

---

# Condensation de Bose hors-équilibre dans un gaz quantique non isolé

Stage de recherche - Phytem master première année

Timothé ALEZRAA

Sous la supervision de Alexander Schnell et André Eckardt  
Institute for Theoretical physics

Quantum Non-Equilibrium Dynamics Group  
Technische Universität, Berlin

04/2022 - 07/2022

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Bases théoriques pour les systèmes quantiques ouverts</b>	<b>2</b>
1.1	Approche générale des Equations maîtresses de Lindblad . . . . .	3
1.2	Microscopic approach . . . . .	3
1.3	Modèle de Bose-Hubbard en champ moyen, en présence de bains thermiques	4
1.4	On ajoute une source de chaleur, une aiguille chaud ( hot needle ) ou un forçage periodique . . . . .	6
1.4.1	Hot needle . . . . .	7
1.4.2	Periodic driving . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Résultats de simulations</b>	<b>9</b>
2.1	Configuration à l'équilibre . . . . .	9
2.2	Hot needle . . . . .	10
2.3	Floquet heating . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Calendrier synthétique du déroulement du stage</b>	<b>15</b>
<b>4</b>	<b>Résumé / Abstract</b>	<b>16</b>
<b>5</b>	<b>Références</b>	<b>17</b>

# 1 Bases théoriques pour les systèmes quantiques ouverts

On considère un système quantique  $S$  décrit par un hamiltonien  $H_S$  agissant dans un espace de Hilbert  $\mathcal{H}_S$ , Dans un environnement décrit par  $H_E$  dans  $\mathcal{H}_E$ . Ces deux sous-systèmes interagissent, donc l'hamiltonien total dans  $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$  est décrit par un terme additionnel  $H_{int}$

$$\text{On écrit } H_{tot} = H_S \otimes 1 + 1 \otimes H_E + H_{int}$$

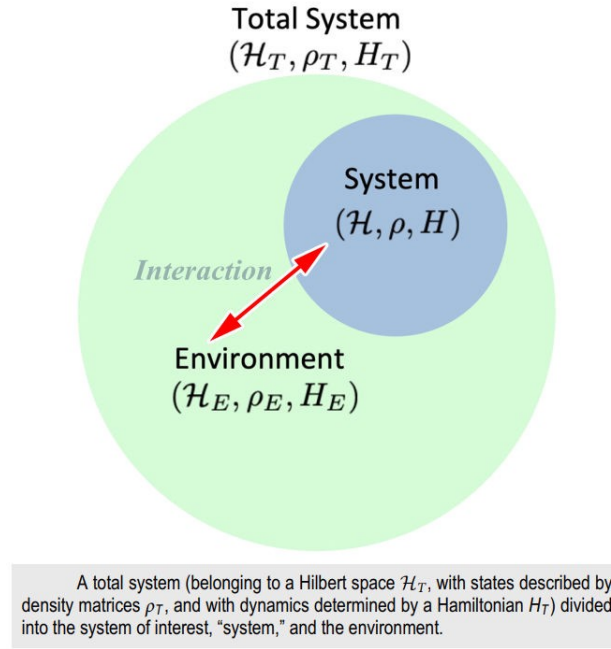


FIGURE 1 – Un système composé de deux sous-systèmes, graph by Daniel Manzano[5]

Quand c'est clair, on n'écrira pas le 1 pour une écriture plus fluide.

Pour n'importe quel espace de Hilbert  $\mathcal{H}$  avec base  $\{|\psi_j\rangle\}$ , avec une probabilité  $p_j$  du système d'être dans l'état  $|\psi_j\rangle$ , on définit l'opérateur densité  $\rho = \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|$ . L'équivalent de l'équation de Schrodinger pour cet opérateur est l'équation de Liouville-Von neumann :

$$\partial_t \rho = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] \quad (1)$$

(Qui suit directement de l'équation de Schrodinger) Quand le système total est un composite de deux systèmes  $S$  et  $E$  (notre cas), avec bases  $\{|\psi_i\rangle\}$  et  $\{|\phi_j\rangle\}$ , on définit l'opérateur densité réduit, comme dans [2],

$$\rho_S = Tr_E(\rho_{tot}) = Tr_E(\sum_i \sum_j p_{ij} (|\psi_i\rangle \otimes |\phi_j\rangle) (\langle \psi_i| \otimes \langle \phi_j|)) = \sum_i (\sum_j p_{ij}) |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

Cet opérateur de densité est positif, semi-défini et hermitien, et est l'observable principal que nous allons utiliser pour décrire l'évolution du système. En particulier, l'espérance de tout observable peut être exprimé avec l'opérateur de densité :

$$\forall \hat{A} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}), \langle \hat{A} \rangle \equiv Tr(\hat{A} \hat{\rho})$$

## 1.1 Approche générale des Equations maîtresses de Lindblad

On ne va pas aller dans trop de détails parce que ce n'est pas forcément pertinent ici, mais les concepts de cartes dynamiques et de Lindbladiens restent utiles à savoir. A partir de maintenant,  $\rho = \rho_S = Tr_E(\rho_{tot})$  par défaut, on ne note pas le S. A chaque instant on peut écrire  $\rho(t) = \mathcal{P}(t)\rho(0)$  et si la carte dynamique  $\mathcal{P} \in \mathcal{L}(\mathcal{L}(\mathcal{H}))$  satisfait plusieurs conditions (préservation de la trace, propriété de semi-groupe, continuité et complète positivité), le théorème Choi Kraus nous dit qu'on peut écrire  $\mathcal{P}\rho = \sum_i V_i^\dagger \rho V_i$ , et  $\mathcal{P}(t) = e^{\mathcal{L}t}$ , avec  $\mathcal{L}$  étant le générateur du semigroupe, ce qu'on appelle le *Lindbladien*. On peut alors montrer que l'évolution de  $\rho$  peut s'écrire comme, [5],[3].

$$\partial_t \rho = \mathcal{L}\rho = \underbrace{-i[H, \rho]}_{\text{Coherent term}} + \underbrace{\sum_{i,j} R_{ij} (L_{ij} \rho L_{ij}^\dagger - \frac{1}{2} \{L_{ij}^\dagger L_{ij}, \rho\})}_{\text{Dissipative term}} \quad (2)$$

où  $\{\cdot\}$  est l'anti-commutateur,  $L_i$  sont les opérateurs de Lindblad, (ou opérateur de sauts), calculés à partir des opérateurs de Kraus  $V_i$  [3].

Ceci est la forme générale des équations maîtresses lindbladiennes : il y a deux parties : un terme d'évolution cohérente, une partie dissipative. On peut noter que le  $H$  dans le premier terme n'est pas exactement  $H_S$ , mais on le verra dans l'approche microscopiques et les approximations que nous allons faire.

## 1.2 Microscopic approach

On va dans la représentation de Dirac : Après la transformation  $A \rightarrow \tilde{A} = e^{i(H_S+H_B)t} A e^{-i(H_S+H_B)t}$ , l'équation de von-Neumann devient :

$$\partial_t \tilde{\rho}_{tot} = -i[H_{int}, \tilde{\rho}_{tot}] \Rightarrow \tilde{\rho}_{tot}(t) = \tilde{\rho}_{tot}(0) - \int_0^t i[H_{int}(s), \tilde{\rho}_{tot}(s)] ds \quad (3)$$

En intégrant cette équation et en l'injectant dans le terme de droite de l'équation de von-Neumann, et en calculant la trace partiel sur l'environnement, tout en approximant que  $[H_{tot}, \rho_{tot}(0)] = 0$  [1],[3]

$$\partial_t \tilde{\rho}(t) = - \int_0^t ds Tr_E [H_{int}(t), [H_{int}(s), \tilde{\rho}_{tot}(s)]] \quad (4)$$

Nous allons maintenant faire deux approximations essentielles :

- On suppose que le couplage entre le système et l'environnement est faible, si bien qu'on peut écrire  $\rho_{tot} = \rho \otimes \rho_E$  à chaque instant. C'est l'approximation de *Born*.

- Après, on suppose que l'évolution est markovienne : le futur d'un système ne dépend que de son état présent, et non de son passé, i.e dans l'intégrale  $\rho(s) \rightarrow \rho(t)$ . C'est l'approximation de *Markov*.

Ensuite, on décompose  $H_{int} = \sum_\alpha s_\alpha \otimes \Gamma_\alpha$

On arrive alors à l'équation de Redfield

$$\partial_t \tilde{\rho}(t) = \sum_{\alpha, \beta} \int_0^{+\infty} ds ([\tilde{s}_\alpha(t), \tilde{s}_\beta(t-s) \tilde{\rho}(t)] C_{\alpha\beta}(s) + h.c.) \quad (5)$$

avec h.c. voulant dire hermitian conjugate, et la fonction de corrélation du réservoir  $C_{\alpha\beta}(t) = \langle \tilde{\Gamma}_\alpha(t) \tilde{\Gamma}_\beta(0) \rangle$

A partir de cette équation, on va obtenir les équations du mouvement de nos états : pour ça nous devons choisir de représenter l'opérateur densité dans une base de  $\mathcal{H}$  : Le choix naturel ( mais pas le seul) serait la base des fonctions propres de l'hamiltonien  $H_S |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle$ . Les éléments de matrice deviennent alors  $\rho_{nm} = \langle n | \rho | m \rangle$ , et en projetant cette equation de cette façon, on arrive à l'équation, voir [3]

$$\partial_t \rho_{nm} = -\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) \rho_{nm} + \frac{1}{2} \sum_{k,l} [R_{ml,nk} \rho_{kl} - R_{kn,kl} \rho_{lm} + R_{nk,ml}^* \rho_{kl} - R_{lm,lk}^* \rho_{nk}] \quad (6)$$

Avec le tenseur des taux de transitions ( rates )  $R_{nm,kl} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha,\beta} s_{mn}^\alpha s_{kl}^\beta W_{\alpha\beta}(E_k - E_l)$  calculé à partir de la transformée de Laplace de la fonction de corrélation du réservoir/bain  $W$  et des éléments de matrice  $s_{nm}^\alpha = \langle n | \tilde{s}^\alpha | m \rangle$ . Ces équations forment un set fermé d'ODE couplées, ce que l'on cherchait.

### 1.3 Modèle de Bose-Hubbard en champ moyen, en présence de bains thermiques

Dans cette section nous allons expliquer nous allons expliciter quel système on va étudier ici.

On considère  $N$  bosons (en interaction ou non) dans une chaine optique 1D de  $M$  sites dans un environnement qu'on va appeler bain global : Cela va thermaliser les bosons à la température du bain, ceci à chaque site. Puisque le système est de taille finie, on peut observer de la condensation de Bose-Einstein (BEC) apparaître même si on est en 1D. Ces bosons peuvent tunneler de site en site, coutant l'énergie  $J$ , ce qu'on appelle le paramètre de tunnel. voir [3] page 90 pour une discussion sur le modèle.

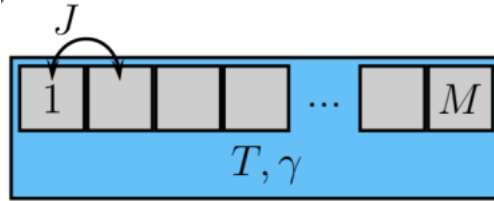


FIGURE 2 – schéma de réseau optique 1D couplé à un bain global

L'hamiltonien de notre système total consiste de différents termes que nous allons expliquer, en commençant par l'hamiltonien de Bose-Hubbard où  $H_S, H_B, H_{SB}$  représentent respectivement l'hamiltonien du système, celui du bain et celui du couplage(system-Bath).

$$H = H_S + H_B + H_{SB} = -J \sum_i (\hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1}) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + H_B + H_{SB} \quad (7)$$

$H_B$  est souvent décrit comme une somme d'oscillateurs harmoniques du bain,  $H_B = \sum_\alpha \frac{1}{2} m_\alpha \omega_\alpha \hat{r}_\alpha^\dagger \hat{r}_\alpha$ , et le terme de couplage peut être séparé en deux parties :  $H_{SB} = \gamma \hat{v} \otimes \hat{\Gamma}$  où  $\hat{v}$  est l'opérateur de couplage au système, et  $\hat{\Gamma}$  est l'opérateur de couplage au bain. On

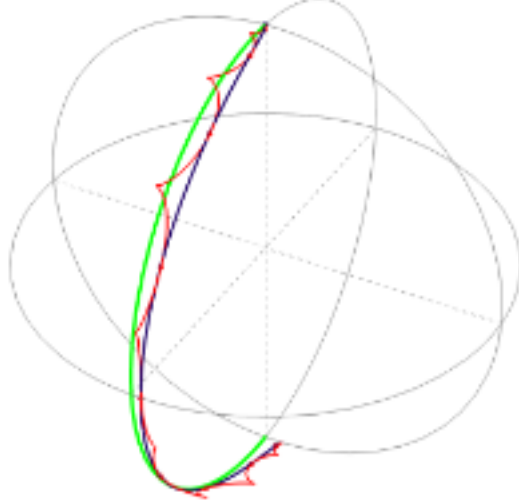


FIGURE 3 – Illustration de la RWA, ici pour un système à deux niveaux représenté dans une sphère de Bloch : le terme très oscillant est négligé.

va prendre  $\hat{v} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \sum_i \hat{n}_i$  où  $\hat{n}_i$  est l'opérateur de comptage, comptant le nombre de bosons au site  $i$ .

A partir de ça, on pourrait simplement calculer le tenseur 4D des taux de transition et utiliser l'équation de Redfield trouvée précédemment, mais avant de plonger dans ces détails, nous allons essayer de trouver une équation plus simple, utilisant une approximation bien connue, l'approximation séculaire, ou Rotating Wave Approximation (RWA) : Le temps caractéristique de la dissipation de l'énergie dans le bain est très grand devant celui de l'évolution cohérente du système. Ceci est équivalent à dire que le tenseur des taux de transition est diagonal :  $R_{nm,kl} \propto \delta_{nk} \delta_{ml}$ , on nomme donc  $R_{kq} \equiv R_{kq,kq}$ . En effet, cela signifie que les éléments non-diagonaux, i.e l'inverse du temps de dissipation, est très petit que les différences d'énergies du système, i.e l'inverse du temps d'évolution cohérente du système. Cela veut aussi dire que la matrice densité est diagonale dans la bases des vecteurs propres du hamiltonien.

Pour  $M$  sites, On rappelle les états de Fock de la forme  $|\vec{n}\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$ . Dans cette base, les opérateurs de saut deviennent  $L_{ij} = |i\rangle\langle j| \rightarrow \hat{L}_{ij} = \hat{L}_{i \leftarrow j} = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$  avec  $i, j = 1, \dots, M$ . Notre objectif est de trouver l'évolution de l'occupation de chaque site, de même que l'occupation des différents modes, dans d'autres bases que celui local qu'on utilise pour l'instant. Dans la base 'locale' des sites  $|i\rangle$  on va utiliser les indices  $i$  et  $j$ , et dans la base des vecteurs propres du hamiltonien, on va utiliser les indices  $k$  et  $q$  :

$$\hat{H} = \sum_{i,j} c_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j = \sum_{k,q} \epsilon_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_q \delta_{kq}$$

Alors on arrive à l'équation de Pauli

$$\dot{n}_k = \sum_q R_{kq} n_q (1 + n_k) - R_{qk} n_k (1 + n_q) \quad (8)$$

Ici on a calculé la valeur moyenne  $n_k = \langle \hat{n}_k \rangle = \text{Tr}(\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \hat{\rho})$  Avec une matrice des taux de transition plus usuelle qui suit la règle d'or de Fermi  $R_{kq} = R_{k \leftarrow q} = \frac{2\pi}{\hbar} \gamma^2 |\langle k | \hat{v} | q \rangle|^2 g(E_k -$

$E_q$ ) qui represente la transittion du mode q au mode k, où règne la densité d'états  $g(\Delta E) \propto \frac{\Delta E}{e^{\Delta E/k_B T} - 1}$ . Le terme en  $(1 + n)$  provient de la nature bosonique des particules, voir [9] sur le regroupement des bosons. Pour changer d'une base à une autre, on fait agir une transformation unitaire :

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j = \sum_{kq} \langle k|i \rangle \langle j|q \rangle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_q \quad (9)$$

Maintenant que nous avons une équation qui régit la population des modes propres du système, il nous reste à trouver ces modes en diagonalisant l'hamiltonien. Le problème est que notre hamiltonien est quartique dans la base  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$  à cause du terme supplémentaire qui tient compte des interactions entre les bosons du même site. Pour pouvoir exprimer plus facilement  $H$  dans notre base, nous allons effectuer une théorie du champ moyen en utilisant la décomposition de Wick, en disant que  $\frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \approx 2U n_i \hat{n}_i$  (voir [9],[8],et [2] pour une jolie démonstration du théorème de Wick).

Alors on peut écrire :

$$H_{ij} = \langle i | \hat{H} | j \rangle = \begin{bmatrix} 2Un_1 & -J & 0 & \cdots & \\ -J & 2Un_2 & -J & 0 & \vdots \\ 0 & -J & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & -J \\ \cdots & 0 & -J & 2Un_M & \end{bmatrix}$$

(10)

Cette matrice est celle que nous allons diagonaliser pour obtenir les modes d'énergie. Voici donc un aperçu de ce que nous allons faire :

A partir d'une configuration initiale, nous calculons l'Hamiltonien du champ moyen puis nous le diagonalisons. Cela nous donne les modes et les taux sde transition. Cependant, ces taux dépendent de l'état de notre système (à cause du terme d'interaction), nous devons donc choisir un pas de temps pertinent pour calculer l'évolution de la population, pour ensuite calculer  $H$  à nouveau à partir de la nouvelle population, le diagonaliser à nouveau et ainsi de suite, jusqu'à ce qu'un état stationnaire soit atteint. Sans interactions à l'équilibre, nous nous attendons à trouver les statistiques BE  $n_k \rightarrow \frac{1}{e^{E_k/kT} - 1}$ , mais il serait intéressant de voir comment le système se comporte lorsque nous ajoutons des interactions, ou si nous ajoutons de l'énergie au système pour le mettre hors d'équilibre.

## 1.4 On ajoute une source de chaleur, une aiguille chaud ( hot needle ) ou un forçage periodique

Le système est maintenant couplé à un bain froid global (c'est-à-dire que chaque site est en contact avec lui). Pour créer des états particuliers, nous ajouterons une source d'énergie locale, plus particulièrement un bain chaud local sur un seul site (ce que nous appelons une "hot needle"), ou nous ajouterons un forçage périodique sur un site, ce que l'on appelle le chauffage de Floquet.

### 1.4.1 Hot needle

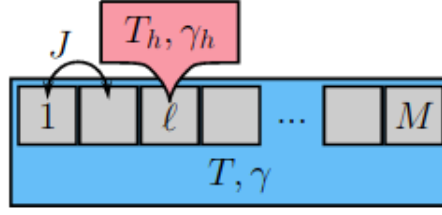


FIGURE 4 – schéma de reseau optique 1D relié à un bain froid global et à un bain chaud local, la hot needle

Dans le cas d'une aiguille chaude placée sur un site  $l = 1, \dots, M$ , nous la modélisons en ajoutant un nouveau terme au tenseur de taux :  $R_{kq}^{hot} = \gamma_{hot}^2 |\langle k|l\rangle \langle l|q\rangle|^2 g_{hot}(E_k - E_q)$

Où  $g_{hot}$  est la même fonction de densité mais avec une température plus élevée  $T_{hot} \gg T$

Dans l'équation de Redfield, le taux devient

$$R_{nm,kq}^{hot} = \gamma_{hot}^2 \langle n|l\rangle \langle l|m\rangle \langle k|l\rangle \langle l|q\rangle g_{hot}(E_k - E_q)$$

### 1.4.2 Periodic driving

On ajoute un forçage périodique à un site :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_D(t) = \hat{H}_0 + A(1 + \cos(\omega t))\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \quad (11)$$

Par conséquent, nous perdons la notion d'état stationnaire que nous recherchions auparavant : Pour observer les effets de cette conduite, plongeons dans les bases de la théorie de Floquet.

Prenons un hamiltonien périodique de période  $\tau$ ,  $\hat{H}(t + \tau) = \hat{H}(t)$ , dans un espace de Hilbert arbitraire  $\mathcal{H}$ . Par analogie avec le théorème de Bloch dans les cristaux, le théorème de Floquet nous dit que les états propres du système ont une certaine forme :

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-i\epsilon_n t/\hbar} |u_n(t)\rangle \quad (12)$$

Avec les modes de Floquet  $|u_n(t)\rangle = |u_n(t + \tau)\rangle$  périodiques dans le temps avec la même période que le système, et la quasi énergie  $\epsilon_n$ , définie modulo  $\hbar\omega$ . Chaque fonction d'onde peut être décrite sur la base des modes de Floquet, et nous pouvons donc prédire l'évolution plus facilement :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-i\epsilon_n t/\hbar} |u_n(t)\rangle \quad (13)$$

with  $c_n = \langle u_n(0)|\psi(0)\rangle$ . L'évolution temporelle peut être séparée en deux contributions : la *micromotion* périodique dans les modes de Floquet, et le déphasage entre chaque mode causé par les différents facteurs  $e^{-i\epsilon_n t/\hbar}$ .

Pour trouver ces modes et énergies propres de Floquet, nous pouvons diagonaliser l'opérateur d'évolution temporelle sur un cycle  $U$  défini comme  $|\psi(t + T)\rangle = \hat{U}(t + T, t) |\psi(t)\rangle$ , puis calculer l'hamiltonien de Floquet défini par :

$$e^{-i\hat{H}_F^{(t_0)}T} = \hat{U}(t_0 + T, t_0) \quad (14)$$



Cela nous donne les modes de Floquet au temps  $t_0$ . Ensuite, nous pouvons trouver les modes de Floquet à chaque  $t$  en calculant l'évolution des modes avec l'équation de Schrodinger, sans oublier le facteur de phase. Cet Hamiltonien de Floquet indépendant du temps décrit l'évolution de notre système de manière stroboscopique à chaque période  $\tau$ . L'équation de taux que nous utilisons est maintenant sur la population dans l'occupation des modes de Floquet : voir la thèse de Wustman[10] et l'article d'Eckardt [4].

Les quasi-énergies sont la généralisation des énergies pour un Hamiltonien indépendant du temps, et les modes de Floquet sont la généralisation des états propres indépendants du temps : on peut voir cela simplement en disant que le problème indépendant du temps est la limite où  $T$  tend vers 0, donc les modes de Floquet ne dépendent effectivement plus du temps.

$$\dot{\rho}_{ij} = - \sum_{kl} M_{ijkl} \rho_{kl} , \text{ with}$$

$$M_{ijkl} = \frac{1}{2} \left( \sum_m R_{imkm} \delta_{jl} + \sum_m R_{jmlm}^* \delta_{ik} - R_{ljki} - R_{kilj}^* \right) + \frac{i}{\hbar} (\epsilon_i - \epsilon_j) \delta_{ik} \delta_{jl}$$

avec  $R_{ijkl}$  le tenseur des taux de la même forme que montré à la fin de 1.4.1.

$$R_{ljki} = \gamma^2 \sum_K x_{lj}(K) x_{ki}^*(K) g(\epsilon_i - \epsilon_k - K\hbar\omega) \quad (15)$$

Avec  $x(K)$  la transformée de Fourier de l'élément de la matrice de couplage dans la base du mode de Floquet. [7]

## 2 Résultats de simulations

Au vu du grand nombre de paramètres qu'on fait varier ( $N, M, J, U, T, \gamma, l, A, \omega, \gamma_h, T_h \dots$ ) et que le système est très sensible aux instabilités computationnelles (on calcule les rates qu'une fois tous les timesteps définis, et dépendant de la valeur de  $U$ , il faut être méthodique sur l'analyse des données, et faire un compromis entre computabilité et ambition (grosses valeurs de  $N, M, U \dots$  font que la convergence est bien plus lente.)

### 2.1 Configuration à l'équilibre

Regardons d'abord la matrice de densité à l'équilibre, sans interactions et sans driving, à très basse température. Nous exprimons cette matrice de densité en deux bases : une de sites  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$  et une d'énergie  $\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_q$ .

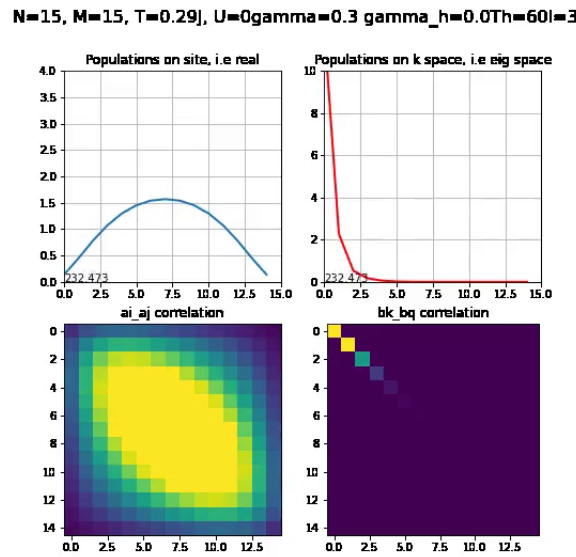


FIGURE 5 – Simulation for a standard equilibrium configuration,  $U=0, \gamma_h = 0$ , no periodic driving

Les éléments diagonaux de  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$  correspondent au nombre de particules à chaque site, et les non diagonaux à la corrélation à deux points entre le site  $i$  et le site  $j$ . Nous voyons qu'un BEC se produit au mode 0, et l'occupation correspond bien à la distribution BE.

Sans interactions, l'hamiltonien décrit sur la base  $a_{iaj}$  ne dépend pas de l'état du système, donc les états propres et le tenseur de taux restent les mêmes pendant la dynamique du système. Lorsque nous allons jouer sur l'interaction, cela ne sera pas le cas.

Ajoutons maintenant une interaction répulsive, en activant  $U > 0$ .

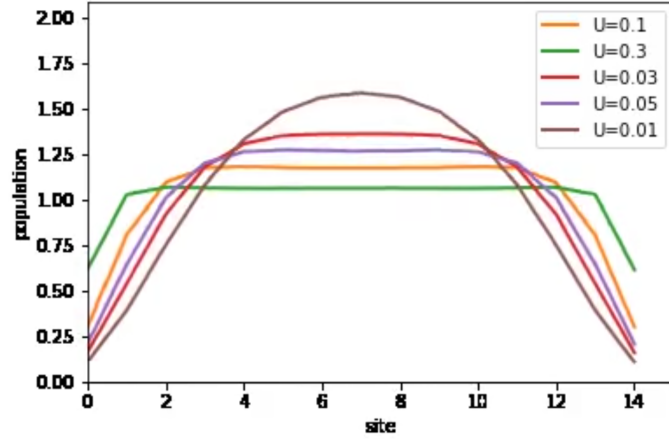


FIGURE 6 – Final state for different values of  $U$ .

On voit que les interactions "aplatissent" la courbe : c'est simplement l'aspect répulsif de l'interaction qui est illustré. Sinon, les interactions ne semblent pas avoir d'effet direct sur le BEC comme on peut le voir dans le graphique suivant, à part baisser la qualité du condensat. Mais peut-être que les interactions changeront plus de choses lorsque nous ajouterons une autre source de chaleur en contact avec le système.

**$N=15, M=15, T=0.29J, U=0.1, \gamma=0.3, \gamma_h=0.0, \hbar=60, l=3$**

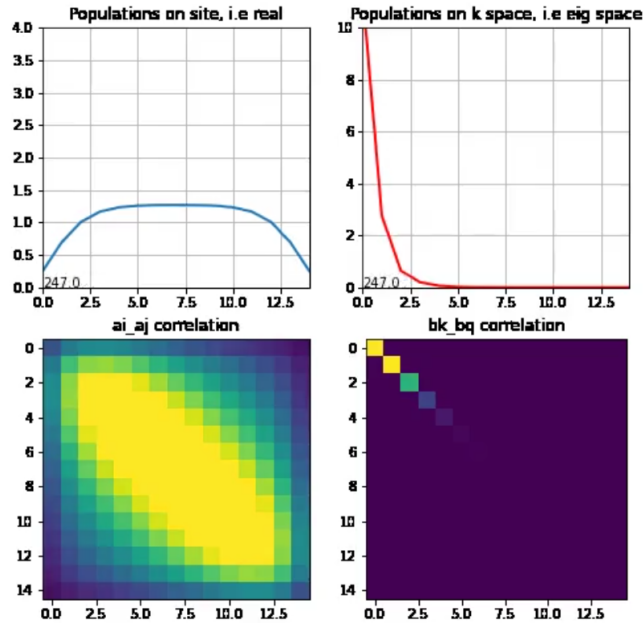


FIGURE 7 –  $U=0.1$  example, on condensation we don't see much

## 2.2 Hot needle

Nous constatons que l'aiguille chaude fonctionne comme un "sélecteur de mode" pour les modes qui ont un nœud sur le même site que celui sur lequel nous plaçons la hot needle.

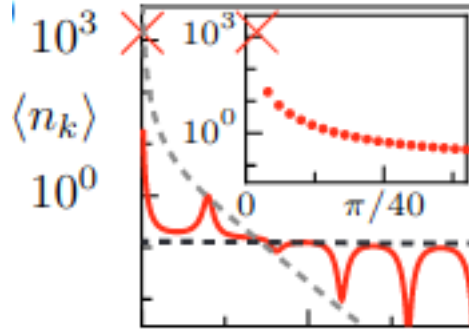


FIGURE 8 – Illustration of the mode selection process

On constate un condensat dans un mode différent du mode 0, on remarque que le mode correspondant est  $k_c = \frac{\pi}{\ell}$  puis ses multiples ; Pour ces modes sélectionnés, ils suivent la distribution BE. Les autres modes sont équivalents comme si la température globale était celle du bain, donc une distribution quasi uniforme. On comprend ça en reprenant la définition des taux de transition et en prenant la limite  $|\epsilon_k - \epsilon_q| \ll T_{bath}$ .

On remarque que ce condensat peut se former, même pour une température globale supérieure à la température critique de condensation à l'équilibre ! Une manière intuitive d'interpréter ce résultat est de regarder les flux de chaleurs dans le système, qui tendent à s'équilibrer : Il y a deux flux de chaleur  $I_{hot}, I_{cold}$  provenant de chacun des bains, et alors que la hot needle apporte beaucoup d'énergies au système via le site 1, on comprend que moins il ya de particules dans le site 1, moins la chaleur pourra se propager. Alors se forme un condensat justement dans un mode qui est découplé de la hot needle [6].

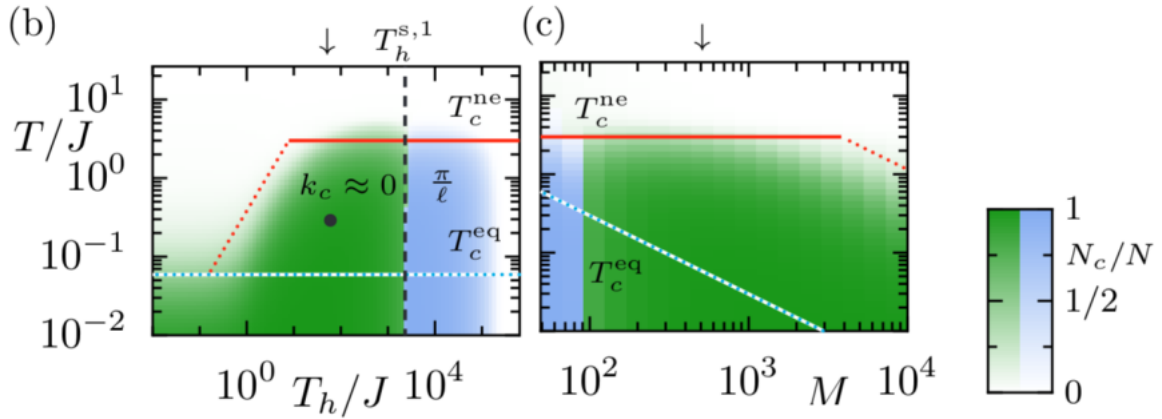
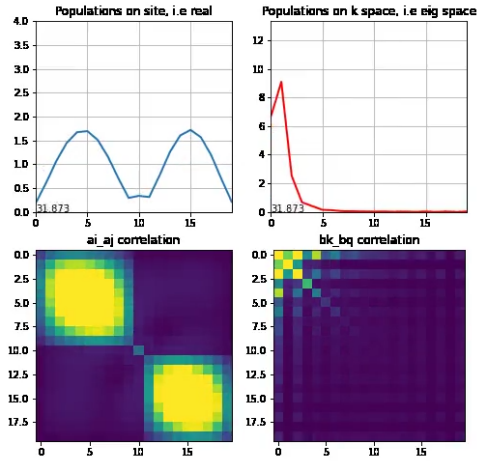


FIGURE 9 – Le pourcentage de condensation est indiqué par la couleur, on voit donc qu'à  $T_h$  élevé, la température critique effective de condensation augmente.

Nous pouvons voir deux régimes dépendant de la valeur de  $\gamma$  : un avec de fortes corrélations hors diagonale, un sans :

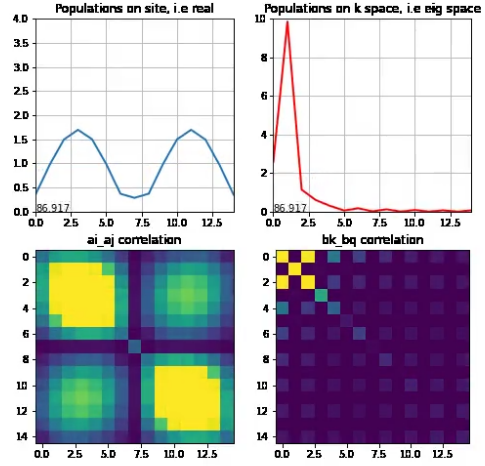
Si nous diagonalisons la matrice de densité, nous pouvons voir quelles orbitales sont occupées : nous voyons que celle avec une seule orbitale occupée n'a pas beaucoup de corrélation non diagonale, et celle avec deux orbitales occupées avec à peu près le même nombre d'occupation présente des corrélations non diagonales. Une façon de comprendre

N=20, M=20, T=0.29J, U=0.0 gamma=1.0 gamma\_h=0.5 Th=60J=10



(a) One with no correlation

N=15, M=15, T=0.29J, U=0.0 gamma=0.3 gamma\_h=0.5 Th=60J=7



(b) One with correlation

FIGURE 10 – Comparaison d'un état stable avec et sans corrélation off-diagonales

comment les corrélations disparaissent est de prendre un problème plus simple : le système à deux niveaux, juste pour revenir un peu aux bases.

Nous prenons deux orbitales  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$  avec un nombre d'occupation  $p_1, p_2$ . La matrice de densité peut alors être exprimée

$$\rho = p_1 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + p_2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2| = \begin{bmatrix} p_1 + p_2 & p_1 - p_2 \\ p_1 - p_2 & p_1 + p_2 \end{bmatrix} \quad (16)$$

On voit donc que, dans le cas où les nombres d'occupation sont proches, les corrélations hors diagonale s'annulent.

Pour l'instant, nous avons pris  $T_{hot} = 60J, T_{cold} = 0.29J$ , mais on remarque que la valeur de  $T_{hot}$  influe sur quel mode est sélectionné :

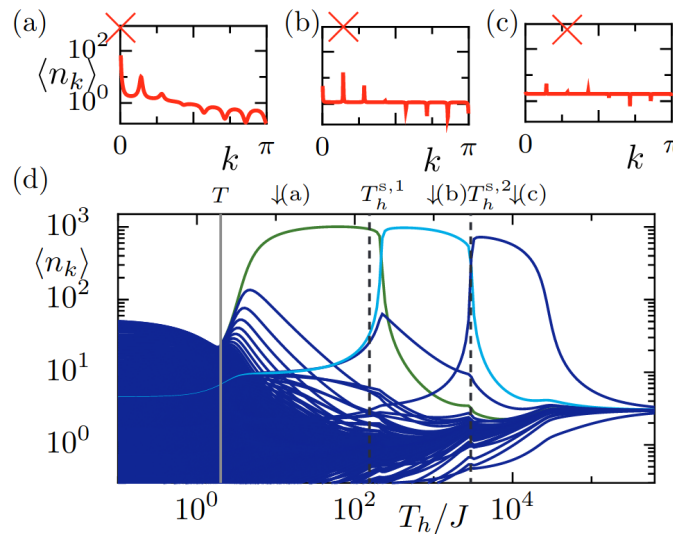


FIGURE 11 – Reproduction pour différentes température de hot needle. (a),(b),(c) sont les distributions en moment k aux trois températures caractéristiques.

On remarque qu'à basse température de hot needle, le système n'est pas assez " perturbé " donc il reste judicieux pour le système de rester en condensat au mode 0. Lorsque que l'on augmente  $T_{hot}$  petit à petit, on passe alors dans des régions où le mode du condensat est  $\pi/l$  puis  $2\pi/l$ , puis le phénomène de condensation disparaît et les modes deviennent équivalents. On note cependant qu'à des valeurs extrême de température, nos hypothèse, comme l'approximation de Born par exemple, peuvent ne plus être valable. Le rôle des interactions sur les modes sélectionnés reste encore à déterminer.

## 2.3 Floquet heating

Cette partie là est toujours du travail en cours, mais on va mettre les résultats principaux.

On parle de floquet engineering ( ingénierie ) lorsque que la fréquence de forçage est très grande devant la bande d'énergie du système isolé  $4J$ . Ici, on s'intéresse à la condensation dans l'espace des modes de Floquet

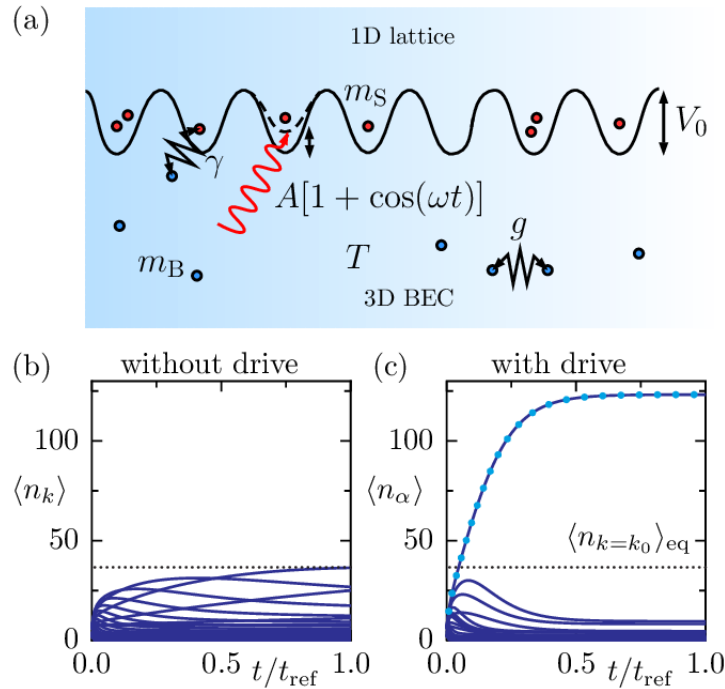


FIGURE 12 – (a) Principe du chauffage Floquet, on applique un forçage périodique local; (b) Dynamique d'occupation dans le cas où il n'y a pas de forçage (c) cas avec forçage, on voit apparaître un phénomène de condensation;  $t_{ref}$  est le temps caractéristique de relaxation du système

De manière équivalente à la situation de hot needle, on observe de la condensation de Bose avec forçage, à la température où normalement la statistique de Bose Einstein nous indique que le condensat n'est pas encore formé. En effet, la condensation apparaît comme signe de la compétition entre la chaleur amenée par le forçage périodique et la dissipation de cette chaleur dans le bain global.

Là encore, en fonction de l'intensité de forçage  $A$ , on trouve des effets dynamiques non triviaux, qui dépendent également  $\gamma$ .

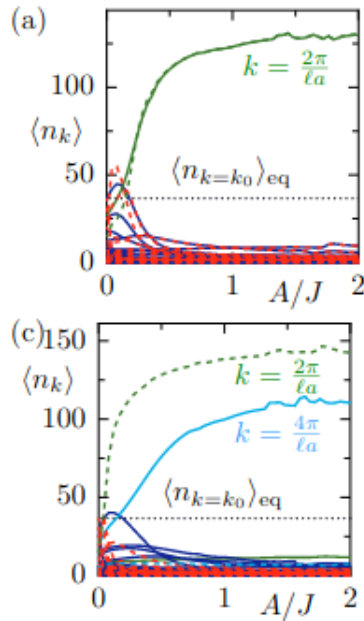


FIGURE 13 – occupations des modes  $k$  pour  $t = t_{ref}$  ( lignes pleines ) et pour  $t \rightarrow \infty$  ( lignes pointillées)

On remarque que, pour la figure du bas, pendant la dynamique du système, il passe par un état de condensat métastable d'ordre plus élevé que celui lorsqu'on fait tendre le temps vers l'infini. Là encore, l'apparition de condensats dans des modes multiples de  $\pi/l$  est de sorte à ce que le mode occupé soit découplé du forçage. Ces graphiques ont été calculés avec la RWA ( c'est d'ailleurs une des raisons pour laquelle la taille du système est assez importante) et sans interactions. L'abandon de la RWA et l'ajout d'interactions sont les prochaines étapes, mais elle compliquent tout car alors les modes de Floquet eux-mêmes changent au fil du temps, alors qu'avant ils restaient identiques, et la complexité augmente comme expliqué précédemment. Il faut alors choisir des échelles de temps adaptées pour mettre à jour les modes de Floquet de manière discrète, comme l'on a fait précédemment.

### 3 Calendrier synthétique du déroulement du stage

Mois d'avril : Arrivée au labo, lecture de passages du BreuerPetrucione et du Carmichael : Bases des équations maîtresses Lindbladiennes, Lecture de l'article d'alex sur la hot needle, reproduction de l'équation de Pauli pour reproduire dans une situation à l'équilibre puis avec hot needle. Ensuite, on ajoute des interactions dans le système et ça fait changer la manière d'apprécier le système.

Mois de mai : On enlève l'hypothèse de RWA, alors tout devient bien plus lent à simuler, il faut développer des nouvelles stratégies sur quels timestep utiliser dans le programme pour mettre à jour les taux de transitions au fur et à mesure ( ils ne changent pas lors de l'intégration). Comme on passe des tenseur de rang 2 à tenseurs de rang 4, on se retrouve contraint à travailler avec des systèmes plus petits ( On passe de  $M, N = 50$  à 100, environ seulement 20, voire 30 ou 40 en utilisant le réseau informatique du labo et la division des tâches sur tous les ordis présents). D'autant plus que le système est encore plus susceptible aux conditions initiales, donc trouver un état stationnaire passe par la dynamique alors qu'on pouvait juste parfois résoudre le problème stationnaire ( donc "juste" un système d'équations).

Mois de Juin : Etude du formalisme de Floquet, d'abord l'article d'Alex dessus, puis celui d'Andre. Ensuite, je lis la thèse de Wustmann où il y a les dérivations nécessaires. Ensuite on essaie de mettre ça en place numériquement, et ça a pris du temps. En parallèle on va plus en profondeur en jouant sur les paramètres du problème avec hot needle avec et sans interactions, en voulant reproduire les effets connus et découvrir ce qu'il se passe quand on y ajoute des interactions par exemple. Toutes ces simulations sont lancées sur le réseau informatique du labo où les ordinateurs sont mutualisés.

Et tout le stage fut parsemé de nombreuses conférences, colloques et présentations sur de nombreux sujets, fait par des étudiants de TU Berlin, ou par des chercheurs de TU Berlin, ou alors sur des chercheurs d'autres pays. Ces conférences sont des très bonnes expériences pour stimuler nos réflexions, avoir de nouvelles idées ou alors vouloir s'inspirer des méthodes expliquées pour mon propre sujet. Quelques sujets en vrac : Topological Chern insulators using bosons in a lattice - Classical resonances in QM - Quantum state engineering with optimal control and reinforcement learning - Theoretical challenges in quantum computations...



## 4 Résumé / Abstract

La physique statistique des gaz quantiques se concentre majoritairement sur le système isolé, et à partir de quelques valeurs intensives ( la température, la pression, le potentiel chimique), on arrive à déduire les équilibres thermiques que va atteindre le système. Lorsque le système est forcé loin de l'équilibre et en contact avec l'extérieur, nous devons revenir aux bases de la mécanique quantique et développer de nouveaux outils pour comprendre la dynamique de ces états, si il existe ou non des états stables, et si ils sont intéressants ou non. Dans cette perspective, on va ici s'intéresser à la condensation de Bose d'un gaz de bosons, avec et sans interactions, non isolé d'un environnement sur lequel on va jouer, pour arriver à trouver des nouvelles distributions de populations dans des modes spécifiques. Ces méthodes qu'on étudie sont alors primordiales pour comprendre le contrôle d'atomes froids, ou la création de champs magnétiques artificiels. En utilisant le chauffage Floquet ou l'introduction d'un contact local très chaud, on arrive à créer des condensats non triviaux, et des états stables hors-équilibres.

The statistical physics of quantum gases focuses mainly on isolated system, and from a few intensive values (temperature, pressure, chemical potential), we can deduce the thermal equilibrium that the system will reach. When the system is pushed far from equilibrium and in contact with an environment, we have to go back to the basics of quantum mechanics and develop new tools to understand the dynamics of these states, if there are stable states or not, and if they are interesting or not. In this perspective, we are interested in the Bose condensation of a gas of bosons, with and without interactions, not isolated from an environment on which we will play, to find new distributions of populations in specific modes. These methods that we study are then essential to understand the control of cold atoms, or the creation of artificial magnetic fields. By using Floquet heating or the introduction of a very hot local contact, one can create non-trivial condensates, and out of equilibrium stable states.

## Table des figures

1	Un systeme composé de deux sous-systemes, graph by Daniel Manzano[5] .	2
2	schéma de réseau optique 1D couplé à un bain global . . . . .	4
3	Illustration de la RWA, ici pour un système à deux niveaux représenté dans une sphère de Bloch : le terme très oscillant est negligé. . . . .	5
4	schéma de reseau optique 1D relié à un bain froid global et à un bain chaud local, la hot needle . . . . .	7
5	Simulation for a standard equilibrium configuration, $U=0, \gamma_h = 0$ , no periodic driving . . . . .	9
6	Final state for different values of $U$ . . . . .	10
7	$U=0.1$ example, on condensation we don't see much . . . . .	10
8	Illustration of the mode selection process . . . . .	11
9	Le pourcentage de condensation est indiqué par la couleur, on voit donc qu'à $T_h$ élevé, la température critique effective de condensation augmente. . . . .	11
10	Comparaison d'un état stable avec et sans corrélation off-diagonales . . . . .	12
11	Reproduction pour différentes température de hot needle. (a),(b),(c) sont les distributions en moment $k$ aux trois températures caractéristiques. . . . .	12
12	(a) Principe du chauffage Floquet, on applique un forçage périodique local ; (b) Dynamique d'occupation dans le cas où il n'y a pas de forçage (c) cas avec forçage, on voit apparaître un phénomène de condensation ; $t_{ref}$ est le temps caractéristique de relaxation du système . . . . .	13
13	occupations des modes $k$ pour $t = t_{ref}$ ( lignes pleines ) et pour $t \rightarrow \infty$ ( lignes pointillées) . . . . .	14

## 5 Références

- [1] Breuer and Petruccione. *The theory of open quantum systems*. 2002.
- [2] Yvan Castin. Simple theoretical tools for low dimension bose gases. 2016.
- [3] Alexander Schnell PhD dissertation. *Dissipative state engineering in quantum many-body systems*. 2019.
- [4] André Eckardt and Egidijus Anisimovas. High-frequency approximation for periodically driven quantum systems from a floquet-space perspective. *New Journal of Physics*, 17(9) :093039, 2015.
- [5] Daniel Manzano. A short introduction to the lindblad master equation. 2020.
- [6] Alexander Schnell. High-temperature nonequilibrium bose condensation induced by a hot needle. 2017.
- [7] Alexander Schnell. Floquet-heating-induced non equilibrium bose condensation in an open optical lattice. 2022.
- [8] Daniel Vorberg. Generalized bose-einstein condensation into multiple states in driven-dissipative systems. 2013.
- [9] Daniel Vorberg. Nonequilibrium steady states of ideal bosonic and fermionic quantum gases. 2015.
- [10] Waltraut wustmann. *Statistical mechanics of time-periodic quantum systems*. 2010.