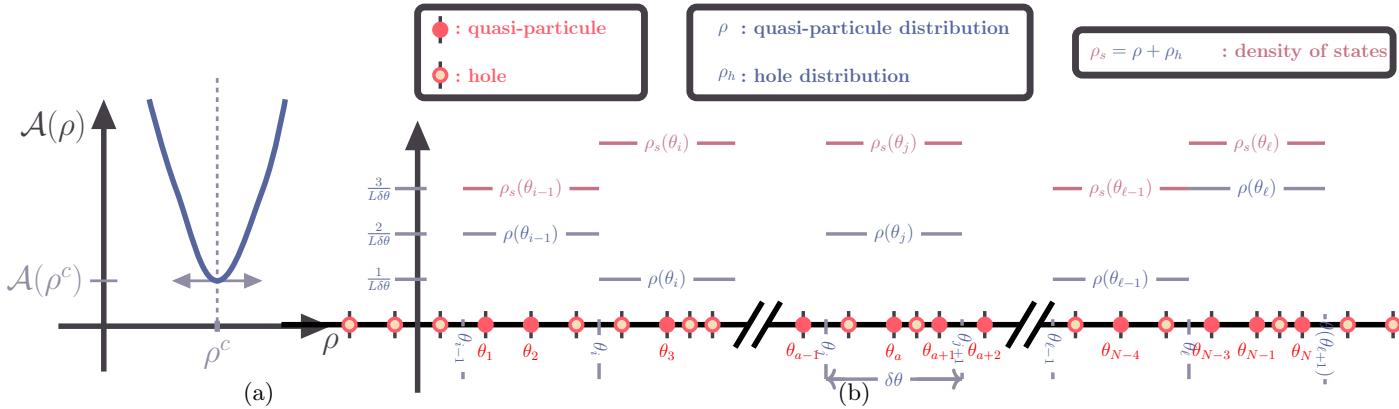


FIGURE 4.1

### 4.3 Fluctuations autour de la distribution moyenne et rôle de la Hessienne

On note  $\mathcal{H}(\theta, \theta')$  la Hessienne fonctionnelle de  $\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho]$

$$\mathcal{H}(\theta, \theta') = - \frac{\delta^2}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} (\mathcal{S}_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho]) \Big|_{\rho=\langle \rho \rangle}. \quad (4.6)$$

La fonction de corrélation à deux points des fluctuations  $\delta\rho$  est alors donnée par l'inverse de la Hessienne :

$$\langle \delta\rho(\theta) \delta\rho(\theta') \rangle = \frac{1}{L} \mathcal{H}^{-1}(\theta, \theta'), \quad (4.7)$$

où  $\mathcal{H}^{-1}$  est défini comme le noyau de l'opérateur inverse au sens fonctionnel :

$$(\mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{H})(\theta, \theta') = (\mathcal{H} \cdot \mathcal{H}^{-1})(\theta, \theta') = \int d\theta'' \mathcal{H}(\theta, \theta'') \mathcal{H}^{-1}(\theta'', \theta') = \delta(\theta - \theta') \quad (4.8)$$

où le dernier  $\delta$  désigne la fonction delta de Dirac, et non une différentielle.

Dans un premier temps calculons  $\mathcal{H}(\theta, \theta')$ . Puisque l'énergie généralisé s'écrit

$$\mathcal{W}[\rho] = \int w(\theta) \rho(\theta) d\theta, \quad (4.9)$$

alors sa différentielle seconde est nulle et la Hessienne se réécrit alors

$$\mathcal{H}(\theta, \theta') = - \frac{\delta^2 \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \Big|_{\rho=\langle \rho \rangle}, \quad (4.10)$$

alors en injectant l'entropie de Yang-Yang que je rappelle

$$\mathcal{S}_{YY}[\rho] = \int d\theta (\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)) (\theta) \quad (4.11)$$

la Hessienne se décompose alors

$$\mathcal{H}(\theta, \theta') = \mathcal{D}(\theta, \theta') + \mathcal{V}(\theta, \theta') \quad (4.12)$$

avec une partie diagonale irrégulière

$$\mathcal{D}(\theta, \theta') = \left( \frac{1}{\langle \rho_s(\theta) \rangle \langle \nu(\theta) \rangle (1 - \langle \nu(\theta) \rangle)} \right) \delta(\theta, \theta') \quad (4.13)$$

avec une partie symétrique régulière

$$\mathcal{V}(\theta, \theta') = - \left( \frac{1}{\langle \rho_s(\theta) \rangle (1 - \langle \nu(\theta) \rangle)} + \frac{1}{\langle \rho_s(\theta') \rangle (1 - \langle \nu(\theta') \rangle)} \right) \frac{\Delta(\theta - \theta')}{2\pi} \quad (4.14)$$

$$+ \int d\theta'' \frac{\langle \nu(\theta'') \rangle}{\langle \rho_s(\theta'') \rangle (1 - \langle \nu(\theta'') \rangle)} \frac{\Delta(\theta - \theta'')}{2\pi} \frac{\Delta(\theta'' - \theta')}{2\pi} \quad (4.15)$$

en notant  $\langle \rho \rangle = \langle \rho_s \rangle \langle \rho \rangle$ .

## 4.4 Fluctuations autour de la distribution moyenne

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

$$\mathcal{H}^{-1}(\theta, \theta') = \mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta') + \mathcal{B}(\theta, \theta') \quad (4.16)$$

avec une partie diagonale irrégulière

$$\mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta') = (\langle \rho_s(\theta) \rangle \langle \nu(\theta) \rangle (1 - \langle \nu(\theta) \rangle)) \delta(\theta, \theta') \quad (4.17)$$

tel que

$$(\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{D})(\theta, \theta') = (\mathcal{D} \cdot \mathcal{D}^{-1})(\theta, \theta') = \int d\theta'' \mathcal{D}(\theta, \theta'') \mathcal{D}^{-1}(\theta'', \theta') = \delta(\theta - \theta'), \quad (4.18)$$

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

Les équations (4.12), (4.16), (4.8) et (4.18), il vient que

$$\begin{cases} \mathcal{H} \cdot \mathcal{H}^{-1} = \delta \\ \mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{H} = \delta \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \mathcal{H} \cdot \mathcal{B} = -\mathcal{V} \cdot \mathcal{D}^{-1} \\ \mathcal{B} \cdot \mathcal{H} = -\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{V} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \mathcal{B} = -\mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{V} \cdot \mathcal{D}^{-1} \\ \mathcal{B} = -\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{V} \cdot \mathcal{H}^{-1} \end{cases} \quad (4.19)$$

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 (4.15) et (4.17)

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

où  $(f \star g)(x)$  désigne la convolution  $\int f(x-t) g(t) dt$ . En injectant cette dernière équation et 4.16, dans (4.7), il vient que une équation implicite :

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

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  $\rho(\theta)$ .

## 4.5 Fonction correlation du nombre d'atomes et de l'énergie

Il est maintenant pertinent de tester notre expression des fluctuations. On fait l'hypothèse que le système est en équilibre thermique caractérisé par la température  $T$  et le potentiel chimoque  $\mu$ .

La valeur propre  $\mathcal{N}[\rho]$  (resp  $\mathcal{E}[\rho]$ ) de opérateur nombre d'atomes  $\hat{\mathcal{N}}$  (resp énergie.  $\hat{\mathcal{E}}$ ) et assiciés aux configuration liés à la distribution de rapidité  $\rho$  s'écrit (avec comme combention la masse des atomes  $k_B = \hbar = m = 1$ )

$$\begin{aligned}\mathcal{N}[\rho] &= L \int d\theta \rho(\theta), \\ \mathcal{E}[\rho] &= \frac{L}{2} \int d\theta \theta^2 \rho(\theta).\end{aligned}$$

Les corrélations associées s'est

$$\begin{aligned}C_{\hat{\mathcal{N}}, \hat{\mathcal{N}}} &= L^2 \int d\theta_a \int d\theta_b \langle \delta\rho(\theta_a) \delta\rho(\theta_b) \rangle, \\ C_{\hat{\mathcal{E}}, \hat{\mathcal{E}}} &= \left( \frac{L}{2} \right)^2 \int d\theta_a \int d\theta_b \theta_a^2 \theta_b^2 \langle \delta\rho(\theta_a) \delta\rho(\theta_b) \rangle,\end{aligned}$$

Dans la section {??}, nous avons vu que la variance d'une observable  $\hat{\mathcal{O}}_i$ , autrement dit ses fluctuations, peut également s'exprimer comme une dérivée thermodynamique de sa moyenne :

$$C_{\hat{\mathcal{O}}_i, \hat{\mathcal{O}}_i} = \Delta_{\hat{\mathcal{O}}_i}^2 = - \left. \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{O}}_i \rangle}{\partial \beta_i} \right|_{\beta_j \neq i},$$

où  $\beta_i$  est la variable conjuguée à  $\langle \hat{\mathcal{O}}_i \rangle$ . En particulier, les fluctuations du nombre d'atomes et de l'énergie peuvent s'écrire :

$$\begin{aligned}\Delta_{\hat{\mathcal{N}}}^2 &= \frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{N}} \rangle}{\partial \mu} \right|_T, \\ \Delta_{\hat{\mathcal{E}}}^2 &= \Delta_{\hat{\mathcal{E}} - \mu \hat{\mathcal{N}}}^2 + \mu \Delta_{\hat{\mathcal{N}}}^2 = - \left. \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{E}} - \mu \hat{\mathcal{N}} \rangle}{\partial \beta} \right|_\mu - \left. \frac{\mu}{\beta} \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{N}} \rangle}{\partial \mu} \right|_T,\end{aligned}$$

avec  $\beta = T^{-1}$ .

Les quantités  $C_{\hat{\mathcal{N}}, \hat{\mathcal{N}}}$  et  $\Delta_{\hat{\mathcal{N}}}^2$  sont analytiquement équivalentes, de même que  $C_{\hat{\mathcal{E}}, \hat{\mathcal{E}}}$  et  $\Delta_{\hat{\mathcal{E}}}^2$ .

Nous souhaitons maintenant effectuer une comparaison numérique entre ces deux approches. Pour ce faire, nous avons d'abord résolu numériquement l'équation {??} avec  $f(\theta) = \beta\epsilon(\theta) - \beta\mu$ , ce qui nous a permis d'obtenir  $\rho(\theta)$  et  $\rho_s(\theta)$  (Il y aura plus de détaille dans le chapitre ??).

On fais les calcule des correlation pour  $\gamma = g/n$  fixé à ?? et  $t = 1/(\beta g^2)$  entre ?? et ?. Les points correspondants sont représentés en bleu sur un diagramme de phase du modèle de Lieb-Liniger (voir Fig. 4.2a).

Ce même diagramme contient également un point rouge correspondant à  $t = ??$ . Les fluctuations associées à ce point sont représentées en niveaux de couleur sur un graphique 2D (voir Fig. 4.2b)

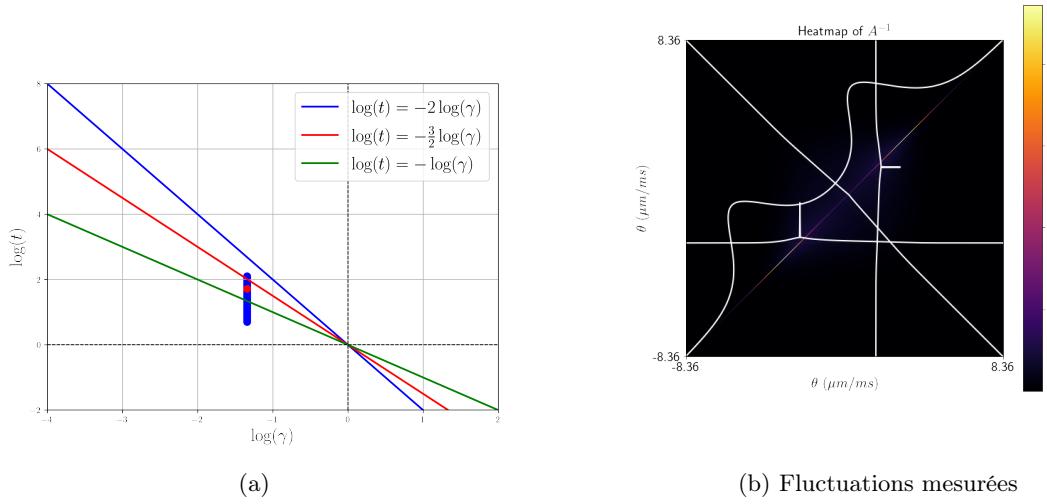


FIGURE 4.2 – (a) Diagramme de phase du modèle de Lieb-Liniger à l'équilibre thermique. Différents régimes asymptotiques sont séparés par des transitions progressives. Les points bleus représentent les fluctuations calculées numériquement pour différentes températures. Les coordonnées sont données par  $\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 n}$  et  $t = \frac{k_B T}{mg^2/\hbar^2}$ . (b) Représentation en niveaux de couleur des fluctuations  $\delta\rho$  pour  $T = 60$  nK et  $\mu = 27$  nK (point rouge dans (a)).

Les résultats obtenus à l'aide de cette méthode thermodynamique sont comparés à ceux issus du calcul direct des fluctuations de  $\rho$ . Ces comparaisons sont représentées sur la Fig. 4.3, et montrent une excellente concordance entre les deux approches.

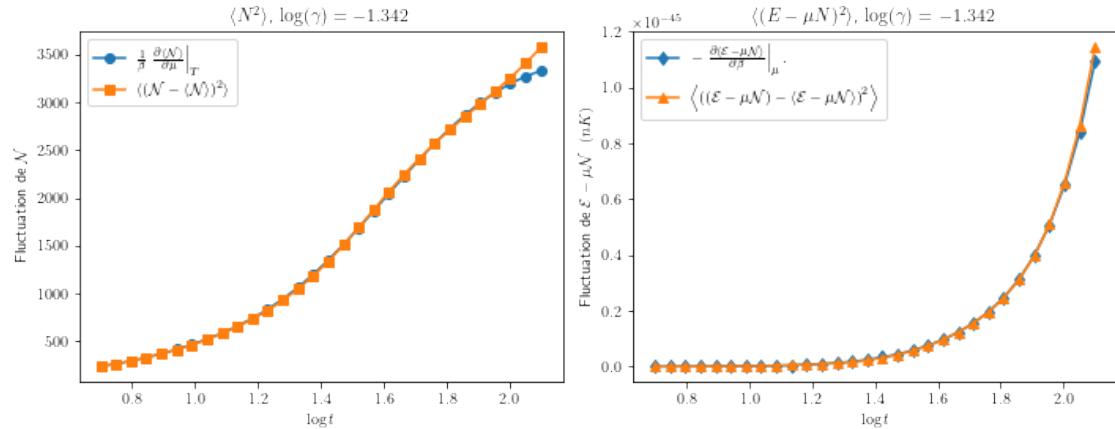


FIGURE 4.3 – Comparaison numérique entre les fluctuations calculées à partir de l'analyse quadratique de l'action (fluctuations de  $\rho$ ) et celles obtenues par dérivées thermodynamiques des observables moyennes.

# Chapitre 5

## Protocoles experimentale

### Contents

---

5.1	Présentation de l'expérience	33
5.1.1	Piégeage transverses et longitudinale	33
5.2	Outil de sélection spatial	33

---

### 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</b>	<b>Dispositif expérimental</b>	<b>37</b>
6.1.1	Préparation et Confinement du Gaz Ultra-Froid de $^{87}\text{Rb}$	37
6.1.2	Confinement Longitudinal et Stabilisation du Piège Quartique	37
6.1.3	Sélection Spatiale et Réalisation de la Coupure Bipartite	38
6.1.4	Dynamique Après Coupure	38
<b>6.2</b>	<b>Prédictions de la GHD</b>	<b>38</b>
<b>6.3</b>	<b>Données expérimentales</b>	<b>39</b>
<b>6.4</b>	<b>Sonder la distribution locale des rapidités</b>	<b>41</b>
<b>6.5</b>	<b>Détails sur les calculs</b>	<b>43</b>
6.5.1	Facteur d'occupation et distribution de rapidité à l'équilibre thermique	43
6.5.2	Dynamique du contour dans l'espace des phases $(x, \theta)$	44
6.5.3	Simulation de la déformation du bord	45
6.5.4	Simulation de l'expansion	46

---

### 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 —

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

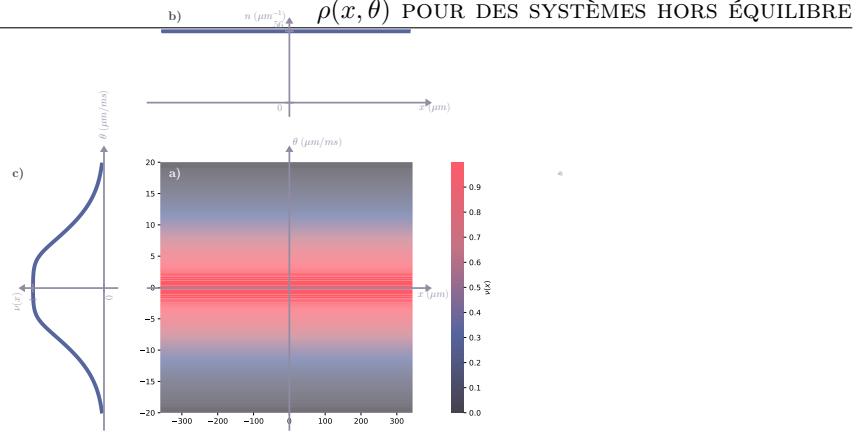


FIGURE 6.1 – a) Facteur d'occupation initial  $\nu(x, \theta) = \nu_0(\theta)$  correspondant à un état d'équilibre thermique à la température  $T = 560 \text{ nK}$ , pour une densité linéaire homogène  $n_0 = 56 \mu\text{m}^{-1}$ . Ces paramètres correspondent à une potentiel chimique  $\mu = 65 \text{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

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 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

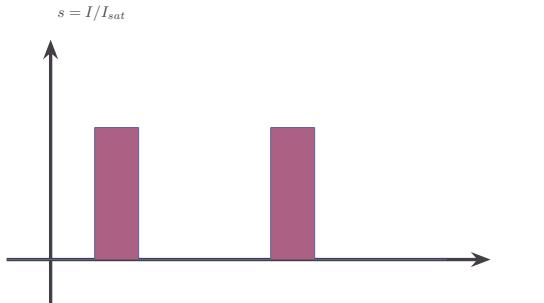


FIGURE 6.2 – Schéma à compléter, comprenant plusieurs parties : deux diagrammes temporels montrant l'intensité lumineuse du pulse DMD et de la sonde imageuse, l'intensité des courants de piégeage longitudinal et transverse, un schéma 3D du piège avec un schéma du nuage atomique, un diagramme du DMD similaire 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  $k_B T/(\hbar\omega_\perp) = 0,8$  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  $\gamma = mg/(\hbar^2 n_0)$  dans l'intervalle  $[0,4, 0,7] \times 10^{-2}$ , tandis que la température satisfait l'inégalité  $T \ll n_0^{3/2} \sqrt{\hbar^2 g/m}/k_B$ . 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

**ÉTUDE DU PROTOCAL DE BI-PARTITION : MESURE DE DISTRIBUTION DE RAPIDITÉS LOCALES**  
38  
solt 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 linéique obtenu dans ce potentiel quartique est représenté en gris sur la Fig.6.3(b). La densité linéique  $n_0$  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  $B_0 = 3,36$  G et des courants dans les fils de confinement :  $I_D = 1.400$  A,  $I_{D'} = 1.100$  A,  $I_d = 1.090$  A, et  $I_{d'} = 0.875$  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 15MHz 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  $t$ .

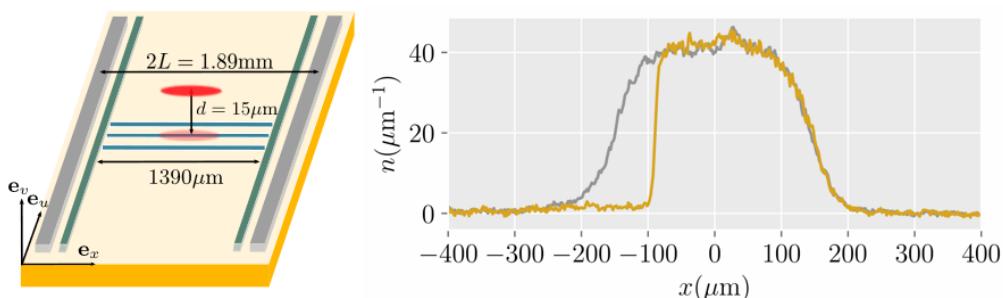


FIGURE 6.3 – (a) Schéma de la puce atomique. Les 3 fils bleus assurent le confinement transverse, les 4 autres fils (gris) génèrent le potentiel longitudinal. Le nuage atomique, représenté par une ellipse rouge, est piégé à 12  $\mu\text{m}$  au-dessus des fils. (b) Profils de densité linéique extraits 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 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 équivalement 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 :  $x \rightarrow x' = \alpha x$ ,  $t \rightarrow t' = at$ . 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 :

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

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

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 [?, ?]

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

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.

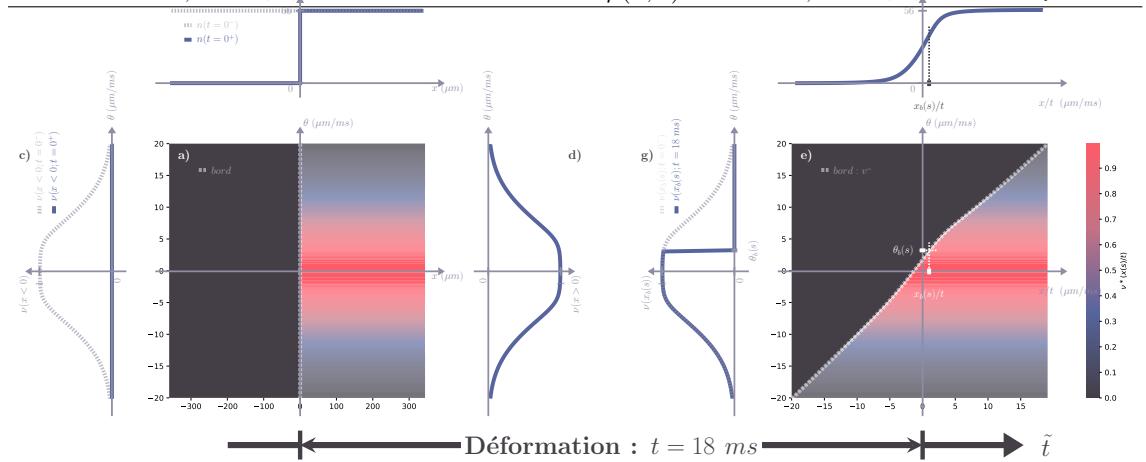


FIGURE 6.4 – (a) À l'instant  $t = 0^+$ , immédiatement après le « quench bipartite » en  $x = 0$ , le facteur d'occupation est donné par  $\nu(x, \theta; t = 0^+) = \nu_0(\theta)$  pour  $x > 0$  et est nul pour  $x < 0$ . Le bord initial représenté en tirets par l'ensemble des points  $(x_b(s; t =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

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 prédiction 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  $t = 10 \text{ ms}$  et  $t = 18 \text{ ms}$ . 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  $t_m = 6 \pm 2 \text{ ms}$ .

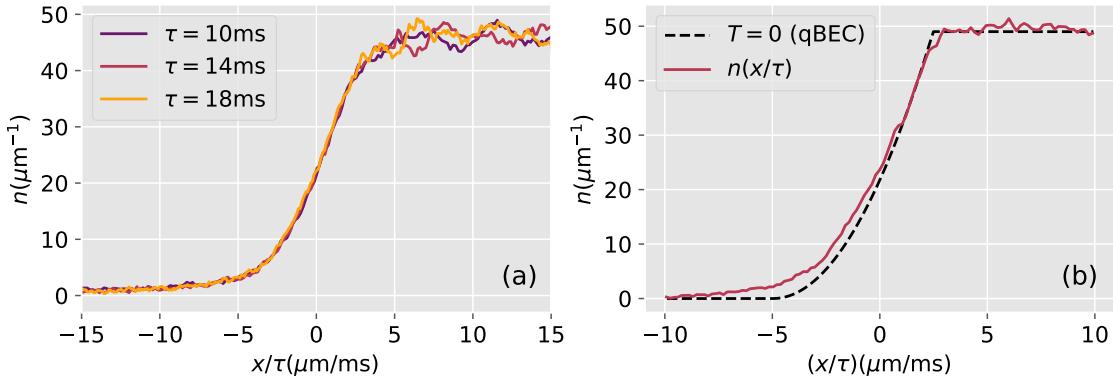


FIGURE 6.5 – (a) Profils de densité aux bords obtenus pour différents temps de déformation  $t$ , représentés en fonction de la variable réduite  $x/t$ . Le bon recouvrement des profils témoigne d'une dynamique balistique conforme à la GHD à l'échelle d'Euler. (b) Comparaison d'un profil mesuré à  $t = 10$  ms avec la prévision 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 μm, 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)).

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  $\tau = 30$  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  $T = 560$  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

ÉTUDE DU PROTOCAL DE BI-PARTITION : MESURE DE DISTRIBUTION DE RAPIDITÉS LOCALES  
POUR DES SYSTÈMES HORS ÉQUILIBRE

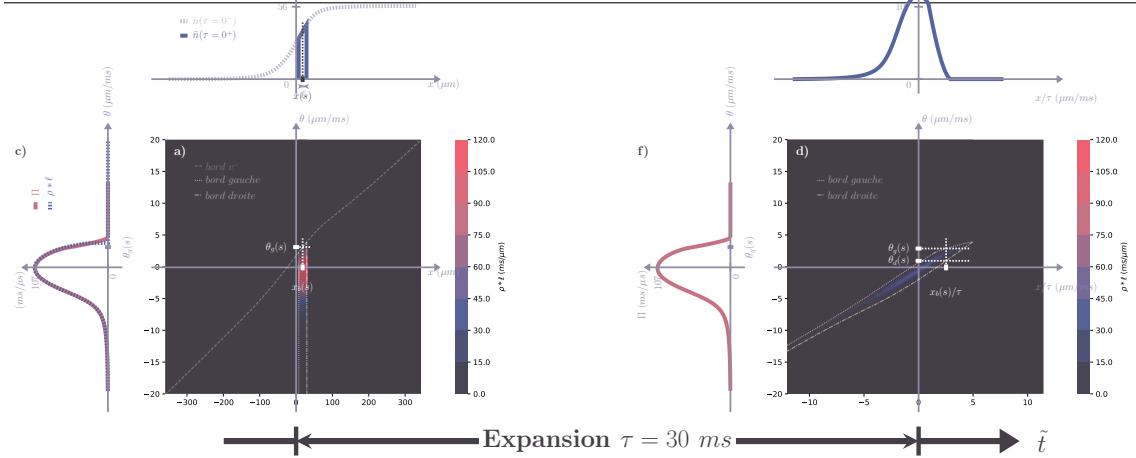


FIGURE 6.6 – (a) À l'instant  $\tau = 0^+$ , immédiatement après la sélection de la tranche centrée en  $x = x_0$  et de largeur  $\ell$ , la distribution de rapidité localement résolue est donnée par  $\rho(x, \theta; \tau = 0^+) = \nu(x, \theta; t = 18 \text{ ms}) \rho_s(x, \theta; t = 18 \text{ ms})$  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  $(x_g(s; \tau = 30 \text{ ms}), \theta(s; \tau = 30 \text{ ms}))$ , et le bord droit en tiret-point par  $(x_d(s; \tau = 30 \text{ ms}), \theta(s; \tau = 30 \text{ ms}))$ . (f) Densité spatiale  $\tilde{n}(x; \tau = 30 \text{ ms})$ . (g) Distribution de rapidité  $\Pi(\theta)$  après la sélection (identique à celle de (c)).

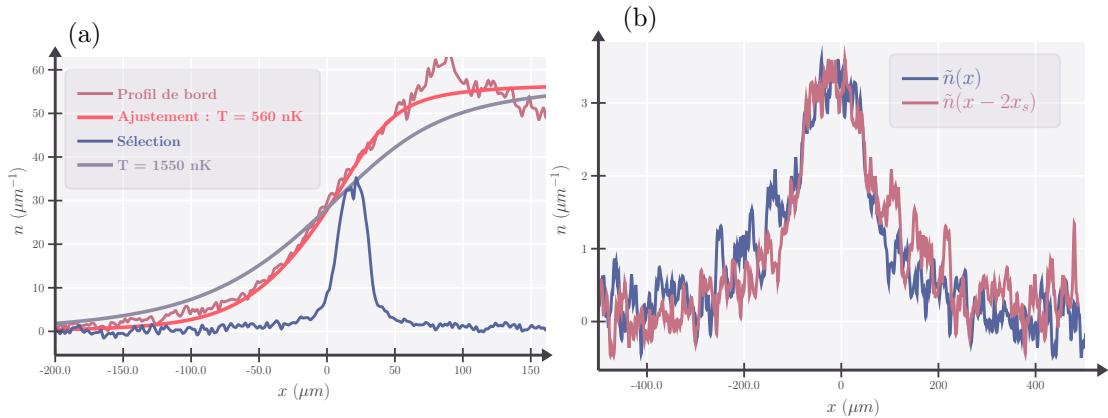


FIGURE 6.7 – (a) Profil de bord et tranche sélectionnée. Le profil de bord après 18 ms est montré en rouge. L'ajustement thermique donne une température  $T = 560 \text{ nK}$  (orange). Le profil de densité mesuré 1 ms après la sélection de la tranche est en bleu. (b) Asymétrie du profil d'expansion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

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 montré en Fig. 6.8(b), le profil prédit reproduit les principales caractéristiques du

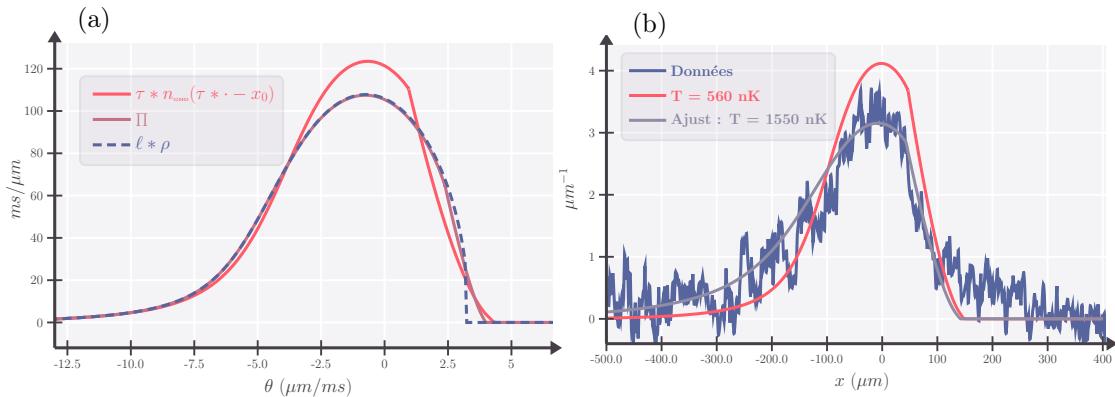


FIGURE 6.8 – (a) *Profil de densité après expansion de la tranche : effets de la largeur finie et du temps d'expansion fini.* Courbe orange : profil obtenu par simulation GHD après expansion pendant  $\tau = 30 \text{ ms}$ , avec  $T = 560 \text{ nK}$ . Courbe marron : distribution asymptotique  $\Pi((x-x_0)/\tau)/\tau$ . 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  $T = 1550 \text{ nK}$ .

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

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

ÉTUDE DU PROTOCAL DE BI-PARTITION : MESURE DE DISTRIBUTION DE RAPIDITÉS LOCALES  
 44 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 :

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

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 :

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

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 :

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

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

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

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  $x \rightarrow v = x/t$  :

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

$\nu^*$  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  $T = 560 \text{ nK}$ .

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>calculs</b>	<b>47</b>
7.1.1	Transformation de jauge et simplification du Hamiltonien	47
7.1.2	Effet Stark dynamique et interaction dipolaire atomique	48
7.1.3	Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne	50
7.1.4	Quelle longueur d'onde du laser ?	54
7.1.5	Quelle Puissance du laser ?	55
<b>7.2</b>	<b>laser , MOPA, etc .. Données</b>	<b>56</b>

### 7.1 calculs

#### 7.1.1 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 quadrivecteur potentiel s'écrit  $A^\mu = \{A^0 \equiv \Phi/c, A^i \equiv \vec{A}\}$ . Si l'on définit la dérivée covariante comme  $\mathcal{D}_\mu = \partial_\mu + \frac{iq}{\hbar} A_\mu = \{\mathcal{D}_t \equiv \partial_t + \frac{iq}{\hbar} \Phi, \vec{\mathcal{D}} = \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar} \vec{A}\}$ , l'équation de Schrödinger régissant l'évolution de la fonction d'onde  $|\psi\rangle$  prend la forme manifestement invariante :

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

**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

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

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 :

$$H_{\mathcal{J}'} = \tilde{H}_{\mathcal{J}} + V_{AR},$$

avec  $\tilde{H}_{\mathcal{J}} = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + q\Phi$ . L'opérateur de couplage atome-rayonnement quantifié est donné par :  $V_{AR} = -\vec{D} \cdot \vec{E}_{\perp}$ , 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.

### 7.1.2 Effet Stark dynamique et interaction dipolaire atomique

Dans l'approximation dipolaire et pour un champ électrique classique quasi-monochromatique

$$\vec{E}_{\perp}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2}\mathcal{E}\vec{u}e^{-i\omega t} + \text{c.c.} \quad (7.1)$$

où  $\mathcal{E}$  est l'amplitude complexe et  $\vec{u}$  le vecteur de polarisation unitaire. En explicitant l'oscillation temporelle, on a :

$$V^E = -\vec{D} \cdot \vec{E}_{\perp} = -\frac{1}{2}\mathcal{E}\vec{u} \cdot \vec{D}e^{-i\omega t} - \frac{1}{2}\mathcal{E}^*\vec{u}^* \cdot \vec{D}e^{+i\omega t}.$$

Ce terme d'interaction induit, par la théorie des perturbations du second ordre (pour un champ loin de toute résonance atomique), un déplacement de niveau énergétique de l'état non perturbé  $|g\rangle$ . En notant  $\hbar\omega_{g \rightarrow e} = \hbar\omega_e - \hbar\omega_g$  la différence d'énergie angulaire entre états  $|e\rangle$  et  $|g\rangle$ , on obtient :

$$\delta E_g = -\frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \sum_e \Re \left[ \frac{|\langle e | \vec{u} \cdot \vec{D} | g \rangle|^2}{\omega_{g \rightarrow e} - \omega - i\gamma_{ge}/2} + \frac{|\langle g | \vec{u} \cdot \vec{D} | e \rangle|^2}{\omega_{g \rightarrow e} + \omega + i\gamma_{ge}/2} \right], \quad (7.2)$$

où  $\gamma_{ge} = \gamma_g + \gamma_e$  est la largeur naturelle de transition. Ce décalage peut être vu comme l'espérance d'un opérateur effectif  $V^{EE}$  agissant sur  $|g\rangle$ . On montre que cet opérateur s'écrit :

$$V^{EE} = \frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \left[ (\vec{u}^* \cdot \vec{D}) \mathcal{R}_+ (\vec{u} \cdot \vec{D}) + (\vec{u} \cdot \vec{D}) \mathcal{R}_- (\vec{u}^* \cdot \vec{D}) \right],$$

avec

$$\mathcal{R}_{\pm} = \sum_e \Re \left[ \frac{1}{\omega_{g \rightarrow e} \mp \omega \mp i\gamma_{ge}/2} \right] |e\rangle\langle e|.$$

Pour un champ très loin résonant, les parties imaginaires sont négligées, et cela conduit usuellement à écrire le potentiel dipolaire moyen sous la forme scalaire :

$$U_{\text{dip}} = -\frac{1}{4}\alpha(\omega)|\mathcal{E}|^2,$$

où  $\alpha(\omega)$  est la polarisabilité dynamique de l'état atomique concerné.

#### Polarisabilité scalaire, vectorielle et tensorielle dans les états fins

Pour un atome de moment cinétique total  $J$ , le décalage de niveau  $V^{EE}$  se décompose en composantes irréductibles suivant les règles du formalisme des tenseurs sphériques. On définit les polarisabilités dynamiques réduites  $\alpha_{nJ}^{(K)}$  pour  $K = 0, 1, 2$  correspondant respectivement aux composantes scalaire, vectorielle et tensorielle.

$$\alpha_{nJ}^{(K)}(\omega) = (-1)^{K+J+1} \sqrt{2K+1} \sum_{n'J'} (-1)^{J'} \begin{Bmatrix} 1 & K & 1 \\ J & J' & J \end{Bmatrix} |\langle n'J' | \vec{D} | nJ \rangle|^2 \mathcal{R}_{nJn'J'}^{(K)}(\omega)$$

avec et  $\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix}$  sont les symboles de Wigner 6-j. et  $C_{nJn'J'K}(\omega)$  un fonction paramétré par les niveaux  $|nJ\rangle$  et  $|n'J'\rangle$  et de  $K$

$$\mathcal{R}_{nJn'J'}^{(K)}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \Re \left[ \frac{1}{\omega_{n'J'nJ} - \omega - i\gamma_{n'J'nJ}/2} + \frac{(-1)^K}{\omega_{n'J'nJ} + \omega + i\gamma_{n'J'nJ}/2} \right],$$

où  $\omega_{n'J'nJ} = \omega_{n'J'} - \omega_{nJ}$  est la différence de fréquences angulaires entre les niveaux  $|n'J'\rangle$  et  $|nJ\rangle$ ,  $\gamma_{n'J'nJ} = \gamma_{n'J'} + \gamma_{nJ}$  est la largeur spectrale totale de la transition.

L'opérateur  $V^{EE}$  prend alors la forme :

$$V_{nJ}^{EE} = -\frac{1}{4} |\mathcal{E}|^2 \left[ \alpha_{nJ}^s - i\alpha_{nJ}^v \frac{(\vec{u}^* \times \vec{u}) \cdot \vec{J}}{2J} + \alpha_{nJ}^T \frac{3[(\vec{u}^* \cdot \vec{J})(\vec{u} \cdot \vec{J}) + (\vec{u} \cdot \vec{J})(\vec{u}^* \cdot \vec{J})] - 2\vec{J}^2}{2J(2J-1)} \right].$$

Les coefficients  $\alpha_{nJ}^s, \alpha_{nJ}^v, \alpha_{nJ}^T$  sont reliés aux polarisabilités réduites par :

$$\alpha_{nJ}^s = \frac{1}{\sqrt{3(2J+1)}} \alpha_{nJ}^{(0)}, \quad \alpha_{nJ}^v = -\sqrt{\frac{2J}{(J+1)(2J+1)}} \alpha_{nJ}^{(1)}, \quad \alpha_{nJ}^T = -\sqrt{\frac{2J(2J-1)}{3(J+1)(2J+1)(2J+3)}} \alpha_{nJ}^{(2)}.$$

Dans cette décomposition, la contribution scalaire ( $K = 0$ ) est indépendante de l'orientation interne de l'atome, la contribution vectorielle ( $K = 1$ ) intervient sous la forme du pseudo-produit  $(\vec{u}^* \times \vec{u}) \cdot \vec{J}$ , et la contribution tensorielle ( $K = 2$ ) dépend de la quadratique  $(\vec{u} \cdot \vec{J})^2$ . Ces différentes composantes se révèlent naturellement lorsque l'on utilise le formalisme des opérateurs tensoriels irréductibles pour décrire le couplage entre le champ et le moment angulaire électronique.

### Interprétation physique

- **Terme scalaire** :  $\alpha^s$  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.
- **Terme vectoriel (Zeeman optique)** :  $\alpha^v$  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, l'opérateur  $i(\vec{u}^* \times \vec{u}) \cdot \vec{J}$  se comporte 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 lumière linéaire ( $\vec{u}$  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  $\mu_B g_J (\vec{J} \cdot \vec{B}_{\text{fict}})$ .
- **Terme tensoriel** :  $\alpha^T$  introduit une anisotropie du potentiel selon l'orientation du moment angulaire par rapport à la polarisation du champ. Mathématiquement, le facteur  $\frac{3[(\vec{u}^* \cdot \vec{J})(\vec{u} \cdot \vec{J}) + (\vec{u} \cdot \vec{J})(\vec{u}^* \cdot \vec{J})] - 2\vec{J}^2}{2J(2J-1)}$  sur la direction de polarisation. Il ne contribue que pour les états de spin total  $J \geq 1$ , car la symétrie quantique annule le 6-j associé dès que  $J = 1/2$ . Ce terme entraîne par exemple une tension ou une compression différentielle des sous-niveaux magnétiques selon leur moment d'alignement avec le champ (effet d'alignement de type quadrupolaire).

### Cas des atomes alcalins (ex. Rubidium)

Les atomes alcalins (comme le Rb) ont un état fondamental  $nS_{1/2}$  de moment total  $J = 1/2$ . D'après les formules ci-dessus, pour  $J = 1/2$  la composante tensorielle s'annule exactement (le symbole de Wigner 6-j associé est nul). Par conséquent, dans l'état fondamental du rubidium seul le terme scalaire et, en cas de polarisation non linéaire du champ, le terme vectoriel subsistent. Pour un champ linéaire, seul  $\alpha^s$  demeure. (à enlever) Quand on intègre l'hyperfine (moment nucléaire  $I$  de  $\text{Rb}^{87} = 3/2$ ), on passe aux états  $|F, M_F\rangle$  ( $F = 1, 2$ ); l'opérateur de Stark effectif garde alors la forme analogue en remplaçant  $\vec{J}$  par  $\vec{F}$ , et des contributions fines peuvent apparaître (un terme de type tensoriel « relatif » entre sous-niveaux  $F > 1/2$ ). Néanmoins, dans la plupart des traitements d'optique quantique on évoque simplement que pour l'état fondamental  $J = 1/2$  du rubidium la polarisabilité tensorielle est nulle et que le terme vectoriel ne survient que pour une lumière circulaire. Les équations ci-dessus peuvent être utilisées pour calculer les décalages

de Zeeman optiques expérimentaux ou les potentiels de piégeage par champ lumineux (pièges dipolaires). Par exemple, on trouve souvent l'approximation  $U_{\text{dip}}(r) = -\frac{1}{4}\alpha(\omega)|\mathcal{E}(r)|^2$  pour les atomes oscillant lentement, où  $\alpha$  est la polarisabilité scalaire effectif (somme des contributions dipolaires). L'analyse plus détaillée avec les termes vectoriels et tensoriels explique des observations telles que les dépendances en polarisation et en niveau hyperfin (par exemple la structure Zeeman optique entre sous-niveaux  $F$ ) dans les expériences sur le rubidium.

### 7.1.3 Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne

+

**Champ électrique appliqué** Pour le rubidium-87 à l'état fondamental, l'état électronique est tel que  $J = 1/2$  ( $L = 0$ ). Dans ce cas, la composante tensorielle de l'opérateur dipolaire s'annule.

On considère qu'un champ électrique classique, quasi-monochromatique et à polarisation rectiligne, est appliqué à l'atome. Ce champ (7.1) peut s'écrire :

$$\vec{E}_\perp(\vec{r}, t) = \mathcal{E}\vec{u}\cos(\omega t),$$

où  $\mathcal{E}$  est l'amplitude du champ, et  $\vec{u}$  un vecteur de polarisation réel unitaire.

**Cas de désaccords très importants.** Lorsque le désaccord du laser est très grand, la structure fine (typiquement de l'ordre de 15 nm) ne peut être résolue. Dans ce régime, seuls les niveaux caractérisés par le moment angulaire orbital total  $L$  sont pertinents.

*Décalage d'énergie au second ordre.* En notant  $\hbar\omega_{nL \rightarrow n'L'} = \hbar\omega_{n'L'} - \hbar\omega_{nL}$  la différence d'énergie entre les états  $|e\rangle \equiv |n', L'\rangle$  et  $|g\rangle \equiv |n, L=0\rangle$ , le décalage d'énergie au second ordre du perturbateur dipolaire s'écrit (voir équation (7.2)) :

$$\delta E_{n,L} = -\frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \sum_{n'L'} \Re \left[ \frac{|\langle n', L' | \vec{u} \cdot \vec{D} | n, L \rangle|^2}{\omega_{nL \rightarrow n'L} - \omega - i\gamma_{n'L'nL}/2} + \frac{|\langle n, L | \vec{u} \cdot \vec{D} | n', L' \rangle|^2}{\omega_{nL \rightarrow n'L} + \omega + i\gamma_{n'L'nL}/2} \right], \quad (7.3)$$

où  $\gamma_{n'L'nL} = \gamma_{n'L'} + \gamma_{nL}$  est la différence des largeurs naturelles de transition.

(à revoir) Les états sont alors notés  $|L, m_L\rangle$ , et les coefficients de Clebsch–Gordan gouvernent les amplitudes de transition induites par le champ. Dans ce cas, une transition de type  $S \rightarrow P$  se comporte, pour une polarisation donnée, comme une transition à deux niveaux effectifs. La figure 1.1 illustre la structure des niveaux  $|L, m_L\rangle$  ainsi que les coefficients de Clebsch–Gordan associés aux différentes polarisations.

*Structure orbitale et opérateur dipolaire.* Dans la base propre du moment orbital  $L$  (état  $|L, m_L\rangle$ ), on exprime les composantes sphériques de l'opérateur dipolaire comme :

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

où  $\vec{u}_q$  le vecteur de polarisation unitaire ( $q = 0, \pm 1$  désigne les composantes rectiligne, circulaires droite, et circulaire gauche).

L'opérateur  $\vec{D} \cdot \vec{u}_q$  n'agit que sur la partie orbitale de la fonction d'onde. Il modifie le moment orbital projeté  $m_L$  :

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

*Application du théorème de Wigner-Eckart.* D'après le théorème de Wigner-Eckart, l'élément de matrice du moment dipolaire entre deux états d'un même multiplet peut se factoriser en un produit d'un facteur radial (appelé coefficient réduit) et d'un coefficient de Clebsch-Gordan. Cela permet de séparer la dépendance angulaire de la structure électronique.

$$\langle L', m'_L | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | L, m_L \rangle = \langle L' || \vec{D} || J \cdot \langle L, 1; m_L, q | L', m'_L \rangle, \quad (7.4)$$

où  $\langle L' || \vec{D} || L \rangle$  est le coefficient réduit associé à la transition atomique (ici noté  $d_{5S \rightarrow 5P}$  dans le cas du rubidium), et  $\langle L, 1; m_L, q | L', m'_L \rangle$  est le coefficient de Clebsch-Gordan décrivant la conservation du moment cinétique orbital projeté.

*Application au cas  $5S \rightarrow 5P$  et  $q = 0$ .* Dans le cadre de la figure 1.1, on considère uniquement la transition entre les niveaux  $L = 0$  (état  $S$ ) et  $L' = 1$  (état  $P$ ) et la polarisation est rectiligne ( $\vec{u} = \vec{u}_{q=0}$ ). On s'intéresse plus précisément à l'élément de matrice entre l'état fondamental  $|L = 0, m_L = 0\rangle$  et un état excité  $|L' = 1, m'_L\rangle$ . L'élément pertinent est alors :

$$\langle L' = 1, m'_L | \vec{D} \cdot \vec{u}_{q=0} | L = 0, m_L = 0 \rangle = d_{5S \rightarrow 5P} \cdot \langle L = 0, 1; m_L = 0, q = 0 | 1, m'_L \rangle \quad (7.5)$$

$$= d_{5S \rightarrow 5P} \cdot \delta_{m'_L, m_L + q}. \quad (7.6)$$

Cette relation met en évidence que seule la composante de polarisation correspondant au changement de moment projeté orbital  $m'_L = q = 0$  contribue à la transition, ce qui permet de sélectionner précisément les transitions optiques permises par la polarisation du champ incident.

**Piègeage dipolaire d'un atome à deux niveaux — généralités.** Un atome neutre placé dans un champ électrique  $\vec{E}$  développe un moment dipolaire induit  $\vec{p}(t)$ . 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  $W(t) = -\frac{1}{2}\vec{p}(t) \cdot \vec{E}_\perp(t)$ .

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*.

*Système à deux niveaux et interaction avec le champ.* Considérons un atome modélisé par deux états, le fondamental  $|g\rangle$  et l'excité  $|e\rangle$ , couplés par le champ électrique. Le couplage est gouverné par l'élément de matrice dipolaire  $\langle e | \vec{D} \cdot \vec{\mathcal{E}} | g \rangle$ . Lorsque le champ est proche de la résonance, le système présente des oscillations de Rabi caractéristiques. Hors résonance, l'interaction se traduit par un décalage énergétique effectif des niveaux.

*Expression du potentiel.* Hors résonance, et dans la limite d'un champ laser intense, le couplage au champ modifie l'énergie des états de manière effective. Ce décalage d'énergie est appelé « potentiel dipolaire » ou « décalage AC Stark ». Pour un état donné, ce potentiel est proportionnel à l'intensité du champ. Dans le cas d'un atome à deux niveaux, et sous certaines approximations détaillées plus bas, on montre que l'énergie 7.3 se dérive, le potentiel dipolaire s'écrit :

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) = -\frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \frac{|\langle e | \vec{D} \cdot \vec{u}(\vec{r}) | g \rangle|^2}{\Delta} = \frac{\hbar\Omega^2(\vec{r})}{4\Delta} = \frac{\hbar\Gamma^2}{8I_{\text{sat}}} \cdot \frac{I(\vec{r})}{\Delta}, \quad (7.7)$$

où  $\Omega(\vec{r}) = -\vec{D} \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r})/\hbar$  est la fréquence de Rabi, définissant le couplage entre le champ électrique (réel, ici entre  $|g\rangle \equiv |5S\rangle$  et  $|e\rangle \equiv |5P\rangle$ ),  $\Delta = \omega - \omega_{g \rightarrow e}$  est le désaccord du laser par rapport à la fréquence de transition atomique ;  $I(\vec{r}) = \varepsilon_0 c |\vec{\mathcal{E}}(\vec{r})|^2 / 2$  est l'intensité locale du champ laser ;  $\Gamma$  est la largeur naturelle de la transition, donnée par :

$$\Gamma = \frac{\omega_{g \rightarrow e}^3}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3} d_{g \rightarrow e}; \quad (7.8)$$

$I_{\text{sat}}$  est l'intensité de saturation, définie par :

$$I_{\text{sat}} = \frac{\hbar\omega_{g \rightarrow e}^3\Gamma}{12\pi c^2}. \quad (7.9)$$

*Conditions de validité.* L'expression (7.7) pour le potentiel dipolaire est obtenue sous les hypothèses suivantes, qui assurent la validité du modèle à deux niveaux et du traitement perturbatif :

- **Sélectivité de la transition** : 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  $U_{\text{dip}}(\vec{r})$  agit comme une modulation de l'énergie potentielle pour les atomes neutres. Selon le signe du désaccord  $\Delta$ , les atomes sont attirés vers les régions de forte ou de faible intensité lumineuse :

- Si  $\Delta < 0$  (désaccord rouge), le potentiel est attractif, et les atomes se dirigent vers les maxima d'intensité.
- Si  $\Delta > 0$  (désaccord bleu), le potentiel est répulsif, et les atomes sont repoussés vers les minima d'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.* Ce potentiel dipolaire peut être utilisé pour piéger des atomes neutres. En focalisant le faisceau laser, on crée une variation spatiale de l'intensité lumineuse, et donc du potentiel dipolaire. Cela permet de construire des pièges optiques ou des réseaux d'interférences lumineuses appelés « réseaux optiques », où les atomes peuvent être confinés et manipulés avec une grande précision.

*Taux de diffusion spontanée.* L'interaction avec le champ lumineux conduit à une absorption suivie d'une réémission spontanée. Le taux de diffusion dans le régime précédent est :

$$\Gamma_{\text{sp}}(\vec{r}) = \frac{\Gamma \Omega^2(\vec{r})}{4\Delta^2} = \frac{\Gamma^3}{8I_{\text{sat}}} \cdot \frac{I(\vec{r})}{\Delta^2}. \quad (7.10)$$

*Bilan — compromis intensité / désaccord* Les expressions (7.7) et (7.10) révèlent un compromis fondamental : Le potentiel varie comme  $I/\Delta$ ; Le taux de diffusion varie comme  $I/\Delta^2$ . Pour minimiser les pertes par diffusion tout en conservant un potentiel significatif, il est donc optimal d'utiliser un désaccord important avec une intensité élevée. Ce régime est appelé *FORT* (Far-Off Resonance Optical Trap).

**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.

*Décalage d'énergie au second ordre.* En notant  $\hbar\omega_{nJ \rightarrow n'J'} = \hbar\omega_{n'J'} - \hbar\omega_{nJ}$  la différence d'énergie entre les états  $|e\rangle \equiv |n', J'\rangle$  et  $|g\rangle \equiv |n, J = 1/2\rangle$ , le décalage d'énergie au second ordre du perturbateur dipolaire s'écrit (voir équation (7.2)) :

$$\delta E_{n,J} = -\frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \sum_{n'J'} \Re \left[ \frac{|\langle n', J' | \vec{u} \cdot \vec{D} | n, J \rangle|^2}{\omega_{nJ \rightarrow n'J} - \omega - i\gamma_{n'J'nJ}/2} + \frac{|\langle n, J | \vec{u} \cdot \vec{D} | n', J' \rangle|^2}{\omega_{nJ \rightarrow n'J} + \omega + i\gamma_{n'J'nJ}/2} \right], \quad (7.11)$$

où  $\gamma_{n'J'nJ} = \gamma_{n'J'} + \gamma_{nJ}$  est la différence des largeurs naturelles de transition.

*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 :

$$|L, S; J, m_J\rangle = \sum_{\substack{-L \leq m_L \leq L, \\ -S \leq m_S \leq S}}^{m_L+m_S=m_J} \langle L, m_L; S, m_S | J, m_J \rangle |L, m_L; S, m_S\rangle. \quad (7.12)$$

On calcule alors à l'aide de cette décomposition :

$$\begin{aligned} & \langle L', S'; J', m'_J | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | L, S; J, m_J \rangle \\ &= \sum_{\substack{-L' \leq m'_L \leq L', \\ -S' \leq m'_S \leq S''}}^{m'_L+m'_S=m'_J} \sum_{\substack{-L \leq m_L \leq L, \\ -S \leq m_S \leq S}}^{m_L+m_S=m_J} \overbrace{\langle L', m'_L; S', m'_S | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | L, m_L; S, m_S \rangle}^{\propto \delta_{m'_L, m_L+q} \delta_{m'_S, m_S}} \langle J', m'_J | L', m'_L; S', m'_S \rangle \langle L, m_L; S, m_S | J, m_J \rangle \\ &= \sum_{\substack{-L \leq m_L \leq L, \\ -S \leq m_S \leq S}}^{m_L+m_S=m_J, \\ m_L+q+m_S=m'_J} \langle L', m_L+q | \vec{D} \cdot \vec{u}_q | L, m_L \rangle \langle J', m_L+q+m_S | L', m_L+q; S', m_S \rangle \langle L, m_L; S, m_S | J, m_J \rangle \end{aligned} \quad (7.13) \quad (7.15)$$

*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 excités  $|5^2P_{1/2}, m'_J\rangle$ , que l'on peut écrire de manière équivalente comme :

$$|5^2P_{J'}, m'_J\rangle \equiv |5P, J', m'_J\rangle \equiv |n = 5; L' = 1, S' = \frac{1}{2}; J', m'_J\rangle.$$

Pour rappel, les opérateurs de montée/descente agissant sur les états propres du moment angulaire vérifient la relation générale :

$$\hat{\mathbf{A}}_{\pm}|n, A, m_A\rangle = \hbar\sqrt{A(A+1) - m_A(m_A \pm 1)}|n, A, m_A \pm 1\rangle \quad (7.16)$$

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

$$\begin{aligned} \langle 5^2P_{1/2}, m'_J = \pm\frac{1}{2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | n^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2} \rangle &= \mp\sqrt{\frac{1}{3}}d_{5S \rightarrow 5P}, \\ \langle n^2P_{3/2}, m'_J = \pm\frac{1}{2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | n^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2} \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}d_{5S \rightarrow 5P}, \\ \langle n^2P_{3/2}, m'_J = \pm\frac{3}{2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | n^2S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2} \rangle &= 0. \end{aligned}$$

*Potentiel dipolaire* En négligeant le temps non-resonant et avec l'hypothèse l'équation ??? devient :

$$\begin{aligned} U_{\text{dip}}(\vec{r}) &= -\frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \left( \frac{|\langle n^2P_{1/2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | n^2S_{1/2} \rangle|^2}{\Delta_1} + \frac{|\langle n^2P_{3/2} | \vec{D} \cdot \vec{u} | n^2S_{1/2} \rangle|^2}{\Delta_2} \right) \\ &= \frac{d_{5S \rightarrow 5P}^2 |\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \left( \frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2} \right) \\ &= \frac{\hbar\Gamma^2}{8I_{\text{sat}}} \left( \frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2} \right) I(\vec{r}), \end{aligned}$$

avec  $\Delta_i = \omega - \omega_i$  avec  $i \in \{1, 2\}$  avec  $\omega_1 = \omega_{n^2P_{1/2}, m_J=\pm 1/2} - \omega_{n^2S_{1/2}, m_J=\pm 1/2}$  et  $\omega_2 = \omega_{n^2P_{3/2}, m_J=\pm 1/2} - \omega_{n^2S_{1/2}, m_J=\pm 1/2}$

#### Relier Intensité laser et $\mathcal{E}$

La densité d'énergie électromagnétique :

$$u_{em} = \frac{1}{2} \left( \varepsilon_0 \Re(\hat{\mathcal{E}})^2 + \frac{1}{\mu_0} \Re(\hat{\mathcal{B}})^2 \right), \quad \langle u_{em} \rangle = \frac{\varepsilon_0 \langle \Re(\hat{\mathcal{E}})^2 \rangle}{2} + \frac{\langle \Re(\hat{\mathcal{B}})^2 \rangle}{2\mu_0} \quad (7.17)$$

#### 7.1.4 Quelle longueur d'onde du laser ?

La structure interne de l'atome est modélisée par un système à deux niveaux, et la polarisabilité de l'atome est décrite par le modèle classique de Lorentz [9902072]. En utilisant les notations suivantes :  $\omega_0$  pour la fréquence propre entre ces deux niveaux et  $\omega$  pour la fréquence du faisceau laser, lorsque le désaccord est négligeable par rapport à la fréquence du laser ( $|\omega - \omega_0| \ll \omega_0$ ), le taux d'amortissement classique est donné par :

$$\Gamma(\omega) = \frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 m_e c^3} \omega^2 \quad (7.18)$$

Cela conduit à l'expression suivante :

$$\hbar\Gamma_{sc} = \frac{\Gamma_0}{\omega - \omega_0} U_{dip} \quad (7.19)$$

où  $\Gamma_0 \equiv \Gamma(\omega_0)$ .

À partir de cette dernière équation, on peut établir une relation entre la longueur d'onde du laser  $\lambda$ , le potentiel dipolaire  $U_{dip}$  et le taux de photons diffusés  $\Gamma_{sc}$ . Si l'on impose les conditions suivantes :

- Le potentiel dipolaire  $U_{dip}$  doit être supérieur à  $U_{dip,\min}$ .
- $\Gamma_{sc}$  pour une valeur de  $U_{dip}$  doit être inférieur à  $\Gamma_{sc,\max}$ .

On obtient alors la longueur d'onde maximale  $\lambda_{\max}$  que le laser peut avoir :

$$\lambda = \frac{1}{\frac{\Gamma_0}{\Gamma_{sc,\max}} \frac{U_{dip}}{hc} + \frac{1}{\lambda_0}} \leq \frac{1}{\frac{\Gamma_0}{\Gamma_{sc,\max}} \frac{U_{dip,\min}}{hc} + \frac{1}{\lambda_0}} = \lambda_{\max} \quad (7.20)$$

Nous prenons  $U_{dip,0,\min}/k_B = 1 \mu K$  comme valeur minimale du potentiel dipolaire, et le taux de diffusion des photons pour  $U_{dip,\min} = U_{dip,0,\min}/2 = 500 nK \times k_B$  est  $\Gamma_{sc,\max} = 1 s^{-1}$ . Nous nous plaçons autour de la transition  $D_2$  du rubidium 87, c'est-à-dire à une longueur d'onde propre  $\lambda_0 = 780 \text{ nm}$ . Nous obtenons ainsi  $\lambda_{\max} = 779,228 \text{ nm}$ , ce qui correspond à un décalage de moins de 1 nm.

### 7.1.5 Quelle Puissance du laser ?

Le potentiel dipolaire s'exprime par l'équation suivante :

$$U_{dip}(\vec{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma_0}{\omega - \omega_0} I(\vec{r}) \quad (7.21)$$

où  $I(\vec{r})$  est l'intensité du champ laser. On modélise cette intensité par l'intensité d'un faisceau gaussien :

$$I(\vec{r}) = \frac{2P}{\pi w^2(z)} e^{-\frac{2x^2}{w^2(z)}} \quad (7.22)$$

avec  $P$  la puissance du faisceau laser,  $w(z)$  le diamètre du faisceau laser à la position  $z$ ,  $w_0$  la waist, et  $z_R = \pi w_0^2/\lambda$  la longueur de Rayleigh du laser. Étant donné que les atomes se trouvent proches du point focal du faisceau, nous effectuons un développement limité du potentiel dipolaire au premier ordre en  $x^2/w_0^2$  et en  $z^2/z_R^2$  :

$$U_{dip}(\vec{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma_0}{\omega - \omega_0} \frac{2P}{\pi w_0^2} \left( 1 - \frac{2x^2}{w_0^2} - \frac{z^2}{z_R^2} \right) \quad (7.23)$$

La hauteur du piège est donnée par :

$$U_{dip,0} = U_{dip}(0, 0, 0) = \frac{3c^2\Gamma_0}{w_0^2\omega_0^3(\omega - \omega_0)} P \quad (7.24)$$

En inversant cette équation et en ajoutant la condition sur le potentiel dipolaire minimal  $U_{dip,0,\min}$ , on obtient la puissance minimale du faisceau laser en fonction de sa pulsation :

$$P(\omega) = \frac{w_0^2 \omega_0^3 (\omega - \omega_0)}{3c^2 \Gamma_0} U_{dip,0} \geq \frac{w_0^2 \omega_0^3 (\omega - \omega_0)}{3c^2 \Gamma_0} U_{dip,0,\min} = P_{\min}(\omega) \quad (7.25)$$

Nous avons déterminé la longueur maximale  $\lambda_{\max}$  du faisceau laser, c'est-à-dire sa pulsation minimale  $\omega_{\min} \equiv 2\pi c/\lambda_{\max}$ . Notons  $P_{\min} \equiv P_{\min}(\omega_{\min})$  la puissance minimale du faisceau laser pour satisfaire les deux conditions sur la hauteur du potentiel et le taux de diffusion des photons pour un waist de  $w_0 = 300\mu m$ . On obtiens  $P_{\min} = 4.2$  mW.

[http://10.117.51.227:8890/notebooks/analysedata/analyses\\_jupyter/analyses\\_Guillaume/Calculs%20puissance%20laser%20.ipynb](http://10.117.51.227:8890/notebooks/analysedata/analyses_jupyter/analyses_Guillaume/Calculs%20puissance%20laser%20.ipynb)

**Je propose ce laser (chez Toptica-Eagleyard) :**

- Dans le commerce on trouve des laser avec une longueur d'onde  $\lambda = 772.5$  nm. On note  $\omega \equiv 2\pi c/\lambda$ .  $P_{\min} = 75.0$  mW

Ref	#LD-0773-0075-DFB-1
Wavelength	772.5 nm
Power	75.0 mW
Laser Type	DFB
Operation Mode	?
Quote	?

[https://www.toptica.com/fileadmin/Editors\\_English/14\\_stocklists/DFB-Stock-list.pdf](https://www.toptica.com/fileadmin/Editors_English/14_stocklists/DFB-Stock-list.pdf)

- Dans le commerce on trouve des laser avec une longueur d'onde  $\lambda = 778.0$  nm. On note  $\omega \equiv 2\pi c/\lambda$ .  $P_{\min} = 60.0$  mW

Ref	#LD-0778-0060-DBR-1
Wavelength	778.0 nm
Power	60.0 mW
Laser Type	DBR
Operation Mode	?
Quote	?

[https://www.toptica.com/fileadmin/Editors\\_English/14\\_stocklists/DFB-Stock-list.pdf](https://www.toptica.com/fileadmin/Editors_English/14_stocklists/DFB-Stock-list.pdf)

- Dans le commerce on trouve des laser avec une longueur d'onde  $\lambda = 765$  nm. On note  $\omega \equiv 2\pi c/\lambda$ .  $P_{\min} = 85.0$  mW

Ref	EYP-TPA-0765-01500-3006-CMT03-0000 / EYP-TPA-0765-01500-3006-BTU02-0000
Wavelength	765 nm
Power	1,5 W
Laser Type	Tapered Amplifier
Operation Mode	CW
Quote	???

[https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-tpa-0765-01500-3006-cmt03-0000/?\\_application%5B0%5D=quantum-technology&\\_application%5B1%5D=spectroscopy](https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-tpa-0765-01500-3006-cmt03-0000/?_application%5B0%5D=quantum-technology&_application%5B1%5D=spectroscopy)  
[https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-tpa-0765-01500-3006-btu02-0000/?\\_application%5B0%5D=quantum-technology&\\_application%5B1%5D=spectroscopy](https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-tpa-0765-01500-3006-btu02-0000/?_application%5B0%5D=quantum-technology&_application%5B1%5D=spectroscopy)

- $\lambda = 770$  nm .  $P_{\min} = 55.6$  mW

Ref	EYP-ECL-0770-00080-1500-BFW01-0005
Wavelength	770 nm
Power	80 mW
Laser Type	ECL laser diode
Operation Mode	CW
Quote	???

[https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-ecl-0770-00080-1500-bfw01-0005/?\\_application%5B0%5D=atomic-clock&\\_application%5B1%5D=cold-atom-interferometry&\\_application%5B2%5D=metrology&\\_application%5B3%5D=quantum-technology](https://www.toptica-eagleyard.com/ey-product/eyp-ecl-0770-00080-1500-bfw01-0005/?_application%5B0%5D=atomic-clock&_application%5B1%5D=cold-atom-interferometry&_application%5B2%5D=metrology&_application%5B3%5D=quantum-technology)

## 7.2 laser , MOPA, etc .. Données

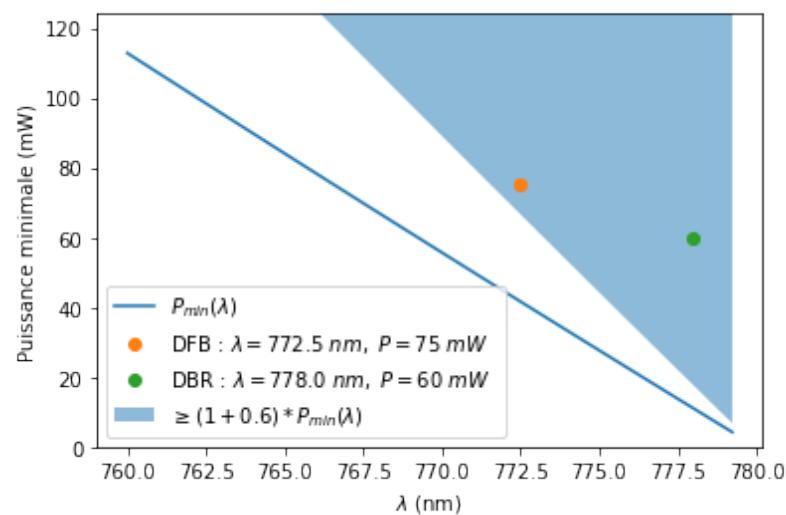


FIGURE 7.1 – La ligne pleine représente  $P_{min}(\lambda)$  et le fond bleu représente  $(1 + 60\%)P_{min}(\lambda)$



## Annexe A

# Calculs Hamiltonien à N fixés

### A.1 deux particules

Agir avec cet opérateur sur la fonction propre (1.20) donne

$$-\frac{1}{\sqrt{2}} \int dx \iint dz_1 dz_2 \varphi_2(z_1, z_2) \left[ \frac{1}{2} \hat{\partial}_x^2 \hat{\Psi}^\dagger(x) \right] \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\Psi}^\dagger(z_2) |0\rangle \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{aligned} \hat{H}|2\rangle &= \\ &+ \frac{c}{2\sqrt{2}} \int dx \iint dz_1 dz_2 \varphi_2(z_1, z_2) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\Psi}^\dagger(z_2) |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Les règles de commutations (1.2) impliquent que

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\Psi}^\dagger(z_2)] &= \hat{\Psi}^\dagger(z_2) \hat{\delta}(x - z_1) + \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\delta}(x - z_2) \\ [\hat{\partial}_x \hat{\Psi}^\dagger(x), \hat{\Psi}^\dagger(z)] &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

En utilisant ces dernières règles de commutations et la définition d'état de Fock (1.8) , la première partie de l'application de l'hamiltonien sur l'état  $|2\rangle$  , (A.1) se simplifie en

$$-\frac{1}{\sqrt{2}} \iint dz_1 dz_2 \varphi_2(z_1, z_2) \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \left[ \frac{1}{2} \hat{\partial}_{z_2}^2 \hat{\Psi}^\dagger(z_2) \right] + \hat{\Psi}^\dagger(z_2) \left[ \frac{1}{2} \hat{\partial}_{z_1}^2 \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \right] \right\} |0\rangle \quad (\text{A.4})$$

Et en faisant deux intégrations par parties selon la variable  $z_{1,2}$  , cette première partie devient

$$-\frac{1}{\sqrt{2}} \iint dz_1 dz_2 \frac{1}{2} \left\{ \hat{\partial}_{z_1}^2 + \hat{\partial}_{z_2}^2 \right\} \varphi_2(z_1, z_2) \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\Psi}^\dagger(z_2) |0\rangle \quad (\text{A.5})$$

Pour la seconde partie , en remarquant que Les règles de commutations (1.2) impliquent que

$$[\hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(z)] = 2 \hat{\Psi}(x) \hat{\delta}(x - z) \quad (\text{A.6})$$

et en remplaçant  $\hat{\Psi}(x)$  par  $\hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x)$  dans (A.3) il vient que

$$[\hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\Psi}^\dagger(z_2)] = 2 \left\{ \hat{\delta}(x - z_1) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}^\dagger(z_2) + \hat{\delta}(x - z_2) \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\Psi}(x) \right\} \quad (\text{A.7})$$

et en injectant (A.3), (A.7) devient

$$[\hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\Psi}^\dagger(z_2)] = 2 \left\{ \hat{\delta}(x - z_1) \hat{\delta}(x - z_2) + \hat{\delta}(x - z_1) \hat{\Psi}^\dagger(z_2) \hat{\Psi}(x) + \hat{\delta}(x - z_2) \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\Psi}(x) \right\} \quad (\text{A.8})$$

En utilisant la règle de commutation (A.8) et la définition de l'état de Fock (1.8) , la seconde partie de (A.2) devient

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \iint dz_1 dz_2 c \hat{\delta}(z_1 - z_2) \varphi_2(z_1, z_2) \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\Psi}^\dagger(z_2) |0\rangle \quad (\text{A.9})$$

en utilisant (A.5) et (A.9)

$$\hat{H}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \iint dz_1 dz_2 [\hat{\mathcal{H}}_2 \varphi_2(z_1, z_2)] \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \hat{\Psi}^\dagger(z_2) |0\rangle \quad (\text{A.10})$$

avec

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = -\frac{1}{2} \hat{\partial}_{z_1}^2 - \frac{1}{2} \hat{\partial}_{z_2}^2 + c \hat{\delta}(z_1 - z_2). \quad (\text{A.11})$$

## A.2 N particules

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N z \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) \left[ \frac{1}{2} \hat{\partial}_x^2 \hat{\Psi}^\dagger(x) \right] \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |0\rangle \quad (\text{A.12}) \\ \hat{H}|\psi(\theta_1, \dots, \theta_N)\rangle &= \\ & + \frac{c}{2\sqrt{N!}} \int dx \int d^N z \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |0\rangle \end{aligned}$$

Les règles de commutations (1.2) impliquent que

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N)] &= \sum_{i=0}^N \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \dots \hat{\delta}(x - z_i) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) \\ [\hat{\partial}_x \hat{\Psi}^\dagger(x), \hat{\Psi}^\dagger(z)] &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

En utilisant ces dernières règles de commutations et la définition d'état de Fock (1.8) , la première partie de l'application de l'hamiltonien sur l'état  $|\psi\rangle$  , (A.13) se simplifie en

$$-\frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^N z \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) \sum_{i=1}^N \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \dots [\hat{\partial}_{z_i}^2 \hat{\Psi}^\dagger(z_i)] \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |0\rangle \quad (\text{A.15})$$

Et en faisant deux intégrations par parties selon la variable  $z_i$  , cette première partie devient

$$-\frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^N z \sum_{i=1}^N \hat{\partial}_{z_i}^2 \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |0\rangle \quad (\text{A.16})$$

Pour la seconde partie , en remarquant que Les règles de commutations (1.2) impliquent que

$$[\hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(z)] = 2 \hat{\Psi}(x) \hat{\delta}(x - z) \quad (\text{A.17})$$

et en remplaçant  $\hat{\Psi}(x)$  par  $\hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x)$  dans (A.14) il vient que

$$[\hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N)] = 2 \sum_{i=0}^N \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \dots \hat{\Psi}(x) \hat{\delta}(x - z_i) \dots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) \quad (\text{A.18})$$

et en injectant (A.14), (A.18) devient

$$[\hat{\Psi}(x)\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N)] = \begin{cases} 2 \sum_{i=0}^N \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \cdots \hat{\delta}(x - z_i) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) \hat{\Psi}(x) \\ + \sum_{i=0}^N \sum_{j=i+1}^N \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \cdots \hat{\delta}(x - z_i) \hat{\Psi}^\dagger(z_{i+1}) \cdots \hat{\delta}(x - z_j) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

En utilisant la règle de comutation (A.19) et la définition de l'état de Fock (??) , la seconde partie de (A.13) devient

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^N z \ 2c \sum_{1 \leq i < j \leq N} \hat{\delta}(z_i - z_j) \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |0\rangle \quad (\text{A.20})$$

en utilisant (A.16) et (A.20) , (A.16) devient

$$\hat{H}|\psi(\theta_1, \dots, \theta_N)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^N z \left[ \hat{\mathcal{H}}_N \varphi_{\{\theta_a\}}(z_1, \dots, z_N) \right] \hat{\Psi}^\dagger(z_1) \cdots \hat{\Psi}^\dagger(z_N) |0\rangle \quad (\text{A.21})$$

avec

$$\hat{\mathcal{H}}_N = - \sum_{i=1}^N \hat{\partial}_{z_i}^2 + c \sum_{1 \leq i < j \leq N} \hat{\delta}(z_i - z_j) \quad (\text{A.22})$$



## Annexe B

Exemple : action de  $\hat{P}$  sur l'état  $|\psi_N\rangle$



## Annexe C

Action de  $\hat{H}$  sur l'état  $|\psi_N\rangle$



## **Annexe D**

### **Vérification explicite de la condition aux limites**



## Annexe E

### Lien avec les équations de Bethe



## Annexe F

### Energie

L'équipartition de l'énergie nous donne  $\varepsilon_0 |\vec{E}|^2 = \frac{1}{\mu_0} |\vec{B}|^2$

$$\langle u_{em} \rangle = \frac{\varepsilon_0 |\mathcal{E}|^2}{2} \quad (\text{F.1})$$

De même pour le vecteur de poynting  $\vec{\Pi} = \frac{\vec{E} \times \vec{B}}{\mu_0} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times (\vec{n}/c \times \vec{E})$  :

$$\langle \vec{\Pi} \rangle = \left\langle \frac{\vec{E} \times \vec{B}}{\mu_0} \right\rangle = c \langle u_{em} \rangle \vec{n} \quad (\text{F.2})$$

Donc

$$V_{AR} = -d_0^2 \frac{I}{2\varepsilon_0 c \hbar} \left( \frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2} \right),$$

avec  $I = \frac{c\varepsilon_0 |\mathcal{E}|^2}{2}$



# Annexe G

## Taux

### G.0.1 Le taux de décroissance radiative

#### Courant paramagnétique

Dans cette section, nous abordons le concept de courant paramagnétique en relation avec l'interaction entre une particule chargée et un champ électromagnétique. Au lieu de traiter la matière dans le formalisme de la deuxième quantification, nous réservons cette approche aux photons uniquement. La partie matérielle du système sera décrite dans le formalisme habituel de la mécanique quantique (équation de Schrödinger).

Revenons à l'expression (???) de l'hamiltonien d'une particule chargée dans un champ électromagnétique et exprimons-la quantiquement pour un ensemble de particules de même type. Ces particules ont la même masse  $m$  et la même charge  $q$  (par exemple, un ensemble d'électrons). Elles ont des impulsions  $\vec{P}_i$  et des positions  $\vec{R}_i$  (opérateurs) :

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\mathcal{J}'} &= \sum_i \left\{ \frac{\vec{P}_i^2}{2m} - \frac{q}{2m} \left[ \vec{P}_i \cdot \vec{A}'(\vec{R}_i) + \vec{A}'(\vec{R}_i) \cdot \vec{P}_i \right] + q \underbrace{(\hat{\Phi}(\vec{R}_i) - \partial_t \chi(\vec{R}_i))}_{\dot{\Phi}'(\vec{R}_i)} + \frac{q^2 \vec{A}'^2(\vec{R}_i)}{2m} \right\}, \\ &= \underbrace{\sum_i \frac{\vec{P}_i^2}{2m}}_{\hat{H}_0} + q \hat{\Phi}(\vec{R}_i) + \underbrace{\sum_i \left\{ -q \frac{1}{2m} \left[ \vec{P}_i \cdot \vec{A}'(\vec{R}_i) + \vec{A}'(\vec{R}_i) \cdot \vec{P}_i \right] + \frac{q^2 \vec{A}'^2(\vec{R}_i)}{2m} - q \partial_t \chi(\vec{R}_i) \right\}}_{\hat{H}_{int} = \hat{V}_{AR} = -\vec{D} \cdot \vec{E}_{\perp}}\end{aligned}\quad (\text{G.1})$$

Dans cette expression, les potentiels  $\vec{A}'$  et  $\hat{\Phi}'$  dépendent des opérateurs de position  $\vec{R}_i$  de chaque particule, ce qui signifie qu'ils ne commutent pas avec les impulsions  $\vec{P}_i$ . Il serait peu pratique de quantifier directement les potentiels. Pour surmonter cette difficulté, nous introduisons l'opérateur du courant paramagnétique et l'opérateur de densité :

$$\vec{J}(\vec{r}) \equiv \frac{1}{2m} \sum_i \left[ \vec{P}_i \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) + \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \vec{P}_i \right] \quad (\text{G.3})$$

er l'opérateur densité

$$\hat{n}(\vec{r}) \equiv \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad (\text{G.4})$$

L'hamiltonien d'interaction peut être séparé en trois parties :  $\hat{H}_{int} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3$ , où

$$\hat{\mathbf{H}}_1 = -q \int d\vec{r} \vec{\mathbf{J}}(\vec{r}) \cdot \vec{\mathbf{A}}'(\vec{r}) \quad (\text{G.5})$$

$$\hat{\mathbf{H}}_2 = \frac{q^2}{2m} \int d\vec{r} \hat{\mathbf{n}}(\vec{r}) \vec{\mathbf{A}}'^2(\vec{r}), \quad (\text{G.6})$$

$$\hat{\mathbf{H}}_3 = q \int d\vec{r} \hat{\mathbf{n}}(\vec{r}) \partial_t \chi(\vec{\mathbf{R}}_i). \quad (\text{G.7})$$

Dans cette expression, les potentiels  $\vec{\mathbf{A}}'$  et  $\hat{\Phi}'$  commutent (jauge de Coulomb) avec les courants parce qu'ils ne dépendent plus des opérateurs de position des particules. Notons que  $\vec{r}$  n'est pas un opérateur dans ces expressions. Après quantification, les potentiels deviennent des opérateurs agissant dans l'espace des états décrivant le champ électromagnétique, qui est distinct de celui décrivant la matière. L'espace d'états total est le produit tensoriel de ces deux espaces.

Il est possible de séparer  $\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}}$  en trois parties distinctes :  $\hat{\mathbf{H}}_1$ ,  $\hat{\mathbf{H}}_2$  et  $\hat{\mathbf{H}}_3$ . Cependant, en général,  $\hat{\mathbf{H}}_1$  est plus important que  $\hat{\mathbf{H}}_2$ , ce que nous aborderons plus tard.

En se basant sur le développement en fonctions propres de l'opérateur potentiel vecteur  $\vec{\mathbf{A}}'$ , nous avons l'expression suivante :

$$\vec{\mathbf{A}}'(\vec{r}) = \sum_{i,\vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\vec{k}} V \varepsilon_0}} \left\{ \hat{\mathbf{a}}_{i,\vec{k}} \vec{\varepsilon}_{i,\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + cc \right\} \quad (\text{G.8})$$

L'espace est défini dans une boîte de volume  $V$  pour faciliter les calculs de quantités telles que les taux de désintégration et les sections efficaces. Nous supposerons également que le potentiel scalaire  $\hat{\mathbf{U}}$  est une fonction fixée par la distribution de charge du système. Dans les développements qui suivent, nous inclurons  $U$  dans l'hamiltonien non perturbé, en supposant que les solutions de ce dernier sont connues. De plus, l'opérateur  $\hat{\mathbf{H}}_3$  n'agit pas sur les états du champ électromagnétique. L'interaction quantifiée avec le champ électromagnétique se limite donc aux termes  $\hat{\mathbf{H}}_1$  et  $\hat{\mathbf{H}}_2$ . En général,  $\hat{\mathbf{H}}_1$  prédomine sur  $\hat{\mathbf{H}}_2$ , et les distinctions entre ces deux termes seront clarifiées ultérieurement.

Il n'est pas encore nécessaire d'exprimer  $\hat{\mathbf{H}}_2$  en fonction des opérateurs de création et d'annihilation. À ce stade, intéressons-nous à  $\hat{\mathbf{H}}_1$  qui peut être formulé comme suit :

$$\hat{\mathbf{H}}_1 = \sum_{i,k} \sqrt{\frac{e^2 \hbar}{\omega_{\vec{k}} V \varepsilon_0}} \left\{ \hat{\mathbf{a}}_{i,\vec{k}} \vec{\varepsilon}_{i,\vec{k}} \vec{\mathbf{J}}_{-\vec{k}} + cc \right\}. \quad (\text{G.9})$$

Nous supposons dans la suite que la matière qui nous intéresse est composée d'électrons portant une charge  $q = -e$  où  $e > 0$ , justifiant ainsi le changement de signe dans  $\hat{\mathbf{H}}_1$ . De plus, nous avons introduit la transformée de Fourier du courant paramagnétique :

$$\vec{\mathbf{J}}_{\vec{k}} = \int d\vec{r} \vec{\mathbf{J}}(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (\text{G.10})$$

### Émission et absorption

**Taux d'émission et d'absorption** Examinons le processus par lequel un atome émet ou absorbe un photon. Pour cela, utilisons la règle d'or de Fermi au premier ordre de la théorie des perturbations, avec l'hamiltonien d'interaction (??). Supposons que l'état initial comporte  $n_{i,\vec{k}}$  photons dans le mode de propagation  $(i, \vec{k})$ , et que l'atome soit dans un état du spectre discret que nous désignerons par l'indice  $n$ . Notons cet état initial du système total  $|n; n_{i,\vec{k}}\rangle$ . Après le processus, supposons que l'atome soit dans un état noté  $|m\rangle$ , et que le nombre de photons dans le même mode de propagation soit  $n_{i,\vec{k}} \pm 1$ . L'état final est donc noté  $|m; n_{i,\vec{k}} \pm 1\rangle$ . Bien sûr, le signe (+) correspond à l'émission d'un photon, et le signe (-) à l'absorption. Selon la règle d'or de Fermi (règle d'or), le taux de transition est donné par :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m; n_{i,\vec{k}} \pm 1 | \hat{\mathbf{H}}_1 | n; n_{i,\vec{k}} \rangle|^2 \rho_f^{\pm}, \quad (\text{G.11})$$

où  $\rho_f$  est la densité d'états finaux. En notant  $E_n$  et  $E_m$  les énergies des états atomiques (ou moléculaires, etc.), et  $\omega = c|\vec{k}| \equiv \omega_k$ , la fréquence angulaire du photon émis ou absorbé, on a  $\rho_f^+ = \int \frac{d\vec{r}d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E_m - E_n \pm \hbar\omega)$  et  $\rho_f^- = \delta(E_m - E_n \mp \hbar\omega)$ .

Notons que les états de rayonnement peuvent contenir un nombre indéterminé de photons dans d'autres modes. Cependant, ici nous nous intéressons à un processus où un seul photon est émis ou absorbé. Les autres photons agissent comme des spectateurs passifs n'ayant aucune influence sur l'amplitude du processus. L'opérateur  $\hat{\mathbf{H}}_1$  est une somme sur tous les modes, mais un seul de ces termes contribue à l'amplitude : celui associé au mode  $n_{i,\vec{k}}$ . Ce terme est le produit d'un opérateur agissant sur les photons ( $\hat{\mathbf{a}}_{i,\vec{k}}^\dagger$  dans le cas de l'absorption) et d'un opérateur agissant sur l'atome ( $\vec{\epsilon}_{i,\vec{k}} \cdot \vec{\mathbf{J}}_{-\vec{k}}$  dans le même cas). L'élément de matrice de la partie électromagnétique est facile à évaluer :

$$\langle n_{i,\vec{k}} + 1 | \hat{\mathbf{a}}_{i,\vec{k}}^\dagger | n_{i,\vec{k}} \rangle = \sqrt{n_{i,\vec{k}} + 1}, \quad \langle n_{i,\vec{k}} - 1 | \hat{\mathbf{a}}_{i,\vec{k}} | n_{i,\vec{k}} \rangle = \sqrt{n_{i,\vec{k}}}. \quad (\text{G.12})$$

Les amplitudes pour l'émission et l'absorption sont alors :

**absorption :**

$$\Gamma_{\text{abs.}} = \frac{\pi e^2}{V\omega\epsilon_0} n_{i,\vec{k}} |\langle m | \vec{\mathbf{J}}_{-\vec{k}} \cdot \vec{\epsilon}_{i,\vec{k}} | n \rangle|^2 \rho_f^-. \quad (\text{G.13})$$

**émission :**

$$\Gamma_{\text{em.}} = \frac{\pi e^2}{V\omega\epsilon_0} (n_{i,\vec{k}} + 1) |\langle m | \vec{\mathbf{J}}_{\vec{k}} \cdot \vec{\epsilon}_{i,\vec{k}}^* | n \rangle|^2 \rho_f^+. \quad (\text{G.14})$$

Le plus remarquable dans ces formules est la présence des facteurs  $n_{i,\vec{k}}$  et  $n_{i,\vec{k}} + 1$  qui proviennent de la nature de boson du photon. Ils sont responsables de l'émission et de l'absorption induites de rayonnement : plus le nombre de photons dans l'état initial est grand, plus le processus d'émission ou d'absorption est probable. Ceci est le principe fondamental du fonctionnement des lasers. Il est à noter cependant que l'amplitude de la lumière incidente doit être importante dans un mode donné ( $n_{i,\vec{k}} \gg 1$ ), c'est-à-dire que la lumière incidente doit être cohérente pour que cet effet se produise. Il est également remarquable que l'émission d'un photon puisse avoir lieu en l'absence d'un photon initial ( $n_{i,\vec{k}} = 0$ ), c'est-à-dire en l'absence apparente de stimulation externe. Ce processus est appelé émission spontanée, correspondant au rayonnement classique d'une charge accélérée.

**Dépendance angulaire de la puissance rayonnée** Examinons maintenant le taux total de transition d'un état atomique excité vers un état d'énergie plus basse, tel que l'état fondamental, par émission spontanée. Cette étape implique de sommer le taux défini dans l'équation (29) sur tous les photons ayant une énergie  $\hbar\omega = E_n - E_m$ . Cette somme sur les impulsions peut être transformée en une intégrale sur les fréquences selon la relation suivante :

$$\rho_f^+ = \int \frac{d\vec{r}d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) = V \int \frac{k^2 dk d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) = V \int \frac{\omega^2 d\omega d\Omega}{(2\pi\hbar c)^3} \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) \quad (\text{G.15})$$

Cette intégrale sur les fréquences est évaluée en utilisant la fonction delta en énergie  $\delta(E_m - E_n + \hbar\omega)$ . Pour effectuer cette évaluation, nous utilisons la propriété  $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$  et  $\int f(x)\delta(x-a) dx = f(a)$ . Nous obtenons alors le taux de désintégration par unité d'angle solide, pour une polarisation donnée :

$$\frac{d\Gamma}{d\Omega} = \left| \left\langle m \left| \vec{\mathbf{J}}_{\vec{k}} \cdot \vec{\epsilon}_{i,\vec{k}} \right| n \right\rangle \right|^2 \frac{e^2 \omega}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0 \hbar} \quad (\text{G.16})$$

Le deuxième terme dans cette expression provient de l'intégration de la fonction delta en énergie. Il représente le nombre de photons émis par unité de temps et par unité d'angle solide. En général, nous nous intéressons à la puissance rayonnée par unité d'angle solide, obtenue en multipliant cette expression par l'énergie  $\hbar\omega$  du photon :

$$\frac{dP}{d\Omega} = \left| \langle m | \vec{J}_k \cdot \vec{\epsilon}_{i,k} | n \rangle \right|^2 \frac{e^2 \omega^2}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0} \quad (\text{G.17})$$

**Rayonnement dipolaire électrique** Explorons maintenant le calcul de l'élément de matrice :

$$\int \langle m | \vec{J}_k | n \rangle d\vec{r} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \int \vec{J}(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad (\text{G.18})$$

L'élément de matrice  $\langle m | \vec{J}(\vec{r}) | n \rangle$  devient rapidement négligeable lorsque  $|\vec{r}|$  dépasse le rayon atomique, car les fonctions d'onde atomiques décroissent exponentiellement pour des distances supérieures au rayon de Bohr. Les seules valeurs de  $\vec{r}$  qui contribuent effectivement à l'intégrale sont celles pour lesquelles  $\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1$ , étant donné que la longueur d'onde ( $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ ) du photon émis (environ  $10^{-7}$  m) est beaucoup plus grande que la taille de l'atome (environ  $10^{-10}$  m). Ceci est dû au fait que l'énergie au repos  $mc^2$  de l'électron est grande par rapport à son énergie cinétique. Le rapport  $\frac{v}{c}$  d'un électron atomique est de l'ordre de la constante de structure fine  $\alpha \approx \frac{1}{137.037\dots}$ , caractéristique de la force électromagnétique. Pour une énergie donnée, l'impulsion caractéristique d'un électron atomique est grande (et la distance caractéristique petite) par rapport à celles d'un photon de même énergie.

Nous allons maintenant utiliser l'approximation dipolaire, où nous négligeons complètement le produit  $\vec{k} \cdot \vec{r}$ , ce qui équivaut à remplacer  $\vec{J}_k$  par  $\vec{J}_0$ . Cependant,  $\vec{J}_0$  est simplement la somme des impulsions de tous les électrons de l'atome, c'est-à-dire

$$\vec{J}_k \stackrel{\text{dip}}{\approx} \vec{J}_0 = \frac{1}{2m} \sum_i \int d\vec{r} \left( \vec{P}_i \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) + \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \vec{P}_i \right) = \frac{1}{m} \sum_i \vec{P}_i = \frac{\vec{P}}{m} \quad (\text{G.19})$$

où  $\vec{P}$  est la quantité totale de mouvement.

Maintenant, pour calculer l'élément de matrice  $\langle m | \vec{P} | n \rangle$ , nous pouvons utiliser le fait que

$$\vec{P}_i = \frac{m}{i\hbar} [\vec{R}_i, \hat{H}_0] \quad (\text{G.20})$$

où  $\hat{H}_0$  est l'hamiltonien non perturbé de l'atome (seule l'énergie cinétique contribue à ce commutateur).<sup>1</sup>

Observons que le terme du côté droit de l'expression (G.20) se révèle être précisément la vitesse  $\vec{R}_i$  de l'électron, conformément à l'équation de mouvement de Heisenberg. À partir de la relation (G.20), en désignant par  $\vec{R}$  la somme des positions des électrons, soit  $\vec{R} = \sum_i \vec{R}_i$ , il devient possible d'écrire :

$$\frac{\vec{P}(t)}{m} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{R}(t), \hat{H}_0], \quad (\text{G.25})$$

---

1. Nous pouvons utiliser le fait que le commutateur  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$  lorsque  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  sont des opérateurs dépendant de coordonnées mutuellement indépendantes. Ainsi, nous pouvons calculer la dérivée temporelle de  $\vec{A}(t)$  avec  $\vec{A}(t) = \exp(i\hat{H}t/\hbar)\vec{A}\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$  en utilisant les résultats de la mécanique quantique :

$$\frac{d}{dt} \vec{A}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \vec{A}(t)] + \frac{\partial \vec{A}(t)}{\partial t}. \quad (\text{G.21})$$

Si  $\vec{A}(t)$  ne dépend pas explicitement du temps,

$$\frac{d}{dt} \vec{A}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \vec{A}(t)] \quad (\text{G.22})$$

Dans notre cas,  $\vec{A}(t) = \vec{R}_i$  avec  $\hat{H} = \sum_i (\hat{H}_{0i} + \hat{W}_{0i})$  ne dépend pas explicitement du temps ; avec  $\hat{H}_0 = \sum_i \hat{H}_{0i}$  et  $\hat{H}_{int} = \sum_i \hat{W}_i$ . Or  $[\vec{R}_i, \hat{W}_i] = 0$  donc

$$m \frac{d}{dt} \vec{R}_i(t) = \frac{im}{\hbar} [\hat{H}_0, \vec{R}_i(t)] \quad (\text{G.23})$$

donc

$$\vec{P}_i(t) = \frac{im}{\hbar} [\hat{H}_0, \vec{R}_i(t)] \quad (\text{G.24})$$

L'élément de matrice recherché est alors donné par

$$\langle m | \vec{J}_0 | m \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle m | [\vec{R}, \hat{H}_0] | n \rangle = \frac{E_n - E_m}{i\hbar} \langle m | \vec{R} | n \rangle = \frac{\omega}{i} \langle m | \vec{R} | n \rangle \quad (\text{G.26})$$

avec  $\hbar\omega = E_n - E_m$ .

Si nous définissons l'opérateur du dipôle électrique des électrons comme  $\vec{D} = -e\vec{R}$ , la puissance rayonnée devient

$$\frac{dP}{d\Omega} = |\langle m | \vec{D} \cdot \vec{\varepsilon}_{i,\vec{k}}^* | n \rangle|^2 \frac{\omega^4}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0} \quad (\text{G.27})$$

où  $\vec{\varepsilon}_{i,\vec{k}}$  est la polarisation du photon émis.

La somme sur les polarisations des photons peut être effectuée comme indiqué précédemment, avec le résultat

$$\left[ \frac{dP}{d\Omega} \right]_{\text{non pol}} = \langle m | \vec{R}_\perp | n \rangle \cdot \langle m | \vec{R}_\perp | n \rangle^* \frac{e^2 \omega^4}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0} \quad (\text{G.28})$$

où  $\vec{R}_\perp$  est la projection de  $\vec{R}$  sur le plan perpendiculaire à  $\vec{k}$ .

En supposant que les états atomiques  $m$  et  $n$  ont des nombres quantiques magnétiques nuls ( $m = 0$ ), le moment dipolaire est dirigé le long de l'axe de quantification  $z$ , donné par le vecteur unitaire  $\hat{z}$ . Nous avons alors  $\vec{D} = d_0 \hat{z} = -e \langle m | \vec{Z} | n \rangle \hat{z}$ . En utilisant l'expression de  $\frac{d\Gamma}{d\Omega} = \frac{dP}{d\Omega} \frac{1}{\hbar\omega}$ , nous pouvons évaluer l'élément de matrice du dipôle  $D$  dans l'équation (G.27), ce qui nous amène à l'expression de la durée de vie spontanée :

$$\frac{d\Gamma}{d\Omega} = \frac{\omega^3 |d_0|^2}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0} \sum_i |\hat{z} \cdot \hat{\varepsilon}_{i,\vec{k}}^*|^2 = \frac{\omega^3 |d_0|^2}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0} \sin^2 \theta \quad (\text{G.29})$$

<sup>2</sup>

Lorsque  $\vec{k}$  forme un angle  $\theta$  avec l'axe  $\hat{z}$ , en utilisant l'expression  $d\Omega = 2\pi \sin(\theta) d\theta$  et le résultat de l'intégrale  $\int \sin^3(\theta) d\theta = 4/3$ , nous pouvons obtenir le taux total d'émission :

$$\Gamma = \int \frac{d\Gamma}{d\Omega} d\Omega = \frac{\omega^3 |d_0|^2}{3\pi c^3 \epsilon_0 \hbar}. \quad (\text{G.31})$$

Si nous remplaçons  $d_0$  par  $-ea$ , où  $a_0$  est le rayon de Bohr, nous obtenons  $\frac{\Gamma}{\omega_0} \simeq \alpha \frac{\omega_0^2 a_0^2}{c^2}$  où la structure fine  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \simeq \frac{1}{137.037\dots}$  et  $\omega_0$  est la fréquence angulaire de l'électron sur son orbite. Or dans l'atome d'hydrogène  $\alpha \simeq \frac{\omega_0 a_0}{c}$  ce qui donne  $\frac{\Gamma}{\omega_0} \simeq \alpha^3$ . Ainsi, la durée de vie associée au processus d'émission spontanée,  $\frac{2\pi}{\Gamma}$ , est nettement plus longue que la période de révolution d'un électron sur son orbite,  $\frac{2\pi}{\omega_0}$ .

Classiquement, on a  $\Gamma_{\text{cl}} = \frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 m c^3} \omega^2$ . En comparant cette expression avec celle de la mécanique quantique donnée en (G.31), on constate que  $\Gamma = \Gamma_{\text{cl}} f_{mn}$ , avec  $f_{mn} = \frac{2m}{\hbar} \omega_{mn} |\langle m | \vec{Z} | n \rangle|^2$ . Cette grandeur est sans dimension et est désignée sous le nom de force d'oscillateur de la transition.

2.

$$\sum_{\hat{\varepsilon} \perp \vec{k}} |\hat{\varepsilon} \cdot \vec{X}|^2 = \vec{X} \cdot \vec{X}^* - \frac{(\vec{k} \cdot \vec{X})(\vec{k} \cdot \vec{X}^*)}{k^2}. \quad (\text{G.30})$$



# Index

Ensemble Thermodynamique Général  
(GGE), 35

Schrödinger non linéaire (NS), 4



# Index des noms propres

Ensemble Thermodynamique Général  
(GGE), Ensemble de Gibbs

Général (GGE), 35