

Etude de la dynamique hors équilibre des gaz de Bosons unidimensionnels

Guillaume Themeze

▶ **To cite this version:**

Guillaume Themeze. Etude de la dynamique hors équilibre des gaz de Bosons unidimensionnels. Optique [physics.optics]. Université Paris-Saclay, 2025. Français. ⟨NNT : 2025UPASP137⟩. ⟨tel-05507646⟩

HAL Id: tel-05507646

https://pastel.hal.science/tel-05507646v1

Submitted on 12 Feb 2026

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

université PARIS-SACLAY

Étude de la dynamique hors équilibre des gaz de Bosons unidimensionnels

Study of the out-of-equilibrium dynamics of one-dimensional Bose gases

Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay

École doctorale n°572, Ondes et Matières
Spécialité de doctorat : Physique
Graduate School : Physique, Référent : Institut d'optique

Thèse préparée dans l'unité de recherche **Université Paris-Saclay**, **Institut d'Optique Graduate School**, **CNRS**, **Laboratoire Charles Fabry**, 91127, Palaiseau, France, sous la direction de **Isabelle BOUCHOULE**, Directrice de thèse CNRS.

Thèse soutenue à Paris-Saclay, le 4 novembre 2025, par

Guillaume THÉMÈZE

Composition du jury

Membres du jury avec voix délibérative

Dmitry PETROV Directeur de recherche (LPTMS)	Président
Laurent VERNAC Professeur, Universités Sorbonne (LPL)	Rapporteur
Nicolas CHERRORET Chargé de recherche (LKB)	Rapporteur
Martin ROBERT DE SAINT VINCENT Chargé de recherche (LPL)	Examinateur

Membres du jury sans voix délibérative

Jérôme DUBAIL Chargé de Recherche, (CESQ)	Membre invité

THESE DE DOCTORAT
NNT : 2025UPASP137

université PARIS-SACLAY

ÉCOLE DOCTORALE
Ondes et matière (EDOM)

Titre : Étude de la dynamique hors équilibre des gaz de Bosons unidimensionnels
Mots clés : Quantique - Intégrabilité - Unidimensionnel - Boson - Dynamique

Résumé : Cette thèse porte sur l'étude expérimentale et théorique des gaz quantiques unidimensionnels hors équilibre, réalisée avec des atomes ultra-froids de rubidium 87 piégés sur une puce atomique. Ce dispositif permet un confinement transverse fort et un contrôle longitudinal précis, ouvrant la voie à l'exploration de situations exotiques comme l'analogue quantique du pendule de Newton.

Dans ce régime, les interactions sont décrites par le modèle intégrable de Lieb-Liniger, résolu par la méthode de Bethe Ansatz. Les systèmes ainsi obtenus ne se thermalisation pas selon Gibbs, mais via l'ensemble de Gibbs généralisé (GGE). J'ai initié un travail théorique sur le calcul des fluctuations d'observables, nécessaire pour tester cette description, sans toutefois mener de mesures expérimentales correspondantes.

L'hydrodynamique généralisée (GHD) complète le GGE en décrivant la dynamique à grande échelle. Dans ce cadre, nous avons étudié des dynamiques de type « problème de Riemann », et développé expérimentalement un dispositif de micro-miroirs (DMD) pour façonner les potentiels et sonder localement la distribution de rapidité, ouvrant la voie à des situations hors équilibre contrôlées.

Enfin, nous avons exploré des alternatives au confinement magnétique sur puce, en particulier la mise en place d'un piège dipolaire optique offrant une flexibilité accrue dans l'ingénierie de potentiels longitudinaux.

En résumé, cette thèse combine avancées expérimentales et théoriques sur la préparation et la manipulation de gaz bosoniques intégrables, la mise en œuvre d'outils de mesure locaux, et l'articulation avec les cadres modernes de relaxation et de dynamique (GGE et GHD).

Title : Study of the out-of-equilibrium dynamics of one-dimensional Bose gases
Keywords : Quantum – Integrability – One-dimensional systems – Bosons – Dynamics

Abstract : This thesis focuses on the experimental and theoretical study of one-dimensional quantum gases out of equilibrium, using ultracold rubidium-87 atoms trapped on an atom chip. This setup provides strong transverse confinement and precise longitudinal control, enabling the exploration of exotic situations such as the quantum analogue of Newton's cradle.

In this regime, interactions are described by the integrable Lieb–Liniger model, solvable by the Bethe Ansatz method. Such systems do not thermalize according to the standard Gibbs ensemble, but rather via the Generalized Gibbs Ensemble (GGE). I initiated theoretical work on the calculation of observable fluctuations, which are necessary to test this description, although no corresponding experimental measurements were carried out during this thesis.

Generalized Hydrodynamics (GHD) complements the GGE by describing the large-scale dynamics of integrable gases. In this framework, we investigated dynamics of the "quantum Riemann problem" type, and developed an experimental device based on a Digital Micromirror Device (DMD) to shape potentials and locally probe the rapidity distribution, paving the way for controlled out-of-equilibrium configurations.

Finally, we explored alternatives to chip-based magnetic confinement, in particular the implementation of an optical dipole trap providing increased flexibility in engineering longitudinal potentials.

In summary, this thesis combines experimental and theoretical advances in the preparation and manipulation of integrable bosonic gases, the development of novel local probing tools, and the connection to modern theoretical frameworks for relaxation and dynamics (GGE and GHD).

Université Paris-Saclay

École doctorale Ondes et Matières
Laboratoire Charles Fabry

Étude de la dynamique hors équilibre des gaz de bosons unidimensionnels

Thèse de doctorat

présentée par
Guillaume THÉMÈZE

Directeur de thèse : Isabelle Bouchoule

Soutenue le 04 Novembre 2025

Une version étendue et mise à jour de ce manuscrit est disponible à l'adresse suivante :

https://themeze.github.io/quantum-mechanics-thesis/

Liste des acronymes

ABA Algebraic Bethe Ansatz. 182

AC Alternating Current. 83

AOM Acousto-Optic Modulator. 80, 88, 119, 137, 139–141

Au aurum. 82

BA Bethe Ansatz. x, xiii, xiv, 1, 11, 15, 17, 18, 21, 23, 25, 29, 31, 44, 65, 66, 70, 73, 143, 178–183, 187–190

BCB benzocyclobuténe. 82

BCS Bardeen–Cooper–Schrieffer. 11

C2N Centre de nanosciences et de nanotechnologies. 82, 84

CCD Charge-Coupled Device. 89

CESQ Centre européen de sciences quantiques. v, 201

DBR Distributed Bragg Reflector. 137, 138

DC Direct Current. 79, 83, 84

DFB Distributed Feedback. 80, 137, 138

DMD Dispositif de Micromirroirs Digitaux. xiv, 79, 87–89, 95, 96, 98, 99, 103, 106, 107, 119, 141

FBA Fermionic Bethe Ansatz. 17

GE Gibbs Ensemble. 27, 52, 57

GGE Generalized Gibbs Ensemble. x, xi, xiii, xiv, 10, 21, 23–31, 33, 35, 38, 57, 59, 60, 62–65, 67, 68, 70, 71, 75, 78, 95, 143, 144, 199

GHD Generalized Hydrodynamics. x, xiii, xiv, 39, 42–48, 51–53, 55–57, 79, 90, 95–98, 101–106, 108–112, 116, 117, 143, 197, 199

GOE Gaussian Orthogonal Ensemble. 184–186

GP Gross–Pitaevskii. 10, 52, 53, 55–57, 90, 97

GUE Gaussian Unitary Ensemble. 186–189

LCF Laboratoire Charles Fabry. v, xiii, 38, 82, 84

LDA Local Density Approximation. 40, 42, 95

LL Lieb–Liniger. x, xiv, 1, 10, 11, 14, 15, 17, 19–21, 24, 25, 28, 38, 42–44, 51–53, 56, 59, 60, 64, 65, 76, 77, 86, 101, 103, 143, 174, 178–181, 184, 187, 189, 199

MFT Macroscopic Fluctuation Theory. 71

NLS Nonlinear Schrödinger. 10

PBS Polarizing Beam Splitter. 80

PMO Piège Magnéto-Optique. 79–84

qBEC quasi Bose–Einstein Condensate. xiii, xiv, 36–38, 52, 53, 85, 90, 96, 97

QED Quantum Electrodynamics. 11

RMT Random Matrix Theory. 184, 189

SiC silicon carbide. 82

SYRTE Systèmes de Référence Temps-Espace. 80

TA Tapered Amplifier. 80, 138–141

TBA Thermodynamic Bethe Ansatz. xiv, 21, 23, 25, 30, 34, 35, 38, 39, 44, 65, 73, 75, 77, 95, 96, 110, 143, 199

TF Thomas-Fermi. 53, 90, 93

TG Tonks-Girardeau. 36–38

YY Yang–Yang. 30–33, 35, 60, 70, 72, 74

Remerciements

Ce manuscrit présente les résultats scientifiques obtenus au terme de trois années de travail doctoral. Cette thèse n'aurait pu aboutir sans le soutien, l'aide et les échanges de nombreuses personnes, que je tiens ici à remercier chaleureusement.

Je remercie tout d'abord les rapporteurs et les membres du jury de thèse : Laurent Vernac, Nicolas Cherroret, Dmitry Petrov et Martin Robert de Saint Vincent, pour avoir accepté d'évaluer ce travail et pour le temps conséquent qu'ils ont consacré à la lecture attentive de ce manuscrit.

J'ai réalisé cette thèse au Laboratoire Charles Fabry (LCF), je remercie donc sincèrement son directeur, Patrick Georges, pour son accueil, sa disponibilité et le cadre de travail qu'il a su offrir tout au long de ces années.

En commençant à rédiger ces remerciements, la première personne qui m'est naturellement venue à l'esprit est Isabelle Bouchoule, responsable de l'équipe Puce, qui m'a encadré tout au long de cette thèse. Je mesure aujourd'hui pleinement la chance que j'ai eue de t'avoir comme directrice de thèse. Ta patience, ta rigueur et ton excellence scientifique m'ont énormément appris. Après un stage de recherche effectué sous ta direction, ma thèse a débuté par une régate, symbole d'une aventure humaine et scientifique commencée sous les meilleurs auspices. Tu m'as appris à tenir la barre, à prendre des décisions, et, progressivement, à formuler et défendre mon propre avis scientifique. L'effort pédagogique que tu as déployé, ta disponibilité et ta bienveillance ont été déterminants pour mon évolution en tant que chercheur.

Je souhaite consacrer un paragraphe particulier à Léa Dubois. Bien que nous ayons partagé le même bureau, l'accompagnement que tu m'as apporté va bien au-delà de ce cadre. Arrivé lors de la dernière année de ta thèse, j'ai bénéficié de ta grande patience et de ton réel sens pédagogique. Les échanges que nous avons eus, qu'ils portent sur la physique ou sur des sujets plus larges, ont toujours été très enrichissants. Tes élèves de classes préparatoires ont aujourd'hui beaucoup de chance de t'avoir comme enseignante. Ta gentillesse et ta bienveillance ont profondément marqué mon quotidien au laboratoire.

Je remercie également Florence Nogrette, pour ses nombreux conseils au laboratoire et son accompagnement attentif lors d'étuvages délicats. Grâce à ton expérience et à ta vigilance, tout s'est toujours déroulé dans les meilleures conditions.

Je ne remercierai jamais assez Jérôme Dubail, chargé de recherche au Centre européen de sciences quantiques (CESQ) à Strasbourg. Merci pour cette collaboration scientifique, pour les nombreuses idées et discussions qui m'ont permis de mieux comprendre la physique et les structures mathématiques sous-jacentes aux gaz de bosons unidimensionnels. Ce fut un honneur de pouvoir contribuer, même modestement, à ces réflexions.



(a) F.NOGRETTE (b) J.DUBAIL (c) I.BOUCHOULE (d) L.DUBOIS (e) G.THEMEZE

FIGURE 1 – (a) Florence Nogrette, (b) Jérôme Dubail, (c) Isabelle Bouchoule, (d) Léa Dubois, (e) moi-même.

Je tiens également à remercier Yasser Bezzaz, avec qui j'ai partagé mon stage de recherche. Merci pour les nombreuses discussions mathématiques et physiques, toujours stimulantes. J'ai beaucoup apprécié ton dynamisme, ton sérieux et ton sens du travail en équipe.

Je remercie mes autres camarades de bureau, Charlie Leprince et Victor Gondret, avec qui j'ai partagé de nombreuses activités, ainsi que de précieux moments d'échange et de convivialité.

J'ai également une pensée pour Alfred Hammond, qui m'a formé bien avant le début de ma thèse, lors de la préparation à l'agrégation de physique à Montrouge ENS ULM. Je remercie également Roy Eid, avec qui j'ai eu de nombreuses discussions scientifiques et humaines très enrichissantes.

Un mot pour mon compatriote Ziyad Amodjee, avec qui nous aimions nous retrouver entre Réunionnais. Te voir aujourd'hui à l'INSP est une grande fierté.

Je remercie Denis Boiron, chercheur permanent, pour nous rappeler régulièrement qu'il est aussi important d'aller déjeuner. J'ai beaucoup apprécié ces attentions, et je te félicite pour ton rôle actuel de directeur du laboratoire.

Plus généralement, je remercie l'ensemble des membres du groupe Gaz Quantique. Je pense en particulier aux chercheurs permanents — Alain Aspect, Chris Westbrook, David Clément, Marc Cheneau, Thomas Bourdel, Thomas Chalopin et Vincent Josse — pour la dynamique scientifique et humaine qu'ils entretiennent au sein du groupe. Merci tout particulièrement à Marc C. pour avoir assisté à une répétition de soutenance. Je remercie également l'ensemble des stagiaires, doctorants et post-doctorants que j'ai rencontrés. L'ambiance au sein du groupe a été extrêmement agréable, et j'ai passé trois très belles années à échanger, débattre et discuter de sciences avec vous.

Au cours de ma thèse, j'ai eu l'opportunité d'effectuer plusieurs missions d'enseignement, en mécanique quantique, traitement du signal et lasers. Je remercie Rosa Tualle-Brouri, François Goudail, Bruno Luca, Jaffré Alexandre, Aymeric Van de Dalle et Clément Favey pour leur confiance, leur organisation et leur soutien dans ces missions pédagogiques.

Je souhaite également remercier mes quatre amis qui m'accompagnent depuis le magistère de physique : Anass Najlaoui, Ioaquin Moulanier, Thomas Clark et Romain Maccary. Vous m'avez non seulement aidé à mieux comprendre la physique, mais surtout à comprendre qu'il n'y a pas que les études dans la vie.

Je pense enfin à ma famille. Merci à ma sœur Émilie, à ma mère Nathalie et à mon père, pour leur soutien constant, leur confiance indéfectible et leur capacité à m'encourager même dans des domaines qu'ils ne connaissaient pas. Merci pour votre soutien sans faille pendant ces dix années passées loin de vous. Malgré les milliers de kilomètres, vous avez toujours su m'envoyer l'énergie et la chaleur de La Réunion.Pendant ces dix années, malgré la distance de dix mille kilomètres, votre présence a toujours été à mes côtés.

Je termine par une pensée toute particulière pour Phylidia, qui m'a soutenu quotidiennement pendant ces trois années. Tu as eu la force et le courage de m'accompagner durant une période très difficile. Ce soutien, souvent invisible, pour les autres, est pourtant essentiel. Merci pour tout.

Pourquoi étudier un système unidimensionnel ? Un exemple simple : les sphères dures

En lisant le titre de ce mémoire, ***Étude de la dynamique hors équilibre des gaz de bosons unidimensionnels***, un lecteur non initié pourrait légitimement se demander pourquoi s'intéresser à des systèmes unidimensionnels, qui semblent a priori très éloignés de notre réalité tridimensionnelle. L'objectif de cette petite introduction est d'illustrer, à l'aide d'un exemple simple et standard, l'intérêt fondamental de l'étude des systèmes de basse dimension. Nous considérons pour cela le modèle classique des *sphères dures*[1].

Les sphères dures en deux dimensions

Premièrement, considérons un ensemble de particules sphériques identiques se déplaçant librement dans un espace bidimensionnel muni de conditions aux limites périodiques[2]. Les particules interagissent uniquement par des collisions élastiques lorsqu'elles entrent en contact, sans interaction à distance.

Les sphères sont initialement disposées de manière aléatoire dans l'espace, et toutes sont au repos. À l'instant initial, on applique une impulsion à une seule sphère, par exemple en la frappant brièvement (la sphère rouge dans la figure 2a). Cette impulsion localisée constitue une excitation fortement hors équilibre du système.

Dans cet état initial, toute l'énergie cinétique est concentrée dans un seul degré de liberté. La distribution des vitesses est donc très éloignée de la distribution d'équilibre attendue, à savoir la distribution de *Maxwell–Boltzmann*. Au cours du temps, la sphère excitée entre en collision avec ses voisines, leur transmettant progressivement de l'énergie et de l'impulsion. Par une succession de collisions élastiques, l'excitation initiale se propage dans l'ensemble des degrés de liberté du système.

Après un temps suffisamment long, l'énergie initialement localisée est redistribuée de manière quasi uniforme entre toutes les particules. La distribution des vitesses converge alors vers la distribution de Maxwell–Boltzmann, qui est une loi gaussienne entièrement caractérisée par ses premiers moments (voir figure 2c). Cet état correspond à l'équilibre thermodynamique du système. Le processus par lequel un système isolé évolue spontanément vers un tel état est appelé *thermalisation*.

Un point fondamental est que, après relaxation, le système *oublie* la quasi-totalité de l'information microscopique sur ses conditions initiales (positions et vitesses individuelles des particules). Son état macroscopique est alors décrit par un nombre restreint de champs hydrodynamiques conservés :

$$\begin{aligned} n(\mathbf{x};t) &: \text{densité de particules,} \\ p(\mathbf{x};t) &: \text{densité d'impulsion,} \\ \varepsilon(\mathbf{x};t) &: \text{densité d'énergie.} \end{aligned}$$

1. Voir par exemple le cours en ligne très pédagogique de Jérôme Dubail au Collège de France : https://www.youtube.com/watch?v=t53C5hoXiw4 [Dub25].

2. Les conditions aux limites périodiques signifient que lorsqu'une particule quitte un côté du domaine, elle réapparaît instantanément du côté opposé avec la même vitesse. Elles permettent de simuler un système homogène et de taille infinie, en éliminant les effets de bord.

Ces quantités macroscopiques suffisent à décrire le comportement du système à grande échelle spatiale et temporelle, indépendamment des détails microscopiques. Cette perte d'information et cette description universelle sont au cœur de la physique statistique et de la thermodynamique.

On dit que ce système bidimensionnel est *ergodique*/*chaotique* : il explore de manière exhaustive son espace des phases au cours du temps, permettant ainsi la thermalisation et l'émergence d'un comportement macroscopique universel.

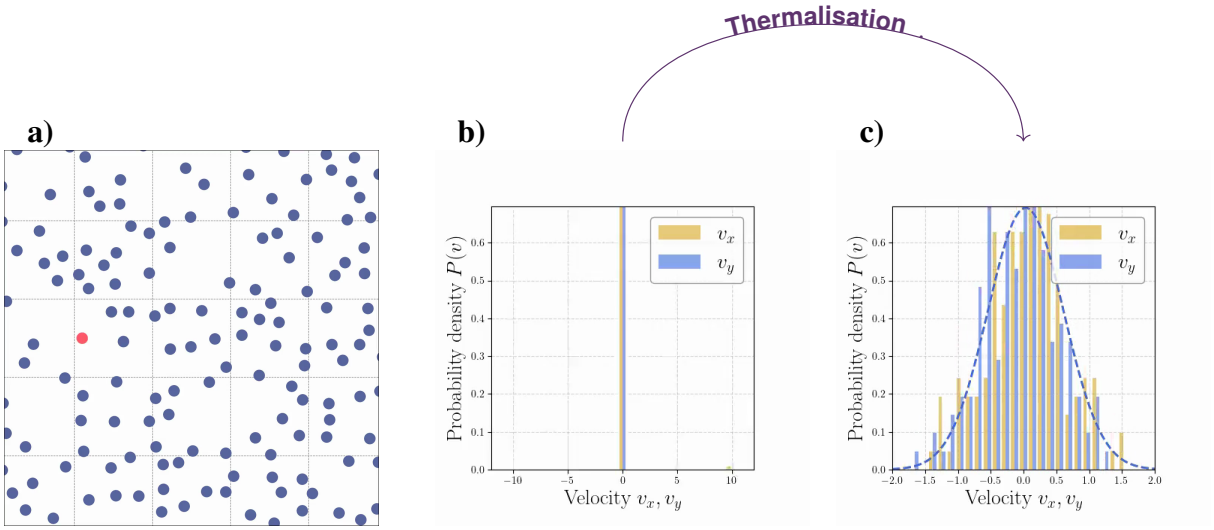


FIGURE 2 – a) Position des sphères dures en deux dimensions au cours du temps après avoir donné une impulsion initiale à une des sphères (sphère rouge). b) Distribution des vitesses des sphères immédiatement après l'impulsion initiale. c) Distribution des vitesses des sphères après *thermalisation*, qui suit la distribution de *Maxwell-Boltzmann*.
Avec le logiciel Adobe acrobat Reader DC, il est possible de lancer les animations en cliquant dessus. Ces simulations sont générés grace è une code écrit en Python. Les codes pythons et animation sont disponible sur un des dépots github associé à ce mémoire : `https://github.com/THEMEZE/N-Corps-elastiques-1D-2D`

Les sphères dures en une dimension

Maintenant, considérons le même ensemble de sphères dures, mais cette fois confinées à se déplacer le long d'une ligne unidimensionnelle avec des conditions aux limites périodiques . Comme précédemment, nous donnons une impulsion initiale à une des sphères (figure 3 a). Cependant, en raison de la contrainte unidimensionnelle, les collisions entre les sphères sont beaucoup plus restrictives. On remarque qu'à tout moment, une seule sphère est en mouvement. On connait ce phénomène depuis notre enfance ; c'est le même phénomène qu'avance le *pendule de Newton* (cf figure 3 b)).

Lorsqu'une sphère entre en collision avec une autre identique, elles échangent simplement leurs vitesses (figure 3 a). Cela signifie que la distribution des vitesses des sphères ne change jamais au cours du temps : la sphère qui a reçu l'impulsion initiale transmet simplement sa vitesse aux autres sphères au fur et à mesure des collisions, mais la distribution globale des vitesses reste inchangée (figure 3 c).

Contrairement au cas bidimensionnel, le système unidimensionnel ne parvient jamais à se thermaliser. Les grandeurs macroscopiques telles que la densité de particules, la densité d'impulsion et la densité d'énergie restent constantes et dépendent fortement des conditions initiales microscopiques (positions et vitesses individuelles des sphères). Le système conserve une mémoire complète de son état initial, ce qui empêche l'atteinte d'un état d'équilibre thermodynamique. Plus simplement, contraiment au cas bidimentionelle, trois nombres sont insuffisants pour décrire l'état du système unidimensionnel. Il faut en fait connaître la position et la vitesse de chaque sphère individuellement pour décrire complètement l'état du système à tout instant. Toute une fonction : la distribution des vitesses initiale, décrit complètement l'état du système à tout

instant. Plus formellement, on dit que le système unidimensionnel possède un grand nombre de *constantes du mouvement* (en fait autant que de degrés de liberté), ce qui empêche la thermalisation.

Ici, la contrainte dimensionnelle joue un rôle crucial en limitant les interactions possibles entre les particules. En une dimension, les particules ne peuvent pas contourner les autres, ce qui restreint considérablement la dynamique du système. Cette limitation conduit à une conservation stricte de la distribution des vitesses, empêchant ainsi le processus de thermalisation observé dans les dimensions supérieures.

Il est important de noter que ce comportement non-thermalisant n'est pas spécifique aux sphères dures, mais est une caractéristique générale des systèmes unidimensionnels avec des interactions courtes portées. De nombreux autres modèles unidimensionnels, qu'ils soient classiques ou quantiques, présentent également cette absence de thermalisation en raison de la contrainte dimensionnelle et des nombreuses constantes du mouvement associées.

Il en résulte que les systèmes unidimensionnels offrent un terrain d'étude fascinant pour explorer des phénomènes hors équilibre et des dynamiques non-thermalisantes, mettant en lumière l'importance de la dimensionnalité dans la physique statistique et la dynamique des systèmes complexes.

Ici pour une systeme de sphères dures en une dimension, le nombre de constantes du mouvement est égal au nombre de degrés de liberté (nombre de sphères). On dit que ce système est *non-ergodique/intégrable* : il ne thermalise pas et ne perd pas la mémoire de ses conditions initiales.

Dans la limite où le nombre de sphères devient très grand, on peut décrire la dynamique du système à l'aide d'une équation cinétique intégrable appelée *équation de Boltzmann–Enskog* intégrable. Cette équation permet de suivre l'évolution de la distribution des vitesses des sphères au cours du temps, en tenant compte des collisions élastiques entre elles. Cependant, en raison de l'intégrabilité du système, la distribution des vitesses reste inchangée, reflétant l'absence de thermalisation.

Dans le chapitre I, nous verrons que le modèle quantique des bosons en interaction de contact en une dimension (modèle de Lieb–Liniger) partage cette propriété d'intégrabilité, conduisant à une absence de thermalisation similaire à celle observée dans le modèle classique des sphères dures unidimensionnelles.

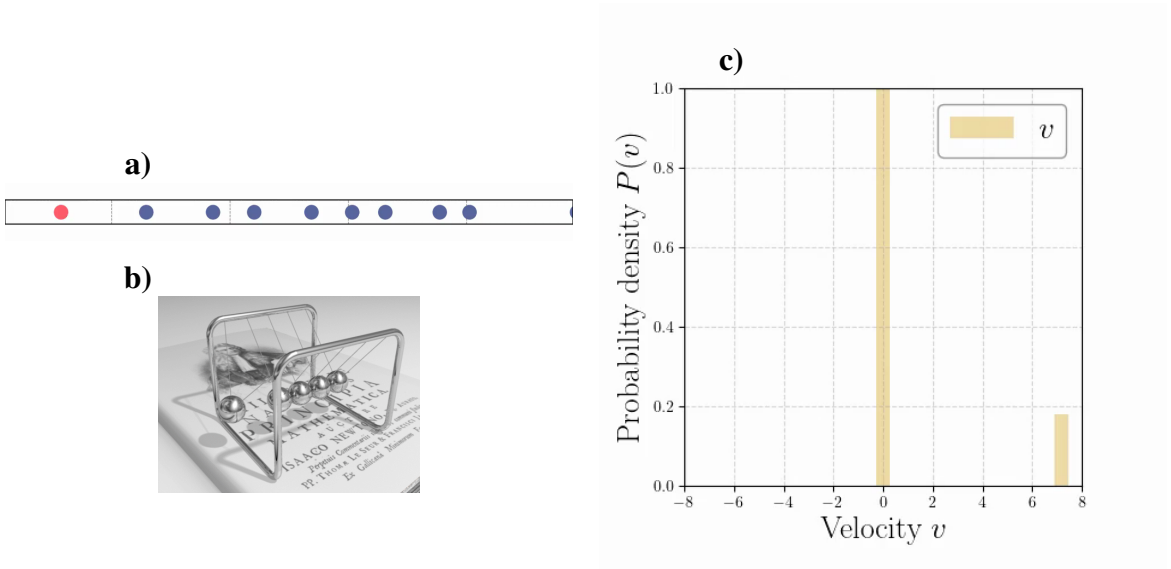


FIGURE 3 – a) Position des sphères dures en une dimension au cours du temps après avoir donné une impulsion initiale à une des sphères (sphère rouge). b) Illustration du *pendule de Newton extrait de l'animation disponible à l'adresse :* https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Newtons_cradle_animation_new.gif?uselang=fr. *c) Distribution des vitesses des sphères qui reste inchangée au cours du temps, empêchant la thermalisation.*
Avec le logiciel Adobe acrobat Reader DC, il est possible de lancer les animations en cliquant dessus. Ces simulations sont générés grace è une code écrit en Python. Les codes pythons et animation sont disponible sur un des dépots github associé à ce mémoire : https://github.com/THEMEZE/N-Corps-elastiques-1D-2D

Dinamique hors équilibre et intégrabilité en basse dimension

L'exemple des sphères dures illustre de manière élémentaire un fait central : la dynamique hors équilibre d'un système dépend de façon cruciale de sa dimension et de son degré d'intégrabilité. Alors que les systèmes ergodiques de dimension supérieure relaxent vers un état d'équilibre thermodynamique universel, les systèmes unidimensionnels intégrables présentent une dynamique radicalement différente, dominée par la présence d'un nombre extensif de constantes du mouvement.

Il est toutefois crucial de souligner que cette absence de thermalisation ne signifie en aucun cas que la dynamique soit triviale ou figée. Au contraire, les systèmes unidimensionnels intégrables présentent une riche phénoménologie hors équilibre. Une perturbation locale engendre la propagation balistique d'excitations cohérentes, dont la dynamique est fortement contrainte par les lois de conservation du système. Ces excitations peuvent former des structures persistantes à grande échelle, et conduire, à long temps, à des états stationnaires non thermiques.

Ces états stationnaires ne sont pas décrits par les ensembles statistiques usuels de la thermodynamique, mais par des *ensembles de Gibbs généralisés* GGE, qui prennent en compte l'ensemble — en principe infini — des charges conservées associées à l'intégrabilité du modèle. La connaissance de ces charges, ou de manière équivalente de la distribution des quasi-particules, est alors nécessaire pour caractériser complètement l'état macroscopique du système.

Dans un système intégrable, la description microscopique en termes de trajectoires individuelles devient inadaptée à grande échelle. La dynamique s'organise naturellement en termes de *quasi-particules*, dont les propriétés effectives sont fixées par l'intégrabilité du modèle. Dans le cas quantique, ces quasi-particules émergent de la solution de Bethe Ansatz et sont caractérisées par un paramètre spectral continu, la *rapidité* (notée «θ»).

Pour le modèle de Lieb–Liniger, l'état macroscopique du système dans la limite thermodynamique est entièrement décrit par une densité de quasi-particules

$$\rho(\theta, x; t), \tag{1}$$

qui donne le nombre de quasi-particules de rapidité θ par unité de longueur autour du point x au temps t. Cette fonction joue un rôle analogue à la distribution des vitesses dans le modèle classique des sphères dures, mais elle encode ici l'ensemble des constantes du mouvement du système quantique.

La dynamique hors équilibre à grande échelle spatiale et temporelle est alors décrite par une théorie hydrodynamique effective, appelée *hydrodynamique généralisée* GHD. Contrairement à l'hydrodynamique classique, qui ne fait intervenir qu'un petit nombre de champs conservés (densité, impulsion, énergie), la GHD prend en compte l'infinité de charges conservées associées à l'intégrabilité.

À l'ordre hydrodynamique dominant, l'évolution de la densité de quasi-particules est gouvernée par une équation de continuité cinétique :

$$\partial_t \rho + \partial_x \left(v^{\text{eff}} \rho \right) + \partial_\theta \left(a^{\text{eff}} \rho \right) = 0. \tag{2}$$

La quantité v^{eff} est la *vitesse effective* et des quasi-particules, tandis que v^{eff} désigne leur *accélération effective*.Elle reflète le fait que, dans un système intégrable, les collisions entre quasi-particules ne changent pas leur rapidité, mais modifient leurs trajectoires par des déphasages cumulatifs. Cette équation joue un rôle analogue à celui des équations d'Euler en hydrodynamique classique : elle décrit le transport des degrés de liberté conservés, non plus en termes des champs usuels de densité de particules $n(x;t)$, d'impulsion $p(x,t)$ et d'énergie $\varepsilon(x;t)$ mais en termes de la distribution de quasi-particules associée à un état de Gibbs local. La structure cinétique de l'équation (2) met ainsi en évidence la proximité conceptuelle entre la GHD et l'hydrodynamique d'Euler, tout en généralisant cette dernière à un espace de phases étendu incluant la rapidité θ, dans le cadre des systèmes intégrables.

Cette structure est l'analogue quantique direct de la dynamique des sphères dures unidimensionnelles, où les collisions se traduisent par un simple échange de vitesses. Dans les deux cas, la dynamique est balistique et contrainte par l'intégrabilité, empêchant toute redistribution statistique vers une loi de Maxwell–Boltzmann. L'état stationnaire atteint à long temps après une perturbation hors équilibre n'est donc pas thermique, mais décrit par un ensemble de Gibbs généralisé,

$$\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{GGE}} \propto \exp\left(- \sum_i \beta_i \hat{\boldsymbol{Q}}_i \right), \tag{3}$$

où $\{\hat{\boldsymbol{Q}}_i\}$ désigne l'ensemble des charges conservées indépendantes du modèle, et où les coefficients β_i sont les multiplicateurs de Lagrange associés à chacune de ces charges. Ces paramètres sont fixés par les valeurs d'attente initiales des $\hat{\boldsymbol{Q}}_i$ et encodent l'information conservée par la dynamique intégrable.

L'ensemble de Gibbs généralisé (GGE) constitue ainsi une généralisation directe de la matrice densité de Gibbs usuelle. En particulier, les ensembles canonique et grand canonique sont retrouvés comme des cas particuliers, lorsque seules l'énergie (et éventuellement le nombre de particules) sont conservées. Le GGE étend ce formalisme en incorporant l'ensemble complet des charges intégrales du mouvement, ce qui permet de décrire correctement les états stationnaires hors équilibre des systèmes quantiques intégrables.

Ainsi, l'étude de la dynamique hors équilibre des gaz de bosons unidimensionnels ne se limite pas à une simple extension de la physique statistique standard. Elle nécessite un changement profond de cadre conceptuel, dans lequel les notions de quasi-particules, d'intégrabilité et d'hydrodynamique généralisée jouent un rôle central. Ce cadre fournit une description universelle et prédictive de l'évolution hors équilibre des systèmes intégrables, et constitue le fil conducteur des chapitres suivants de ce manuscrit.

Introduction

Ma thèse porte sur l'étude des gaz d'atomes froids, plus précisément sur des systèmes expérimentaux où des ensembles de quelques dizaines à plusieurs millions d'atomes sont refroidis jusqu'à des températures proches du zéro absolu. Dans ce régime extrême, les effets quantiques collectifs prennent le dessus et donnent accès à une physique à N corps difficilement accessible autrement [BDZ08]. Ces gaz offrent ainsi un laboratoire exceptionnel pour explorer la mécanique quantique et tester des modèles théoriques complexes. Ils trouvent aussi de nombreuses applications, allant de la métrologie de très haute précision au développement de processeurs quantiques [GLM06], en passant par la simulation de systèmes quantiques dont la dimension de l'espace de Hilbert croît de manière exponentielle avec le nombre de particules, ce qui rend leur traitement classique rapidement inabordable [NC10 ; Fey82].

Parmi ces systèmes, les gaz atomiques unidimensionnels (1D) constituent une plateforme privilégiée pour l'étude de la physique quantique dans les systèmes de basse dimension. En réduisant drastiquement le mouvement transversal des atomes grâce à des pièges très confinants, leurs degrés de liberté sont figés dans deux directions et le mouvement se limite à une seule dimension. Cette géométrie particulière conduit à des systèmes de type : modèles de bosons [BI05 ; KWW04 ; Hal+09 ; Ame+08 ; Jac+11 ; Dub25], de fermions [GBL13 ; Lia+10 ; Mor+05] ou encore de mélanges multi-composants [Pag+14]. Leur intérêt réside notamment dans la possibilité d'établir des comparaisons directes avec des descriptions théoriques et numériques très précises, mais aussi dans leur rôle de systèmes analogues pour comprendre des matériaux de basse dimension tels que les chaînes de spins, les nano-fils supraconducteurs ou les réseaux de jonctions Josephson. Dans les expériences menées au Laboratoire Charles Fabry (LCF), ces gaz 1D sont réalisés en piégeant des atomes de rubidium 87 à l'aide de champs magnétiques générés par des microstructures déposées sur une puce atomique.

La restriction à une dimension unique entraîne des propriétés singulières pour les gaz atomiques. Ainsi, les fluctuations quantiques y sont fortement amplifiées, ce qui empêche la formation d'une condensation de Bose-Einstein à température nulle (en anglais quasi Bose–Einstein Condensate (qBEC)). Certains de ces systèmes 1D présentent également une intégrabilité : ils possèdent autant de quantités conservées que de degrés de liberté. Cette caractéristique se traduit par une dynamique particulière, différentes de celles des systèmes ergodiques. Ces gaz ne tendent pas vers un état thermique classique, mais vers un état décrit par des fonctions conservées dont les distributions de rapidités, qui paramètrent l'ensemble des constantes de mouvement du système.

Ma thèse s'est concentrée sur l'étude d'un gaz 1D de bosons avec interactions de contact répulsives, un système intégrable étudié initialement par Lieb et Liniger [LL63 ; Lie63]. Les états propres de ce modèle, obtenus via l'ansatz de Bethe (BA), sont décrits par des rapidités qui peuvent être interprétées comme les vitesses de quasi-particules à temps de vie infini. Dans la limite thermodynamique, l'état relaxé du système est entièrement caractérisé par la distribution de rapidités.

Durant cette thèse, j'ai réalisé une partie des expériences avec Léa Dubois, doctorante ayant travaillé sur le même dispositif. J'ai contribué à l'étude expérimentale de la distribution de rapidités, ainsi qu'à l'analyse numérique des résultats via des simulations basées sur la théorie Hydrodynamique Généralisée (GHD). Mon apport a notamment porté sur l'étude des fluctuations dans le cadre du formalisme de l'Ensemble de Gibbs Généralisé (GGE) et sur la mise en place d'un potentiel dipolaire permettant de contrôler et de moduler la distribution atomique.

Ce mémoire présente les résultats obtenus sur la caractérisation expérimentale et numérique des gaz de bosons 1D, tant à l'équilibre qu'hors équilibre, à travers l'étude de la distribution de rapidités spatialement

résolue. Il est structuré en sept chapitres, chacun abordant un aspect spécifique de l'étude, qu'il soit théorique, numérique ou expérimental.

Présentation des chapitres

Chapitre I : Modèle de Lieb-Liniger et approche Bethe Ansatz. Ce chapitre introduit de manière pédagogique le modèle de Lieb-Liniger Lieb–Liniger (LL) et l'approche de l'ansatz de Bethe (BA). Il commence par un rappel des notions de première et deuxième quantification pour expliquer la structure de l'Hamiltonien de (LL), en particulier l'interaction de contact. Les états de Bethe sont des états propres de l'Hamiltonien de (LL), ainsi que des opérateurs nombre de particules et quantité de mouvement. Ils constituent un point de départ pour l'étude des charges conservées, qui sera développée dans le chapitre suivant [CM11].

Chapitre II : Relaxation et Équilibre dans les Systèmes Quantiques Intégrables : de l'Ensemble de Gibbs Généralisé à la Thermodynamique de Bethe. Le chapitre 2 présente le formalisme l'Ensemble de Gibbs Généralisé (GGE) et introduit le formalisme du Bethe Ansatz thermodynamique (TBA) à travers les travaux de Yang et Yang. On y détaille notamment le calcul des moyennes de charges locales et le formalisme nécessaire pour relier l'état intégrable aux distributions de rapidités. Les notions de fluctuations sont évoquées, mais leur étude détaillée est laissée au chapitre IV.

Chapitre III : Dynamique hors-équilibre et hydrodynamique généralisée. Le chapitre 3 étend l'étude à la dynamique hors équilibre à l'aide de la théorie d'Hydrodynamique Généralisé (GHD). On y montre comment le formalisme de (GGE) se traduit dans la dynamique, et que les distributions de rapidités restent des quantités conservées, contrairement à l'approche classique de Gibbs.

Chapitre IV : Fluctuations de la distribution de rapidités dans les états stationnaires du modèle de Lieb–Liniger homogène. Nous avons montré qu'il est possible d'échantillonner correctement le (GGE) en utilisant des simulations de Monte-Carlo. Le principe de fluctuation-réponse est employé pour tester la validité des formules établies dans le régime dans lequel le formalisme (TBA) est applicable.

Chapitre V : Dispositif expérimental. Ce chapitre présente les aspects expérimentaux de la thèse : lasers, puce atomique, Dispositif de Micromirroirs Digitaux (DMD), etc. Deux expériences principales sont décrites : la première étudie l'évolution d'un nuage initialement piégé dans un potentiel harmonique, dans le régime de quasi-condensation de Bose (qBEC) ; la seconde utilise le (DMD) pour résoudre spatialement la distribution de rapidités et pour préparer des états hors équilibre.

Chapitre VI : Étude du protocole de bi-partition : Mesure de distribution de rapidités locales $\rho(x,\theta)$ pour des systèmes hors équilibre. Le chapitre 6 se concentre sur l'étude des déformations du profil de densité et des résultats numériques issus des simulations (GHD), permettant de comparer les prédictions théoriques avec les mesures expérimentales.

Chapitre VII : Potentiel dipolaire et perspectives expérimentales. Le dernier chapitre présente la réflexion sur l'ajout d'un potentiel dipolaire et les perspectives expérimentales associées. On y discute comment ce potentiel permet de préparer des distributions atomiques plus complexes et d'étudier de nouveaux régimes dynamiques.

Bien que chaque chapitre puisse être lu indépendamment, certaines dépendances existent pour une compréhension plus complète :

- Le chapitre IV s'appuie sur le chapitre II, lui-même basé sur le chapitre I.
- Le chapitre VII se fonde sur le chapitre VI, qui fait référence au chapitre III, lequel repose sur le chapitre II.

Bibliographie

[Lie63] Elliott H. LIEB. "Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. II. The Excitation Spectrum". In : *Phys. Rev.* 130 (4 mai 1963), p. 1616-1624. DOI : 10.1103/PhysRev.130.1616. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.1616.

[LL63] Elliott H. LIEB et Werner LINIGER. "Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State". In : *Phys. Rev.* 130 (4 mai 1963), p. 1605-1616. DOI : 10.1103/PhysRev.130.1605. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.1605.

[Fey82] Richard P. FEYNMAN. "Simulating physics with computers". In : *International Journal of Theoretical Physics* 21.6-7 (juin 1982), p. 467-488. DOI : 10.1007/BF02650179.

[KWW04] Toshiya KINOSHITA, Trevor WENGER et David S. WEISS. "Observation of a one-dimensional Tonks-Girardeau gas". In : *Science* 305.5687 (2004), p. 1125-1128. DOI : 10.1126/science.1100700. URL : https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1100700.

[BI05] Immanuel BLOCH et IMMANUEL. "Ultracold quantum gases in optical lattices". In : *Nature Physics* 1 (oct. 2005), p. 23-30. DOI : 10.1038/nphys138.

[Mor+05] Henning MORITZ et al. "Confinement induced molecules in a 1D Fermi gas". In : *Phys. Rev. Lett.* 94 (juin 2005), p. 210401. DOI : 10.1103/PhysRevLett.94.210401. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.210401.

[GLM06] Vittorio GIOVANNETTI, Seth LLOYD et Lorenzo MACCONE. "Quantum Metrology". In : *Phys. Rev. Lett.* 96 (1 jan. 2006), p. 010401. DOI : 10.1103/PhysRevLett.96.010401. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.010401.

[Ame+08] A. H. van AMERONGEN et al. "Yang-Yang thermodynamics on an atom chip". In : *Phys. Rev. Lett.* 100 (mars 2008), p. 090402. DOI : 10.1103/PhysRevLett.100.090402. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.090402.

[BDZ08] Immanuel BLOCH, Jean DALIBARD et Wilhelm ZWERGER. "Many-body physics with ultracold gases". In : *Rev. Mod. Phys.* 80 (3 juill. 2008), p. 885-964. DOI : 10.1103/RevModPhys.80.885. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.885.

[Hal+09] Elmar HALLER et al. "Realization of an excited, strongly correlated quantum gas phase". In : *Science* 325.5945 (sept. 2009), p. 1224-1227. ISSN : 1095-9203. DOI : 10.1126/science.1175850. URL : http://dx.doi.org/10.1126/science.1175850.

[Lia+10] Yean-an LIAO et al. "Spin-imbalance in a one-dimensional Fermi gas". In : *Nature* 467.7315 (sept. 2010), p. 567-569. ISSN : 1476-4687. DOI : 10.1038/nature09393. URL : http://dx.doi.org/10.1038/nature09393.

[NC10] Michael A. NIELSEN et Isaac L. CHUANG. *Quantum Computation and Quantum Information : 10th Anniversary Edition*. Cambridge : Cambridge University Press, 2010. ISBN : 9781107002173.

[CM11] Jean-Sébastien CAUX et Jorn MOSSEL. "Remarks on the notion of quantum integrability". In : *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* 2011.02 (fév. 2011), P02023. DOI : 10.1088/1742-5468/2011/02/P02023. URL : https://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2011/02/P02023.

[Jac+11] Thibaut JACQMIN et al. "Sub-Poissonian fluctuations in a 1D Bose gas : From the quantum quasi-condensate to the strongly interacting regime". In : *Phys. Rev. Lett.* 106 (juin 2011), p. 230405. DOI : 10.1103/PhysRevLett.106.230405. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.230405.

[GBL13] Xi-Wen GUAN, Murray T. BATCHELOR et Chaohong LEE. "Fermi gases in one dimension : From Bethe ansatz to experiments". In : *Rev. Mod. Phys.* 85 (nov. 2013), p. 1633-1691. DOI : 10.1103/RevModPhys.85.1633. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.85.1633.

[Pag+14] Guido PAGANO et al. "A one-dimensional liquid of fermions with tunable spin". In : *Nature Physics* 10.3 (fév. 2014), p. 198-201. ISSN : 1745-2481. DOI : 10.1038/nphys2878. URL : http://dx.doi.org/10.1038/nphys2878.

[Dub25] Jérôme DUBAIL. *Solitons et ondes de matière (4)*. Cours / séminaire en ligne. Collège de France. 2025. URL : https://www.youtube.com/watch?v=t53C5hoXiw4 (visité le 28/03/2025).

Table des matières

Remerciements **v**

Pourquoi étudier un système unidimensionnel ? Un exemple simple : les sphères dures **vii**

Introduction **xiii**
Bibliographie . . . xv

I Modèle de Lieb-Liniger et approche Bethe Ansatz **1**
A Description du modèle de Lieb-Liniger . . . 3
A-1 Introduction au modèle de gaz de Bose unidimensionnel . . . 3
A-1-a De la première à la seconde quantification . . . 3
A-1-b Seconde quantification . . . 5
A-1-c Opérateur. . . . 7
A-1-d Expression de l'Hamiltonien de Lieb-Liniger. . . . 10
A-2 Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à 2 corps . . . 12
A-2-a Interprétation physique pour deux particules et rôle de la rapidité . . . 16
B Équation de Bethe et distribution de rapidité . . . 17
B-1 Fonction d'onde dans le secteur ordonné et représentation de Gaudin . . . 17
B-2 Conditions aux bords périodiques . . . 17
B-2-a Équations de Bethe exponentielles . . . 17
B-2-b Équations de Bethe logarithmiques . . . 17
B-2-c Interprétation physique . . . 18
B-3 Thermodynamique du gaz de Lieb–Liniger à l'état fondamental . . . 18
B-4 Excitations élémentaires . . . 20
Bibliographie . . . 22

II Relaxation et états stationnaires dans les systèmes quantiques intégrables : de l'ensemble de Gibbs généralisé au Bethe Ansatz thermodynamique **25**
A Notion d'état d'Équilibre de Gibbs Généralisé . . . 26
A-1 Introduction à l'Équilibre de Gibbs Généralisé . . . 26
A-2 Moyenne dans l'Équilibre de Gibbs Généralisé . . . 28
A-3 Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales . . . 30
B Thermodynamique de Bethe et relaxation . . . 32
B-1 Moyenne dans la limite thermodynamique . . . 32
B-2 Statistique des macro-états : entropie de Yang–Yang . . . 33
B-3 Équations intégrales de la TBA . . . 36
B-3-a Équilibre thermique . . . 38
Bibliographie . . . 41

III Dynamique hors-équilibre et hydrodynamique généralisée **43**
A Manipulation de l'opération d'*habillage* . . . 47
A-1 Dérivation intuitive de la vitesse effective . . . 48
A-2 Diagonalisation et invariants de Riemann dans la GHD spatiale étendue . . . 49
B Formulation hamiltonienne de la théorie Hydrodynamique Généralisée . . . 51
B-1 Crochet de Poisson fonctionnel . . . 51
B-2 Crochet avec l'Hamiltonien . . . 54

B-3 Modèle de Lieb–Liniger . . . 55
B-4 Cas “no dressing” . . . 55
C Régime de quasi-condensation et limite Gross–Pitaevskii . . . 57
C-1 Évolution temporelle selon l’équation de Gross–Pitaevskii . . . 57
C-2 Description par les équations Hydrodynamiques Généralisées . . . 58
C-3 Connexion hydrodynamique : de la GHD à l’équation de Gross–Pitaevskii . . . 58
Bibliographie . . . 61

IV Fluctuations de la distribution de rapidités dans des états stationnaires du modèle de Lieb–Liniger homogène 63
A Fluctuation-réponse et susceptibilités dans les états d’équilibre généralisés . . . 64
A-1 Charges généralisées et dérivées fonctionnelles . . . 65
A-2 Poids spectral et formulation du GGE . . . 67
A-3 Vérification numérique : Echantillonnage du GGE . . . 69
B Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilité . . . 74
B-1 Susceptibilité spectrale et structure variationnelle de l’entropie . . . 74
B-2 Fluctuations gaussiennes autour de l’équilibre thermodynamique . . . 75
B-3 Expression de la Hessienne . . . 77
B-4 Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne . . . 77
B-5 Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle . . . 78
B-5-a Méthode. . . . 78
B-5-b Dans un équilibre thermodynamique généralisé . . . 78
B-5-c Vérification numérique thermique : énergie et nombre de particules . . . 79
Bibliographie . . . 83

V Dispositif expérimental 85
A Le dispositif expérimental . . . 86
A-1 Système laser et contrôle de fréquence . . . 86
A-2 Production et refroidissement des atomes . . . 86
A-3 Piégeage magnétique sur puce . . . 88
A-3-a Piégeage magnétique sur puce . . . 88
A-4 Génération de potentiels modulés . . . 91
B Sélection spatiale avec DMD . . . 92
B-1 Motivation et principe . . . 92
B-2 Mise en place technique . . . 93
B-3 Utilisation dans les protocoles . . . 94
C Techniques d’imagerie et d’analyse . . . 95
C-1 Imagerie par absorption . . . 95
D Expériences et protocoles étudiés . . . 96
D-1 Expansion longitudinale . . . 96
D-1-a Motivation et protocole expérimental d’expansion longitudinale . . . 96
D-1-b Analyse des données expérimentales . . . 100
D-2 Sonde locale de distribution de rapidités . . . 101
D-2-a Distribution de rapidités locale dans les gaz 1D . . . 101
Bibliographie . . . 106

VI Étude du protocole de bi-partition : Mesure de distribution de rapidités locales $\rho(x,\theta)$ pour des systèmes hors équilibre 109
A Dynamique balistique d’un gaz 1D après une coupure bipartite . . . 111
A-1 Préparation expérimentale et protocole de coupure . . . 111
A-2 Cadre de la GHD et dynamique balistique . . . 111
A-3 Validation expérimentale de la dynamique hydrodynamique . . . 113
B Sonder la distribution locale des rapidités . . . 114
B-1 Sélection d’une tranche localisée après déformation du bord . . . 115
B-2 Expansion de la tranche et observation d’une asymétrie . . . 116

C Simulations numériques . . . 118
C-1 Système homogène à l'équilibre thermique . . . 118
C-2 Dynamique du contour dans l'espace des phases (x, θ). . . . 118
C-3 Simulation de la déformation du bord . . . 120
C-4 Simulation de l'expansion. . . . 120
C-5 Comparaison avec les données expérimentales et discussion . . . 124
Bibliographie . . . 126

VIIMise en place d'un confinement longitudinale dipolaire 127
A Transformation de jauge et simplification de l'Hamiltonien . . . 128
B Potentiel Dipolaire d'un atome à deux niveaux - généralité . . . 128
B-1 Système à deux niveaux et interaction avec le champ . . . 129
B-2 Interprétation du traitement du second ordre : transition virtuelle et origine du potentiel dipolaire (AC-Stark) . . . 129
B-3 Expression explicite du potentiel dipolaire . . . 131
C Piégeage dipolaire d'un atome à plusieurs niveaux . . . 132
C-1 Atomes multiniveaux et origine du potentiel dipolaire dans le formalisme quantique 132
C-1-a Description quantique de l'atome et du champ laser . . . 133
C-1-b États habillés et structure des niveaux . . . 134
D Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne . . . 136
D-1 Structure électronique du Rubidium . . . 136
D-2 Structure matricielle du potentiel dipolaire . . . 137
D-3 Régime de désaccord très important . . . 138
D-4 Structure fine et base des états $|L, S; J, m_J\rangle$. . . . 140
E Notre dispositif expérimental . . . 142
E-1 Choix du laser pour le piégeage dipolaire . . . 142
E-2 Amplification par Tapered Amplifier (TA) . . . 146
Bibliographie . . . 149

Conclusion 151

A De la transformation de Fourier aux états de Bethe : Représentations et intégrabilité 153
a. Transformée de Fourier, variables conjuguées et changements de représentation . . . 153
a.i. Transformée de Fourier : définition et cadre fonctionnel $\mathcal{L}^1$ . . . 154
a.i.1. Définition intégrale de la transformée de Fourier sur $\mathbb{R}$ . . . 154
a.i.2. Cadre minimal de définition : Espaces $\mathcal{L}^1(\mathbb{R})$ et $\mathcal{L}^\infty(\mathbb{R})$ . . . 155
a.ii. Dérivation et dualité Fourier . . . 156
a.ii.1. Opérateur de multiplication et opérateur de dérivation . . . 156
a.ii.2. Conjugaison des opérateurs par la transformée de Fourier (dualité dérivation–multiplication) 156
a.ii.3. Représentations : variables conjuguées et relations de commutation . . . 157
a.ii.4. Représentations quantiques : position et impulsion ; et normalisations . . . 158
a.iii. Interprétation géométrique : rotation symplectique . . . 159
a.iii.1. Espace des phases et structures symplectiques . . . 159
a.iii.2. Transformée de Fourier comme rotation canonique . . . 160
a.iii.3. Valeurs et vecteur propre de la transformée de Fourier . . . 160
a.iv. Passage à l'espace $\mathcal{L}^2$ et unitarité . . . 165
a.iv.1. Espace de Schwartz $\mathcal{S}$ et stabilité . . . 165
a.iv.2. Extension distributionnelle : distributions tempérées . . . 166
a.iv.3. Produit scalaire, norme et unitarité sur $\mathcal{L}^2$ . . . 167
a.iv.4. Dual de $\mathcal{L}^2$ et Théorème de Plancherel et Isométrie unitaire . . . 168
a.v. Espace de Hilbert $\mathscr{H}$ séparable et exemples canoniques . . . 169
a.v.1. Exemples fondamentaux ℓ^2, $\mathcal{L}^2([0, a])$ et $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ isomorphes . . . 169
a.v.2. Discrétisation, périodisation et peigne de Dirac . . . 170
a.v.3. Séries de Fourier comme transformée de Fourier discrète sur $\mathcal{L}^2([0, a])$ 172
a.vi. Distributions, Bras et Kets . . . 173
a.vi.1. Kets $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ . . . 173

a.vi.2. Bras $\langle\psi| \in \mathscr{H}^*$ . . . 174
a.vi.3. États propres généralisés de la position : Bras $\langle x_0| \notin \mathscr{H}^*$. . . . 174
a.vi.4. États propres généralisés de l'impulsion : Kets $\langle p| \notin \mathscr{H}$ . . . 175
a.vi.5. «Id = $\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$» . . . 176
a.vi.6. Bases généralisées . . . 177
b. États propres de Bethe pour le modèle de Lieb-Liniger . . . 178
b.i. Pour une particule libre : première quantification . . . 178
b.i.1. Équation spectrale en espace de Fourier . . . 178
b.ii. Pour N (inconue) de particule(s) : seconde quantification . . . 184
b.ii.1. Cadre fonctionnel et bases généralisées. . . . 185
b.ii.2. Limites de la première quantification. . . . 185
b.ii.3. Principe de la seconde quantification. . . . 185
b.ii.4. Espace de Fock et opérateurs de création-annihilation. . . . 185
b.ii.5. Champs quantiques et représentation positionnelle. . . . 186
b.ii.6. Lien spectral entre modes de moment et champs quantiques. . . . 186
b.ii.7. Intérêt pour le modèle de Lieb–Liniger. . . . 186
b.iii. Résumé synthétique — opérateurs à un et deux corps . . . 187
b.iii.1. Opérateur à un corps. . . . 187
b.iii.2. Opérateur à deux corps. . . . 187
b.iii.3. Hamiltonien de Lieb–Liniger. . . . 187
b.iv. États de Bethe et structure unitaire des collisions . . . 187
b.iv.1. Réécritur de l'Hamiltonien de Lieb–Liniger en seconde quantification. . 188
b.iv.2. Formalisme Matriciel et Représentation de S_N . . . 188
b.iv.3. Structure algébrique du Bethe Ansatz : Représentation régulière et opérateurs de Dunkl . . . 189
b.iv.4. De l'Analyse Coordonnée à l'Analyse de Bethe Algébrique . . . 190
b.v. Formulation variationnelle unifiée des spectres de la Random Matrix Theory (RMT) 192
b.v.1. Problème variationnel général . . . 192
b.v.2. Cas des matrices aléatoires gaussiennes . . . 192
b.v.3. Cas des matrices aléatoires gaussiennes unitaires . . . 195
b.v.4. Cas du gaz de Lieb–Liniger à faible couplage . . . 196
b.v.5. Solution universelle et unicité . . . 197
b.vi. Méthode de Scattering Inverse et hiérarchie d'invariants . . . 197
b.vi.1. L'IST comme Transformée de Fourier non-linéaire . . . 197
b.vi.2. Invariants et charges conservées . . . 198
b.vi.3. Du Bethe Ansatz à la limite classique . . . 198
b.vi.4. Matrice de Lax, monodromie et structure spectrale en méthode de diffusion inverse . . . 198
Bibliographie . . . 200

B Action de $\hat{P}$ et $\hat{H}$ sur $|\{\theta_a\}\rangle$ 203
a. Action de $\hat{P}$ sur $|\{\theta_a\}\rangle$ . . . 203
a.i. Utilisation de la définition de $\hat{P}$ intégrée par parties . . . 203
a.ii. Application à l'état à N particules . . . 203
b. Action de $\hat{H}$ sur $|\{\theta_a\}\rangle$ . . . 204
b.i. Réecriture de l'hamiltonien . . . 204
b.ii. Application à l'état à N particules . . . 204

C Réduction GHD → transport d'Euler lorsque le *dressing* est l'identité 207
a. Point de départ : équation GHD. . . . 207
b. Hypothèse "sans interactions" : $^{\mathrm{dr}} = \mathrm{Id}$. . . . 207
c. Hiérarchie des moments (charges nues). . . . 207
d. Trois premiers moments ("masse", "momentum", "énergie"). . . . 208
e. Lien (et limite) avec les équations d'Euler classiques. . . . 208
f. Encadré : fermeture et équations d'Euler fermées. . . . 209

D Dérivation alternative des fluctuations de ρ **211**
a. Réécriture de l'entropie de Yang–Yang . . . 211
b. Différentielle de l'action effective . . . 212
c. Fluctuations . . . 212
c.i. Fluctuations des facteurs d'occupation . . . 212
c.ii. Opérateur d'habillage . . . 212
c.iii. Fluctuations des distributions de rapidité . . . 213
Bibliographie . . . 213

E Propriétés des facteurs d'homothétie **215**
a. Loi de puissance des facteurs homothétiques . . . 215
b. Équivalence entre $f(\lambda)$ et $\mu(n)$ . . . 215

F Polarisabilité dynamique et potentiel dipolaire optique **217**
a. Polarisabilité scalaire, vectorielle et tensorielle dans les états fins . . . 218
b. Interprétation physique . . . 218
c. Cas des atomes alcalins (ex. Rubidium) . . . 219
Bibliographie . . . 219

G Moment tensoriel pour J=1/2 **221**

Chapitre I

Modèle de Lieb-Liniger et approche Bethe Ansatz

Sommaire

A Description du modèle de Lieb-Liniger 3
A-1 Introduction au modèle de gaz de Bose unidimensionnel 3
A-2 Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à 2 corps 12
B Équation de Bethe et distribution de rapidité 17
B-1 Fonction d'onde dans le secteur ordonné et représentation de Gaudin 17
B-2 Conditions aux bords périodiques 17
B-3 Thermodynamique du gaz de Lieb–Liniger à l'état fondamental 18
B-4 Excitations élémentaires 20
Bibliographie 22

Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation progressive du modèle de Lieb–Liniger (LL) et de l'Ansatz de Bethe (en anglais Bethe Ansatz (BA)), outils centraux pour la description d'un gaz de bosons unidimensionnel en interaction via un potentiel de type delta. L'objectif est d'accompagner rigoureusement le lecteur depuis la formulation quantique du système jusqu'aux solutions exactes obtenues par l'approche de Bethe.

Nous commençons, pour des raisons pédagogiques, par le cas le plus simple : une particule libre, sans interaction, dans un espace unidimensionnel avec des conditions aux bords périodiques. Cette première étape permet d'introduire naturellement les fonctions d'onde à une particule, leur évolution sous l'action d'Hamiltonien libre, ainsi que la quantification résultant des conditions de périodicité — autrement dit, la version élémentaire des équations de BA.

Nous poursuivons en formulant le problème dans le cadre de la théorie quantique des champs, en exprimant l'Hamiltonien à l'aide des opérateurs de création et d'annihilation dans la représentation positionnelle : c'est le passage à la seconde quantification. Cette étape clarifie la distinction entre les termes à un corps et à deux corps dans l'Hamiltonien, et établit les notations qui seront utilisées tout au long du chapitre.

Une fois ce cadre posé, nous généralisons le raisonnement au cas de N particules pour introduire le modèle complet de Lieb–Liniger. Nous présentons alors l'Ansatz de Bethe (BA) dans sa forme générale, qui fournit les états propres de l'Hamiltonien. Ce formalisme permet d'accéder explicitement au spectre du système, ainsi qu'à diverses quantités physiques telles que l'impulsion totale et le nombre de particules.

Nous abordons ensuite le cas de deux particules, cette fois en présence d'une interaction locale. L'analyse de ce système met en lumière les effets de l'interaction ponctuelle sur la régularité de la fonction d'onde et les conditions de raccord, ainsi que sur les modifications des équations de BA. Ce cas constitue une étape clé vers la généralisation à N particules.

Le cadre est ensuite étendu au cas général de N particules, permettant ainsi de dériver les équations de BA pour un système interactif. Ces équations encapsulent toute l'information sur les états propres du système.

Enfin, nous introduisons la notion de *distribution de rapidité*, concept fondamental pour la description des états dans la limite thermodynamique. Elle permet non seulement de caractériser les états d'énergie minimale (états fondamentaux), mais aussi d'analyser des configurations excitées au-delà de l'état fondamental. Ce formalisme constituera le socle des développements ultérieurs sur les propriétés thermodynamiques et dynamiques des gaz bosoniques intégrables.

A Description du modèle de Lieb-Liniger

A-1 Introduction au modèle de gaz de Bose unidimensionnel

A-1-a De la première à la seconde quantification

A-1-a-i Introduction. La mécanique quantique se développe historiquement en deux grandes étapes : la *première quantification*, aussi appelée quantification canonique et la *seconde quantification*. Comprendre ces deux cadres est essentiel pour aborder les systèmes quantiques complexes, en particulier ceux où le nombre de particules peut varier (cf annex A).

A-1-a-ii Première quantification (quantification canonique, particule unique). La première quantification est la mécanique quantique standard, celle que vous avez rencontrée dès vos premiers cours. Elle consiste à quantifier un système classique décrit par des variables dynamiques telles que la position x et la quantité de mouvement p. On procède en remplaçant ces variables par des **opérateurs hermitiens $\hat{x}$** et

$$\hat{p} \doteq -i\hbar\hat{\partial}_x, \tag{I.1}$$

où $\hbar$ est la constante de Planck réduite, satisfaisant la **relation de commutation canonique** fondamentale $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. L'état du système est alors décrit par une **fonction d'onde** $\psi(x,t)$, solution de **l'équation de Schrödinger** indépendante du nombre de particules :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}\psi, \tag{I.2}$$

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

Exemple : Particule libre en une boite à une dimension.

Dans le cas d'une particule libre de masse m se déplaçant en une dimension, l'Hamiltonien est constitué uniquement du terme cinétique $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\boldsymbol{p}}^2/2m$. En représentation position, où l'opérateur quantité de mouvement s'écrit comme dans l'équation (I.1), l'Hamiltonien prend alors la forme différentielle :

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\boldsymbol{\partial}}_x^2. \tag{I.3}$$

Les états propres stationnaires de (I.2) dépendant du temps sont de la forme $\psi_k(x,t) = \varphi_k(x)\, e^{-i\varepsilon(k)t/\hbar}$ où $\varphi_k(x)$ est une fonction propre de l'hamiltonien, soit de l'équation stationnaire $\hat{\mathcal{H}}\varphi_k = \varepsilon(k)\varphi_k$ *i.e.* pour une particule libre :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\boldsymbol{\partial}}_x^2\varphi_k = \varepsilon(k)\varphi_k, \tag{I.4}$$

avec $\varepsilon(k)$ l'énergie associée à une onde plane de nombre d'onde k

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{I.5}$$

Les fonctions propres spatiales $f_k(x)$ de l'hamiltonien libre s'écrivent comme des combinaisons linéaires d'ondes planes

$$f_k(x) = ae^{-ikx} + be^{ikx}, \quad \text{avec} \quad (a,b) \in \mathbb{C}^2. \tag{I.6}$$

Périodicité. Si la particule est confinée dans une boîte de longueur L avec des conditions aux limites périodiques (*i.e.* $f_k(x+L) = f_k(x)$), alors le spectre de k est quantifié :

$$e^{ikL} = 1 \quad \text{ou encore } kL \in 2\pi\mathbb{Z}. \tag{I.7}$$

Le problème est équivalent à celui d'une particule libre sur un cercle de périmètre L.

La particule est délocalisée sur tout l'espace (le cercle), sans structure particulière *i.e.* les solutions (I.6) correspondent à des **états non liés** (ou états de diffusion).
Les solutions (I.6) avec la condition de périodicité (I.7) décrivent une particule libre se propageant sur un cercle, sans potentiel externe.

Pour $k \neq 0$ (respectivement pour $k = 0$), la fonction propre $f_k(x)$ de l'équation (I.6) appartient à un sous-espace propre associé à k de dimension 2 (respectivement de dimension 1) engendré par $x \mapsto e^{-ikx}$ et $x \mapsto e^{ikx}$ (respectivement par $x \mapsto 1$). L'espace engendré par l'ensemble des sous-espaces propres forme un **espace de Hilbert**, muni du **produit scalaire** défini par :

$$(f_{k'}, f_k) = \int_0^L f_{k'}^*(x) f_k(x)\, dx. \tag{I.8}$$

Les sous-espaces propres sont orthogonaux entre eux *i.e.* en utilisant les conséquences de la condition de périodicité (I.7), $(f_{k'}, f_k) = 0$ pour $|k'| \neq |k|$. Pour chaque sous-espace propre, on impose que les états propres forment une base orthonormale *i.e.* en utilisant (I.7), les fonctions propres f_k écrites sous la forme (I.6), sont orthogonales avec $\overline{f}_k : x \mapsto \pm(b^* e^{-ikx} - a^* e^{ikx})$ soit $(\overline{f}_k, f_k) = 0$, et on impose que $|a|^2 + |b|^2 = L^{-1}$ pour assurer la normalité de f_k et de $f_{\overline{k}}$ soit $(f_k, f_k) = (\overline{f}_k, \overline{f}_k) = 1$.

Les solutions générales de l'équation de Schrödinger s'écrivent alors comme une superposition d'états propres $\psi = c_0\psi_0 + \sum_{|k|>0}(c_k\psi_k + \overline{c}_k\overline{\psi}_k)$.

Il y a deux bases de vecteur propre particulier :

i) **Base de chiralité / impulsion :**

$$\varphi_{\pm k} \quad = \quad \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\pm ikx} \tag{I.9}$$

Ces derniers en plus d'être états propres de l'opérateur énergie $\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}$, sont des états propres de l'opérateur impulsion $\hat{\boldsymbol{p}}$, avec valeurs propres opposées $\pm\hbar k$.

ii) **Base symétrique / antisymétrique :** En appliquant la matrice de passage unitaire $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & +i \end{pmatrix}$ à la base $\{\varphi_{+k}, \varphi_{-k}\}$, on passe dans la base

$$\begin{cases} \varphi_S \quad = \quad \sqrt{\dfrac{2}{L}} \cos(kx) \quad \text{type Neumann : } \varphi_S'(0) = \varphi_S'(L) = 0 \\ \varphi_A \quad = \quad \sqrt{\dfrac{2}{L}} \sin(kx) \quad \text{type Dirichlet : } \varphi_A(0) = \varphi_A(L) = 0 \end{cases} \tag{I.10}$$

Cette base est particulièrement utile lorsque des potentiels symétriques sont ajoutés à l'Hamiltonien, car les fonctions paires et impaires restent séparées sous l'action de tels potentiels.

Cette condition d'orthonormalitée est imposée afin de garantir l'indépendance linéaire des états quantiques, et d'assurer que toute fonction d'onde de l'espace de Hilbert puisse être développée de manière unique sur cette base.

Avec le formalisme de Dirac, la fonction d'onde φ_k est représentée par le ket $|k\rangle$ normé (*i.e.* $\langle k'|k\rangle = \delta_{k',k}$, où $\delta_{p,q}$ est le symbole de Kronecker) , et l'équation de Schrödinger s'écrit : $\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}\,|k\rangle = \varepsilon(k)\,|k\rangle$. En appliquant le bra $\langle x|$ de part et d'autre, on obtient : $\langle x|\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}\,|k\rangle = \varepsilon(k)\langle x|k\rangle$, où $|x\rangle$ est normé (*i.e.* $\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)$ avec $\delta(y-x)$ une distribution de Dirac) et $\varphi_k(x) = \langle x|k\rangle$ est la représentation positionnelle de l'état $|k\rangle$.

À retenir

La base $\{|x\rangle\}$ étant continue, et les états $\{|k\rangle\}$ quantifiés (par exemple dans une boîte de taille finie avec conditions aux limites périodiques), les relations de changement de base s'écrivent :

$$|k\rangle = \int_0^L dx\, \varphi_k(x)\,|x\rangle\,, \qquad |x\rangle = \sum_{Lk\in 2\pi\mathbb{Z}} \varphi_k^*(x)\,|k\rangle\,, \tag{I.11}$$

avec $\varphi_k^*(x) = \langle k|x\rangle$. L'état $|x\rangle$ est relié aux états $|k\rangle$ par une transformation de Fourier discrète. Ces formules montrent que les états $|k\rangle$ sont les composantes de Fourier de l'état $|x\rangle$.

De la particule unique aux systèmes à N particules. Pour un système composé de N particules identiques, une approche naturelle consiste à introduire une fonction d'onde $\varphi(x_1, \ldots, x_N)$ dépendant de N variables , symétrique pour des bosons ou antisymétrique pour des fermions sous l'échange de deux coordonnées $x_i \leftrightarrow x_j$, solution de l'équation de Schrödinger à N corps. Toutefois, cette description devient rapidement inextricable lorsque le nombre de particules augmente, ou lorsque le système permet la création et l'annihilation de particules, comme dans un milieu ouvert ou en contact avec un bain thermique.

A-1-b Seconde quantification

Pour dépasser ces limitations, on adopte le **formalisme de la seconde quantification**, dans lequel l'état du système est décrit non plus par une fonction d'onde mais par un vecteur dans un espace de Fock. Les opérateurs de création et d'annihilation remplacent alors les variables dynamiques classiques et permettent une description unifiée et élégante des systèmes à nombre variable de particules.

A-1-b-i Structure de l'espace des états de Fock. Dans ce formalisme, l'espace des états est une **somme directe d'espaces à N particules**, et chaque état est décrit par l'occupation des différents modes quantiques. Les opérateurs $\hat{\boldsymbol{a}}_k^\dagger$ et $\hat{\boldsymbol{a}}_k$ créent et annihilent une particule dans l'état d'onde plane de moment k :

$$|k\rangle \quad = \quad \hat{\boldsymbol{a}}_k^\dagger\,|\emptyset\rangle\,, \tag{I.12}$$

état avec une particule dans le mode k , où $|\emptyset\rangle$ désigne le vide quantique de Fock, défini par :

$$\forall k \in \mathbb{R}: \qquad \hat{\boldsymbol{a}}_k \, |\emptyset\rangle = 0, \quad \langle\emptyset|\emptyset\rangle = 1. \tag{I.13}$$

Le symbole $\hat{\boldsymbol{a}}_\lambda$ représente ici de manière générique soit l'opérateur $\hat{\boldsymbol{b}}_\lambda$ pour les bosons, soit $\hat{\boldsymbol{c}}_\lambda$ pour les fermions, et satisfait respectivement les relations de commutation (pour les bosons) ou d'anticommutation (pour les fermions). Dans ce qui suit, nous nous restreignons au cas bosonique.

Relations de commutation bosoniques. Les relations de commutation fondamentales pour les bosons sont :

$$[\hat{\boldsymbol{b}}_k, \hat{\boldsymbol{b}}_{k'}] = [\hat{\boldsymbol{b}}_k^\dagger, \hat{\boldsymbol{b}}_{k'}^\dagger] = 0, \qquad [\hat{\boldsymbol{b}}_k, \hat{\boldsymbol{b}}_{k'}^\dagger] = \hat{\boldsymbol{\delta}}_{k,k'}, \tag{I.14}$$

où $\hat{\boldsymbol{\delta}}_{k,k'}$ est le symbole de Kronecker, valant 1 si $k = k'$ et 0 sinon.

A-1-b-ii Nature du champ quantique. La seconde quantification généralise ce cadre en permettant de traiter des systèmes où le nombre de particules n'est pas fixé, ce qui est fréquent en physique des particules, des champs quantiques, ou des gaz quantiques.

L'idée principale est de ne plus quantifier directement les particules, mais le *champ quantique* associé. Les états d'une particule unique deviennent alors des états d'occupation dans un espace de Fock, qui décrit l'ensemble des configurations possibles avec zéro, une, ou plusieurs particules.

Champs de Bose. Le gaz de Bose unidimensionnel est décrit dans le cadre de la théorie quantique des champs par un champ bosonique canonique $\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)$, 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 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x)$ correspond à la création d'une particule en ce point.

$$|x\rangle \quad = \quad \hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x) \, |\emptyset\rangle \, , \tag{I.15}$$

état avec une particule en x et $|\emptyset\rangle$ est le vide quantique de Fock défini par :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \qquad \hat{\boldsymbol{\Psi}}(x) \, |\emptyset\rangle = 0. \tag{I.16}$$

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

$$[\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x), \hat{\boldsymbol{\Psi}}(y)] = [\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x), \hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(y)] = 0, \qquad [\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x), \hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(y)] = \hat{\boldsymbol{\delta}}(x-y), \tag{I.17}$$

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

A-1-b-iii État à N particules. Soient N bosons dans les états $\{k_1, \cdots, k_N\}$ (un boson dans l'état k_1, un autre dans k_2, etc.) et aux positions $\{x_1, \cdots, x_N\}$ (un boson en x_1, un autre en x_2, etc.). Leurs états s'écrivent alors :

$$|\{k_1, \cdots, k_N\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\boldsymbol{b}}_{k_1}^\dagger \cdots \hat{\boldsymbol{b}}_{k_N}^\dagger \, |\emptyset\rangle \, , \quad |\{x_1, \cdots, x_N\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x_1) \cdots \hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x_N) \, |\emptyset\rangle \, , \tag{I.18}$$

où le facteur $1/\sqrt{N!}$ traduit le caractère d'indiscernabilité des bosons et garantit la symétrisation correcte de l'état.

Changement de base. On peut relier les opérateurs de création/annihilation dans la base des ondes planes aux opérateurs de champ via :

$$\hat{\boldsymbol{b}}_k^\dagger = \int_0^L dx \, \varphi_k(x) \hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x), \qquad \hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x) = \sum_k \varphi_k^*(x) \hat{\boldsymbol{b}}_k^\dagger. \tag{I.19}$$

Le champ quantique $\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)$ est relié aux opérateurs de moment $\hat{\boldsymbol{b}}_k$ par une transformation de Fourier. Ces formules montrent que les opérateurs $\hat{\boldsymbol{b}}_k$ sont les composantes de Fourier du champ $\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)$.

Ainsi, un état à N bosons dans la base $|k\rangle^{\otimes N}$ peut s'écrire :

$$|\{k_a\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int dx_1 \cdots dx_N \, \varphi_{\{k_a\}}(\{x_a\}) \, \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x_1) \cdots \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x_N) \, |\emptyset\rangle \,, \tag{I.20}$$

où on note $\{k_a\} \equiv \{k_1, \ldots, k_N\}$ et $\{x_a\} \equiv \{x_1, \ldots, x_N\}$, et la fonction d'onde symétrisée s'écrit : $\varphi_{\{k_a\}}(\{x_a\}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \hat{S}_N} \prod_{i=1}^N \varphi_{k_{\sigma(i)}}(x_i)$, avec $\hat{S}_N$ le groupe symétrique d'ordre N, ou encore, de manière équivalente :

$$\varphi_{\{k_a\}}(\{x_a\}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \emptyset | \, \hat{\mathbf{\Psi}}(x_1) \cdots \hat{\mathbf{\Psi}}(x_N) \, |\{k_a\}\rangle \,. \tag{I.21}$$

A-1-c Opérateur.

A-1-c-i Opérateur à un corps.

Dans la base discrète des modes $\{|k\rangle\}$. Soit $\hat{\boldsymbol{f}}$ un opérateur à une particule, dont les éléments de matrice dans une base orthonormée $\{|k\rangle\}$ sont donnés par $f_{\lambda\nu} = \langle \lambda | \hat{\boldsymbol{f}} | \nu \rangle$. Un opérateur symétrique à N particules correspondant à la somme des actions de $\hat{\boldsymbol{f}}$ sur chacune des particules s'écrit : $\hat{\boldsymbol{F}} = \sum_{i=1}^N \hat{\boldsymbol{f}}^{(i)}$, où $\hat{\boldsymbol{f}}^{(i)}$ désigne l'action de $\hat{\boldsymbol{f}}$ sur la i^{e} particule uniquement. En base de Dirac, cela donne : $\hat{\boldsymbol{f}}^{(i)} = \sum_{\lambda,\nu} f_{\lambda\nu} \, |i:\lambda\rangle \langle i:\nu|$, où $|i:\lambda\rangle$ représente un état où seule la i^{e} particule est dans l'état λ. On peut montrer que la somme des projecteurs agissant sur chaque particule s'identifie à une combinaison d'opérateurs de création et d'annihilation : $\sum_{i=1}^N |i:\lambda\rangle \langle i:\nu| = \hat{\boldsymbol{a}}_\lambda^\dagger \hat{\boldsymbol{a}}_\nu$, (où $\hat{\boldsymbol{a}}_\lambda$ est une notation générique désignant $\hat{\boldsymbol{b}}_\lambda$ pour les bosons, ou $\hat{\boldsymbol{c}}_\lambda$ pour les fermions).

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

$$\hat{\boldsymbol{F}} = \sum_{\lambda,\nu} \langle \lambda | \, \hat{\boldsymbol{f}} \, | \nu \rangle \, \hat{\boldsymbol{a}}_\lambda^\dagger \hat{\boldsymbol{a}}_\nu . \tag{I.22}$$

L'opérateur $\hat{\boldsymbol{a}}_\lambda^\dagger \hat{\boldsymbol{a}}_\nu$ fait la transition d'une particule de l'état ν à l'état λ. Si $\lambda = \nu$ cet opérateur est l'opérateur nombre de particules dans le mode λ.

Énergie cinétique totale des particules libres. — Exemple

Exemple : Énergie cinétique totale des particules libres.

Si l'on sait diagonaliser l'opérateur à une particule $\hat{\boldsymbol{f}}$, c'est-à-dire si l'on peut écrire : $\hat{\boldsymbol{f}} = \sum_k f_k \, |k\rangle \langle k|$, alors l'opérateur à N corps associé s'écrit : $\hat{\boldsymbol{F}} = \sum_k \langle k | \, \hat{\boldsymbol{f}} \, | k \rangle \, \hat{\boldsymbol{a}}_k^\dagger \hat{\boldsymbol{a}}_k$. On obtient ainsi une forme diagonale de $\hat{\boldsymbol{F}}$ en seconde quantification.
Un exemple immédiat est celui des **particules libres sans interaction**. On rappelle que : $\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}} \, |k\rangle = \varepsilon(k) \, |k\rangle$, avec $\varepsilon(k)$ l'énergie du mode k (I.5). En injectant $\hat{\boldsymbol{f}} = \hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}} \, (= \frac{\hat{p}^2}{2m})$ dans (I.22), on obtient l'énergie cinétique totale du système :

$$\hat{\boldsymbol{K}} = \sum_k \varepsilon(k) \, \hat{\boldsymbol{b}}_k^\dagger \hat{\boldsymbol{b}}_k . \tag{I.23}$$

Pour N particules libres, en écrivant l'état sous la forme (I.18), en utilisant les relations de commutation (I.14) et la définition de l'état de Fock (I.13), on trouve que $|\{k_a\}\rangle$ est un état propre de $\hat{\boldsymbol{K}}$ associé à l'énergie $\sum_{i=1}^N \varepsilon(k_i)$, c'est-à-dire :

$$\hat{\boldsymbol{K}} \, |\{k_a\}\rangle = \left(\sum_{i=1}^N \varepsilon(k_i) \right) |\{k_a\}\rangle \,. \tag{I.24}$$

Dans la base continue des positions $\{|x\rangle\}$. En injectant les relation des changement de base d'état (I.11) et de champ (A.267) (qui prend la même forme pour $\hat{\boldsymbol{a}}_\lambda$ et pour $\hat{\boldsymbol{a}}_\lambda^\dagger$), dans (I.22) on obtient :

$$\hat{\boldsymbol{F}} = \iint_0^L dx \, dy \, \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x) \, \langle x | \, \hat{\boldsymbol{f}} \, | y \rangle \, \hat{\mathbf{\Psi}}(y) . \tag{I.25}$$

Énergie cinétique totale des particules libres. → exemple

Exemple : Énergie cinétique totale des particules libres.

Reprenons l'exemple de l'énergie cinétique totale avec $\hat{f} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$. En injectant $\langle x|\,\hat{f}\,|y\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_y^2\delta(y-x)$ dans (I.25), on réécrit l'opérateur énergie cinétique total $\hat{K}$ de l'équation (I.23) :

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^L dx\,\hat{\Psi}^\dagger(x)\,\hat{\partial}_x^2\hat{\Psi}(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\int_0^L dx\,\hat{\partial}_x\hat{\Psi}^\dagger(x)\cdot\hat{\partial}_x\hat{\Psi}(x). \tag{I.26}$$

Lorsque cet Hamiltonien agit sur l'état de Fock à N particules libres $|\{k_a\}\rangle$, les règles de commutation (I.17) ainsi que la définition des états de Fock (I.16) impliquent (cf. Annexe B) :

$$\hat{K}\,|\{k_a\}\rangle = \int_0^L d^N z\,\hat{\mathcal{K}}_N\,\varphi_{\{k_a\}}(\{z_a\})\hat{\Psi}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\Psi}^\dagger(z_N)\,|\emptyset\rangle\,, \quad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{K}}_N = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2\hat{\partial}_{z_i}^2}{2m}, \tag{I.27}$$

où $-i\hbar\hat{\partial}_{z_i}$ désigne l'opérateur impulsion associé à la coordonnée z_i de la i-ème particule.

Quantité de mouvement totale et nombre total de particules. Dans l'exemple de l'énergie cinétique, l'opérateur $\hat{f}$ est proportionnel à l'opérateur impulsion au carré $\hat{p}^2$. On peut appliquer un raisonnement similaire à d'autres observables : pour le **nombre total de particules**, on prend $\hat{f} = \hat{p}^0$, c'est-à-dire l'identité et pour la **quantité de mouvement totale**, on choisit $\hat{f} = \hat{p}$ (puissance 1). On note $\hat{Q}$ l'opérateur nombre total de particule et $\hat{P}$ l'opérateur quantité mouvement totale .

Ces observables sont liées à des symétries fondamentales du système : $\hat{Q}$ est associé à la symétrie $U(1)$ (conservation du nombre de particules) ; $\hat{P}$ est associé à la translation (conservation de la quantité de mouvement).

Pour ces observables, les états $|\{k_a\}\rangle$ sont des états propres, et cela reste vrai **avec ou sans interaction**, tant que le système conserve ces symétries fondamentales. Ainsi, $|\{k_a\}\rangle$ diagonalise directement $\hat{Q}$ et $\hat{P}$, même en présence d'interactions locales qui respectent $U(1)$ et la translation.

En seconde quantification, ces opérateurs s'écrivent dans la base $\{|k\rangle\}$:

$$\hat{Q} = \sum_k \hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k, \quad \hat{P} = \hbar\sum_k k\,\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k, \tag{I.28}$$

Lorsqu'on les applique à un état de Fock à N particules $|\{k_a\}\rangle$, on obtient :

$$\hat{Q}\,|\{k_a\}\rangle = \left(\sum_{i=1}^N 1\right)|\{k_a\}\rangle\,, \quad \hat{P}\,|\{k_a\}\rangle = \hbar\left(\sum_{i=1}^N k_i\right)|\{k_a\}\rangle\,. \tag{I.29}$$

Dans la base position $\{|x\rangle\}$, les opérateurs s'écrivent :

$$\hat{Q} = \int_0^L dx\,\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x)\,, \quad \hat{P} = \frac{i\hbar}{2}\int_0^L dx\,\left\{\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\partial}_x\hat{\Psi}(x) - \left[\hat{\partial}_x\hat{\Psi}^\dagger(x)\right]\,\hat{\Psi}(x)\right\} \tag{I.30}$$

où l'expression symétrisée de $\hat{P}$ assure son hermiticité.
Lorsqu'on applique ces opérateurs à l'état $|\{k_a\}\rangle$, on obtient (comme pour l'énergie cinétique) :

$$\hat{Q}\,|\{k_a\}\rangle = \int_0^L d^N z\,\hat{\mathcal{N}}_N\,\varphi_{\{k_a\}}(\{z_a\})\hat{\Psi}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\Psi}^\dagger(z_N)\,|\emptyset\rangle\,, \qquad \text{avec} \qquad \hat{\mathcal{N}}_N = \sum_{i=1}^N 1, \tag{I.31}$$

$$\hat{P}\,|\{k_a\}\rangle = \int_0^L d^N z\,\hat{\mathcal{P}}_N\,\varphi_{\{k_a\}}(\{z_a\})\hat{\Psi}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\Psi}^\dagger(z_N)\,|\emptyset\rangle\,, \qquad \text{avec} \qquad \hat{\mathcal{P}}_N = -i\hbar\sum_{i=1}^N\hat{\partial}_{z_i}. \tag{I.32}$$

On s'avance sur le chapitre (II). , en voulant généraliser avec $\hat{f} = \hat{p}^q$ où q est un entier. Soit dans la base $\{|k_a\rangle\}$: $\hat{F} = \hbar^q \sum_k k^q \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$ et en l'appliquant à $|\{k_a\}\rangle$: On peut généraliser cette construction en considérant des opérateurs à une particule de la forme $\hat{f} = \hat{p}^q$, où q est entier. Dans la base impulsion $\{|k\rangle\}$, l'opérateur à N corps associé s'écrit : $\hat{F} = \hbar^q \sum_k k^q \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$ et son action sur un état de Fock libre est immédiatement

$$\hat{F}\,|\{k_a\}\rangle = \hbar^q \left(\sum_{i=1}^{N} k_i^q\right) |\{k_a\}\rangle\,, \tag{I.33}$$

Information

En représentation position $\{|x\rangle\}$, on obtient l'opérateur hermitisé $\hat{F} = \frac{\hbar^q}{2} \int_0^L \left\{\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\partial}_x^q\hat{\Psi}(x) + (-1)^q \left[\hat{\partial}_x^q\hat{\Psi}^\dagger(x)\right]\hat{\Psi}(x)\right\} dx$ et son action sur $|\{k_a\}\rangle$ se traduit par : $\hat{F}\,|\{k_a\}\rangle = \int_0^L d^N z\, \hat{\mathcal{F}}_N\, \varphi_{\{k_a\}}(\{z_a\})\hat{\Psi}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\Psi}^\dagger(z_N)\,|\emptyset\rangle$ avec $\hat{\mathcal{F}}_N = (-1)^q\hbar^q \sum_{i=1}^N (\hat{\partial}_{z_i})^q$.

L'opérateur $\hat{K}$ (énergie cinétique) ne représente l'énergie totale que dans le cas d'un gaz libre, sans interaction ni potentiel externe. Dans ce régime, les états de Fock $|k_a\rangle$ sont propres de $\hat{K}$ ainsi que de tous les opérateurs $\hat{F}$ construits pour $q \geq 0$.

Dès que des interactions entre particules sont introduites, ces états libres ne sont plus propres de l'Hamiltonien complet (cinétique + interaction), ni des opérateurs $\hat{F}$. Il faut alors considérer les états de Bethe $|\theta_a\rangle$, qui diagonalisent l'Hamiltonien complet, mais aussi les charges conservées fondamentales ($\hat{Q}$ et $\hat{P}$) et l'ensemble infini de charges d'ordre supérieur.

Dans ce cadre, les opérateurs $\hat{F}$ ne suffisent plus : il est nécessaire d'introduire des contributions à plusieurs corps pour tenir compte des interactions, ce qui conduit naturellement à la hiérarchie des charges locales d'intégrabilité.

A-1-c-ii Opérateurs à deux corps

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

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \langle 1:\alpha; 2:\beta|\,\hat{v}\,|1:\gamma; 2:\delta\rangle\; \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\delta \hat{a}_\gamma. \tag{I.34}$$

Cette forme est particulièrement utile pour le traitement des interactions dans l'espace de Fock.

Dans la base continue des positions $\{|x\rangle\}$. En injectant les relations des changements de base d'état (I.11) et de champ (A.267), dans (I.34) on obtient :

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \iiiint_0^L dx_1\, dx_2\, dx_1'\, dx_2'\; \langle 1:x_1, 2:x_2|\,\hat{v}\,|1:x_1', 2:x_2'\rangle\; \hat{\Psi}^\dagger(x_1)\,\hat{\Psi}^\dagger(x_2)\,\hat{\Psi}(x_2')\,\hat{\Psi}(x_1') \tag{I.35}$$

Interactions ponctuelles. Exemple

Exemple : Interactions ponctuelles.

Dans le cas d'une interaction ne dépendant que de la distance relative entre deux particules, $\langle 1:x_1, 2:x_2|\,\hat{v}\,|1:x_1', 2:x_2'\rangle = v(x_1-x_2)\delta(x_1-x_1')\delta(x_2-x_2')$, l'expression (I.35) se simplifie :

$$\hat{\boldsymbol{V}} = \frac{1}{2}\int dx_1\, dx_2\; v(x_1-x_2)\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x_1)\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x_2)\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x_2)\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x_1) \tag{I.36}$$

soit pour des interactions ponctuelles :

$$\hat{\boldsymbol{V}} = \frac{g}{2}\int dx\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x)\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x)\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x) \tag{I.37}$$

et quand on l'applique à l'état $|\{k_a\}\rangle$, les règles de commutations (I.17) et la définition d'état de Fock (I.16) impliquent que (cf Annexe B)

$$\hat{\boldsymbol{V}}\,|\{k_a\}\rangle = \int d^N z\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{V}}}_N\varphi_{\{k_a\}}(\{z_a\})\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)\,|\emptyset\rangle \quad \text{avec} \quad \hat{\boldsymbol{\mathcal{V}}}_N = g\sum_{1\le i<j\le N}\hat{\boldsymbol{\delta}}(z_i-z_j) \tag{I.38}$$

où g est la constante de couplage.

A-1-d Expression de l'Hamiltonien de Lieb-Liniger.

À partir d'ici, on fixe $\hbar = m = 1$. Ainsi, les dimensions (unités) des nombres d'onde k et des vitesses ne sont plus différenciées. Dans le formalisme des opérateurs de champs, l'Hamiltonien d'un système soumis à des interactions ponctuelles est la somme de l'énergie cinétique $\hat{\boldsymbol{K}}$ donnée par (I.26), et du terme d'interaction $\hat{\boldsymbol{V}}$ introduit dans (I.37) :

$$\hat{\boldsymbol{H}} \;=\; \int dx\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x)\left[-\frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\partial}}_x^2 + \frac{g}{2}\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\right]\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x). \tag{I.39}$$

Lorsqu'on applique cet Hamiltonien à un état à N particules, il est important de distinguer deux situations :

- **Sans interaction** ($g = 0$) : les états propres sont simplement les états de Fock en impulsion $|\{k_a\}\rangle$ définie en (I.18). Ce sont des produits d'ondes planes symétrisées.
- **Avec interaction** ($g \neq 0$) : les états propres ne sont plus des produits d'ondes planes. Ce sont les états de Bethe, que l'on note

$$|\{\theta_a\}\rangle \tag{I.40}$$

où les paramètres θ_a jouent le rôle de **quasi-moments (rapidités)**.Ceux-ci sont homogènes à un nombre d'onde ou à une vitesse, mais ne coïncident pas directement avec les impulsions libres k_a. La fonction d'onde correspondante est une combinaison linéaire de morceaux d'ondes planes, reliés par des phases de diffusion fixées par l'interaction locale.

Ainsi, la notation $|\{\theta_a\}\rangle$ est choisie pour rappeler que :

- en absence d'interaction, $\theta_a = k_a$ et l'on retrouve les états de Fock,
- en présence d'interaction, θ_a sont les quasi-moments de Bethe, qui généralisent les nombres d'onde libres.

En utilisant les équations (I.27) et (I.38), on obtient :

$$\hat{\boldsymbol{H}}\,|\{\theta_a\}\rangle = \int d^N z\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}_N\varphi_{\{\theta_a\}}(\{z_a\})\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)\,|\emptyset\rangle\,, \tag{I.41}$$

avec $\{\theta_a\} \equiv \{\,\theta_1, \cdots, \theta_N\}$ et

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}_N = \hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}}_N + \hat{\boldsymbol{\mathcal{V}}}_N \quad \text{où on rappelle} \quad \hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}}_N = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N \partial_{z_i}^2, \text{ et } \hat{\boldsymbol{\mathcal{V}}}_N = g\sum_{1\le i<j\le N}\hat{\boldsymbol{\delta}}(z_i-z_j). \tag{I.42}$$

A-1-d-i Équation du mouvement associée. L'équation du mouvement du champ $\hat{\mathbf{\Psi}}(x)$ s'obtient à partir de l'équation de Heisenberg :

$$i\hat{\partial}_t\hat{\mathbf{\Psi}} = [\hat{\mathbf{\Psi}}, \hat{H}]. \tag{I.43}$$

En évaluant explicitement le commutateur (I.17), on trouve :

$$i\hat{\partial}_t\hat{\mathbf{\Psi}} = -\frac{1}{2}\hat{\partial}_x^2\hat{\mathbf{\Psi}} + g\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger\hat{\mathbf{\Psi}}\hat{\mathbf{\Psi}}. \tag{I.44}$$

Il est important de souligner que cette équation est encore **quantique** : elle décrit l'évolution de l'opérateur de champ $\hat{\mathbf{\Psi}}$.

En revanche, si l'on prend l'approximation dite de **champ moyen**, où l'on remplace l'opérateur de champ par son espérance de valeur dans un état cohérent ou condensé

$$\Psi = \langle\hat{\mathbf{\Psi}}\rangle\,, \tag{I.45}$$

on obtient alors l'équation de Nonlinear Schrödinger (NLS) (ou équation de Gross–Pitaevskii (GP)) pour une fonction d'onde classique :

$$i\partial_t\Psi = -\frac{1}{2}\partial_x^2\Psi + g|\Psi|^2\Psi. \tag{I.46}$$

Ainsi, l'appellation « équation de Schrödinger non linéaire » n'est pertinente qu'au niveau **effectif classique** (champ moyen), et non au niveau fondamental de l'équation de Heisenberg pour les champs quantiques.

A-1-d-ii Conservation et commutation.

À propos d'autres interactions. La conservation des opérateurs nombre total de particules $\hat{\boldsymbol{Q}}$ et quantité totale de mouvement $\hat{\boldsymbol{P}}$ dépend uniquement des **symétries** de l'interaction, et non de sa force :

- Une interaction **locale et à deux corps** de type $g\,\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger\hat{\mathbf{\Psi}}\hat{\mathbf{\Psi}}$ (cas du modèle de LL) est invariante par $U(1)$ et par translation. Ainsi, $\hat{\boldsymbol{Q}}$ et $\hat{\boldsymbol{P}}$ sont conservés.
- Une interaction **à longue portée mais translationalement invariante** (par exemple un potentiel dipolaire uniforme, ou un potentiel $V(x-y)$ dépendant seulement de la distance relative) conserve encore $\hat{\boldsymbol{P}}$, et si elle respecte la symétrie $U(1)$, alors $\hat{\boldsymbol{Q}}$ reste aussi conservé.
- Une interaction **non uniforme ou dépendant explicitement de la position** (par exemple un potentiel externe $V(x)$, ou des bords durs) brise l'invariance par translation : $\hat{\boldsymbol{P}}$ n'est alors plus conservé.
- Une interaction qui **crée ou détruit des particules** brise la symétrie $U(1)$: $\hat{\boldsymbol{Q}}$ n'est plus conservé.

En résumé, la conservation de $\hat{\boldsymbol{Q}}$ et $\hat{\boldsymbol{P}}$ ne dépend pas de la nature microscopique de l'interaction, mais uniquement des **symétries correspondantes** de l'Hamiltonien.

Interactions de contact. Dans le cas particulier du modèle de LL, les opérateurs nombre total de particules $\hat{\boldsymbol{Q}}$ et quantité totale de mouvement $\hat{\boldsymbol{P}}$ commutent avec l'Hamiltonien $\hat{\boldsymbol{H}}$:

$$[\hat{\boldsymbol{H}}, \hat{\boldsymbol{Q}}] = 0, \qquad [\hat{\boldsymbol{H}}, \hat{\boldsymbol{P}}] = 0. \tag{I.47}$$

Ils constituent donc des **intégrales du mouvement**. Cette propriété reflète directement la conservation du nombre de particules (symétrie $U(1)$) et l'invariance par translation du système (symétrie spatiale).

Information

Nous verrons au chapitre II que, dans les systèmes intégrables tels que le modèle de LL, cette situation se généralise à l'existence d'une ***infinité d'intégrales du mouvement***. Cette richesse supplémentaire de quantités conservées a des conséquences profondes sur la dynamique hors d'équilibre, notamment sur les mécanismes de relaxation vers des états stationnaires. Elle mène naturellement à l'introduction de l'ensemble de Gibbs généralisé, ou GGE (Generalized Gibbs Ensemble).

A-1-d-iii États propres et valeurs propres. Les états propres $|\{\theta_a\}\rangle$, construits dans le cadre de la seconde quantification à partir de la solution du modèle de LL, sont simultanément fonctions propres des opérateurs $\hat{\boldsymbol{Q}}$, $\hat{\boldsymbol{P}}$ et $\hat{\boldsymbol{H}}$:

$$\hat{\boldsymbol{Q}}\,|\{\theta_a\}\rangle = N\,|\{\theta_a\}\rangle\,, \quad \hat{\boldsymbol{P}}\,|\{\theta_a\}\rangle = \left(\sum_{a=1}^{N}\theta_a\right)|\{\theta_a\}\rangle\,,\ \hat{\boldsymbol{H}}\,|\{\theta_a\}\rangle = \left(\frac{1}{2}\sum_{a=1}^{N}\theta_a^2\right)|\{\theta_a\}\rangle\,. \tag{I.48}$$

Conclusion

Conclusion. La première quantification constitue la base indispensable pour comprendre le comportement quantique d'un nombre fixe de particules. La seconde quantification en est une extension naturelle, nécessaire pour décrire des systèmes plus complexes où le nombre de particules peut varier. Elle repose sur la quantification des champs et l'introduction d'opérateurs de création et d'annihilation, ouvrant ainsi la voie à la physique quantique des champs et à de nombreuses applications modernes, telles que la physique des gaz quantiques ultrafroids, l'électrodynamique quantique (Quantum Electrodynamics (QED)), la physique des solides via le formalisme des quasi-particules (phonons, polarons, excitons), la théorie de la supraconductivité (décrite par le modèle de Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS)), ou encore les techniques de calcul utilisées dans les collisions de particules en physique des hautes énergies.

Les opérateurs $\hat{\boldsymbol{Q}}$, $\hat{\boldsymbol{P}}$ (I.30) et $\hat{\boldsymbol{H}}$ (I.39) possèdent une structure diagonale commune dans la base des états propres $|\{\theta_a\}\rangle$, révélant la nature intégrable du modèle de LL. Leurs valeurs propres sont respectivement les 0e, 1er et 2e moments des θ_a. Cette structure permet de généraliser la construction à une hiérarchie complète d'observables conservées, qui seront présentées au chapitre suivant.

En passant par la seconde quantification, nous avons pu relier l'Hamiltonien à une particule $\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}_1$ (I.3) à un Hamiltonien à N particules $\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}_N$ (I.42) dans le modèle de LL (système avec interactions ponctuelles). Les états $\varphi_{\{\theta_a\}}$ sont des états propres du nombre total de particules $\hat{\boldsymbol{\mathcal{N}}}_N$ (I.31), de la quantité de mouvement totale $\hat{\boldsymbol{\mathcal{P}}}_N$ (I.32) et de l'hamiltonien $\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}_N$.

Dans le cas d'un système à une particule, les états de la forme (I.9) sont déjà des états propres de $\hat{\boldsymbol{\mathcal{N}}}_1$, $\hat{\boldsymbol{\mathcal{P}}}_1$ et $\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}_1$ (cf. (I.4)). Mais quelle est leur forme pour N particules ? Et comment généraliser les conditions périodiques (I.7), valables pour une particule, à un système à N particules ?

Nous allons étudier le cas de $N = 2$ corps, afin de simplifier l'analyse tout en capturant les premiers effets non triviaux des interactions. Cela permettra de comprendre plus facilement les implications physiques des interactions ponctuelles, en particulier leur influence sur la structure des états propres, les conditions de continuité des fonctions d'onde, ainsi que les relations de dispersion modifiées. Ce cas servira de base pour introduire les concepts clés de la résolution exacte par la méthode de Bethe Ansatz (BA), avant de les généraliser au cas à N-corps.

A-2 Fonction d'onde et Hamiltonien et moment à 2 corps

A-2–i Introduction au système de deux bosons avec interaction de contact. Considérons maintenant un système de deux bosons confinés dans une boîte unidimensionnelle de longueur L, avec des conditions aux limites périodiques. Contrairement au cas à une seule particule, une interaction de contact intervient ici dans la dynamique. L'Hamiltonien à deux particules s'écrit :

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}_2 = \hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}}_2 + \hat{\boldsymbol{\mathcal{V}}}_2, \quad \text{avec} \quad \hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}}_2 = -\frac{1}{2}\partial_{z_1}^2 - \frac{1}{2}\partial_{z_2}^2, \text{ et } \hat{\boldsymbol{\mathcal{V}}}_2 = g\,\delta(z_1 - z_2). \tag{I.49}$$

On rappelle que, pour des particules de masse unitaire (i.e., $\hbar = m = 1$), les énergies propres de l'opérateur cinétique $\hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}}_2$, associées aux fonctions d'onde symétrisées $\varphi_{\{\theta_1,\theta_2\}}$, sont données par :

$$\varepsilon(\theta_1) + \varepsilon(\theta_2) = \frac{\theta_1^2}{2} + \frac{\theta_2^2}{2}. \tag{I.50}$$

Afin de simplifier le problème, nous nous plaçons dans le référentiel du centre de masse.

A-2–ii Changement de variables : coordonnées du centre de masse et relative. En première quantification, on introduit les nouvelles variables : $Z = \frac{z_1+z_2}{2}$ (centre de masse), $Y = z_1 - z_2$ (coordonnée relative). Dans ce changement de variables, l'opérateur laplacien total $\partial^2_{z_1} + \partial^2_{z_2}$ devient $\frac{1}{2}\partial^2_Z + 2\,\partial^2_Y$. L'Hamiltonien (I.49) se décompose alors en la somme de deux Hamiltoniens agissant respectivement sur Z et Y :

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = -\frac{1}{4}\partial^2_Z + \hat{\mathcal{H}}_{\rm rel}, \qquad \text{avec} \quad \hat{\mathcal{H}}_{\rm rel} = -\partial^2_Y + g\,\delta(Y). \tag{I.51}$$

A-2–iii Résolution du problème du centre de masse et de la coordonnée relative. L'Hamiltonien du centre de masse, $-\frac{1}{4}\partial^2_Z$, décrit une particule de masse totale $\bar{m} = 2$. Ses états propres sont des ondes planes associées à une énergie $\overline{\theta}^2$, avec : $\overline{\theta} = \frac{\theta_1+\theta_2}{2}$, jouant ici un rôle analogue à celui d'un pseudo-moment associé dans le référentiel du laboratoire. L'Hamiltonien relatif, $\hat{\mathcal{H}}_{\rm rel}$, correspond quant à lui à une particule de masse réduite $\tilde{m} = \frac{1}{2}$ soumise à un potentiel delta centré en $Y = 0$. Son état propre $\tilde{\varphi}(Y)$ satisfait l'équation de Schrödinger suivante :

$$-\partial^2_Y\,\tilde{\varphi}(Y) + g\,\delta(Y)\,\tilde{\varphi}(Y) = \tilde{\varepsilon}\,\tilde{\varphi}(Y), \tag{I.52}$$

où $\tilde{\varepsilon}$ désigne l'énergie associée au mouvement relatif.

A-2–iv Forme symétrique de la fonction d'onde pour des bosons. Dans le référentiel du centre de masse, le système est le même que celui d'une particule de masse $\tilde{m} = \frac{1}{2}$. Le système étant composé de particules bosoniques, on cherche une solution symétrique que l'on écrit sous la forme (I.6) :

$$\tilde{\varphi}(Y) \;=\; a\,e^{i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} + b\,e^{-i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} \;\propto\; \sin\left(\frac{1}{2}(\tilde{\theta}|Y| + \Phi)\right). \tag{I.53}$$

Le paramètre $\tilde{\theta} = \theta_1 - \theta_2$ joue ici un rôle analogue à celui d'un pseudo-moment associé à la coordonnée relative, et la phase Φ s'écrit (avec la définition usuelle de l'arctangente complexe,)

$$\Phi(\tilde{\theta}) \quad = \quad 2\arctan\left(\frac{1}{i}\frac{a+b}{a-b}\right), \tag{I.54}$$

car $a\exp(ix) + b\exp(-ix) = 2\sqrt{ab}\sin\left(x + \arctan\left(-i\,\frac{a+b}{a-b}\right)\right)$. Pour $\tilde{\theta} < 0$, les termes exponentiels $\exp(i\tilde{\theta}|Y|/2)$ et $\exp(-i\tilde{\theta}|Y|/2)$ correspondent aux paires de particules entrantes et sortantes d'un processus de diffusion à deux corps.

En réinjectant l'ansatz (I.53) dans l'équation relative (I.52), on obtient l'énergie propre $\tilde{\varepsilon}$ du problème réduit. Elle prend la forme cinétique usuelle $\frac{1}{2} \times$ masse $\times$ vitesse^2. La masse réduite vaut ici $\tilde{m} = \frac{1}{2}$ et le paramètre $\tilde{\theta}$ joue le rôle d'une impulsion ; ainsi

$$\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}) \;=\; \frac{\tilde{\theta}^2}{4}. \tag{I.55}$$

Dans le cas d'un couplage attractif ($g < 0$), cette énergie détermine la décroissance exponentielle de la fonction d'onde le long de la coordonnée relative : plus $\tilde{\theta}$ est grand, plus l'état est localisé autour de $Y = 0$, témoignant d'une interaction attractive plus forte entre les deux bosons.

La fonction d'onde relative présente des oscillations de fréquence $\tilde{\theta}/2$, et son énergie croît proportionnellement à $\tilde{\theta}^2$. Cette solution correspond à un état de diffusion à deux corps avec interaction ponctuelle. En revanche, une décroissance exponentielle autour de $Y = 0$ n'apparaît que pour un couplage attractif ($g < 0$), condition nécessaire à la formation d'états liés.

L'énergie totale se décompose enfin en la somme du mouvement du centre de masse et du mouvement relatif : $\overline{\theta}^2 + \tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}) = \varepsilon(\theta_1) + \varepsilon(\theta_2)$, où $\overline{\theta} = \frac{\theta_1+\theta_2}{2}$.

A-2–v Condition de discontinuité à cause du potentiel delta. En raison de la présence du potentiel delta centré en $Y = 0$, la dérivée première de la fonction d'onde $\tilde{\varphi}(Y)$ présente une discontinuité en ce point. En effet, le potentiel étant infini en $Y = 0$, la phase Φ du régime symétrique est déterminée en intégrant

l'équation du mouvement autour de la singularité. En intégrant entre $-\epsilon$ et $+\epsilon$ et en faisant tendre $\epsilon \to 0$, on obtient la condition de saut de la dérivée :

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

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

A-2–vi Détermination de la phase Φ. Et en évaluant la discontinuité de sa dérivée au point $Y = 0$, on trouve que la phase Φ satisfait la condition :

$$\Phi(\tilde{\theta}) \quad = \quad 2\arctan(\tilde{\theta}/g) \in [-\pi, +\pi]. \tag{I.56}$$

Cette relation exprime l'effet de l'interaction delta sur la phase de la fonction d'onde à deux particules. On en déduit que plus le couplage g est fort ($g \to \infty$), plus la phase Φ se rapproche de zéro. Cela correspond à une fonction d'onde qui s'annule en $Y = 0$, caractéristique d'un régime d'imperméabilité totale.

À l'inverse, dans la limite d'une interaction faible ($g \to 0$), la phase Φ tend vers π (ou $-\pi$, selon le signe de $\tilde{\theta}$). Dans ce cas, la discontinuité de la dérivée de la fonction d'onde au point $Y = 0$ devient négligeable, ce qui traduit une interaction absente entre les deux particules.

A-2–vii Phase de diffusion à deux corps. En combinant les équations (I.54) et (I.56) avec l'identité analytique valable pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \{\pm i\}$, $2\arctan(z) = i\ln\left(\frac{1-iz}{1+iz}\right)$ *i.e.* $e^{2i\arctan(z)} = \frac{1+iz}{1-iz}$, on obtient que le rapport des amplitudes a et b de la fonction d'onde relative (I.53) définit la *phase de diffusion* $\Phi(\tilde{\theta}) = i\ln\left(-\frac{b}{a}\right)$. On introduit alors la *matrice de diffusion* (ou *facteur de diffusion*) noté $S(\theta)$, définie comme une phase complexe :

$$S(\theta) \doteq e^{i\Phi(\theta)} \tag{I.57}$$

Dans le cas d'une interaction de type delta, cette fonction prend la forme explicite :

$$S(\tilde{\theta}) = \frac{1 + i\,\tilde{\theta}/g}{1 - i\,\tilde{\theta}/g}. \tag{I.58}$$

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

A-2–viii Lien entre la phase de diffusion et le décalage temporel — interprétation semi-classique Wigner (1955) [Wig55], à la suite d'Eisenbud (1948) [Eis48], a mis en évidence un lien entre la **phase de diffusion** et un *décalage temporel*, interprétation qui peut être éclairée dans une perspective semi-classique. L'idée de Wigner repose sur l'analyse d'un paquet d'ondes incident, constitué de la superposition de deux ondes planes de moments voisins, $\tilde{\theta}/2$ et $\tilde{\theta}/2 + \delta\tilde{\theta}$:

$$\tilde{\varphi}_{\text{inc}}(Y) \quad \propto \quad e^{i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|} + e^{i\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|}. \tag{I.59}$$

Cette superposition évolue dans le temps comme :

$$\tilde{\psi}_{\text{inc}}(Y,t) \quad \propto \quad e^{i\left(\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y| - t\,\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta})\right)} + e^{i\left(\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y| - t\,\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})\right)}. \tag{I.60}$$

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 $\tilde{\theta} = 2\tilde{\varepsilon}'(\tilde{\theta})$. Selon les équations (I.53) et (I.58), l'état sortant de la diffusion correspondant serait :

$$\tilde{\psi}_{outc}(Y,t) \quad \propto \quad -e^{i\Phi(\tilde{\theta})}e^{-i\frac{1}{2}\tilde{\theta}|Y|}\,e^{-i\,\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta})t} - e^{i\Phi(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})}e^{-i\frac{1}{2}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})|Y|},\,e^{-i\,\tilde{\varepsilon}(\tilde{\theta}+2\delta\tilde{\theta})t}. \tag{I.61}$$

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.

$$|Y| \quad \simeq \quad \tilde{\theta}t - 2\Delta(\tilde{\theta}) \tag{I.62}$$

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

$$\Delta(\theta) \quad \doteq \quad \frac{d\Phi}{d\theta}(\theta) = \frac{2g}{g^2 + \theta^2}. \tag{I.63}$$

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

$$z_1 = Z + \frac{Y}{2} \;\simeq\; \theta_1 t - \Delta(\theta_1 - \theta_2), \quad z_2 = Z - \frac{Y}{2} \;\simeq\; \theta_2 t + \Delta(\theta_1 - \theta_2). \tag{I.64}$$

La figure I.1 illustre schématiquement la collision de deux particules et le décalage spatial $\Delta(\theta_1 - \theta_2)$ qui en résulte dans l'évolution semi-classique de leurs positions.

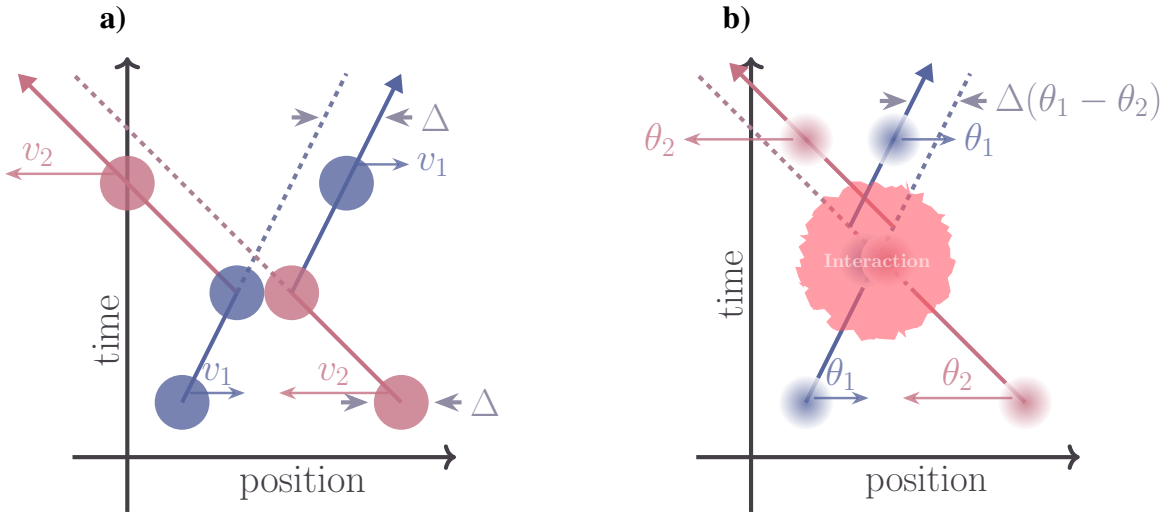


Figure I.1 – Schéma de la collision entre deux quasi-particules illustrant le décalage spatial $\Delta(\theta_1 - \theta_2)$.(a) description classique (sphère dure) ; (b) description quantique.

On peut vérifier les identités utiles suivantes :

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

ce qui est en accord avec les masses associées : masse totale $\overline{m} = 2$, masse réduite $\tilde{m} = \frac{1}{2}$.

Pour revenir à la représentation observée dans le laboratoire, il est nécessaire de multiplier l'ansatz dans le référentiel du centre de masse (Eq. (I.53)) par un facteur de phase globale $\exp(2iZ\overline{\theta})$. On obtient alors l'expression de la fonction d'onde :

$$\varphi_{\{\theta_1,\theta_2\}}(z_1,z_2) \;\propto\; \begin{cases} (\theta_2 - \theta_1 - ig)e^{iz_1\theta_1 + iz_2\theta_2} - (\theta_1 - \theta_2 - ig)e^{iz_1\theta_2 + iz_2\theta_1} & \text{si} \quad z_1 < z_2 \\ (z_1 \leftrightarrow z_2) & \text{si} \quad z_1 > z_2 \end{cases} \tag{I.65}$$

Pour $\theta_1 > \theta_2$, les deux termes exponentiels $e^{iz_1\theta_1 + iz_2\theta_2}$ et $e^{iz_1\theta_2 + iz_2\theta_1}$ correspondent respectivement aux ondes entrantes et sortantes dans le canal de diffusion à deux corps [BD22]. Le rapport de leurs amplitudes définit la **phase de diffusion** Φ et la **matrice diffusion** S à deux corps (I.58), reste inchangée, mais en voici une autre écriture :

$$S(\theta_1 - \theta_2) = \frac{\theta_1 - \theta_2 - ig}{\theta_2 - \theta_1 - ig}. \tag{I.66}$$

Cette phase caractérise entièrement le processus de diffusion dans le modèle de LL à deux particules.

A-2–x Conditions périodiques et équations de Bethe pour deux bosons. Dans ce paragraphe, on écrit la fonction d'onde obtenue en (I.65) sous la forme

$$\varphi_{\{\theta_1<\theta_2\}}(z_1,z_2) \;=\; a\, e^{iz_1\theta_1 + iz_2\theta_2} + b\, e^{iz_1\theta_2 + iz_2\theta_1}, \tag{I.67}$$

où a et b sont deux coefficients complexes.

Périodicité en z_2. On impose une condition de périodicité sur la fonction (I.67) : $\varphi_{\{\theta_1,\theta_2\}}(z_1, z_2 = L) = \varphi_{\{\theta_1,\theta_2\}}(z_1, z_2 = 0)$, avec $0 < z_1 < z_2 = L$. Au point $z_2 = L$, la configuration reste dans le secteur $z_1 < z_2$, tandis qu'à $z_2 = 0$, on entre dans le secteur $z_2 < z_1$. La continuité de la fonction d'onde impose alors d'échanger les coordonnées $z_1 \leftrightarrow z_2$: $\varphi_{\{\theta_1,\theta_2\}}(z_1, L) = \varphi_{\{\theta_1,\theta_2\}}(0, z_1)$. En utilisant l'expression explicite de l'ansatz dans les deux secteurs, on obtient l'égalité suivante :

$$a\, e^{i\theta_1 z_1 + i\theta_2 L} + b\, e^{i\theta_2 z_1 + i\theta_1 L} \quad = \quad a\, e^{i\theta_2 z_1} + b\, e^{i\theta_1 z_1}. \tag{I.68}$$

Cette relation, valable pour tout $z_1 \in [0, L]$, fixe une contrainte sur le rapport b/a. En utilisant l'expression de la phase de diffusion introduite en (I.66) (valable pour $z_1 < z_2$), on a :

$$-\frac{b}{a} = e^{i\Phi(\theta_1-\theta_2)}, \tag{I.69}$$

avec la fonction Φ donnée par l'équation (I.56).

On obtient une condition sur les phases θ_1 et θ_2, cœur de la quantification imposée par le formalisme de Bethe. En identifiant les coefficients de $e^{i\theta_1 z_1}$ et $e^{i\theta_2 z_1}$ indépendamment dans (I.68) , on obtient $e^{i\theta_2 L}\, a = b$, $e^{i\theta_1 L}\, b = a$, c'est-à-dire en utilisant (I.69), les **équations de BA à deux particules** :

$$e^{i\theta_1 L}\, e^{i\Phi(\theta_1-\theta_2)} = -1, \qquad e^{i\theta_2 L}\, e^{i\Phi(\theta_2-\theta_1)} = -1. \tag{I.70}$$

En prenant le logarithme, elles se réécrivent sous la forme usuelle :

$$\theta_1 L + \Phi(\theta_1 - \theta_2) = 2\pi I_1, \qquad \theta_2 L + \Phi(\theta_2 - \theta_1) = 2\pi I_2, \tag{I.71}$$

où $I_1, I_2 \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$ sont des nombres demi-entiers.

Périodicité sur z_1. Le raisonnement symétrique conduit exactement aux mêmes égalités (I.70) et (I.71). Ces équations constituent la quantification complète du gaz de Lieb–Liniger à deux bosons sur un cercle de longueur L et seront le point de départ pour l'étude de l'état fondamental et des excitations.

En comparaison avec le cas d'une seule particule (où la condition aux bords périodiques impose simplement $\theta L = 2\pi n$ (I.7)), on voit que les équations de BA à deux particules (I.70)–(I.71) incorporent la fonction Φ, qui encode explicitement l'**interaction entre particules**.

A-2-a Interprétation physique pour deux particules et rôle de la rapidité

Pour bien comprendre le sens physique des équations de BA (I.71), nous avons commencé par le cas de deux particules. Dans ce cadre, les particules interagissent lorsqu'elles se croisent, et à chaque interaction elles acquièrent une **phase de diffusion** Φ. L'état propre du système est obtenu en imposant que l'onde multi-corps soit périodique sur un cercle de longueur L : chaque particule effectue une rotation complète, accumule une phase cinématique $e^{i\theta L}$ liée à son mouvement libre, ainsi que des contributions de phase dues aux diffusions avec l'autre particule. Cela donne lieu à une quantification des **pseudo-impulsions** θ via l'équation de BA.

Pour décrire ces **excitations** , ces **quasi-particules**, on introduit le paramètre θ appelé **rapidité**. Ce terme vient de la théorie relativiste [ZZ79 ; BBT03], mais reste pertinent même dans des modèles non relativistes, comme ici. La rapidité est choisie comme **paramètre spectral naturel** : elle étiquette les états propres, linéarise les relations de dispersion dans certains régimes, et elle simplifie considérablement les équations de BA.

On peut interpréter chaque θ comme la **vitesse d'une quasi-particule** : une entité collective qui se comporte comme une particule libre, mais qui tient compte des effets des interactions avec les autres. Contrairement à une particule élémentaire, une **quasi-particule** est une excitation émergente du système à plusieurs corps : elle résume de façon efficace le comportement collectif d'une particule « habillée » par son environnement d'interactions. Cette notion est centrale en physique des systèmes quantiques à N corps, où les excitations ne sont plus des particules indépendantes, mais des objets collectifs.

Ainsi , dans le cas à deux corps, les équations de BA quantifient les valeurs possibles des rapidités θ_1 et θ_2 en fonction de la taille du système L et de l'interaction entre particules via la phase de diffusion $\Phi(\theta_1 - \theta_2)$. Chaque solution (θ_1, θ_2) correspond à un état propre du système, où les deux quasi-particules se propagent avec des vitesses θ_1 et θ_2, tout en incorporant les effets d'interaction. Dans l'image de Bethe, les états propres sont des configurations stables de N quasi-particules de rapidités $\theta_1, \ldots, \theta_N$, dont les valeurs sont quantifiées par les conditions d'interactions imposées par les équations de BA.

B Équation de Bethe et distribution de rapidité

B-1 Fonction d'onde dans le secteur ordonné et représentation de Gaudin

Sans en faire ici la démonstration, donnons une forme généralisée de la fonction propre à N particules (Eq (I.21)), qui prolonge naturellement l'expression obtenue pour le cas à deux corps (Eq (I.65) et Annex A). Dans le domaine $z_1 < z_2 < \cdots < z_N$, la fonction d'onde pour un état de Bethe à N particules s'écrit [KIB93 ; GC12 ; LL63 ; Fra16 ; Wou15]) :

$$\begin{aligned}\varphi_{\{\theta_a\}}(z_1 < \cdots < z_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle\emptyset|\hat{\Psi}(z_1)\cdots\hat{\Psi}(z_N)|\{\theta_a\}\rangle \\ &\propto \sum_{\sigma}(-1)^{|\sigma|}\left(\prod_{1\le a<b\le N}(\theta_{\sigma(b)}-\theta_{\sigma(a)}-ig)\right)e^{i\sum_{j=1}^{N}z_j\theta_{\sigma(j)}},\end{aligned} \tag{I.72}$$

où la somme s'étend sur toutes les permutations σ de $\{1,\dots,N\}$. Le facteur $(-1)^{|\sigma|}$ est la signature de la permutation, et les amplitudes dépendent des différences de quasi-moments θ_j ainsi que du couplage g. Cette fonction d'onde est ensuite étendue par symétrie aux autres domaines du type $z_{\pi(1)} < z_{\pi(2)} < \cdots < z_{\pi(N)}$ via des propriétés d'échange symétriques.

B-2 Conditions aux bords périodiques

Les équations précédentes ont été établies pour un système défini sur la droite réelle. Cependant, dans une perspective thermodynamique, il est essentiel de considérer une densité finie N/L. Cela peut être obtenu en compactifiant l'espace sur un cercle de longueur L, i.e. en imposant les *conditions aux bords périodiques*.

Concrètement, cela consiste à identifier $x = 0$ et $x = L$ et à exiger que la fonction d'onde soit périodique lorsqu'une particule fait le tour du système :

$$\varphi_{\{\theta_a\}}(x_1,\dots,x_{N-1},L) = \varphi_{\{\theta_a\}}(0,x_1,\dots,x_{N-1}). \tag{I.73}$$

Cette condition doit être satisfaite pour chaque particule. Or, déplacer la j-ième particule de x_j à $x_j + L$ revient à la faire passer devant toutes les autres : cela introduit un facteur de diffusion à chaque croisement.

B-2-a Équations de Bethe exponentielles

En imposant les conditions de périodicité sur la fonction d'onde de type Bethe (I.72), on généralise l'équation(I.70) pour N particules. On obtient que chaque moment θ_a doit satisfaire l'équation :

$$e^{i\theta_a L}\prod_{b\neq a}S(\theta_a-\theta_b) = (-1)^{N-1}, \quad a = 1,\dots,N, \tag{I.74}$$

où la matrice diffusion $S(\theta)$ définie en (I.57), (I.58) et (I.66) est l'amplitude de diffusion à deux corps. Le signe $(-1)^{N-1}$ vient du fait que chaque permutation change la signature du déterminant dans la représentation de Gaudin.

B-2-b Équations de Bethe logarithmiques

En prenant le logarithme du membre gauche et du membre droit de l'équation (I.74), on généralise l'équation (I.71). On obtient sa forme *logarithmique* :

$$L\theta_a + \sum_{b=1}^{N}\Phi(\theta_a-\theta_b) = 2\pi I_a, \qquad a = 1,\dots,N, \tag{I.75}$$

où les I_a sont des nombres quantiques. Ce sont des entiers $I_a \in \mathbb{Z}$ si N est impair, et des demi-entiers $I_a \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$ si N est pair.

Dans la configuration d'état fondamental (ou de type "mer de Fermi"), ces nombres sont pris de manière symétrique autour de zéro (voir Fig I.2(a)) :

$$I_a = a - \frac{N+1}{2}, \quad \text{pour } a \in [\![1,N]\!]. \tag{I.76}$$

ce qui correspond au choix symétrique des nombres quantiques pour l'état fondamental. Il en résulte une distribution uniforme des θ_a dans l'intervalle autour de zéro $[-\theta_{\max}, \theta_{\max}]$ où $\theta_{\max}$ est le paramètre de Fermi (ou rapidité maximale).

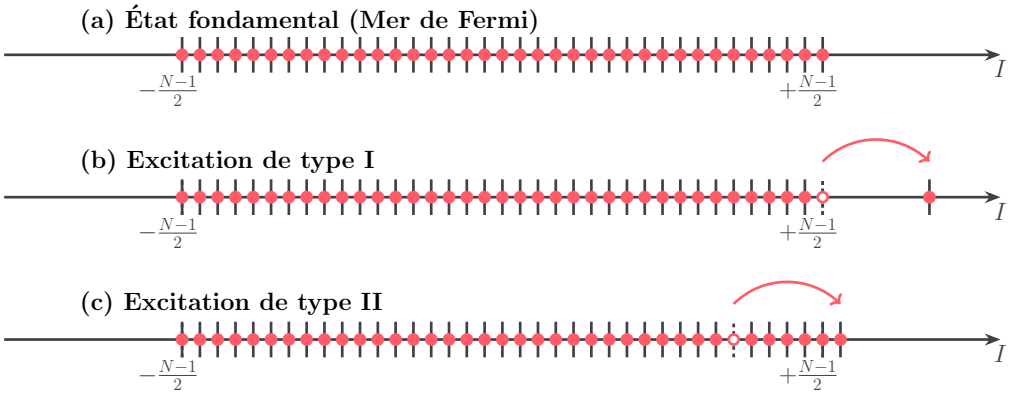


FIGURE I.2 – Représentation schématique de la mer de Fermi pour un système de N particules : (a) distribution occupée à l'état fondamental, analogue à une mer de Fermi idéale ; (b) modification de cette distribution sous l'effet d'une excitation élémentaire de type I ; (c) modification correspondante en présence d'une excitation élémentaire de type II.

Tous les nombres I_a sont distincts. Cette propriété établit un lien direct avec un gaz de **fermions libres** en une dimension : bien que les particules du modèle de LL soient bosoniques, la structure des équations de BA impose une exclusion effective au niveau des nombres quantiques. Pour cette raison, on parle de **nombres quantiques fermioniques**. L'équation de BA (I.75) définit ainsi une bijection entre une configuration de rapidité $\{\theta_a\}$ (BA) et un ensemble de nombres quantiques $\{I_a\}$ (Fermionic Bethe Ansatz (FBA)) [Gir60].

En particulier, dans la limite d'**interaction forte** (*i.e.* $g \to \infty$ c'est-à-dire si $\Phi = 0$), les équations (I.75) se réduisent à $L\theta_a = 2\pi I_a$, soit $\theta_a = 2\pi I_a/L$. Cela correspond exactement aux quantifications de l'impulsion pour des **fermions libres sans spin**, dans une boîte de taille L, avec conditions aux bords périodiques.

L'interprétation est alors la suivante : les solutions de Bethe θ_a décrivent des quasi-particules interagissantes, dont la configuration est déterminée par l'ensemble des nombres quantiques I_a, eux-mêmes analogues aux **moments quantiques d'un gaz de fermions libres**.

B-2-c Interprétation physique

Les équations de BA (I.75) représentent une *quantification des pseudo-impulsions* θ_a des particules en interaction, résultant d'un *interféromètre multi-corps sur le cercle* : chaque particule accumule une phase $e^{i\theta_a L}$ due au mouvement libre, ainsi que des phases de diffusion lorsqu'elle croise les autres.

Ce système d'équations non linéaires couple toutes les rapidités θ_a entre elles via la fonction de phase de diffusion $\Phi(\theta_a - \theta_b)$, qui encode les interactions à deux corps. La résolution de ces équations permet de déterminer les valeurs permises des rapidités θ_a, et donc les états propres du système. Ce système d'équations détermine les états propres du système de Lieb–Liniger en volume fini, et joue un rôle fondamental dans la description exacte de ses propriétés thermodynamiques et dynamiques.

B-3 Thermodynamique du gaz de Lieb–Liniger à l'état fondamental

Dans la limite thermodynamique, le nombre de particules N et la longueur L du système tendent vers l'infini de telle sorte que leur rapport reste fini :

$$\lim_{\substack{L\to\infty \\ N\to\infty}} \frac{N}{L} = n < \infty,$$

où n désigne la densité linéique de particules.

Considérons désormais le système à température nulle. L'état fondamental dans le secteur à nombre de particules fixé correspond à la configuration d'énergie minimale parmi les solutions des équations de BA (I.75).

Dans la limite thermodynamique ($\lim_{\text{therm}} \equiv \lim_{\substack{L,N\to\infty,\infty \\ N/L=\text{cnst}}}$) , les valeurs de θ_a deviennent quasi-continues, avec un espacement $\theta_{a+1} - \theta_a = O(1/L)$, et se condensent dans un intervalle symétrique autour de zéro $[-\theta_{\max}, \theta_{\max}]$. En supposant que l'ordre $I_a \geq I_b$ implique que $\theta_a \geq \theta_b$, cet intervalle constitue ce qu'on appelle la *mer de Fermi* (ou sphère de Fermi en dimension un).

B-3–i Distribution de rapidité $\rho(\theta)$. Nous introduisons la **distribution de rapidité macroscopique** par unité de longueur, notée $\rho(\theta)$, définie par

$$L\rho(\theta)\delta\theta \quad \doteq \quad \text{nombre de quasi-particules ayant une rapidité dans } [\theta, \theta + \delta\theta]. \tag{I.77}$$

Autrement dit, dans un petit intervalle $\delta\theta$, le nombre total de particules ayant une rapidité dans cet intervalle est approximativement :

$$\delta N(\theta) \quad = \quad L\rho(\theta)\delta\theta \tag{I.78}$$

Avec les rapidités θ_a ordonnées *i.e.* $\theta_1 < \theta_2 < \cdots < \theta_N$.

Pour des intervalles $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta_a]$ assez petits, on a $\delta\theta_a = \theta_{a+1} - \theta_a$. Cela correspond à $\delta N(\theta_a) = 1$ quasi-particule, car une seule particule occupe l'intervalle entre deux rapidités consécutives. Dans la limite thermodynamique la dernière équation (I.78) se réécrit comme :

$$\rho(\theta_a) \quad = \quad \lim_{\text{therm}} \frac{1}{L} \cdot \frac{1}{\theta_{a+1} - \theta_a} > 0. \tag{I.79}$$

On peut aussi écrire la distribution de rapidité sous la forme :

$$\rho(\theta) \quad = \quad \lim_{\text{therm}} \frac{1}{L} \sum_{a=1}^{N} \delta(\theta - \theta_a), \tag{I.80}$$

où $\delta(\cdot)$ est la distribution delta de Dirac.

B-3–ii Densité d'états $\rho_s(\theta)$. Intéressons-nous maintenant à la **densité d'états** $\rho_s(\theta)$, définie par

$$\rho_s(\theta_a) \quad \doteq \quad \frac{1}{L} \lim_{\text{therm}} \frac{|I_{a+1} - I_a|}{|\theta_{a+1} - \theta_a|}, \tag{I.81}$$

soit en notant la fonction $I(\theta_a) = I_a$, le passage discret-continu permet d'écrire :

$$2\pi\rho_s(\theta_a) \quad = \quad \frac{2\pi}{L} \frac{\partial I}{\partial \theta}(\theta_a). \tag{I.82}$$

L'application des équations de BA sous forme logarithmique (I.75) conduit alors à

$$2\pi\rho_s(\theta_a) = 1 + \frac{1}{L} \sum_{b=1}^{N} \Delta(\theta_a - \theta_b), \tag{I.83}$$

ce qui relie ρ_s au déplacement collisionel Δ défini dans l'équation (I.63).

Dans l'état fondamental, toutes les positions disponibles dans l'intervalle $[-\theta_{\max}, +\theta_{\max}]$ sont occupées. On a donc :

$$\rho(\theta) = \rho_s(\theta). \tag{I.84}$$

La quantité $L\rho(\theta)d\theta$ représente le nombre de rapidités dans la cellule infinitésimale $[\theta, \theta + d\theta]$, tandis que $N = L\int_{-\theta_{\max}}^{+\theta_{\max}} \rho(\theta)\, d\theta$ donne le nombre total de particules dans le système. Le passage de la somme discrète à l'intégrale dans le second membre de l'équation de BA s'effectue en utilisant la correspondance :

$$\frac{1}{L} \sum_{b=1}^{N} \Delta(\theta_a - \theta_b) \underset{\text{therm}}{\longrightarrow} \int_{-\theta_{\max}}^{+\theta_{\max}} \Delta(\theta_a - \theta)\, \rho(\theta)\, d\theta. \tag{I.85}$$

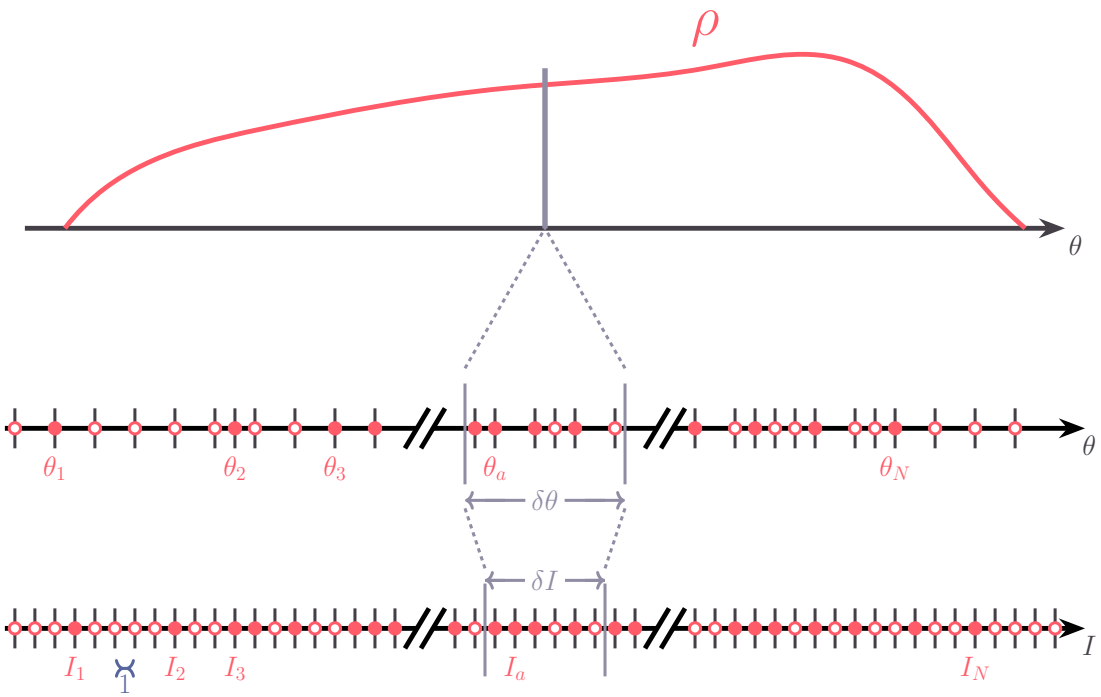


FIGURE I.3 – Illustration de la relation entre la densité d'états à l'état fondamental, $\rho(\theta) = \rho_s(\theta)$, et les nombres quantiques fermioniques I_a. Les rapidités contenues dans l'intervalle $[\theta, \theta + \delta\theta]$ correspondent à un ensemble de nombres quantiques fermioniques situés dans $[I, I + \delta I]$. À l'état fondamental, la densité d'états se déduit de la relation $\delta I \simeq L\,\rho(\theta)\,\delta\theta$.

Ainsi, l'équation pour la densité d'états (I.83) devient (Fig I.3) :

$$2\pi\rho_s(\theta) = 1 + \int_{-\theta_{\max}}^{+\theta_{\max}} \Delta(\theta - \theta')\,\rho(\theta')\,d\theta', \tag{I.86}$$

et, comme $\rho = \rho_s$ dans l'état fondamental, on obtient l'équation linéaire intégrale satisfaite par la distribution de rapidités dans cet état :

$$\rho(\theta) - \int_{-\theta_{\max}}^{+\theta_{\max}} \frac{\Delta(\theta - \theta')}{2\pi}\rho(\theta')\,d\theta' = \frac{1}{2\pi}. \tag{I.87}$$

B-4 Excitations élémentaires

À partir de l'état fondamental dans le régime d'interaction forte, les excitations élémentaires du modèle de LL ont été classifiées par Lieb en deux types distincts [Lie63]. Ces excitations peuvent être comprises comme des perturbations de la mer de Fermi formée par les quasi-particules.

- **Excitations de type I :** Il s'agit de remplacer une quasi-particule avec un nombre fermionique au bord de Fermi I_N (ou I_{-N}) par une quasi-particule avec un nombre fermionique $I' > I_N$ (resp.$I' < I_{-N}$), c'est-à-dire au-delà du bord de la mer de Fermi (voir Fig I.2(b)). Ces excitations sont analogues à des excitations de particules libres et, dans la limite des faibles interactions ($g \to 0$), leur relation de dispersion reproduite celle prédite par la théorie de Bogoliubov.
- **Excitations de type II :** Ces excitations sont de type particule-trou. Elles sont obtenues en remplaçant une quasi-particule de la mer de Fermi avec un nombre fermionique I_a (*i.e.*, en créant un trou dans l'état fondamental) et de le remplacer par une quasi-particule avec $I' = I_{N+1} = N/2$ ou $I' = I_{N-1} = -N/2$ et en réarrangeant les autres nombres fermionique (voir Fig I.2(c)). Cela correspond à une excitation interne pseudo-mer de Fermi, avec conservation du nombre de particules. Pour de

petits I', la dispersion est linéaire, correspondant à des modes phononiques. Dans la limite d'interaction faible $g \to 0$, ces excitations peuvent être interprétées comme des solitons sombres [IT80 ; Kar+15].

Ces deux types d'excitations définissent ensemble le spectre complet du modèle de LL et permettent d'accéder aux propriétés dynamiques du système, telles que les fonctions de réponse ou la structure du spectre d'énergie.

B-4–i Équation de Bethe continue. Hors de l'état fondamental, la notion de « mer de Fermi » n'est plus bien définie, et les équations (I.84) et (I.87) ne sont donc plus valides (en particulier, on n'a plus $\rho = \rho_s$).

De manière plus générale, que l'on soit ou non dans l'état fondamental (*i.e.* aussi bien dans l'état fondamental qu'à l'extérieur de celui-ci), les équations de Bethe (I.86) se condensent, dans la limite thermodynamique, en une équation intégrale reliant les densités de rapidité :

$$2\pi\rho_s(\theta) \;=\; 1 \;+\; \big(\Delta \star \rho\big)(\theta), \tag{I.88}$$

où le symbole $\star$ désigne la *convolution* :

$$\big[\Delta \star \rho\big](\theta) \quad = \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\theta'\, \Delta(\theta-\theta')\,\rho(\theta').$$

On introduit alors la **densité de trous** $\rho_h(\theta)$ définie par

$$\rho_s(\theta) \;=\; \rho(\theta) + \rho_h(\theta), \tag{I.89}$$

ainsi que la *fonction d'occupation* (ou facteur d'occupation de type Fermi–Dirac)

$$\nu(\theta) \;=\; \frac{\rho(\theta)}{\rho_s(\theta)}. \tag{I.90}$$

B-4–ii Opération de *dressing*.

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

$$f^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}(\theta) \;=\; f(\theta) \;+\; \frac{1}{2\pi}\,\big(\Delta \star [\nu\, f^{\mathrm{dr}}]\big)(\theta). \tag{I.91}$$

Ici, $\nu(\theta)$ est le **facteur d'occupation**, et $\Delta/2\pi$ est le **noyau de diffusion** caractéristique du modèle considéré.

Interprétation physique Le dressing incorpore à tous ordres les effets de rétrodiffusion entre quasi-particules. Il encode ainsi les corrections d'interaction aux grandeurs physiques initiales $f(\theta)$. L'opération de *dressing* joue un rôle central dans la description thermodynamique et dynamique des systèmes intégrables : elle permet d'exprimer les grandeurs physiques effectives (charges, courants, vitesses de groupe, etc.) en termes de leurs versions habillées par les interactions.

Exemple : densité de sites En prenant $f(\theta) = 1$ dans l'équation (I.91), on obtient : $1^{\mathrm{dr}}_{[\nu]} = 1 + \frac{\Delta}{2\pi} \star \big(\nu\, 1^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\big)$ soit directement :

$$2\pi\rho_s \;=\; 1^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}, \tag{I.92}$$

ce qui n'est autre que la relation (I.88).

Conclusion

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons introduit le modèle de Lieb–Liniger (LL), qui décrit un gaz de bosons unidimensionnel soumis à une interaction de contact. Dans ce cadre, les grandeurs conservées naturelles ne sont pas seulement le nombre total de particules $\hat{\boldsymbol{Q}}$ et la quantité de mouvement totale $\hat{\boldsymbol{P}}$, mais également l'énergie associée à l'Hamiltonien LL, $\hat{\boldsymbol{H}}$, (plutôt qu'à la simple énergie cinétique $\hat{\boldsymbol{K}}$). Ces charges conservées correspondent respectivement aux moments d'ordre 0, 1 et 2 en rapidité. Comme nous le verrons au chapitre suivant, des charges d'ordre supérieur interviennent dans la description des états en équilibre, notamment via l'Ensemble de Gibbs Généralisé (Generalized Gibbs Ensemble (GGE)).

L'imposition de conditions aux bords périodiques conduit naturellement aux équations de Bethe Ansatz (BA), voir (I.75). Dans la limite thermodynamique, celles-ci se condensent en une équation intégrale reliant la densité d'états $\rho_s(\theta)$ à la distribution de rapidités $\rho(\theta)$, cf. (I.88). Le Bethe Ansatz établit ainsi le lien fondamental entre ces deux grandeurs et constitue la base de la description thermodynamique du modèle.

Le chapitre suivant sera consacré à l'introduction du GGE et à l'écriture explicite du formalisme de Bethe Ansatz thermodynamique (Thermodynamic Bethe Ansatz (TBA)), qui fournit un cadre puissant pour décrire les propriétés thermodynamiques et hors équilibre des systèmes intégrables.

Bibliographie

[Eis48] L. EISENBUD. "The formal properties of nuclear collisions". Thèse de doct. Princeton U., 1948.

[Wig55] Eugene P. WIGNER. "Lower Limit for the Energy Derivative of the Scattering Phase Shift". In : *Phys. Rev.* 98 (1 avr. 1955), p. 145-147. DOI : 10.1103/PhysRev.98.145. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.98.145.

[Gir60] M. GIRARDEAU. "Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension". In : *Journal of Mathematical Physics* 1.6 (nov. 1960), p. 516-523. ISSN : 0022-2488. DOI : 10.1063/1.1703687. eprint : https://pubs.aip.org/aip/jmp/article-pdf/1/6/516/19055341/516_1_online.pdf. URL : https://doi.org/10.1063/1.1703687.

[Lie63] Elliott H. LIEB. "Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. II. The Excitation Spectrum". In : *Phys. Rev.* 130 (4 mai 1963), p. 1616-1624. DOI : 10.1103/PhysRev.130.1616. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.1616.

[LL63] Elliott H. LIEB et Werner LINIGER. "Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State". In : *Phys. Rev.* 130 (4 mai 1963), p. 1605-1616. DOI : 10.1103/PhysRev.130.1605. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.1605.

[ZZ79] Alexander B ZAMOLODCHIKOV et Alexey B ZAMOLODCHIKOV. "Factorized S-matrices in two dimensions as the exact solutions of certain relativistic quantum field theory models". In : *Annals of Physics* 120.2 (1979), p. 253-291. ISSN : 0003-4916. DOI : https://doi.org/10.1016/0003-4916(79)90391-9. URL : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491679903919.

[IT80] Masakatsu ISHIKAWA et Hajime TAKAYAMA. "Solitons in a One-Dimensional Bose System with the Repulsive Delta-Function Interaction". In : *Journal of the Physical Society of Japan* 49 (1980), p. 1242-1246. URL : https://api.semanticscholar.org/CorpusID:122386591.

[KIB93] V. KOREPIN, A. IZERGIN et N. BOGOLIUBOV. "Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions". In : *Journal of Soviet Mathematics* 31 (fév. 1993). DOI : 10.1007/BF02107233.

[BBT03] Olivier BABELON, Denis BERNARD et Michel TALON. *Introduction to Classical Integrable Systems*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics. Online publication date : August 2009. Cambridge, UK : Cambridge University Press, 2003. ISBN : 9780511535024. DOI : https://doi.org/10.1017/CBO9780511535024.

[GC12] Michel GAUDIN et J.S. CAUX. "The Bethe Wavefunction". In : *The Bethe Wavefunction* (jan. 2012), p. 1-322. DOI : 10.1017/CBO9781107053885.

[Kar+15] Tomasz KARPIUK et al. "Correspondence between dark solitons and the type II excitations of the Lieb-Liniger model". In : *Phys. Rev. A* 91 (1 jan. 2015), p. 013621. DOI : 10.1103/PhysRevA.91.013621. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.91.013621.

[Wou15] B. M. WOUTERS. "The quench action approach to out-of-equilibrium quantum integrable models". PhD thesis. Institute for Theoretical Physics Amsterdam (ITFA), oct. 2015. URL : https://hdl.handle.net/11245/1.486244.

[Fra16] Fabio FRANCHINI. *An Introduction to Integrable Techniques for One-Dimensional Quantum Systems*. T. 940. Sept. 2016. ISBN : 9783319484860. DOI : 10.1007/978-3-319-48487-7.

[BD22] Isabelle BOUCHOULE et Jérôme DUBAIL. "Generalized hydrodynamics in the one-dimensional Bose gas : theory and experiments". In : *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* 2022.1 (jan. 2022), p. 014003. DOI : 10.1088/1742-5468/ac3659. URL : https://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/ac3659.

Chapitre II

Relaxation et états stationnaires dans les systèmes quantiques intégrables : de l'ensemble de Gibbs généralisé au Bethe Ansatz thermodynamique

Sommaire

A Notion d'état d'Équilibre de Gibbs Généralisé 26
A-1 Introduction à l'Équilibre de Gibbs Généralisé 26
A-2 Moyenne dans l'Équilibre de Gibbs Généralisé 28
A-3 Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales 30
B Thermodynamique de Bethe et relaxation 32
B-1 Moyenne dans la limite thermodynamique 32
B-2 Statistique des macro-états : entropie de Yang–Yang 33
B-3 Équations intégrales de la TBA 36
Bibliographie 41

Introduction

Dans les systèmes quantiques intégrables, l'évolution vers l'équilibre à partir d'un état initial arbitraire — généralement hors d'équilibre — ne conduit pas, en général, à une thermalisation décrite par la statistique de Gibbs standard. Cette particularité résulte de l'existence d'une infinité de charges conservées, qui sont mutuellement en involution, c'est-à-dire qu'elles commutent entre elles. L'évolution du système est alors contrainte à un sous-espace restreint de l'espace des états accessibles. La relaxation vers un état stationnaire n'est donc pas décrite par l'ensemble canonique, mais par un **ensemble thermodynamique généralisé**, appelé *Ensemble de Gibbs Généralisé* (en anglais Generalized Gibbs Ensemble (GGE)), qui prend en compte l'ensemble des constantes du mouvement.

Ce chapitre est consacré à la mise en place rigoureuse de cette notion. Dans une première section, nous revenons brièvement sur la notion d'opérateurs à un corps exprimés en puissances de l'impulsion $\hat{\boldsymbol{p}}$ pour une particule, introduite au chapitre précédent (Chap.I). Ce cadre permet de construire une hiérarchie naturelle de charges conservées, au-delà du simple nombre de particules, de la quantité totale de mouvement ou de l'énergie totale. Ces charges supplémentaires permettent alors de définir les moyennes d'observables dans un état stationnaire hors d'équilibre.

Dans la section suivante, nous poserons les bases nécessaires à la description quantitative de ces états stationnaires dans le cadre du formalisme du Bethe Ansatz thermodynamique (Thermodynamic Bethe Ansatz (TBA)), introduit initialement par Yang et Yang [YY69] afin d'étendre le BA au régime thermodynamique,

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

A Notion d'état d'Équilibre de Gibbs Généralisé

A-1 Introduction à l'Équilibre de Gibbs Généralisé

A-1–i Configuration des états. On désigne par $\{\boldsymbol{\theta_a}\} \equiv \{\theta_1, \cdots, \theta_N\}$ la *configuration de rapidités* caractérisant un état propre à $N \equiv N(\{\theta_a\})$ particules – le nombre de particules n'est donc pas fixé *a priori* mais dépend de la configuration. L'état propre correspondant est noté $|\{\theta_a\}\rangle = |\{\theta_1, \ldots, \theta_N\}\rangle$.

Rappel

A-1–ii Rappel : Observables diagonales dans la base des états propres. Dans le chapitre précédent (I), on a vu que l'état $|\{\theta_a\}\rangle$ associé à cette configuration est un état propre des observables nombres d'atome, quantité de mouvement et énergie totale (I.48). Ces observables sont diagonales dans la base des états propres :

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

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

A-1–iii Contexte et GGE dans les systèmes intégrables. Dans un système quantique **intégrable**, il existe une infinité de charges conservées locales $\hat{\boldsymbol{Q}}_i$ qui commutent entre elles ainsi qu'avec l'Hamiltonien $\hat{\boldsymbol{H}}$ [Rig+07 ; CCR11]. Plus précisément, chaque charge peut s'écrire sous la forme $\hat{\boldsymbol{Q}}_i = \int dx\, \hat{\boldsymbol{q}}_i(x)$, où $\hat{\boldsymbol{q}}_i(x)$ désigne une densité locale à support borné [1]. L'intégrabilité assure alors une description complète des états propres à partir d'un ensemble de paramètres continus, les rapidités $\{\theta_j\}$ dans le modèle de LL [NP16].

Relaxation non canonique et GGE. Un point essentiel est que, contrairement à un système quantique générique, un système intégrable ne thermalise pas au sens usuel du terme. En effet, la présence d'un nombre infini de contraintes de conservation empêche l'effacement complet des conditions initiales : la dynamique hors équilibre demeure fortement contrainte, même à très long temps. Cette propriété modifie profondément les mécanismes de relaxation et appelle une description statistique adaptée. Les éléments clés sont alors les suivants :

- **Charges conservées** : existence d'une infinité de charges locales $\hat{\boldsymbol{Q}}_i$ satisfaisant $[\hat{\boldsymbol{Q}}_i, \hat{\boldsymbol{H}}] = 0$ et $[\hat{\boldsymbol{Q}}_i, \hat{\boldsymbol{Q}}_j] = 0$.
- **Densités locales** : chaque charge s'écrit sous la forme $\hat{\boldsymbol{Q}}_i = \int_{\mathbb{R}} dx\, \hat{\boldsymbol{q}}_i(x)$, où $\hat{\boldsymbol{q}}_i(x)$ est une densité locale à support fini (*i.e.* il existe un ensemble borné $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}$ tel que $\hat{\boldsymbol{q}}_i(x) = 0$ pour tout $x \notin \mathcal{S}$).
- **Relaxation non canonique** : après un *quench* (variation brutale d'un paramètre), le système évolue vers un état stationnaire qui n'est pas décrit par l'ensemble canonique standard.

Pour décrire cet état, on introduit le GGE [Rig+07], où il est montré qu'une « extension naturelle de l'ensemble de Gibbs aux systèmes intégrables » prédit correctement les valeurs moyennes des observables après relaxation.

Formellement, pour une région finie du système $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}$, *i.e.* un sous-système, on définit la matrice densité locale :

$$\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})} = \frac{1}{Z_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} \exp\left(- \sum_i \beta_i \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \right), \quad \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} = \int_{\mathcal{S}} dx\, \hat{\boldsymbol{q}}_i(x), \tag{II.2}$$

1. Dans le chapitre suivant III, nous reviendrons sur la structure de $\hat{\boldsymbol{q}}_i(x)$ à l'échelle mésoscopique et dans un cadre hydrodynamique. Dans le présent chapitre, nous nous limitons à la description thermodynamique, mais il est utile d'introduire dès maintenant cette notation afin de préparer le formalisme.

où $\beta_i \in \mathbb{R}$ sont les multiplicateurs de Lagrange (ou « températures généralisées ») associés aux charges locales conservées $\{\hat{\boldsymbol{Q}}_i\}$. La fonction de partition

$$Z_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})} = \mathbf{Tr}\left[\exp\left(-\sum_i \beta_i \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})}\right)\right] \tag{II.3}$$

assure la normalisation. L'**état GGE** ainsi défini est le seul permettant de prédire de manière cohérente les observables locales de $\mathcal{S}$ à long temps [NP16]. Autrement dit, l'équilibre local après quench est un état stationnaire faisant perdurer la mémoire de chaque charge conservée, ce qui conduit à un nombre infini de paramètres β_i thermodynamiques (une « température » par charge) [Nar+17].

Interprétation des multiplicateurs de Lagrange. Les multiplicateurs de Lagrange β_i apparaissent naturellement lors de la maximisation de l'entropie sous contraintes, par exemple dans le formalisme du GGE, où ils imposent la conservation des valeurs moyennes des charges $\langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} = \mathbf{Tr}[\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})} \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})}]$.

En résumé, le GGE généralise les ensembles canoniques standard : au lieu de retenir uniquement l'énergie, on impose la conservation de l'ensemble complet $\{\hat{\boldsymbol{Q}}_i\}$. Cette construction rend compte du fait que, dans un système intégrable, les observables locaux convergent vers les valeurs moyennes calculées par $\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}$, et non vers celles d'un ensemble de Gibbs (glsGE) thermique ordinaire [NP16 ; Rig+07]. On comprend ainsi pourquoi la *thermalisation habituelle* (canonique ou micro-canonique) échoue : seul le GGE peut intégrer toutes les contraintes locales.

A-1–iv Rappel sur le modèle de LL et distribution de rapidités. Comme rappelé au chapitre précédent, **le modèle de LL** (gaz bosonique 1D à interactions de contact) est un exemple paradigmatique d'un système intégrable [NP16]. Ses états propres sont caractérisés par un ensemble de N rapidités $\{\theta_a\}$, qui jouent le rôle de quasi-moments (**BA**). Dans ce contexte, l'état macroscopique du gaz après relaxation unitaire est entièrement déterminé par la **distribution des rapidités**. Formellement, on définit $\rho(\theta)$ la distribution intensive des rapidités telle que $\rho(\theta)d\theta$ donne le nombre de particules par unité de longueur ayant une rapidité dans la cellule $[\theta, \theta + d\theta]$.

Cette **distribution de rapidités** $\rho(\theta)$ est une fonction macroscopique caractérisant l'état d'équilibre local du gaz après relaxation. Elle est particulièrement pertinente car elle encode l'ensemble des observables locales du système, telles que la densité, l'énergie ou encore les fonctions de corrélation. En effet, dans le cadre de la TBA (section suivante), toutes les grandeurs physiques peuvent s'exprimer en fonction de $\rho(\theta)$ et de la densité d'états associée $\rho_s(\theta)$.

Il est important de souligner que les rapidités, bien qu'homogènes à des vitesses, ne coïncident pas avec les vitesses instantanées des particules : elles paramètrent les vitesses des quasi-particules du modèle intégrable. En général, la distribution des vitesses réelles des atomes n'est donc pas identique à la distribution de rapidités.

Cependant, une situation particulière permet d'établir un lien direct entre les deux. Considérons un gaz de bosons unidimensionnel décrit par le modèle de LL, préparé dans un état initial hors d'équilibre, puis laissé évoluer de manière strictement unidimensionnelle. Au début de l'évolution, les bosons restent proches les unes des autres et interagissent, ce qui se manifeste par des vitesses qui évoluent au cours du temps. En revanche, après un temps suffisamment long, le nuage s'est suffisamment dilaté pour que les atomes soient mutuellement distants et que les interactions deviennent négligeables. Dans cette limite dite *asymptotique*, les vitesses réelles des particules coïncident avec les rapidités des quasi-particules.

Ainsi, un aspect remarquable est que la distribution de rapidités est *accessible expérimentalement*. Lorsqu'un gaz bosonique unidimensionnel est libéré et s'étend longitudinalement, la distribution asymptotique des vitesses observées en expansion correspond directement à la distribution initiale des rapidités [Nar+17 ; BDB23].

Dans le GGE, cette distribution macroscopique $\rho(\theta)$ est fixée par l'ensemble des charges conservées. Par exemple, on ajuste les β_i de sorte que les valeurs moyennes $\langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}}$ correspondent aux valeurs initiales. Ce processus détermine donc la fonction $\rho(\theta)$ décrivant l'état d'équilibre local.

Les observables locales du gaz (densité, énergie, fonctions de corrélation, etc.) s'en déduisent alors directement à partir des équations de BA.

A-2 Moyenne dans l'Équilibre de Gibbs Généralisé

A-2–i Convention pour les moyennes d'observables. Dans la suite du chapitre, nous noterons la moyenne d'une observable $\hat{\boldsymbol{O}}$ dans un état décrit par une matrice densité (ici noté) $\hat{\boldsymbol{\rho}}$ par :

$$\langle \hat{\boldsymbol{O}} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}} \doteq \mathbf{Tr}[\hat{\boldsymbol{\rho}}\, \hat{\boldsymbol{O}}], \tag{II.4}$$

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

$$\mathbf{Tr}[|\{\theta_a\}\rangle\langle\{\theta_a\}|\, \hat{\boldsymbol{O}}] = \langle\{\theta_a\}|\, \hat{\boldsymbol{O}}\, |\{\theta_a\}\rangle\,.$$

dans ce cas on notera la moyenne :

$$\langle \hat{\boldsymbol{O}} \rangle_{\{\theta_a\}} = \langle\{\theta_a\}|\, \hat{\boldsymbol{O}}\, |\{\theta_a\}\rangle\,, \tag{II.5}$$

où l'on note simplement l'ensemble des rapidité θ_a pour désigner l'état pur.

A-2–ii Charges conservées locales diagonales dans la base des états propres. Les charges conservées locales $\hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})}$ sont diagonales dans la base des états propres $|\{\theta_a\}\rangle$, avec pour valeurs propres $\langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\{\theta_a\}}$:

$$\hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})}\, |\{\theta_a\}\rangle \quad = \quad \langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\{\theta_a\}}\, |\{\theta_a\}\rangle\,. \tag{II.6}$$

A-2–iii Probabilité d'un état à rapidités fixées. On peut ainsi définir la probabilité d'occurrence d'un état propre caractérisé par un ensemble de rapidités $|\{\theta_a\}\rangle$ dans le GGE. Celle-ci est donnée par la moyenne de la matrice densité locale $\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}$ définie en (II.2) :

$$\mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(\mathcal{S})} \quad \equiv \quad \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})} \rangle_{\{\theta_a\}}, \tag{II.7}$$

$$= \quad \frac{1}{Z_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} \exp\left(- \sum_i \beta_i \langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\{\theta_a\}} \right). \tag{II.8}$$

A-2–iv Moyenne des charges conservées locales et dérivées de $Z_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}$. Les charges locales $\hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})}$ sont diagonales dans la base $\{|\{\theta_a\}\rangle\}$ [cf eq (II.6)]. On peut donc écrire la moyenne d'une observable comme une somme pondérée par la probabilité ci-dessus [cf eqs (II.7)-(II.8)], ou encore comme une dérivée de la fonction de partition définie dans l'équation (II.3) :

$$\langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} \quad = \quad \sum_{\{\theta_a\}} \langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\{\theta_a\}} \mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(\mathcal{S})} \tag{II.9}$$

$$= \quad - \frac{1}{Z_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} \frac{\partial Z_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}}{\partial \beta_i} \Bigg)_{\beta_{j\neq i}} \tag{II.10}$$

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

$$\langle \hat{\boldsymbol{Q}}_{i_1}^{(\mathcal{S})}\, \hat{\boldsymbol{Q}}_{i_2}^{(\mathcal{S})} \cdots \hat{\boldsymbol{Q}}_{i_q}^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} \quad = \quad (-1)^q \frac{1}{Z_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} \frac{\partial}{\partial \beta_{i_1}} \Bigg)_{\beta_{j\neq i_1}} \frac{\partial}{\partial \beta_{i_2}} \Bigg)_{\beta_{j\neq i_2}} \cdots \frac{\partial}{\partial \beta_{i_q}} \Bigg)_{\beta_{j\neq i_q}} Z_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}. \tag{II.11}$$

A-2–v Moments d'ordre supérieur et fluctuations. On s'avance sur le chapitre (IV). Le premier et le second moment permettent d'accéder à la variance

$$\left\langle \left(\hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} - \langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} \right)^2 \right\rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} = \langle (\hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})})^2 \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} - \langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}}^2 \tag{II.12}$$

de la charge locale $\hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})}$, en injectant (II.10) et (II.11) et en utilisant $\frac{1}{f}\partial_x^2 f - (\frac{1}{f}\partial_x f)^2 = \partial_x^2 \ln f$:

$$\left\langle \left(\hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} - \langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} \right)^2 \right\rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}} = \left. \frac{\partial^2 \ln Z_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}}{\partial {\beta_i}^2} \right)_{\beta_{j\neq i}}, \tag{II.13}$$

$$= - \left. \frac{\partial \langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}}}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_{j\neq i}}. \tag{II.14}$$

A-2–vi Relaxation dans les systèmes intégrables et chaotiques Avant relaxation, un sous-système est décrit par une infinité de données initiales[2], par exemple les positions et les impulsions microscopiques $\{\hat{\boldsymbol{x}}_i, \hat{\boldsymbol{p}}_i\}$ de toutes les particules.

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

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

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

Dans ce dernier cas particulier, la matrice densité locale (II.2) se réduit à celle de l'**ensemble grand-canonique de Gibbs** :

$$\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GE}}^{(\mathcal{S})} = \frac{1}{\Xi_{\mathrm{GE}}^{(\mathcal{S})}} \exp\left\{ -\beta \left(\hat{\boldsymbol{H}}^{(\mathcal{S})} - \mu\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})} \right\} \right), \quad \hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})} = \int_{\mathcal{S}} dx\, \hat{\boldsymbol{q}}(x), \quad \hat{\boldsymbol{H}}^{(\mathcal{S})} = \int_{\mathcal{S}} dx\, \hat{\boldsymbol{h}}(x), \tag{II.15}$$

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

La fonction de partition grand-canonique associée est

$$\Xi_{\mathrm{GE}}^{(\mathcal{S})} = \mathbf{Tr}\left[\exp\left\{ -\beta \left(\hat{\boldsymbol{H}}^{(\mathcal{S})} - \mu\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})} \right\} \right) \right]. \tag{II.16}$$

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

$$\langle \hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GE}}^{(\mathcal{S})}} = \frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial \ln \Xi_{\mathrm{GE}}^{(\mathcal{S})}}{\partial \mu} \right)_{\beta}, \qquad \frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial \langle \hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GE}}^{(\mathcal{S})}}}{\partial \mu} \right)_{\beta} = \frac{1}{\beta^2} \left. \frac{\partial^2 \ln \Xi_{\mathrm{GE}}^{(\mathcal{S})}}{\partial \mu^2} \right)_{\beta} \tag{II.17}$$

$$\langle \hat{\boldsymbol{H}}^{(\mathcal{S})} - \mu\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GE}}^{(\mathcal{S})}} = - \left. \frac{\partial \ln \Xi_{\mathrm{GE}}^{(\mathcal{S})}}{\partial \beta} \right)_{\mu}, \qquad - \left. \frac{\partial \langle \hat{\boldsymbol{H}}^{(\mathcal{S})} - \mu\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GE}}^{(\mathcal{S})}}}{\partial \beta} \right)_{\mu} = \left. \frac{\partial^2 \ln \Xi_{\mathrm{GE}}^{(\mathcal{S})}}{\partial \beta^2} \right)_{\mu}. \tag{II.18}$$

Les mêmes que dans (II.10) et (II.14).

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

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

$$\langle \hat{\boldsymbol{H}}^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\rho}^{(\mathcal{S})}_{\mathrm{GE}}} = \left[\frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \right)_T - \frac{\partial}{\partial \beta} \Big)_\mu \Big] \ln \Xi^{(\mathcal{S})}_{\mathrm{GE}}, \quad - \frac{\partial \langle \hat{\boldsymbol{H}}^{(\mathcal{S})} \rangle_{\hat{\rho}^{(\mathcal{S})}_{\mathrm{GE}}}}{\partial \beta} \Big)_{-\mu\beta} = \left[\frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \right)_T - \frac{\partial}{\partial \beta} \Big)_\mu \right]^2 \ln \Xi^{(\mathcal{S})}_{\mathrm{GE}}. \quad \text{(II.19)}$$

A-3 Rôle des charges conservées extensives et quasi-locales

A-3–i Écriture des observables thermodynamiques comme sommes sur les rapidités. Dans un système à N particules caractérisé par des rapidités $\{\theta_a\}_{a=1}^N$, les charges conservées classiques — telles que le nombre de particules, l'impulsion ou l'énergie — s'écrivent comme des sommes de puissances des rapidités : $\langle \hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^0$, $\langle \hat{\boldsymbol{P}}^{(\mathcal{S})} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^1$, et $\langle \hat{\boldsymbol{H}}^{(\mathcal{S})} \rangle_{\{\theta_a\}} \propto \sum_{a=1}^N \theta_a^2$. (cf. équations (II.1)) Dans le paragraphe précédent, nous avons sous-entendu — sans l'expliciter — que l'ensemble des charges locales conservées forme une famille donnée par :

$$\hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \, |\{\theta_a\}\rangle \quad \propto \quad \sum_a \theta_a^i \, |\{\theta_a\}\rangle \, . \qquad \text{(II.20)}$$

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

A-3–ii Charges locales conservées . À toute fonction régulière $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ on associe un **opérateur-charge local** $\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[f]$ défini par :

$$\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[f] \quad = \quad L^{(\mathcal{S})} \int d\theta \, f(\theta) \hat{\boldsymbol{\rho}}^{(\mathcal{S})}(\theta). \qquad \text{(II.21)}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{\rho}}^{(\mathcal{S})}(\theta) \, |\{\theta_a\}\rangle \quad = \quad \frac{1}{L^{(\mathcal{S})}} \sum_{a=1}^N \delta(\theta - \theta_a) \, |\{\theta_a\}\rangle \, . \qquad \text{(II.22)}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[f] \; |\{\theta_a\}\rangle = \sum_{a=1}^N f(\theta_a) \; |\{\theta_a\}\rangle \quad \text{d'où'} \quad \langle \hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[f] \rangle_{\{\theta_a\}} = \sum_{a=1}^N f(\theta_a) \qquad \text{(II.23)}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} = \hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[f_i], \quad \text{de sorte que} \quad \langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})} \rangle_{\{\theta_a\}} = \sum_{a=1}^N f_i(\theta_a). \qquad \text{(II.24)}$$

Les fonctions $f_i(\theta)$ sont appelées *fonctions spectrales de charge* : elles représentent les contributions individuelles (ou « charges élémentaires ») d'une quasi-particule de rapidité θ à la charge d'ordre i. Autrement dit, chaque quasi-particule contribue à la valeur totale de la charge Q_i selon le poids donné par $f_i(\theta)$.

Dans le modèle de LL, ces fonctions sont des polynômes en θ, typiquement de la forme

$$f_i(\theta) \quad \propto \quad \theta^i, \qquad \text{(II.25)}$$

ce qui généralise les trois premières charges usuelles : nombre de particules ($i = 0$), impulsion ($i = 1$) et énergie ($i = 2$).

Cette terminologie est la plus couramment utilisée dans la littérature sur les systèmes intégrables et le cadre de la GGE, et elle permet de relier directement les charges macroscopiques aux quasi-particules.

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

A-3–iii Charges conservées généralisées. La fonctions spectrales de charge f_i étant fixées, on note la fonction régulière $w : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ — dorénavant appelée *poids spectral*, ou *potentiel spectral* —

$$w = \sum_i \beta_i f_i, \tag{II.26}$$

où les coefficients β_i sont les multiplicateurs de Lagrange associés aux charges conservées $\hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})}$ dans le GGE [cf. équation (II.2)]. À cette fonction $w(\theta)$, on associe un opérateur-charge généralisé $\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]$:

$$\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]\ |\{\theta_a\}\rangle = \sum_{a=1}^{N} w(\theta_a)\ |\{\theta_a\}\rangle \quad \text{de sorte que} \quad \langle \hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]\rangle_{\{\theta_a\}} = \sum_i \beta_i \langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i^{(\mathcal{S})}\rangle_{\{\theta_a\}} \tag{II.27}$$

A-3–iv Expression de la matrice densité généralisée. Dans le cas des modèles intégrables traités par le BA il est toutefois plus pratique de réécrire cette matrice densité $\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathrm{GGE}}^{(\mathcal{S})}$ de (II.2) en termes du *poids spectral* $w(\theta)$ introduit en (II.26). On obtient alors :

$$\hat{\boldsymbol{\varrho}}^{(\mathcal{S})}[w] = \frac{e^{-\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]}}{Z^{(\mathcal{S})}[w]}, \text{ avec } \quad e^{-\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]} = \sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^{N} w(\theta_a)} |\{\theta_a\}\rangle\langle\{\theta_a\}|, \tag{II.28}$$

où la fonction de partition (II.3) définie par $Z^{(\mathcal{S})}[w] \doteq \mathbf{Tr}\left[\, e^{-\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]}\right]$ s'écrit

$$Z^{(\mathcal{S})}[w] = \sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^{N} w(\theta_a)}, , \tag{II.29}$$

et assure la normalisation $\mathbf{Tr}\left[\hat{\boldsymbol{\varrho}}^{(\mathcal{S})}[w]\right] = 1$.

A-3–v Probabilité associée à une configuration de rapidités. Dans ce formalisme, la probabilité d'occuper l'état $|\{\theta\}\rangle$ (II.7) est donc

$$\mathbb{P}_{\{\theta_a\}}^{(\mathcal{S})} \quad = \quad Z^{(\mathcal{S})}[w]^{-1} e^{-\sum_{a=1}^{N} w(\theta_a)}. \tag{II.30}$$

Ainsi, le poids statistique d'un état se factorise sur les pseudo-moments : chaque quasi-particule de rapidité θ_a contribue indépendamment au poids total avec un facteur $e^{-w(\theta_a)}$. Autrement dit, $w(\theta)$ joue le rôle d'une énergie généralisée assignée à chaque quasi-particule du GGE. [3]

A-3–vi Moyennes d'observables dans le GGE. Pour tout opérateur local $\hat{\boldsymbol{O}}$ diagonal dans la base de Bethe, la moyenne généralisée vaut

$$\langle \hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{\hat{\boldsymbol{\varrho}}^{(\mathcal{S})}[w]} \quad = \quad \frac{\sum_{\{\theta_a\}} \langle \hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{\{\theta_a\}}\, e^{-\sum_{a=1}^{N} w(\theta_a)}}{\sum_{\{\theta_a\}} e^{-\sum_{a=1}^{N} w(\theta_a)}} \tag{II.31}$$

Ainsi, la connaissance de la fonction $w(\theta)$ suffit à déterminer les propriétés statistiques de toute observable diagonale, y compris les charges conservées elles-mêmes.

A-3–vii Conclusion de la section : vers la thermodynamique de Bethe. Nous avons vu que, dans un système intégrable, la description correcte de l'équilibre stationnaire ne peut se limiter aux seules constantes de mouvement usuelles d'un système isolé, telles que l'énergie ou l'impulsion. Elle requiert l'introduction d'une *famille infinie de charges conservées*, qui forment la structure intégrable du modèle.

Ces charges comprennent à la fois :

i des charges strictement locales, construites comme des intégrales de densités dépendant d'un nombre fini de sites ou de points de l'espace ;

3. Ici, le terme « pseudo-moment » désigne la rapidité θ_a, qui joue le rôle d'une quantité conservée individuelle dans le système intégrable.

ii et des charges dites *quasi-locales*, dont la densité n'est pas strictement locale mais décroit suffisamment rapidement à distance pour que l'intégrale totale soit bien définie et que la charge conserve un sens physique. Autrement dit, une charge quasi-locale agit essentiellement sur un voisinage restreint, mais présente de faibles contributions non nulles à des points éloignés.

L'ensemble de ces charges contraint fortement la dynamique et empêche la thermalisation au sens usuel (c'est-à-dire vers l'ensemble canonique ou microcanonique). La relaxation vers l'équilibre se fait alors vers un état stationnaire généralisé, décrit par le GGE, où chaque charge conservée intervient avec son propre multiplicateur de Lagrange.

Toutes ces charges se combinent dans un unique opérateur fonctionnel $\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]$, qui dépend d'un *poids spectral* $w(\theta)$ (cf. équations (II.23)) et encode l'ensemble des contributions de toutes les charges conservées. Cette construction permet de définir la matrice densité généralisée $\hat{\boldsymbol{\rho}}^{(\mathcal{S})}_{\mathrm{GGE}} \propto e^{-\hat{\boldsymbol{Q}}^{(\mathcal{S})}[w]}$, et la moyenne de tout opérateur local $\hat{\boldsymbol{O}}$ s'écrit $\langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{\hat{\boldsymbol{\rho}}^{(\mathcal{S})}_{\mathrm{GGE}}} = \mathrm{Tr}(\hat{\boldsymbol{O}}\hat{\boldsymbol{\rho}}^{(\mathcal{S})}[w])$. Ainsi, la connaissance de $w(\theta)$ suffit pour prédire les valeurs moyennes de toutes les observables, y compris celles des charges elles-mêmes, ce qui constitue le cœur du GGE.

Cette base étant désormais posée, nous passerons dans la section suivante à la TBA. Nous verrons comment, dans la limite thermodynamique, les sommes sur les configurations de rapidités se transforment en intégrales sur des fonctions continues, comment apparaît l'entropie de Yang–Yang (YY), et comment les moyennes sous le GGE se réexpriment à l'aide de ces densités macroscopiques.

Ce formalisme permettra d'analyser finement la relaxation post-quench, en reliant la description microscopique du système intégrable — c'est-à-dire en termes de quasi-particules et de leurs états propres — à la description macroscopique hydrodynamique généralisée.

B Thermodynamique de Bethe et relaxation

B-1 Moyenne dans la limite thermodynamique

B-1–i Observables locales dans la limite thermodynamique. Dans la suite de ce chapitre, nous omettrons l'exposant $(\mathcal{S})$ afin d'alléger les notations et de rendre le texte plus lisible. Il ne faut cependant pas oublier que toutes ces quantités restent définies sur un support borné $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}$, et que cette restriction garde tout son sens physique.

Dans la base des états de Bethe $\{|\{\theta_a\}\rangle\}$, l'opérateur $\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)$ défini en (II.22) est diagonal, et ses valeurs propres correspondent aux **distributions de rapidité** associées à chaque état de Bethe.

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

Si l'observable O est suffisamment locale — c'est-à-dire si son support spatial reste petit devant l'échelle macroscopique du système —, sa valeur d'attente dans un état propre ne dépend pas des détails microscopiques, mais uniquement de la distribution de rapidité. On écrit alors :

$$\lim_{\text{therm.}} \langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{\{\theta_a\}} \quad = \quad \langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{[\rho]}, \tag{II.32}$$

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

Dans un GGE, la valeur moyenne de l'observable (II.31) devient alors :

$$\lim_{\text{therm.}}\langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{\hat{\boldsymbol{\varrho}}[w]} \quad = \quad \frac{\displaystyle\sum_{\rho}\langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{[\rho]}\Omega[\rho]e^{-\sum_{a=1}^{N}w(\theta_a)}}{\displaystyle\sum_{\rho}\Omega[\rho]\,e^{-\sum_{a=1}^{N}w(\theta_a)}}, \tag{II.33}$$

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

Pour établir la fonction $\Omega[\rho]$, rappelons-nous de la transformation des équations de BA dans la limite thermodynamique, non nécessairement à l'état fondamental, (I.90) et (I.92).

$$\nu = \frac{\rho}{\rho_s}, \qquad 2\pi\rho_s = 1^{\mathrm{dr}}_{[\nu]} \tag{II.34}$$

où $f^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}$ est définie en (I.91).

Cette formalisation constitue la brique de base de l'**hydrodynamique généralisée** et, dans la section suivante, permet de définir rigoureusement l'**entropie de YY**, indispensable pour décrire la relaxation hors d'équilibre des systèmes intégrables.

B-2 Statistique des macro-états : entropie de Yang–Yang

B-2–i Motivation. Dans la limite thermodynamique, une observable locale dans un GGE dépend uniquement d'un objet continu : le **poids spectral** $w(\theta)$. Ce dernier joue un rôle analogue à une « température généralisée » : il définit le facteur statistique associé à chaque quasi-particule de rapidité θ et correspond au multiplicateur de Lagrange généralisé qui contrôle sa contribution à l'équilibre.

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

$$\rho_{\mathrm{eq}}(\theta) \doteq \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta) \rangle_{\hat{\boldsymbol{\varrho}}[w]}. \tag{II.35}$$

Cette reformulation est particulièrement puissante, car elle permet de décrire toutes les propriétés locales du système à l'équilibre à partir de $w(\theta)$ ou de $\rho_{\mathrm{eq}}(\theta)$, sans référence explicite aux détails d'un état propre individuel.

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

B-2–ii Distribution de rapidité comme macro-état. Chaque distribution de rapidité $\rho(\theta)$ ne correspond pas à un état propre unique, mais à un grand **ensemble de micro-états** : différents choix des ensembles de quasi-moments $(\{\theta_a\}_{a\in[\![1,N]\!]})_{N\in\mathbb{N}^*}$ peuvent conduire à la même densité de rapidité à l'échelle macroscopique. Ainsi, $\rho(\theta)$ doit être interprétée comme un **macro-état**, qui agrège un très grand nombre d'états propres microscopiques.

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

Plus précisément, dans l'expression de moyenne des opérateurs locaux (II.33), apparaît le facteur $\Omega[\rho]$, qui compte ces états propres. La détermination de $\Omega[\rho]$ (ou équivalemment de l'entropie de Yang–Yang (YY) $\mathcal{S}_{YY}[\rho]$, car $\Omega[\rho] = e^{L\mathcal{S}_{YY}[\rho]}$ avec L la taille du système) est donc la clé pour relier *(i)* le poids spectral $w(\theta)$ imposé dans le GGE et *(ii)* la distribution de rapidité moyenne $\rho_{\mathrm{eq}}(\theta)$ observée à l'équilibre.

B-2–iii Dénombrement local des configurations microcanoniques. Pour répondre à cette question, on subdivise l'axe des rapidités en petites tranches ou cellules de largeur $\delta\theta$, chacune centrée en un point θ_a. Dans une tranche $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta]$, on suppose que la densité $\rho(\theta)$ est constante. Le nombre de quasi-particules dans cette tranche est alors :

$$N_a = L\rho(\theta_a)\delta\theta,$$

et le nombre total d'états disponibles (*i.e.*, le nombre d'états possibles si toutes les positions en moment étaient disponibles) est donné par la densité totale de niveaux

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

Les particules occupent ces niveaux de manière analogue à des fermions libres (principe d'exclusion de Pauli), le nombre de manières différentes de choisir N_a niveaux parmi M_a (Fig II.1) est donné par :

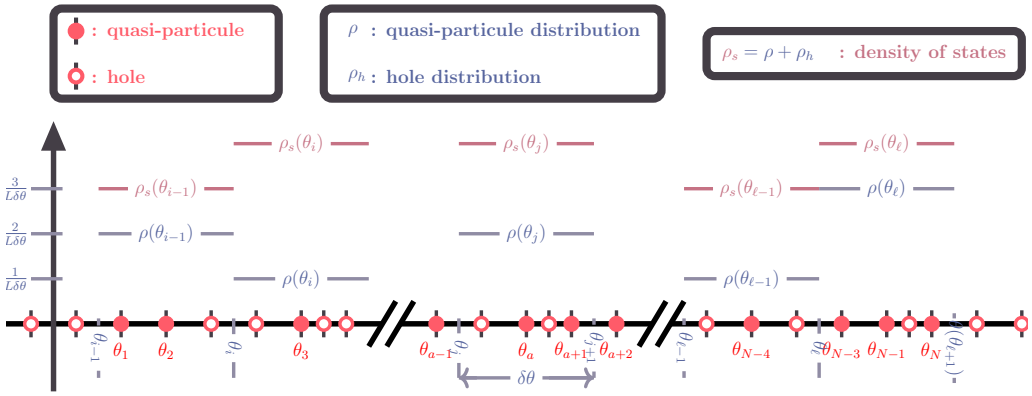


FIGURE II.1 – Schéma illustrant la discrétisation de l'espace des rapidités en cellules de largeur $\delta\theta$.

$$\Omega(\theta_a) \approx \binom{M_a}{N_a} = \frac{[L\rho_s(\theta)\delta\theta]!}{[L\rho(\theta)\delta\theta]![(L\rho_s(\theta) - L\rho(\theta))\delta\theta]!}. \tag{II.36}$$

B-2–iv Estimation asymptotique à l'aide de Stirling. En utilisant la formule de Stirling :

$$n! \underset{n\to\infty}{\sim} n^n e^{-n}\sqrt{2\pi n}., \tag{II.37}$$

composé avec la fonction logarithmique, on obtient :

$$\ln n! \underset{n\to\infty}{\to} n\ln n \underbrace{-n + \ln\sqrt{2\pi n}}_{o(n\ln n)}, \tag{II.38}$$

$$\underset{n\to\infty}{\sim} n\ln n \tag{II.39}$$

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

$$\ln\Omega(\theta) \underset{\substack{L\rho\delta\theta\to\infty \\ \rho(\theta)\leq\rho_s(\theta)}}{\sim} L[\rho_s\ln\rho_s - \rho\ln\rho - (\rho_s-\rho)\ln(\rho_s-\rho)](\theta)\delta\theta. \tag{II.40}$$

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

B-2–v Entropie de Yang–Yang : définition. Le nombre total de micro-états compatibles avec une distribution macroscopique donnée $\rho(\theta)$ est obtenu en prenant le produit des nombres de configurations pour chaque cellule de rapidité $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta]$: $\Omega(\theta_a)$. En prenant le logarithme de ce produit, on accède à l'entropie totale. Pour alléger la notation, cette somme sur les cellules est notée $\sum_a^{\theta-\text{cellules}}$ où chaque a indexe une cellule de rapidité $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta]$. On écrit alors :

$$\ln\Omega[\rho] = \sum_a^{\theta-\text{cellules}} \ln\Omega(\theta_a), \tag{II.41}$$

$$\approx L\mathcal{S}_{YY}[\rho], \tag{II.42}$$

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

$$\mathcal{S}_{YY}[\rho] \doteq \sum_a^{\theta-\text{cellules}} [\rho_s\ln\rho_s - \rho\ln\rho - (\rho_s-\rho)\ln(\rho_s-\rho)](\theta_a)\delta\theta. \tag{II.43}$$

B-2–vi Énergie généralisée par unité de longueur : définition. L'**énergie généralisée** associée à une distribution de rapidité $\rho(\theta)$ et à un poids spectral $w(\theta)$ est définie comme la somme des poids assignés à chaque quasi-particule. Dans la limite thermodynamique, en supposant que $w(\theta)$ varie lentement sur chaque tranche $[\theta_a, \theta_a + \delta\theta]$, cette somme soit l'**énergie généralisée par unité de longueur** $\mathcal{W}$ se définit par :

$$\mathcal{W}(\{\theta_a\}) \doteq \frac{1}{L}\sum_{a=1}^{N} w(\theta_a) \underset{\text{therm.}}{\sim} \mathcal{W}[\rho] \doteq \sum_{a}^{\theta\text{-cellules}} w(\theta_a)\rho(\theta_a)\,\delta\theta. \tag{II.44}$$

B-2–vii Moyenne des Observables locales dans la limite thermodynamique. Dans un ensemble général (GGE), la valeur moyenne de l'observable (II.33) devient :

$$\lim_{\text{therm.}}\langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{\hat{\varrho}[w]} \approx \frac{\sum_{\rho}\langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{[\rho]} e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho]-\mathcal{W}[\rho])}}{\sum_{\rho} e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho]-\mathcal{W}[\rho])}}, \tag{II.45}$$

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

B-2–viii Passage à la limite continue. En faisant tendre $\delta\theta \to 0$, les sommes deviennent des intégrales et l'entropie de YY ainsi que l'énergie généralisée par unité de longueur prennent la forme :

$$\mathcal{S}_{YY}[\rho] = \int d\theta\,[\rho_s \ln\rho_s - \rho\ln\rho - (\rho_s-\rho)\ln(\rho_s-\rho)](\theta), \tag{II.46}$$

$$\mathcal{W}[\rho] = \int w(\theta)\rho(\theta)\,d\theta \tag{II.47}$$

B-2–ix Formule fonctionnelle pour les moyennes. Dans la limite thermodynamique $L \to \infty$, la somme sur les distributions de rapidité ρ admissibles peut être approximée par une intégrale fonctionnelle sur l'espace des densités de rapidité continues, munie d'une mesure fonctionnelle $\mathcal{D}\rho$: $\sum_\rho \sim \int \mathcal{D}\rho$. Cette correspondance repose sur l'idée que les macro-états admissibles deviennent denses dans l'espace fonctionnel, et que le poids statistique associé à chaque configuration est donné par l'entropie de YY. La mesure fonctionnelle $\mathcal{D}\rho$ parcourt l'espace des densités $\rho(\theta)$ continues, *chaque configuration étant pondérée par le facteur exponentiel* $e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho]-\mathcal{W}[\rho])}$. Finalement, la moyenne d'une observable dans le GGE (II.45) s'écrit comme une intégrale fonctionnelle/de chemin :

$$\lim_{\text{therm.}}\langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{\hat{\varrho}[w]} = \frac{\int \mathcal{D}\rho\; e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho]-\mathcal{W}[\rho])}\,\langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{[\rho]}}{\int \mathcal{D}\rho\; e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho]-\mathcal{W}[\rho])}}. \tag{II.48}$$

B-2–x Interprétation thermodynamique.

- $\mathcal{S}_{YY}[\rho]$ *compte* le logarithme du nombre de micro-états par unité de longueur associé à la distribution $\rho(\theta)$: c'est l'**entropie combinatoire**.
- $\mathcal{W}[\rho]$ mesure le *coût énergétique généralisé* associé à cette distribution, dicté par le poids spectral $w(\theta)$.

Leur différence

$$(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho] \tag{II.49}$$

joue donc le rôle d'une *fonction thermodynamique effective* (analogue à une énergie libre). L'exposant $e^{L(\mathcal{S}_{YY}-\mathcal{W})[\rho]}$ fixe la **probabilité relative** d'un macro-état $\rho(\theta)$ dans le GGE : le terme entropique favorise les états, tandis que le terme énergétique pénalise les configurations coûteuses — d'où la compétition caractéristique de l'équilibre statistique.

B-3 Équations intégrales de la TBA

B-3–i Approximation au point selle (« méthode de la selle statique ») Dans la limite thermodynamique $L \to \infty$, l'intégrale (II.48) est dominée par la configuration ρ_{eq} qui maximise le poids exponentiel $e^{L(\mathcal{S}_{YY}-\mathcal{W})[\rho]}$ dans l'expression (II.48). Il s'agit de la densité de rapidité la plus probable, solution d'un problème de maximisation. On obtient à l'ordre principal

$$\lim_{\text{therm.}} \langle \hat{\boldsymbol{O}} \rangle_{\hat{\varrho}[w]} \quad \approx \quad \langle \hat{\boldsymbol{O}} \rangle_{[\rho_{eq}]}, \tag{II.50}$$

où ρ_{eq} est la distribution de rapidité à l'équilibre (II.35). Cette approximation correspond à une méthode de *selle statique*, où l'on développe la *fonction thermodynamique effective*, $\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}$ au voisinage de la distribution dominante.

Information

B-3–ii Dérivée fonctionnelle comme dérivée directionnelle. Dans le cadre des systèmes continus, les observables physiques dépendent souvent d'un champ $\phi(x)$, et sont représentées par des *fonctionnelles*, notées $F[\phi]$. Afin d'étudier la sensibilité de ces fonctionnelles à une variation infinitésimale du champ, on introduit la notion de **dérivée fonctionnelle**, définie par analogie avec la dérivée directionnelle en espace vectoriel de dimension finie.
Considérons une variation infinitésimale du champ de la forme $\phi(x) \mapsto \phi(x) + \epsilon\lambda(x)$, où $\lambda(x)$ est une fonction test lisse à support compact. La variation induite sur la fonctionnelle est donnée par :

$$\mathscr{D}_{[\lambda]} F[\phi] \equiv \lim_{\epsilon \to 0} \frac{F[\phi + \epsilon\lambda] - F[\phi]}{\epsilon} \tag{II.51}$$

La quantité $\mathscr{D}_{[\lambda]} F[\phi]$ est linéaire en $\lambda(x)$, et peut donc s'écrire sous forme d'un produit scalaire dans l'espace fonctionnel :

$$\mathscr{D}_{[\lambda]} F[\phi] = \int dx \, \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)} \lambda(x) \tag{II.52}$$

La fonction $\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)}$ est appelée **dérivée fonctionnelle** de $F[\phi]$ au point x. Elle joue un rôle analogue au gradient dans les espaces de dimension finie, en ce qu'elle encode la variation de $F[\phi]$ sous une perturbation infinitésimale du champ au point x [Whend].
On peut interpréter la dérivée fonctionnelle $\delta F[\phi]/\delta\phi(x)$ comme le résultat de la dérivation directionnelle de $F[\phi]$ dans la direction de la distribution $\delta(x - x_0)$, qui représente une perturbation localisée du champ au point x_0 :

$$\frac{d}{d\epsilon} F[\phi + \epsilon\delta(x - x_0)]\Big|_{\epsilon=0} = \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x_0)} \tag{II.53}$$

Cette construction générale sera utilisée dans la suite pour formuler des conditions d'extremum (par exemple dans des principes variationnels), ou pour dériver les équations de mouvement associées à une action.

B-3–iii Développement fonctionnel au premier ordre. Écrivons $\rho = \rho_{\text{eq}} + \delta\rho$ et développons $(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho]$ à l'ordre premier (linéaire) en $\delta\rho$ autour de la distribution d'équilibre ρ_{eq} :

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

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

$$\mathscr{D}_{[\delta\rho]} \mathcal{S}_{YY}[\rho_{\text{eq}}] = \mathscr{D}_{[\delta\rho]} \mathcal{W}[\rho_{\text{eq}}]. \tag{II.54}$$

B-3–iv Équation intégrale de la TBA. La condition de stationnarité au point selle $\rho = \rho_{\text{eq}}$ (II.54) réécrit sous la forme de produit scalaire (II.52) implique que pour tous θ :

$$\frac{\delta \mathcal{S}_{YY}[\rho_{\text{eq}}]}{\delta\rho(\theta)} = \frac{\delta \mathcal{W}[\rho_{\text{eq}}]}{\delta\rho(\theta)}, \tag{II.55}$$

et la forme de l'*énergie généralisée* (II.47) et le rappel (II.53) impliquent que le second membre de l'équation précédente (II.55) est

$$\frac{\delta \mathcal{W}[\rho_{\rm eq}]}{\delta \rho(\theta)} = w(\theta). \tag{II.56}$$

Ainsi (II.55) se réécrit en

$$\frac{\delta \mathcal{S}_{YY}[\rho_{\rm eq}]}{\delta \rho(\theta)} = w(\theta), \tag{II.57}$$

En utilisant l'expression explicite de l'entropie de YY (II.46), on obtient l'identité fonctionnelle

$$w \quad = \quad \ln(\nu_{eq}^{-1} - 1) - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 - \nu_{eq}). \tag{II.58}$$

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

B-3–v Forme pseudo-énergie. La **pseudo-énergie** ϵ se donne alors par la statistique de type Fermi-Dirac

$$\epsilon = \ln(\nu_{eq}^{-1} - 1), \qquad \nu_{eq} = \frac{1}{1 + e^{\epsilon}}. \tag{II.59}$$

En réinjectant (II.59) dans (II.58) on obtient l'équation intégrale canonique de la thermodynamique de Bethe :

$$\epsilon \quad = \quad w - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln(1 + e^{-\epsilon}). \tag{II.60}$$

Les relations (II.59)–(II.60) déterminent de façon univoque la distribution de rapidité d'équilibre ρ_{eq} à partir du poids spectral w, caractéristique du GGE.

Ainsi, la méthode du point selle relie *explicitement* le *poids spectral*, w (caractéristique du GGE) au *macro-état le plus probable*, ρ_{eq}, et permet d'évaluer les observables par la formule d'ensemble (II.50).

B-3–vi Résolution numérique de l'équation TBA. Prenons un *poids spectral* particulier, par exemple :

$$w(\theta) = \frac{1}{2}\theta^2. \tag{II.61}$$

En injectant w dans l'équation intégrale pour la pseudo-énergie (II.60), on obtient une équation non linéaire. Cette équation définit un opérateur contractant sur l'espace des fonctions $\epsilon(\theta)$; son Jacobien a une norme strictement inférieure à 1, garantissant la convergence de l'itération de Picard.[4]

Algorithme d'itération. La structure contractante de l'équation garantit l'absence de cycles ou de points fixes multiples, assurant la convergence de l'itération vers l'unique solution admissible. L'équation (II.60) est non-linéaire ; pour la résoudre numériquement, on utilise une méthode itérative de type Picard. On initialise $\epsilon_0 = w$, puis on construit une suite de fonctions ε_n définie par

$$\epsilon_{n+1} \quad = \quad \epsilon_0 - \frac{\Delta}{2\pi} \star \ln\left(1 + e^{-\epsilon_n}\right), \quad n \geq 0 \tag{II.62}$$

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

4. Pour une preuve rigoureuse de cette propriété, voir par exemple [**Korepin1997**]. Cette équation définit un opérateur T contractant sur l'espace des fonctions $\epsilon(\theta)$, au sens où il rapproche les fonctions entre elles selon la norme choisie. En conséquence, l'itération de Picard, $\epsilon_{n+1}(\theta) = T[\epsilon_n](\theta)$, converge vers le point fixe $\epsilon^*(\theta)$ unique, solution de l'équation. Cette propriété garantit à la fois l'existence et l'unicité de la solution dans le cadre rigoureux de l'analyse fonctionnelle.

Facteur d'occupation et densités. Une fois l'itération (II.62) convergée vers la **pseudo-énergie** $\epsilon(\theta)$, le facteur d'occupation à l'équilibre est déterminé en substituant $\epsilon(\theta)$ dans l'équation (II.59), ce qui fournit ν_{eq}.

On en déduit ensuite la densité d'état à l'équilibre $\rho_{s,eq}$ via le **dressing** de la fonction constante $f(\theta) = 1$, selon (I.92), rappelée ici pour mémoire : $2\pi\rho_{s,\text{eq}} = 1^{\text{dr}}_{[\nu_{\text{eq}}]}$.

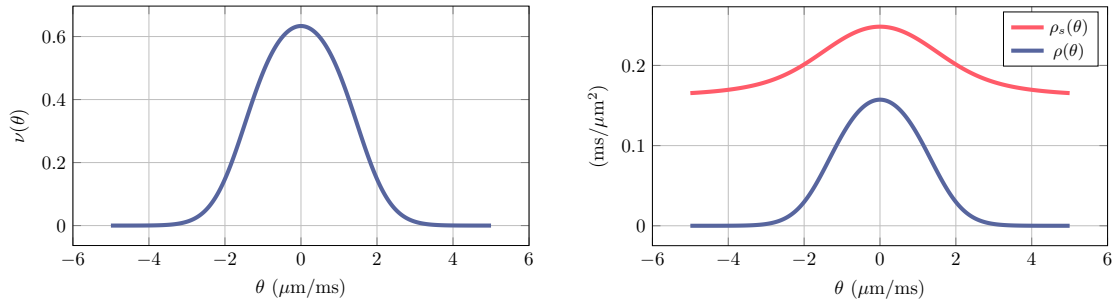
L'opérateur de dressing (I.91) étant linéaire, il peut être résolu numériquement sous la forme suivante :

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

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

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

Ainsi en fixant le poids spectral $w(\theta)$, l'algorithme fournit la pseudo-énergie ϵ, le facteur d'occupation ν_{eq} et la distribution de rapidité ρ_{eq} (Fig II.2).



(a) Facteur d'occupation $\nu(\theta)$.

(b) Distribution de rapidité $\rho(\theta)$ et densité d'états $\rho_s(\theta)$.

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

B-3-a Équilibre thermique

B-3-a-i État fondamental. À l'état fondamental, le facteur d'occupation vaut

$$\nu(\theta) = \begin{cases} 1, & \theta \in [-\theta_{\text{max}}, \theta_{\text{max}}], \\ 0, & \text{sinon}, \end{cases} \tag{II.63}$$

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

$$\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 n}, \tag{II.64}$$

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

En fonction de γ, deux régimes limites apparaissent :

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

$$\rho(\theta) = \frac{n}{\pi c}\sqrt{1 - \left(\frac{\theta}{2c}\right)^2}, \qquad c = \sqrt{gn/m}. \tag{II.65}$$

Pour des γ petits mais non nuls, la distribution est proche du demi-cercle mais présente une discontinuité aux bords, comme illustré sur la Fig. II.3.

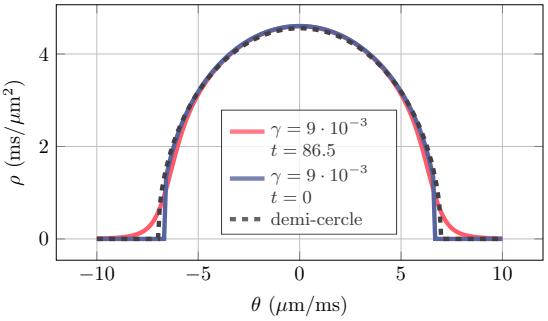


Figure II.3 – Distributions de rapidités pour différents paramètres de Lieb γ et différentes températures réduites $\mathfrak{t}$. Distribution dans le régime de faible interaction ($\gamma \ll 1$) : le demi-cercle gris représente la distribution attendue pour $\gamma \to 0$, tandis que le profil bleu correspond à γ petit mais non nul, montrant une discontinuité aux extrémités. La distribution en rouge illustre l'état excité au-delà de l'état fondamental, avec apparition d'ailes aux extrémités.

B-3-a-ii Diagramme des régimes du gaz de Lieb-Liniger.

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

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

les coefficients de Lagrange associés sont :

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

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

Le poids spectral s'écrit comme une combinaison linéaire :

$$w(\theta) \quad = \quad \beta_0 f_0(\theta) + \beta_2 f_2(\theta), \tag{II.66}$$

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

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

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

$$\mathfrak{t} = \frac{k_B T}{m g^2/\hbar^2}. \tag{II.67}$$

La densité linéaire n ne paramétrise pas directement le poids spectral w (IV.62), mais est liée au potentiel chimique μ via :

$$Ln = \langle \hat{\boldsymbol{Q}}[f_0] \rangle_w \left(= \int d\theta\, \rho_{\text{eq}}(\theta) \right). \tag{II.68}$$

C'est ainsi que les simulations numériques seront effectuées en utilisant γ et $\mathfrak{t}$.

Un exemple de ce profil avec ($\gamma = 9.10^{-3}$, $\mathfrak{t} = 86.5$) est représenté sur la Fig. II.3

Pour synthétiser les différents comportements, les régimes principaux peuvent être représentés dans le plan $(\gamma, \mathfrak{t})$. Le diagramme de la Fig. II.4 distingue trois zones : gaz de Bose idéal, gaz de TG et qBEC. Les courbes qui délimitent ces zones correspondent à des conditions analytiques sur γ et $\mathfrak{t}$, par exemple

$\gamma^{3/2}\mathfrak{t} = 1$, $\gamma^2\mathfrak{t} = 1$ et $\gamma\mathfrak{t} = 1$. Il ne s'agit pas de transitions de phase, mais de cross-over entre régimes asymptotiques. Les expériences sur puce atomique du LCF ont permis d'étudier ces régimes. La plupart des résultats présentés dans cette thèse correspondent à $\gamma \sim 0.9 \times 10^{-2}$. La zone grise indique la gamme de paramètres expérimentaux explorés pendant cette thèse.

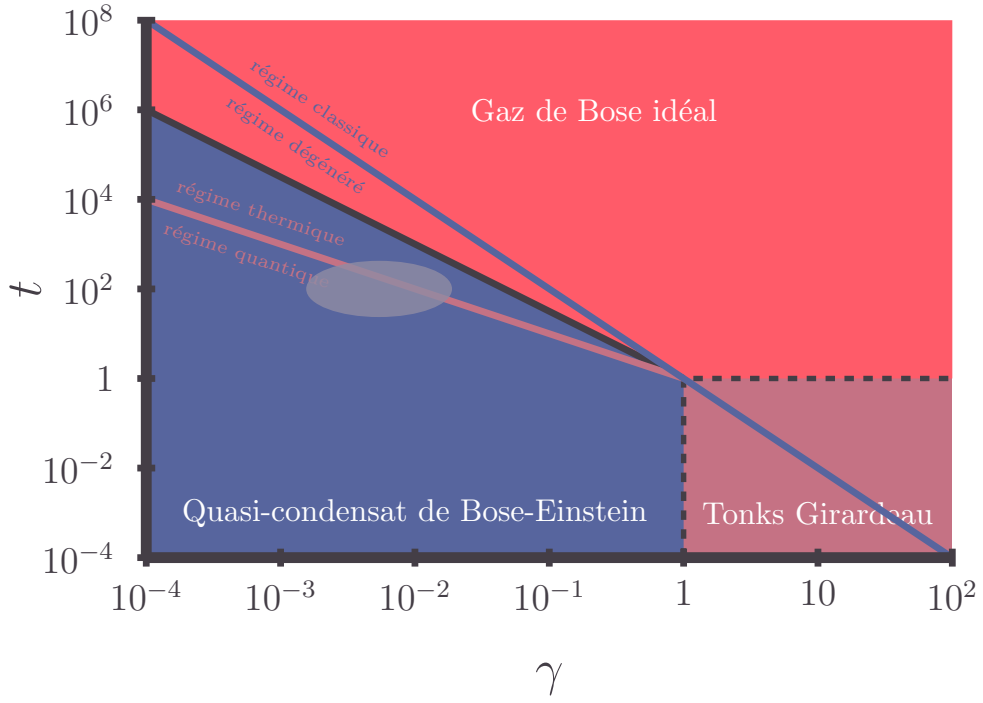


FIGURE II.4 – Diagramme des régimes principaux du gaz de Lieb–Liniger : gaz de Bose idéal, TG et qBEC, en fonction des paramètres adimensionnés γ et $\mathfrak{t}$. Les courbes noires, bleues et orange délimitent les cross-overs entre régimes. La zone grise correspond aux paramètres expérimentaux explorés pendant la thèse. Figure adaptée de [BDW11].

Conclusion

Conclusion

Dans les systèmes intégrables, l'état stationnaire hors équilibre est correctement décrit par un GGE basé sur une infinité de charges conservées. Ces charges sont liées aux puissances des rapidités des quasi-particules (cf eqs (II.24) et (II.25)).

La description via le *poids spectral* $w(\theta)$ permet de relier ces charges aux distributions de rapidité à l'équilibre. En moyenne, $w(\theta)$ définit à la fois les valeurs moyennes des charges conservées et la distribution de rapidité correspondante (cf eq (II.58)).

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

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

Bibliographie

[LL63] Elliott H. Lieb et Werner Liniger. “Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State”. In : *Phys. Rev.* 130 (4 mai 1963), p. 1605-1616. doi : 10.1103/PhysRev.130.1605. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.1605.

[YY69] C. N. Yang et C. P. Yang. “Thermodynamics of a One-Dimensional System of Bosons with Repulsive Delta-Function Interaction”. In : *Journal of Mathematical Physics* 10.7 (juill. 1969), p. 1115-1122. issn : 0022-2488. doi : 10.1063/1.1664947. eprint : https://pubs.aip.org/aip/jmp/article-pdf/10/7/1115/19101094/1115_1_online.pdf. url : https://doi.org/10.1063/1.1664947.

[Rig+07] Marcos Rigol et al. “Relaxation in a completely integrable many-body quantum system : an ab initio study of the dynamics of the highly excited states of 1D lattice hard-core bosons”. In : *Physical review letters* 98.5 (2007), p. 050405.

[BDW11] Isabelle Bouchoule, N. J. van Druten et C. I. Westbrook. “Atom Chips and One-Dimensional Bose Gases”. In : *Atom Chips*. John Wiley et Sons, Ltd, 2011. Chap. 11, p. 331-363. isbn : 9783527633357. doi : 10.1002/9783527633357.ch11. url : https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9783527633357.ch11.

[CCR11] Amy C. Cassidy, Charles W. Clark et Marcos Rigol. “Generalized Thermalization in an Integrable Lattice System”. In : *Phys. Rev. Lett.* 106 (14 avr. 2011), p. 140405. doi : 10.1103/PhysRevLett.106.140405. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.140405.

[NP16] Jacopo De Nardis et Miłosz Panfil. “Exact correlations in the Lieb-Liniger model and detailed balance out-of-equilibrium”. In : *SciPost Phys.* 1 (2016), p. 015. doi : 10.21468/SciPostPhys.1.2.015. url : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.1.2.015.

[Nar+17] Jacopo De Nardis et al. “Probing non-thermal density fluctuations in the one-dimensional Bose gas”. In : *SciPost Phys.* 3 (2017), p. 023. doi : 10.21468/SciPostPhys.3.3.023. url : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.3.3.023.

[BDB23] Yasser Bezzaz, Léa Dubois et Isabelle Bouchoule. *Rapidity distribution within the defocusing non-linear Schrödinger equation model*. 2023. arXiv : 2301.11098 [cond-mat.quant-gas]. url : https://arxiv.org/abs/2301.11098.

[Whend] Nicolas Wheeler. *Classical Field Theory : Chapter 5 — Calculus of Functionals*. PDF lecture notes. Available online at : https ://www.reed.edu/physics/faculty/wheeler/documents/Classical Physical Field Theory/Class Notes/Field Theory Chapter 5.pdf, accessed on 2025-12-09. n.d.

Chapitre III

Dynamique hors-équilibre et hydrodynamique généralisée

Sommaire

A **Manipulation de l'opération d'*habillage*** **47**
A-1 Dérivation intuitive de la vitesse effective 48
A-2 Diagonalisation et invariants de Riemann dans la GHD spatiale étendue 49
B **Formulation hamiltonienne de la théorie Hydrodynamique Généralisée** **51**
B-1 Crochet de Poisson fonctionnel 51
B-2 Crochet avec l'Hamiltonien 54
B-3 Modèle de Lieb–Liniger 55
B-4 Cas "no dressing" 55
C **Régime de quasi-condensation et limite Gross–Pitaevskii** **57**
C-1 Évolution temporelle selon l'équation de Gross–Pitaevskii 57
C-2 Description par les équations Hydrodynamiques Généralisées 58
C-3 Connexion hydrodynamique : de la GHD à l'équation de Gross–Pitaevskii 58
Bibliographie **61**

Introduction

De l'état stationnaire à la dynamique Après avoir étudié les propriétés stationnaires du gaz de bosons unidimensionnel, nous abordons maintenant sa dynamique hors équilibre. Un outil théorique qui permet de décrire cette évolution macroscopique à grande échelle[1] est **l'Hydrodynamique Généralisée**, en anglais Generalized Hydrodynamics (GHD). Cette approche, développée au cours des dernières années (voir par exemple [Doy20a ; BD22 ; Ess23 ; KK23]), fournit un cadre unifié pour la dynamique des systèmes intégrables.

Principe général de l'approche hydrodynamique Si on considère des systèmes homogènes en équilibre ou relaxés vers un état stationnaire, et nous avons étudié la thermodynamique du Bethe Ansatz (TBA), qui permet de caractériser ces états par une distribution de rapidité homogène $\rho(\theta)$.

Pour passer à l'hydrodynamique, nous nous intéressons désormais à des systèmes *inhomogènes* et *hors équilibre*. Nous supposons que le système est suffisamment grand pour que des variations spatiales et temporelles apparaissent, mais suffisamment lent pour qu'il puisse se relaxer *localement* vers des états quasi-stationnaires.

Le système est donc pris dans la limite thermodynamique ($L \to \infty$), de sorte que l'on puisse le découper en cellules fluides locales de taille mésoscopique notée ℓ. Ces cellules sont suffisamment grandes pour

1. La notion de «grande échelle» sera précisée dans la section suivante, où nous détaillerons la description hydrodynamique du système.

contenir un grand nombre de particules, mais suffisamment petites pour que les variations spatiales soient négligeables à l'intérieur de chacune d'elles. Cet effort de séparation d'échelles[2] (fig. III.1), définie par

$$\ell_c \ll \ell \ll L,$$

où ℓ_c est une longueur microscopique caractéristique (distance inter-particules, longueur de corrélation, *etc.*), permet de définir, pour chaque cellule centrée en x au temps t, des opérateurs densités d'observables locaux $\hat{\boldsymbol{q}}_i(x,t)$.

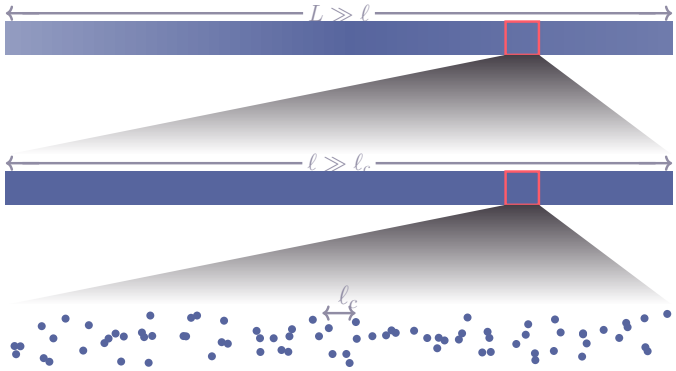


FIGURE III.1 – **Représentation de l'hypothèse hydrodynamique.** Le système est décomposé en cellules de fluide de taille caractéristique ℓ , telles que $L \gg \ell \gg \ell_c$, où L est la taille macroscopique du système et ℓ_c une longueur microscopique caractéristique. À l'intérieur de chaque cellule, le fluide est supposé homogène et localement dans un état relaxé à tout instant.

Ces opérateurs locaux $\hat{\boldsymbol{q}}_i(x,t)$ sont entièrement caractérisés par un opérateur densité locale de rapidités $\hat{\boldsymbol{\rho}}(x,\theta;t)$, correspondant à la distribution de rapidité dans la cellule fluide localisée en (x,t).

On introduit ainsi la description dans l'*espace des phases* (x,θ) : la variable de rapidité θ caractérise l'état asymptotique des quasi-particules (leur quantité de mouvement effective), tandis que la variable x encode l'inhomogénéité spatiale.

L'objectif de l'hydrodynamique est de décrire la dynamique macroscopique du système, après un lissage sur des échelles intermédiaires de temps et d'espace. Le système est alors découpé en cellules spatio-temporelles de taille $\ell \times \tau$.[3]

Nous faisons l'hypothèse que, dans chaque cellule de taille ℓ, le système se relaxe localement un état quasi-stationnaire, c'est-à-dire que les observables locales deviennent stables et proches de leur valeur d'équilibre local, même si le système global évolue encore. Cette hypothèse constitue l'**Approximation de Densité Locale** (en anglais Local Density Approximation (LDA)).[4]

Nous allons maintenant réintroduire les charges conservées définies dans le chapitre précédent, mais cette fois de manière locale, en fonction de l'opérateur densité de rapidités localement résolue $\hat{\boldsymbol{\rho}}(x,\theta;t)$.

2. (*i.e.* la définition de l'échelle mésoscopique de taille ℓ etre l'echelle microscopique de taille ℓ_c et l'échelle macroscopique de taille L)

3. La variable τ représente l'échelle de temps caractéristique associée au découpage en cellules spatio-temporelles. Elle doit être suffisamment grande pour que le système puisse se relaxer localement vers un état quasi-stationnaire, mais suffisamment petite devant les temps d'évolution macroscopique pour que les variations globales restent négligeables à l'intérieur de chaque cellule. Autrement dit, on impose une séparation d'échelles temporelles analogue à celle des longueurs :

$$\tau_c \ll \tau \ll t,$$

où τ_c est le temps microscopique de relaxation locale et t l'échelle de variation globale du système. Cette condition garantit la validité de l'approximation hydrodynamique et permet d'appliquer l'Approximation de Densité Locale (LDA) dans chaque cellule.

4. Le temps nécessaire pour atteindre cet état quasi-stationnaire dans une cellule est typiquement inférieur à l'échelle de variation macroscopique du système.

Opérateurs charges globales Les charges locales conservées ont été définies dans les équations (II.21). Dans le même formalisme, on définit les *charges globales* comme des fonctionnelles linéaires agissant sur une fonction réelle et régulière $f(x,\theta)$ définie sur $\mathbb{R}^2$, selon

$$\hat{\boldsymbol{Q}}[f] = \int_{\mathbb{R}^2} dx\, d\theta\, f(x,\theta)\, \hat{\boldsymbol{\rho}}(x,\theta;t). \tag{III.1}$$

Cette quantité correspond à la charge totale associée à une observable prenant la valeur $f(x,\theta)$ pour chaque quasi-particule. [a]

La valeur moyenne $\langle \hat{\boldsymbol{Q}}[f] \rangle_{\hat{\varrho}[w]}$ a été définie en (II.4). La matrice densité locale $\hat{\varrho}^{(\mathcal{S})}[w]$ a été introduite en (II.28). De manière analogue, la *matrice densité globale* $\hat{\varrho}[w]$ s'écrit

$$\hat{\varrho}[w] = \frac{1}{Z[w]}\, e^{-\hat{\boldsymbol{Q}}[w]}, \qquad Z[w] = \mathrm{Tr}\left[e^{-\hat{\boldsymbol{Q}}[w]}\right], \tag{III.2}$$

où la charge globale $\hat{\boldsymbol{Q}}[w]$ est définie par (III.1), et w désigne le poids spectral.

a.

Remarque : pour que $\hat{\boldsymbol{Q}}[f]$ soit strictement conservée dans le temps, la fonction f doit être indépendante de x, c'est-à-dire $f(x,\theta) = f(\theta)$. Si f dépend de x, $\hat{\boldsymbol{Q}}[f]$ n'est pas nécessairement conservée au cours de l'évolution du système. En revanche, si f dépend uniquement de θ , alors $\hat{\boldsymbol{Q}}[f]$ correspond à une véritable charge conservée. Dans le cadre de ce chapitre, la dépendance en x est introduite pour faciliter certaines dérivations et l'étude des profils locaux, mais la conservation stricte n'est garantie que pour les fonctions $f(\theta)$ indépendantes de x.

Nous allons maintenant considérer la limite thermodynamique, où les moyennes des opérateurs sont notées sans chapeau.

Limite thermodynamique. Dans notre étude de la dynamique, nous n'avons pas besoin de l'information détaillée sur le poids spectral w. Nous noterons donc, dans ce chapitre, et dans la limite thermodynamique, les moyennes des opérateurs en supprimant leur chapeau, *i.e.*

$$\lim_{\text{therm}} \langle \hat{\boldsymbol{O}} \rangle_{\varrho[w]} \equiv O, \tag{III.3}$$

de sorte que, dans cette limite, la moyenne de la charge globale s'écrit

$$Q[f] = \int_{\mathbb{R}^2} dx\, d\theta\, f(x,\theta)\, \rho(x,\theta;t), \tag{III.4}$$

où f est une fonction régulière sur $\mathbb{R}^2$.

Avec ce formalisme, en appliquant $(x,\theta) \mapsto \delta(\cdot - x) f_i(\theta)$ dans (III.4), nous pouvons définir la moyenne des densités locales $q_i(x,t)$ comme

$$q_{[f_i]}(x,t) = Q\big[(x,\theta) \mapsto \delta(\cdot - x)\, f_i(\theta)\big] = \int d\theta\, f_i(\theta)\, \rho(x,\theta;t). \tag{III.5}$$

Équations de type Euler. Maintenant on veut décrire les échanges des densités locales $q_i(x,t)$ entre les cellules fluides.

À l'**échelle d'Euler**, on suppose $\ell_c \ll \ell \ll L$ et une relaxation locale rapide : chaque cellule mésoscopique atteint un état quasi-stationnaire entièrement caractérisé par les densités conservées $q_i(x,t)$. Le courant qui traverse la cellule est alors fixé par cet état local, d'où la relation constitutive locale

$$j_i(x,t) \simeq j_i^{(0)}\big(\{q_1(x,t), q_2(x,t), \cdots\}\big). \tag{III.6}$$

Les dépendances en gradients $\partial_x q_i$ sont de rang supérieur dans l'expansion en petit paramètre de séparation d'échelles (**Knudsen number**) ; elles apparaissent comme corrections dissipatives (p. ex. termes de diffusion

ou de viscosité) :

$$j_i = j_i^{(0)}(\{q_a\}) - \sum_j D_{ij}(\{q_a\})\,\partial_x q_j + \cdots, \tag{III.7}$$

avec D_{ij}coefficients de diffusion (ou viscosité) et $\{q_a\} \equiv \{q_1, q_2, \cdots\}$. C'est ce qui conduit aux lois de Fick/Fourier/viscose au rang suivant.

Ainsi, l'approximation $j_i = j_i(\{q_a\})$ est valable à l'ordre **Euler**, tandis que $j_i(q, \partial_x q, \dots)$ correspond au traitement hydrodynamique au–delà de l'ordre Euler (**Navier–Stokes /** corrections diffusive).

À l'**échelle d'Euler**, l'évolution des densités est alors donnée par les équations de conservation locales : dites **équations d'Euler** :

$$\partial_t q_i + \partial_x j_i = F_i, \tag{III.8}$$

où F_i des termes de force provenant d'éventuels champs externes. Ces équations d'Euler apparaissent dans de nombreux contextes physiques : fluides galiléens, hydrodynamique relativiste, etc.

Cas intégrable et hydrodynamique généralisée Dans un système intégrable en dimension un, il existe une infinité de quantités conservées, et donc une infinité d'équations de type (III.8). GHD fournit une reformulation de cet ensemble d'équations sous une forme compacte et universelle. Elle s'applique aussi bien aux systèmes quantiques (modèle de Lieb–Liniger, chaînes de spins) qu'aux systèmes classiques (bâtons durs, gaz de solitons).

Paramétrisation spectrale. Dans le modèle de LL, nous avons vu que localement un système relaxé est décrit par une distribution de rapidité homogène $\rho(\theta)$ (voir chapitres précédents).

Avec la LDA, on considère désormais des situations dans lesquelles le système présente des variations sur des longueurs d'espace beaucoup plus grandes que les échelles microscopiques l_c. Dans ce cadre hydrodynamique, la distribution de rapidité dépend donc explicitement de la position et du temps :

$$\rho(x, \theta, t) \quad = \quad \mathcal{Q}\big[(x, \theta) \mapsto \delta(\cdot - x)\,\delta(\cdot - \theta)\big].$$

La fonction $\rho(x, \theta, t)$ représente alors la densité locale de rapidité dans cet espace étendu.

Équation de GHD avec force externe. En présence d'un champ de force externe, l'équation GHD prend la forme [DY17]

$$\partial_t \rho + \partial_x\Big(v^{\text{eff}}\rho\Big) + \partial_\theta\Big(a^{\text{eff}}\rho\Big) = 0, \tag{III.9}$$

où la **vitesse effective** v^{eff} et l'**accélération effective** a^{eff} sont des fonctionnelles déterminées par la structure intégrable du modèle. Le terme en ∂_θ traduit la déviation des quasi-particules sous l'effet des forces externes appliquées.[5]

En l'absence de force externe, l'opérateur nombre de rapidités

$$\Pi(\theta)\,\delta\theta = \int \mathrm{d}x\,\rho(x, \theta; t)\,\delta\theta \tag{III.10}$$

est conservé dans chaque tranche de rapidité $[\theta, \theta + \delta\theta]$, et ce pour tout θ (cf. Fig. III.2).

Dans la limite $\delta\theta \to 0$, l'ensemble de ces lois de conservation se traduit par l'équation de continuité

$$\partial_t \rho(x, \theta; t) + \partial_x\Big(v^{\text{eff}}(\theta)\,\rho(x, \theta; t)\Big) = 0, \tag{III.11}$$

qui correspond à l'équation de la théorie GHD (III.9), mais sans terme de dérivée en θ.

5. En présence d'un potentiel externe $V(x)$, le terme $\partial_\theta(a^{\text{eff}}\rho)$ traduit le couplage entre les différentes tranches de rapidité induites par les variations spatiales du potentiel. Plus précisément, ∂_x représente la variation spatiale de la densité dans l'espace physique, tandis que ∂_θ capture la redistribution des quasi-particules entre différentes rapidités. Pour une quasi-particule à la position x avec une rapidité θ, le terme de dérive v^{eff} décrit le déplacement spatial effectif résultant des interactions, et le terme d'accélération $a^{\text{eff}} = -V'(x)$ représente la force externe agissant sur la particule. Les équations GHD sans force externe correspondent à la conservation des charges associées à des fonctions $f(\theta)$ dépendant uniquement de la rapidité. En présence d'un potentiel externe $V(x)$, le terme $\partial_\theta(a^{\text{eff}}\rho)$ traduit le couplage entre les différentes tranches de rapidité induites par les variations spatiales du potentiel.

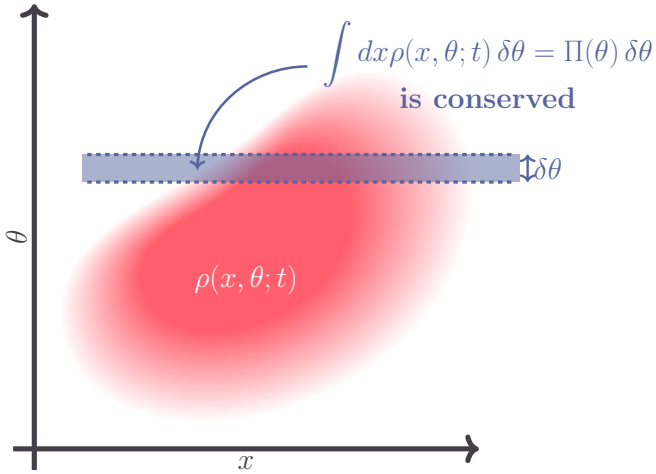


Figure III.2 – Conservation du nombre de quasi-particules dans une tranche de rapidité $[\theta, \theta + \delta\theta]$ en l'absence de force externe.

En présence d'une force externe, les rapidités évoluent dans le temps et les quasi-particules peuvent traverser les tranches de rapidité $[\theta, \theta + \delta\theta]$. La conservation locale est alors modifiée, et l'on obtient l'équation complète de la GHD (III.9) .

Dans la suite, nous détaillons la construction de ces équations pour le modèle de LL, ainsi que leurs principales conséquences physiques.

A Manipulation de l'opération d'*habillage*

Un point technique central de la GHD est la dérivation de la vitesse effective et de l'accélération effective qui apparaissent dans l'équation (III.9). Ces quantités ont été calculées pour la première fois par Bertini *et al.* (2016) [Ber+16] et Castro-Alvaredo *et al.* (2016) [CDY16]. Cette observation clé a déclenché l'ensemble des développements ultérieurs de la dynamique hydrodynamique généralisée dans les systèmes quantiques intégrables. Les travaux de Bertini *et al.* s'appuient en partie sur ceux de Bonnes *et al.* (2014) [BEL14], où la formule de la vitesse effective (voir Eq. (III.13)) était apparue pour la première fois dans le contexte d'un système intégrable quantique.

On note $h(x, \theta)$ la densité de l'hamiltonien *nu*[6] telle que

$$H = Q[h]. \tag{III.12}$$

La fonction d'occupation ν, la vitesse effective v^{eff} et l'accélération effective a^{eff} sont définies par

$$2\pi\rho = 1^{\text{dr}}_{[\nu]}\,\nu, \quad 2\pi\, v^{\text{eff}}\,\rho = (\partial_\theta h)^{\text{dr}}_{[\nu]}\,\nu, \quad 2\pi\, a^{\text{eff}}\,\rho = -(\partial_x h)^{\text{dr}}_{[\nu]}\,\nu, \tag{III.13}$$

toutes trois étant des fonctions de $\rho(\cdot,\cdot,t)$ et l'opération d'*habillage* (notée $(\bullet)^{\text{dr}}_{[\nu]}$) a été définie au chapitre I, Eq. (I.91).

Les équations (III.8) et (III.9) (ainsi que plus loin (III.31) et (III.53)) décrivent la dynamique dans le régime d'Euler. En dehors de cette approximation, il est nécessaire de prendre en compte des contributions supplémentaires associées aux effets diffusifs [DBD18 ; NBD19 ; Hüb+24].

6. Ici « nu » signifie « non habillé » : il s'agit de la densité d'énergie «brute» d'une quasi-particule (énergie cinétique + potentiel externe) définie sans l'opération d'*habillage* (dressing). Les corrections collectives dues aux interactions sont ensuite introduites via le dressing, qui produit les grandeurs effectives (par ex. v^{eff}, a^{eff}).

A-1 Dérivation intuitive de la vitesse effective

En partant de la définition de la vitesse effective en (III.13) et en utilisant la définition de l'opération d'*habillage* (I.91), il vient que

$$2\pi\, v^{\text{eff}}\, \rho = v\, \partial_\theta h + v\, \Big(\Delta \star (\rho\, v^{\text{eff}})\Big), \tag{III.14}$$

où Δ désigne le *déplacement collisionnel* défini dans le modèle LL dans l'équation(I.63). En soustrayant $v^{\text{eff}}(\theta)\, v(\theta)\, (\Delta \star \rho)(\theta)$ des deux côtés on obtient

$$v^{\text{eff}}(\theta)\, \Big(2\pi\, \rho(\theta) - v(\theta)\, (\Delta \star \rho)(\theta)\Big) = v(\theta)\, \Big(\partial_\theta h(\theta) + \int d\theta'\, \Delta(\theta-\theta')\, \rho(\theta')\, (v^{\text{eff}}(\theta') - v^{\text{eff}}(\theta))\Big) \tag{III.15}$$

En utilisant la relation d'*habillage* (III.13) ($2\pi\rho = 1^{\text{dr}}_{[v]}\, v$) et en simplifiant l'expression algébriquement (voir définition (I.91) et inversion de l'opérateur d'habillage), le facteur à gauche se réduit proportionnellement à $v(\theta)$ soit

$$2\pi\rho - v\Delta \star \rho \quad = \quad v, \tag{III.16}$$

ce qui conduit en injectant dans (III.15), et après division par le facteur d'occupation v non nul, à l'équation intégrale standard pour la vitesse effective :

$$v^{\text{eff}}(\theta) = \partial_\theta h(\theta) + \int d\theta'\, \Delta(\theta-\theta')\, \rho(\theta')\, \big(v^{\text{eff}}(\theta') - v^{\text{eff}}(\theta)\big). \tag{III.17}$$

Cette écriture évite l'introduction d'une égalité intermédiaire ambiguë et conserve le signe correct dans le terme d'intégrale.

Dans le cadre général du GHD, l'équation (III.17) s'interprète comme une extension naturelle du résultat classique obtenu pour le gaz de barres dures [Per76 ; BDS83]. La distinction essentielle réside dans le fait que le décalage de diffusion $\Delta(\theta - \theta_0)$ dépend désormais explicitement de la rapidité relative entre les quasi-particules, alors que, dans le cas du gaz de barres dures, Δ est une constante égale à l'opposé du diamètre des particules.

Sur le plan cinématique, on peut décrire la situation de la manière suivante : une quasi-particule *traceur* de rapidité θ — c'est-à-dire de moment asymptotique θ en l'absence d'interactions — se déplacerait, dans le vide, à vitesse constante θ (Figs I.1 et III.3) . En présence d'une densité finie $\rho(\theta_0)$ de quasi-particules de rapidité θ_0, cette vitesse est modifiée par les processus de diffusion à deux corps.

Pendant un intervalle de temps infinitésimal $[t,\ t+\delta t]$, le traceur subit en moyenne

$$\delta t \times \big|v^{\text{eff}}(\theta) - v^{\text{eff}}(\theta_0)\big|\ \rho(\theta_0) \tag{III.18}$$

collisions avec des quasi-particules de rapidité θ_0. Chaque interaction provoque un décalage spatial $\Delta(\theta-\theta_0)$ vers l'arrière (Figs I.1 et III.3). L'équation (III.17) formalise précisément cet effet cumulatif, résultant de l'intégration des contributions de toutes les collisions binaires sur l'espace des rapidités. La Fig. III.3 illustre les trajectoires d'un gaz de barres dures en 1D [Per76 ; BDS83], avec un diamètre "$-\Delta$". Les trajectoires effectives sont calculées via la vitesse des quasi-particules *traceur* , et le graphique a été généré en Python (Fig III.3).

Cette analyse microscopique s'étend naturellement aux modèles à N corps, où les processus de diffusion se combinent et interagissent de manière non triviale, la fonction $\Delta(\theta - \theta_0)$ encapsulant alors l'intégralité de la structure intégrable du système. [7]

7. Par « intégralité de la structure intégrable » on entend que la fonction de déplacement collisionnel $\Delta(\theta - \theta_0)$ contient toutes les données de diffusion à deux corps qui caractérisent le modèle intégrable : elle est reliée à la dérivée de la phase de diffusion $\varphi(\theta - \theta_0)$ (ou au noyau intervenant dans la TBA) via $\Delta(\theta) = \partial_\theta \varphi(\theta)$, et, du fait de la factorisation des collisions, les effets N-corps se décomposent en sommes de contributions binaires. Autrement dit, la matrice de diffusion (ou matrice S), les noyaux de dressing et les charges conservées issues du BA se retrouvent dans Δ : elle encode la dépendance en rapidité des phases de collision, la statistique effective et le noyau de l'opérateur de dressing. Cette information suffit à reconstruire les vitesses effectives, l'opérateur de dressing et l'ensemble des grandeurs thermodynamiques nécessaires à la théorie GHD. Dans les modèles classiques (par ex. gaz de solitons ou hard rods), la même fonction traduit le décalage de phase/position subi lors d'une collision, ce qui illustre le rôle universel de Δ pour l'intégrabilité.

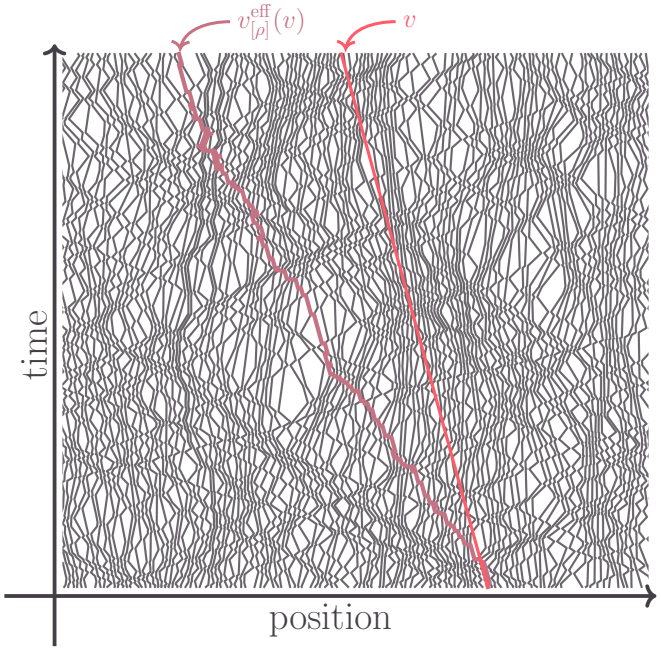


Figure III.3 – Trajectoires des particules d'un gaz de barres dures en 1D. Les lignes noires représentent les particules individuelles, la ligne rouge la trajectoire effective (vitesse GHD) de la particule suivie, et la ligne orange la trajectoire si la particule conservait sa vitesse initiale (bare velocity). Le graphique a été généré en Python.

A-2 Diagonalisation et invariants de Riemann dans la GHD spatiale étendue

En dérivant la définition de l'opération d'*habillage* (I.91), on obtient la relation suivante :

$$\partial_X\big(f^{\text{dr}}_{[\nu]}\big) = \partial_X f + \frac{\Delta}{2\pi} \star \big(\nu\, \partial_X f^{\text{dr}}_{[\nu]}\big) + \frac{\Delta}{2\pi} \star \big(f^{\text{dr}}_{[\nu]}\, \partial_X \nu\big), \tag{III.19}$$

où les variables $X \in \{ t, x, \theta\}$. Soit

$$\Big(\text{Id} - \widehat{K}_\nu\Big)\, \partial_X\big(f^{\text{dr}}_{[\nu]}\big) = \partial_X f + \frac{\Delta}{2\pi} \star \big(f^{\text{dr}}_{[\nu]}\, \partial_X \nu\big), \tag{III.20}$$

où nous avons introduit l'opérateur linéaire $\widehat{K}_\nu$ construit à partir de $\big(\text{Id} - \frac{\Delta}{2\pi} \star \nu \times \big)$ et de convolutions par $\frac{\Delta}{2\pi}$ *i.e.*

$$(\widehat{K}_\nu\, g)(\theta) = \int d\theta'\, K_\nu(\theta,\theta') g(\theta'), \qquad K_\nu(\theta,\theta') = \frac{\Delta(\theta-\theta')}{2\pi}\, \nu(\theta'). \tag{III.21}$$

En utilisant la définition (I.91), on obtient également que

$$\big(\partial_X f\big)^{\text{dr}}_{[\nu]} = \Big(\text{Id} - \widehat{K}_\nu\Big)^{-1} \partial_X f, \tag{III.22}$$

donc en injectant dans (III.20) il vient que

$$\partial_X\Big(f^{\text{dr}}_{[\nu]}\Big) = \big(\partial_X f\big)^{\text{dr}}_{[\nu]} + \widehat{\Theta}\Big(f^{\text{dr}}_{[\nu]}\, \partial_X \nu\Big), \tag{III.23}$$

où $X \in \{t, x, \theta\}$, et où nous avons introduit l'opérateur linéaire $\widehat{\Theta}$, défini comme la composition de l'inverse de l'opérateur $\text{Id} - \widehat{K}_\nu$ avec la convolution par $\frac{\Delta}{2\pi}$, *i.e.*

$$\widehat{\Theta} \doteq \Big(\text{Id} - \widehat{K}_\nu\Big)^{-1} \circ \widehat{K}_{\text{Id}}, \tag{III.24}$$

avec

$$(\widehat{K}_{\mathrm{Id}}\, g)(\theta) = \int d\theta'\, K_{\mathrm{Id}}(\theta,\theta')g(\theta'), \qquad K_{\mathrm{Id}}(\theta,\theta') = \frac{\Delta(\theta-\theta')}{2\pi}. \tag{III.25}$$

Les dérivations des équations (III.13) donnent :

$$2\pi\partial_t\rho = 1^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\partial_t\nu + \nu\left((\partial_t 1)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]} + \widehat{\Theta}\left(1^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\partial_t\nu\right)\right) \tag{III.26}$$

$$2\pi\partial_x(v^{\mathrm{eff}}\rho) = (\partial_\theta h)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\partial_x\nu + \nu\left((\partial_x\partial_\theta h)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]} + \widehat{\Theta}\left((\partial_\theta h)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\partial_x\nu\right)\right) \tag{III.27}$$

$$2\pi\partial_\theta(a^{\mathrm{eff}}\rho) = -(\partial_x h)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\partial_\theta\nu - \nu\left((\partial_\theta\partial_x h)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]} + \widehat{\Theta}\left((\partial_x h)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\partial_\theta\nu\right)\right) \tag{III.28}$$

En injectant dans l'équation GHD (III.9) on obtient après calculs (regroupement des termes et mise en facteur)

$$\left((\partial_t 1)^{\mathrm{dr}} + (\partial_x\partial_\theta h)^{\mathrm{dr}} - (\partial_\theta\partial_x h)^{\mathrm{dr}}\right)\nu + (\mathrm{Id}+\widehat{\Theta})\left(1^{\mathrm{dr}}\partial_t\nu + (\partial_\theta h)^{\mathrm{dr}}\,\partial_x\nu - (\partial_x h)^{\mathrm{dr}}\,\partial_\theta\nu\right) = 0. \tag{III.29}$$

Puisque $\partial_t 1 = 0$ et $\partial_x\partial_\theta h = \partial_\theta\partial_x h$, le premier crochet s'annule. Il reste donc

$$\left(\mathrm{Id}+\widehat{\Theta}\right)\left(1^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\,\partial_t\nu + (\partial_\theta h)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\,\partial_x\nu - (\partial_x h)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\,\partial_\theta\nu\right) = 0.$$

Sous l'hypothèse standard d'inversibilité des opérateurs d'*habillage* $\left(i.e.\ \left(\mathrm{Id}-\widehat{K}_\nu\right)\right.$ est inversible et $\widehat{\Theta}$ n'a pas de noyau pathologique[8] $\left.\right)$, on en déduit l'annulation du membre intérieur. En divisant par $1^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}$ on obtient l'équation de transport locale :

$$\partial_t\nu + v^{\mathrm{eff}}\partial_x\nu + a^{\mathrm{eff}}\partial_\theta\nu = 0, \tag{III.30}$$

(avec $v^{\mathrm{eff}} = (\partial_\theta h)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}/1^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}$ et $a^{\mathrm{eff}} = -(\partial_x h)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}/1^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}$).

Dans les systèmes hyperboliques[9], la *diagonalisation* d'une équation consiste à trouver une transformation des variables qui permet de décomposer le système couplé en un ensemble de modes indépendants, appelés *invariants de Riemann* ou *modes normaux*.

Dans le cadre de la théorie GHD spatiale étendue, l'équation d'évolution de la densité $\rho(x,\theta,t)$ est couplée de manière non triviale en (x,θ) par la vitesse effective v^{eff} et l'accélération effective a^{eff}.[10] La

8. L'inversibilité de l'opérateur $\left(\mathrm{Id}-\widehat{K}_\nu\right)$ est une condition technique garantissant que le système d'équations intégrales définissant l'opération de dressing possède une solution unique. En pratique, cela signifie que le noyau de convolution $\frac{\Delta}{2\pi}\star\nu$ n'a pas de valeur propre égale à 1, ce qui assurerait une accumulation d'effets d'interaction menant à une singularité. Cette condition est généralement satisfaite pour les systèmes intégrables physiques dans les régimes d'intérêt (faibles densités, ou régimes thermodynamiquement stables). L'absence de noyau pathologique pour $\widehat{\Theta}$ signifie quant à elle que cet opérateur ne possède pas de zéro du déterminant de Fredholm, assurant son caractère bien défini et injectif. Ces hypothèses standard permettent d'annuler le terme entre crochets dans l'équation précédente, conduisant ainsi à l'équation de transport (III.30).

9. Un *système hyperbolique* est un système d'équations aux dérivées partielles de la forme

$$\partial_t\mathbf{u} + \mathbf{A}(x,t,\mathbf{u})\cdot\partial_x\mathbf{u} = \mathbf{S}(x,t,\mathbf{u}),$$

où $\mathbf{u}$ est un vecteur d'inconnues (ici les densités conservées ou les variables spectrales), $\mathbf{A}$ est une matrice (appelée matrice de flux ou jacobienne), et $\mathbf{S}$ représente les termes sources éventuels. Le système est dit *hyperbolique* si la matrice $\mathbf{A}$ possède N valeurs propres réelles distinctes (ou, plus généralement, réelles) et N vecteurs propres linéairement indépendants. Cette structure assure que les perturbations se propagent à des vitesses finies et bien définies (les vitesses caractéristiques), ce qui permet une description dynamique stable et l'existence de solutions de type ondes. L'équation GHD, avec ses vitesses effectives v^{eff} et a^{eff}, possède cette structure hyperbolique, permettant ainsi une diagonalisation et l'identification des invariants de Riemann.

10. Par « couplée de manière non triviale en (x,θ) » on entend que $\rho(x,\theta,t)$ ne se factorise pas en une dépendance séparée en x et en θ : la valeur pour une rapidité donnée θ dépend des valeurs pour d'autres rapidités θ' (et parfois d'autres positions x') via des opérateurs non locaux. Concrètement, le *dressing* est un opérateur intégral qui couple toutes les composantes en θ, par exemple

$$f^{\mathrm{dr}}(\theta) = f(\theta) + \int d\alpha\, T(\theta,\alpha)\,\nu(\alpha)\,f^{\mathrm{dr}}(\alpha),$$

ce qui signifie que v^{eff} et a^{eff} (qui sont construits à partir de quantités « dressed ») rendent l'évolution en x pour une θ donnée dépendante de la distribution sur toutes les θ'. Un « couplage trivial » serait, en revanche, une dépendance séparable ou purement locale (p.ex. $g(x)h(\theta)$).

fonction d'occupation $\nu(x, \theta; t)$ est définie par une transformation non locale dite *dressing* qui incorpore les interactions du système.

Grâce à cela, on peut affirmer que la fonction $\nu(x, \theta)$ s'interprète comme un continuum d'**invariants de Riemann**, c'est-à-dire des variables normales qui restent constantes le long des caractéristiques du système. [11] En effet, l'équation de transport locale (III.30) montre que ν est conservée le long des trajectoires définies par les vitesses effectives v^{eff} et les accélérations effectives a^{eff}. Autrement dit, chaque valeur de ν pour une rapidité donnée θ évolue indépendamment des autres, ce qui permet de diagonaliser le système d'équations couplées en un ensemble de modes indépendants.

Cette diagonalisation (III.30) est essentielle pour comprendre la structure hamiltonienne du système et simplifier l'analyse de sa dynamique, notamment dans le cadre spatialement étendu avec un dressing dépendant de la position. [12]

B Formulation hamiltonienne de la théorie Hydrodynamique Généralisée

Dans [BCD22], il est montré que les équations GHD peuvent avoir une formulation Hamiltonienne dans le cadre d'une théorie de champ classique, moyennant une redéfinition du crochet de Poisson. J'ai trouvé cette approche intéressante et je présente ici ce résultat. En aucun cas les calculs ci-dessous ne sont une dérivation de GHD.

B-1 Crochet de Poisson fonctionnel

B-1–i Interprétation et limite non-interactive À ce niveau de généralité, l'équation GHD (III.9) peut être interprétée comme la dynamique hydrodynamique d'un fluide bidimensionnel [13] dont la densité est conservée dans l'espace des phases spectral. Les effets d'interaction se traduisent par un couplage non local dans la direction des rapidités θ [14], reflétant les processus d'interactions entre quasi-particules possédant des

11. Par « restent constantes le long des caractéristiques du système », on entend que la valeur de $\nu(x, \theta; t)$ demeure inchangée lorsqu'on suit une particule (ou plus précisément une quasi-particule) le long de sa trajectoire dans l'espace (x, θ). Mathématiquement, cela s'exprime par $\frac{d\nu}{dt}\big|_{\text{caractéristique}} = 0$, où la dérivée est prise en suivant le mouvement selon les équations de transport (III.30). Autrement dit, même si $\nu(x, \theta; t)$ varie en fonction du temps et de la position lorsqu'on les observe en points fixes, elle reste constante le long des courbes caractéristiques définies par $\dot{x} = v^{\text{eff}}(\theta)$ et $\dot{\theta} = a^{\text{eff}}(x)$. C'est cette propriété qui fait de ν un véritable invariant de Riemann : chaque niveau de ν se propage selon ses propres caractéristiques sans se mélanger avec les autres niveaux, ce qui permet de diagonaliser entièrement la dynamique du système.

12. Par « diagonalisation », on entend le processus de transformation du système d'équations couplées (III.9) en un ensemble de modes découplés et indépendants. Dans le formalisme de la GHD, cela correspond à l'identification de la fonction d'occupation $\nu(x, \theta; t)$ comme un continuum d'invariants de Riemann.

Mathématiquement, la diagonalisation s'exprime par le fait que l'équation de transport (III.30)

$$\partial_t \nu + v^{\text{eff}} \partial_x \nu + a^{\text{eff}} \partial_\theta \nu = 0$$

peut être écrite sous la forme

$$\left.\frac{d\nu}{dt}\right|_{\text{car}} = 0,$$

où la dérivée est prise le long des caractéristiques définies par $\dot{x} = v^{\text{eff}}(\theta)$ et $\dot{\theta} = a^{\text{eff}}(x)$. Cela signifie que chaque « niveau » de ν (chaque valeur de la fonction d'occupation pour une rapidité donnée) reste constant le long de sa trajectoire caractéristique dans l'espace (x, θ), sans se mélanger avec les autres niveaux.

Cette propriété permet de résoudre le système complet non pas en tant que système couplé global, mais plutôt en suivant indépendamment l'évolution de chaque mode, ce qui simplifie drastiquement l'analyse dynamique même lorsque le dressing dépend explicitement de la position.

13. Le terme « bidimensionnel » désigne ici l'espace des phases spectral (x, θ), et non l'espace physique. Les deux dimensions correspondent à : (i) la variable spatiale x décrivant l'inhomogénéité du système dans l'espace physique réel, et (ii) la variable spectrale θ (la rapidité) caractérisant l'état asymptotique de chaque quasi-particule. La « densité » dans cet espace (x, θ) est précisément $\rho(x, \theta, t)$, la distribution locale de rapidité.

14. Le « couplage non local en θ » signifie que l'évolution de $\rho(x, \theta, t)$ pour une rapidité donnée θ dépend non seulement de la distribution aux points voisins en θ, mais aussi de la distribution sur l'ensemble du spectre de rapidités. Mathématiquement, cela se manifeste par des opérateurs intégraux, notamment le dressing $(\cdot)^{\text{dr}}_{[\nu]}$ (équation (I.91)), qui couple implicitement toutes les valeurs de θ' à travers des noyaux de convolution comme $\Delta(\theta - \theta')$ (voir équation (III.17)). Cette non-localité reflète le fait que, dans un système intégrable, les interactions à deux corps entre quasi-particules de rapidités différentes créent un couplage global : une quasi-particule à la rapidité θ « ressent » la présence de toutes les autres quasi-particules à d'autres rapidités θ', et sa dynamique en est affectée de façon non triviale.

paramètres spectraux distincts [15].

Dans le cas limite d'un système *sans interactions*, l'espace spectral coïncide avec l'espace des phases classiques, et l'équation GHD se réduit alors à l'équation de Liouville (ou, de façon équivalente, à l'équation de Boltzmann sans terme de collisions) issue de la théorie cinétique élémentaire.

En l'absence de phénomènes dissipatives, la densité de distribution ρ est conservée le long du flot hamiltonien associé à l'énergie H, ce qui s'exprime par [16]

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = 0, \tag{III.31}$$

où $\{\bullet, \bullet\}$ désigne le crochet de Poisson canonique dans l'espace des phases. Dans cette perspective, la théorie GHD apparaît comme une extension naturelle de l'équation de Liouville aux systèmes intégrables, incorporant les effets collectifs induits par les interactions tout en préservant une description exacte à grande échelle. [17]

B-1–ii Structure hamiltonienne et crochet de Poisson fonctionnel Bonnemain *et al.* [BCD22] introduisent un crochet de Poisson fonctionnel agissant sur des fonctionnelles F et G de la distribution de rapidité $\rho(x, \theta)$ en présence d'interactions. Celui-ci s'écrit

$$\{F, G\} = -\iint dx\, d\theta\, \frac{\nu}{2\pi} \left[\partial_x \left(\frac{\delta F}{\delta \rho(x,\theta)} \right) \left(\partial_\theta \left(\frac{\delta G}{\delta \rho(x,\theta)} \right) \right)_{[\nu]}^{\mathrm{dr}} - \partial_x \left(\frac{\delta G}{\delta \rho(x,\theta)} \right) \left(\partial_\theta \left(\frac{\delta F}{\delta \rho(x,\theta)} \right) \right)_{[\nu]}^{\mathrm{dr}} \right], \tag{III.32}$$

où ν désigne la fonction d'occupation. Dans ce crochet l'application de l'opération d'*habillage* $(\bullet)_{[\nu]}^{\mathrm{dr}}$ (I.91) traduit les interactions entre particules [18].

15. Par « paramètres spectraux distincts », on entend que deux quasi-particules ont des rapidités différentes, $\theta \neq \theta'$. Dans un système intégrable, les collisions binaires entre quasi-particules de rapidités différentes sont décrites par la matrice de diffusion (ou matrice S), caractérisée par la phase de diffusion $\varphi(\theta - \theta')$ ou le noyau de dressing $\Delta(\theta - \theta')$. Ces grandeurs dépendent de la différence relative des rapidités et encodent comment la présence d'une quasi-particule à rapidité θ' modifie le comportement effectif d'une quasi-particule à rapidité θ. C'est précisément cette interaction sélective entre différents « modes » spectraux qui crée le couplage non local observable dans l'équation GHD.

16. **Convention de signe pour l'équation de Liouville et le crochet de Poisson :** Il existe deux conventions couramment utilisées dans la littérature. La convention de **Dirac** (adoptée dans ce chapitre) définit l'équation de Liouville comme

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = 0,$$

où le crochet de Poisson canonique est $\{A, B\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$. La convention de **Landau et Lifschitz** utilise une définition opposée du crochet, conduisant à $\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} - \{\rho, H\} = 0$. Ces deux formulations sont équivalentes mathématiquement, mais diffèrent par le signe du crochet de Poisson. Dans ce manuscrit, nous suivons la convention de **Dirac**.

17. La théorie GHD fournit, pour les modèles intégrables, une description rigoureuse de la dynamique à l'échelle d'Euler. Elle n'est pas une approximation de type champ moyen : elle résulte de la prise en compte explicite de l'infinité de lois de conservation caractéristiques de l'intégrabilité et, de ce fait, préserve la structure des corrélations et l'ensemble des charges conservées. Elle établit un lien cohérent entre la dynamique microscopique — l'évolution des quasi-particules en variables spectrales θ et spatiales x — et la dynamique macroscopique des densités résolues en rapidité, sans recours à des termes phénoménologiques intermédiaires. Enfin, dans la limite sans interactions l'espace spectral coïncide avec l'espace des phases classique et l'équation GHD se réduit à l'équation de Liouville (équivalente à la formulation cinétique collisionless, p.ex. Vlasov/Boltzmann sans terme de collision).

18. Pour n'importe quelle fonctionnelle $G[\rho]$, la règle de la chaîne pour les crochets de Poisson donne :

$$\{F, G\} = \int dx' d\theta' \frac{\delta G}{\delta \rho(x', \theta')} \{F, \rho(x', \theta')\} \tag{III.33}$$

i on pose $G = Q[h] = \int dx'' d\theta'' h(x'', \theta'') \rho(x'', \theta'')$, alors la dérivée fonctionnelle est :

$$\frac{\delta Q[h]}{\delta \rho(x', \theta')} = h(x', \theta') \tag{III.34}$$

En remplaçant cela dans la règle de la chaîne, on retrouve bien :

$$\{\rho(x, \theta), Q[h]\} = \int dx' d\theta'\, h(x', \theta')\, \{\rho(x, \theta), \rho(x', \theta')\}. \tag{III.35}$$

Le crochet $\{\rho(x, \theta), \rho(x', \theta')\}$ représente la **structure géométrique** (la matrice symplectique ou le tenseur de Poisson) de l'espace des phases hydrodynamique.La fonction h agit comme un **poids** qui vient sélectionner quelle transformation on applique à la densité : (i) Si $h = 1$ (nombre de particules), le crochet est nul car les charges commutent. (ii) Si $h = p$ (impulsion), le crochet génère une translation spatiale $\partial_x \rho$.(iii)Si $h = \epsilon$ (énergie), le crochet génère l'évolution temporelle $\partial_t \rho$.

Le crochet de Poisson (défini en (III.32)) entre deux charges $Q[f]$ et $Q[g]$ prend la forme

$$\{Q[f], Q[g]\} = -\int_{\mathbb{R}^2} dx\, d\theta\, \frac{\nu}{2\pi}\left[\partial_x f\, (\partial_\theta g)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]} - \partial_x g\, (\partial_\theta f)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\right]. \tag{III.46}$$

Cette application de *dressing* satisfait la relation de symétrie [Doy20b] :

$$\int_{\mathbb{R}^2} dx\, d\theta\, \nu\, f\, g^{\mathrm{dr}}_{[\nu]} = \int_{\mathbb{R}^2} dx\, d\theta\, \nu\, f^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\, g. \tag{III.47}$$

Avec $F[\rho]$, les crochets de Poisson s'écrivent :

$$\{F, G\} = \int dx d\theta dx' d\theta'\, \frac{\delta F}{\delta\rho(x,\theta)}\frac{\delta G}{\delta\rho(x',\theta')}\{\rho(x,\theta), \rho(x',\theta')\} \tag{III.36}$$

.

Contairement à l'expression dans [BCD22], je vais écrire

$$\{\rho(x,\theta), \rho(x',\theta')\} = \frac{1}{2\pi}\delta'(x-x')\Big[[\delta'(\cdot-\theta')]^{\mathrm{dr}}(x',\theta)\nu(x',\theta) + [\delta'(\cdot-\theta)]^{\mathrm{dr}}(x,\theta')\nu(x,\theta')\Big], \tag{III.37}$$

donc sans signe «-», pour etre en accord avec la structure standard des crochets de Poisson hydrodynamiques de type Gardner ou Faddeev-Zakharov.

On injecte l'expression de $\{\rho(x,\theta), \rho(x',\theta')\}$ dans la définition fonctionnelle :

$$\{F, G\} = \frac{1}{2\pi}\int dx d\theta dx' d\theta'\, \frac{\delta F}{\delta\rho(x,\theta)}\frac{\delta G}{\delta\rho(x',\theta')}\,\delta'(x-x')\left[[\delta'(\cdot-\theta')]^{\mathrm{dr}}\nu(x',\theta) + [\delta'(\cdot-\theta)]^{\mathrm{dr}}\nu(x,\theta')\right] \tag{III.38}$$

Pour simplifier, notons $F_\rho(x,\theta) = \frac{\delta F}{\delta\rho(x,\theta)}$ et $G_\rho(x',\theta') = \frac{\delta G}{\delta\rho(x',\theta')}$. L'intégrale se sépare en deux termes I_1 et I_2 correspondant aux deux membres entre crochets.

$$I_1 = -\frac{1}{2\pi}\int dx d\theta dx' d\theta' F_\rho(x,\theta)G_\rho(x',\theta')\delta'(x-x')[\delta'(\cdot-\theta')]^{\mathrm{dr}}\nu(x',\theta) \tag{III.39}$$

- Intégration sur x' : On utilise la propriété de la distribution $\delta'(x-x')$. Pour une fonction $\phi(x')$, on a $\int dx'\,\delta'(x-x')\phi(x') = \partial_x\phi(x)$.Ici, $\phi(x') = G_\rho(x',\theta')\nu(x',\theta)$. Donc :

$$\int dx'\,\delta'(x-x')G_\rho(x',\theta')\nu(x',\theta) = \partial_x\big(G_\rho(x,\theta')\nu(x,\theta)\big) \tag{III.40}$$

  Comme ν est évalué au même x que la dérivée de G, et que dans le crochet de Bonnemain ν agit comme une mesure locale, on garde le terme $\partial_x G_\rho$.
- Intégration sur θ' : On utilise la propriété de l'opérateur de dressing $(\cdot)^{\mathrm{dr}}$ qui est auto-adjoint pour le produit scalaire L^2 (sous certaines conditions de symétrie du noyau) : $\int d\theta' G_\rho(\theta')[\delta'(\cdot-\theta')]^{\mathrm{dr}} = (\partial_\theta G_\rho)^{\mathrm{dr}}$.Note technique : $\delta'(\alpha-\theta')$ agit comme une dérivée sur la fonction test.

On obtient pour I_1 :

$$I_1 = +\int dx d\theta \frac{\nu(x,\theta)}{2\pi}F_\rho(x,\theta)\partial_x\left(\partial_\theta G_\rho(x,\theta)\right)^{\mathrm{dr}} \tag{III.41}$$

Par une intégration par parties spatiale (∂_x) pour basculer la dérivée de G vers F (le terme de bord est nul) :

$$I_1 = -\int dx d\theta \frac{\nu(x,\theta)}{2\pi}\partial_x F_\rho(x,\theta)\left(\partial_\theta G_\rho(x,\theta)\right)^{\mathrm{dr}} \tag{III.42}$$

De la même manière pour I_2 :

$$I_2 = \frac{1}{2\pi}\int dx d\theta dx' d\theta' F_\rho(x,\theta)G_\rho(x',\theta')\delta'(x-x')[\delta'(\cdot-\theta)]^{\mathrm{dr}}\nu(x,\theta') \tag{III.43}$$

- Intégration sur x : Par rapport à $\delta'(x-x')$, cela donne $-\partial_{x'}\left(F_\rho(x',\theta)\nu(x',\theta')\right)$.
- Intégration sur θ : Le terme $[\delta'(\cdot-\theta)]^{\mathrm{dr}}$ transformé donne $(\partial_{\theta'}F_\rho)^{\mathrm{dr}}$.

Après renommage des variables muettes $(x',\theta') \to (x,\theta)$, on obtient :

$$I_2 = -\int dx d\theta \frac{\nu(x,\theta)}{2\pi}\partial_x G_\rho(x,\theta)\left(\partial_\theta F_\rho(x,\theta)\right)^{\mathrm{dr}}. \tag{III.44}$$

En additionnant I_1 et I_2, nous avons :

$$\{F, G\} = -\int dx d\theta \frac{\nu}{2\pi}\left[\partial_x F_\rho(\partial_\theta G_\rho)^{\mathrm{dr}} - \partial_x G_\rho(\partial_\theta F_\rho)^{\mathrm{dr}}\right] \tag{III.45}$$

Nous introduisons ici un signe négatif par rapport à la convention de Bonnemain *et al.* [BCD22] afin de maintenir la cohérence avec l'équation de Liouville $\partial_t\rho + \{\rho, H\} = 0$. En effet, le passage d'un crochet de Poisson sur les coordonnées (x,θ) à un crochet fonctionnel sur la densité $\rho(x,\theta)$ implique une intégration par parties : $\{\rho(x,\theta), H\} \propto \int dz\partial_z\,\delta(z-x)\frac{\delta H}{\delta\rho} = -\partial_x(\frac{\delta H}{\delta\rho})$ (avec H,

Pour appliquer la relation de symétrie (III.47) au crochet (III.46), il suffit de considérer que les fonctions impliquées f et g sont des fonctions scalaires régulières sur (x, θ). Dans ce cas, la relation de symétrie reste pleinement valide et l'intégrale est bien définie.
[19]

En utilisant cette symétrie ainsi qu'une intégration par parties, le crochet (III.46) se réécrit

$$\{Q[f], Q[g]\} = -\int_{\mathbb{R}^2} dx\, d\theta\; f\, \left[\partial_\theta \left(\frac{\nu}{2\pi}\,(\partial_x g)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\right) - \partial_x \left(\frac{\nu}{2\pi}\,(\partial_\theta g)^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\right)\right]. \tag{III.48}$$

B-2 Crochet avec l'Hamiltonien

On reprend un Hamiltonien de la forme de (III.12), $H = Q[h]$.

B-2–i Densité hamiltonienne et grandeurs effectives La vitesse effective et l'accélération effective données à l'équation (III.13) interviennent dans les équations de mouvement [20]

$$\dot{x} = v^{\mathrm{eff}}, \qquad \dot{\theta} = a^{\mathrm{eff}}, \tag{III.49}$$

montrant que les dérivées ∂_x et ∂_θ présentes dans le crochet de Poisson correspondent respectivement aux générateurs infinitésimaux de l'évolution temporelle. Plus précisément :

- ∂_x agit comme le générateur des translations en θ via l'accélération effective a^{eff} ;
- ∂_θ agit comme le générateur des translations en x via la vitesse effective v^{eff}.

Ainsi, le crochet de Poisson encode le couplage entre ces deux degrés de liberté à travers les termes effectifs.

En utilisant la définition de v^{eff} et a^{eff} données à l'équation (III.13), on trouve que le crochet (III.48) appliqué à (f, h) devient

$$\{Q[f], Q[h]\} = +\int_{\mathbb{R}^2} dx\, d\theta\; f\, \left[\partial_x\left(\rho\, v^{\mathrm{eff}}\right) + \partial_\theta\left(\rho\, a^{\mathrm{eff}}\right)\right]. \tag{III.50}$$

B-2–ii Forme locale : densités conservées . En choisissant $(x, \theta) \mapsto \delta(\cdot - x) f(\theta)$ dans (III.4), on obtient la moyenne de la densité conservée *i.e.*

$$q_{[f]}(x, t) = Q\big[(x, \theta) \mapsto \delta(\cdot - x)\, f(\theta)\big] = \int d\theta\, f(\theta)\, \rho(x, \theta, t). \tag{III.51}$$

Appliqué à (III.50), on obtient

$$\{q_{[f]}(x), Q[h]\} = +\partial_x \left[\int_{\mathbb{R}} d\theta\; f\, \rho\, v^{\mathrm{eff}}\right] - \int_{\mathbb{R}} d\theta\; f'\, \rho\, a^{\mathrm{eff}}. \tag{III.52}$$

ici l'énergie libre). Sans ce signe correctif, le crochet $\{\rho, H\}$ produirait un terme de flux $-\partial_x(v^{\mathrm{eff}}\rho)$, aboutissant à une équation de transport physiquement inversée $\partial_t\rho - \partial_x(v^{\mathrm{eff}}\rho) = 0$. Notre convention assure que $\{\rho, H\} = \partial_x(v^{\mathrm{eff}}\rho)$, en accord avec la structure standard des crochets de Poisson hydrodynamiques de type Gardner ou Faddeev-Zakharov.

- **Justification Technique :** Vous mentionnez explicitement l'intégration par parties de la distribution δ', qui est la source mathématique du changement de signe.
- **Lien Physique :** Vous expliquez que cela garantit que l'onde se propage dans le bon sens ($\partial_t\rho + \partial_x J = 0$).
- **Autorité :** En citant les structures de Faddeev-Zakharov ou de Gardner, vous montrez que votre choix de signe s'inscrit dans la littérature classique de la théorie des systèmes intégrables et de l'hydrodynamique hamiltonienne.

19. La relation de symétrie (III.47) stipule que

$$\int_{\mathbb{R}^2} dx\, d\theta\; \nu\, f\, g^{\mathrm{dr}}_{[\nu]} = \int_{\mathbb{R}^2} dx\, d\theta\; \nu\, f^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}\, g,$$

ce qui signifie que l'intégrale double sur l'espace (x, θ) du membre de gauche égale celle du membre de droit. Cette symétrie de l'opérateur de dressing permet d'échanger l'action du dressing entre g et f à travers l'intégration, ce qui est crucial pour réduire le crochet (III.46) à la forme compacte (III.48). Le formalisme des types tensoriels introduit dans [Doy20b] sert à traiter des objets plus complexes (tenseurs dépendant de x et θ) ; pour des fonctions scalaires comme ici, aucune condition supplémentaire n'est nécessaire.

20. Ces équations de mouvement découlent de la structure hamiltonienne du système. Elles expriment que les variables conjuguées x et θ évoluent selon les vitesses et accélérations effectives, qui encodent la dynamique complète du système dans le référentiel considéré.

En appliquant l'équation de Liouville (III.31) , on retrouve la forme de convection (III.8) :

$$\partial_t q_{[f]} + \partial_x j_{[f]} = F_{[f]}, \tag{III.53}$$

où le flux $j_{[f]}$ et le terme de force $F_{[f]}$ sont donnés par

$$j_{[f]} = \int_{\mathbb{R}} d\theta\; v^{\text{eff}}\, f\, \rho, \quad F_{[f]} = \int_{\mathbb{R}} d\theta\; a^{\text{eff}}\, f'\, \rho. \tag{III.54}$$

B-2–iii Forme locale : équation sur ρ De manière analogue, pour la distribution de rapidité à l'équilibre thermodynamique, on note

$$\rho(x,\theta) = \mathcal{Q}\big[\delta(\cdot - x)\,\delta(\cdot - \theta)\big]. \tag{III.55}$$

Appliqué à (III.50), on obtient

$$\{\rho(x,\theta), \mathcal{Q}[h]\} = \partial_x\big(v^{\text{eff}}\,\rho\big) + \partial_\theta\big(a^{\text{eff}}\,\rho\big). \tag{III.56}$$

En appliquant l'équation de Liouville (III.31) ($\partial_t \rho(x,\theta,t) + \{\rho(x,\theta,t), H\} = 0$), on retrouve l'équation GHD (III.9) :

$$\partial_t \rho + \partial_x\big(v^{\text{eff}}\rho\big) + \partial_\theta\big(a^{\text{eff}}\rho\big) = 0.$$

B-3 Modèle de Lieb–Liniger

Dans le modèle de LL, l'Hamiltonien $H = \mathcal{Q}[h]$ (III.12) s'écrit ici avec :

$$h(x,\theta) = \varepsilon(\theta) + V(x), \tag{III.57}$$

où l'énergie cinétique est $\varepsilon(\theta) = \theta^2/2$ et $V(x)$ représente le potentiel extérieur.

Dans ce modèle, la vitesse effective et l'accélération effective de (III.13) se réécrivent :

$$v^{\text{eff}} = \frac{(\mathrm{Id})^{\text{dr}}_{[\nu]}}{1^{\text{dr}}_{[\nu]}}, \quad a^{\text{eff}} = -V'(x). \tag{III.58}$$

Avec l'equation (III.17) la vitesse effectif dans le modèle de LL vérifie :

$$v^{\text{eff}} = \theta + \int d\theta'\, \Delta(\theta - \theta')\rho(\theta')(v^{\text{eff}}(\theta') - v^{\text{eff}}(\theta)) \tag{III.59}$$

Ainsi, les termes de force dans (III.53) et (III.54) prennent la forme :

$$F_{[f]} = -V'(x) \int_{\mathbb{R}} d\theta\, f'(\theta)\, \rho(x,\theta). \tag{III.60}$$

L'équation GHD (III.9) devient alors :

$$\partial_t \rho + \partial_x\Big(v^{\text{eff}}\rho\Big) - V'(x)\,\partial_\theta \rho = 0, \tag{III.61}$$

et (III.30) devient :

$$\partial_t \nu + v^{\text{eff}}\partial_x \nu - V'(x)\,\partial_\theta \rho = 0, \tag{III.62}$$

B-4 Cas "no dressing"

B-4–i Hypothèse "opérateur d'habillage identité" : $^{\text{dr}} = \mathrm{Id}$. Si l'opérateur d'habillage correspond à l'identité (*no dressing*), les crochets (III.32) et (III.50) se simplifient en :

$$\{F,G\} = -\iint dx\, d\theta\; \rho\left[\partial_x\left(\frac{\delta F}{\delta\rho(x,\theta)}\right)\partial_\theta\left(\frac{\delta G}{\delta\rho(x,\theta)}\right) - \partial_x\left(\frac{\delta G}{\delta\rho(x,\theta)}\right)\partial_\theta\left(\frac{\delta F}{\delta\rho(x,\theta)}\right)\right] \tag{III.63}$$

$$\{\mathcal{Q}[f], \mathcal{Q}[h]\} = +\int_{\mathbb{R}^2} dx\, d\theta\; f\left[\partial_x\big(\rho\, v^{\text{eff}}\big) + \partial_\theta\big(\rho\, a^{\text{eff}}\big)\right]. \tag{III.64}$$

Les flux et termes de force (III.54) s'expriment alors en remplaçant la vitesse effective v^{eff} et l'accélération effective a^{eff} (de (III.13)) par leurs expressions issues de la dynamique hamiltonienne *nue* :

$$v = 2\pi\rho, \qquad v^{\text{eff}}(\theta) \;\to\; \partial_\theta h(x,\theta), \qquad a^{\text{eff}}(\theta) \;\to\; -\partial_x h(x,\theta), \tag{III.65}$$

où $h(x,\theta)$ est l'hamiltonien *nu* (par exemple $h = \varepsilon(\theta) + V(x)$). Dans la limite sans interactions, l'équation (III.9) se réduit à une équation de transport sans collisions (de type Vlasov) :[21]

$$\partial_t \rho + \partial_x\big(\partial_\theta h\, \rho\big) - \partial_\theta\big(\partial_x h\, \rho\big) = 0. \tag{III.66}$$

B-4–ii Hiérarchie des moments (charges nues). Pour toute fonction test $f(\theta)$, l'équation (III.52) devient

$$j_{[f]}(x,t) = \int d\theta\, f(\theta)\, \partial_\theta h\, \rho(x,\theta,t), \qquad F_{[f]}(x,t) = -\int_{\mathbb{R}} d\theta\, \partial_x h\, f'(\theta)\, \rho(x,\theta,t). \tag{III.67}$$

Pour $f(\theta) = 1, \theta$ et $\theta^2/2$ et $h(\theta,x) = \varepsilon(\theta) + V(x)$, l'équation (III.53) avec la charge locale (III.51) et les flux et forces (III.67), déviennent les équations d'Euler classiques (Annexe C) :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \partial_t n + \partial_x(nu) &=& 0, \\ \partial_t(nu) + \partial_x(nu^2 + \mathcal{P}) &=& -n\partial_x V(x), \\ \partial_t E + \partial_x(u\,(E + \mathcal{P})\,) &=& 0, \end{array}\right. \tag{III.68}$$

avec la densité de particule $n = q_{[1]}$, la vitesse moyenne du fluide $u = q_{[\theta]}/q_{[1]}$, la pression cinétique du fluide $\mathcal{P} = q_{[\theta^2]} - q_{[\theta]}^2/q_{[1]}$, l'énergie totale $E = nu^2/2 + nV + ne_{\text{int}}$ où $e_{\text{int}} = q_{[\theta^2/2]}$ est l'énergie interne d'une particule .

B-4–iii Remarques sur les charges globales. En l'absence de potentiel externe ($V = 0$), le système conserve certaines charges globales.

On a vu que dans un système classique non intégrable, seules ces quelques charges sont conservées. Par exemple dans un système de GE sont conservés , nombre total de particules , quantité de mouvement totale, énergie cinétique totale soit respectivement $Q[1] = \int dx\, q_{[1]}, Q[\theta] = \int dx\, q_{[\theta]}$ et $Q[\theta^2/2] = \int dx\, q_{[\theta^2/2]}$.

Et on a vu qu'en revanche, dans un système intégrable, une infinité de charges est conservée $Q[(x,\theta) \mapsto f(\theta)] = \int dx\, q_{[(x,\theta)\mapsto f(\theta)]}$. En particulier, dans l'espace (x,θ), les nombres de rapidité dans chaque intervalle $[\theta, \theta + d\theta]$ est conservé :

$$\Pi(\theta)\delta\theta = Q[(x,\theta) \mapsto \delta(\cdot - \theta)\,\delta\theta] = \int dx\, \rho(x,\theta;t)\,\delta\theta.$$

Cela exprime que les rapidités situées dans une tranche $[\theta, \theta + d\theta]$ se déplacent en restant dans cette tranche, sans interagir ni s'échanger avec les autres tranches de rapidités (cf fig. III.2).

Pour chaque valeur de θ, la quantité $\Pi(\theta)\delta\theta$ est une charge globale conservée. Et pour chaque valeur de θ, $\Pi(\theta)\delta\theta$ respecte une équation de continuité locale de type (III.8) sans terme de force. On a donc une infinité d'équations de continuité. Quand $\delta\theta \to 0$, on retrouve l'équation GHD (III.9) sans terme de force

$$\partial_t \rho + \partial_x\Big(v^{\text{eff}}\rho\Big) = 0. \tag{III.69}$$

Un potentiel externe $V(x)$ non nul induit, dans l'espace (x,θ), un couplage entre les différentes tranches de rapidités : c'est-à-dire qu'il provoque un transport des rapidités selon x, reliant ainsi des tranches de rapidités.

Cette structure constitue l'analogue classique de la description en termes de **distribution de rapidité** dans le cadre intégrable et fournit le point de départ naturel pour comprendre la théorie GHD.

En particulier, pour décrire la dynamique à l'échelle d'Euler, il devient nécessaire de suivre l'évolution de $\rho(x,\theta,t)$ pour toutes les valeurs de θ, contrairement au cas non intégrable où seules quelques densités locales suffisent.

21. L'équation de Vlasov décrit l'évolution d'une distribution de particules dans l'espace des phases, en tenant compte des interactions entre particules. Elle est souvent utilisée pour modéliser des systèmes de particules dans des contextes où les effets de collision peuvent être négligés, permettant ainsi d'étudier la dynamique des systèmes en équilibre ou quasi-équilibre.

C Régime de quasi-condensation et limite Gross–Pitaevskii

Dans cette section, nous considérons un système décrit par le modèle LL ,sans potentiel extérieur, dans le régime (qBEC), correspondant à la limite $\mathfrak{t} \to 0$ et $\gamma \to 0$ (paramètres (température réduite et paramètre de Lieb) définis en (II.67) et (II.64)). Dans ces conditions, la dynamique du gaz peut être décrite par les équations hydrodynamiques issues de l'équation de Gross–Pitaevskii (GP). L'objectif est de montrer que les équations de GHD reproduisent, dans certaines situations [22], les équations hydrodynamiques dérivées de GP.

C-1 Évolution temporelle selon l'équation de Gross–Pitaevskii

Dans le régime qBEC, la dynamique d'un gaz unidimensionnel décrit par le modèle LL à l'état fondamental peut être décrite par l'équation GP dépendante du temps. On a vu l'équation GP dépendante du temps dans (I.46), avec $\hbar = m = 1$. Pour généraliser et pour l'utiliser dans un autre chapitre (V), écrivons-la avec un potentiel externe :

$$i\partial_t \psi = \left(-\frac{1}{2}\partial_x^2 + V + g|\psi|^2\right)\psi. \tag{III.70}$$

En utilisant la représentation de *Madelung* $\psi(x,t) = \sqrt{n(x,t)}\, e^{i\theta(x,t)}$, on obtient les équations dites hydrodynamiques de la forme de (III.68) [Spi80 ; PS16] :

$$\partial_t n + \partial_x(nu) = 0, \tag{III.71}$$

$$\partial_t(nu) + \partial_x\left(nu^2 + \mathcal{P} + \tilde{\mathcal{P}}_Q\right) = -n\partial_x V, \tag{III.72}$$

où la vitesse du fluide, la *pression classique* et un terme de *pression quantique* sont définis par [23]

$$u = \partial_x\theta, \quad \mathcal{P} = \frac{1}{2}gn^2, \quad \tilde{\mathcal{P}}_Q = -\frac{n}{2}\partial_x\left(\frac{\partial_x\sqrt{n}}{\sqrt{n}}\right). \tag{III.73}$$

On peut aussi écrire (III.72) sous la forme

$$\partial_t u + \partial_x\left(\frac{u^2}{2} + \frac{2\mathcal{P} + \mathcal{P}_Q}{n} + V\right) = 0, \tag{III.74}$$

où l'on nomme dans la littérature la *pression quantique* :

$$\mathcal{P}_Q = \frac{1}{2}\sqrt{n}\,\partial_x^2\sqrt{n}. \tag{III.75}$$

Dans la suite nous nous intéressons à la dynamique en l'absence de potentiel exterieur V.

Dans la limite dite de Thomas-Fermi (TF) 1D, les fluctuations de densité sont faibles et le terme de *pression quantique* peuvent être négligé [Str98]. Le terme de pression se réduit alors à la pression classique

22. Par « dans certaines situations », on entend précisément le cas où le système initial correspond à une distribution de rapidité formant une unique mer de Fermi, c'est-à-dire une fonction d'occupation $\nu(x,\theta,t)$ qui prend la valeur 1 dans un intervalle $[\theta_-(x,t), \theta_+(x,t)]$ et 0 ailleurs. Cette restriction est importante car si le système initial contient plusieurs structures (par exemple deux ou plusieurs mers de Fermi distinctes), la correspondance avec les équations de Gross–Pitaevskii n'est plus valide, comme nous le discuterons ultérieurement (voir remarque page 60). La limite $\gamma \to 0$ garantit également que les interactions restent faibles et que l'approximation de Thomas–Fermi (négligeant la pression quantique) demeure justifiée.

23. **Distinction entre pression classique et pression quantique :** La *pression classique* $\mathcal{P} = \frac{1}{2}gn^2$ provient du terme d'interaction répulsive de contact dans l'hamiltonien de GP. Elle représente l'effet des collisions répulsives entre particules, analogue à la pression d'un gaz classique due aux chocs entre molécules. Elle dépend uniquement de la densité locale n.

La *pression quantique* $\tilde{\mathcal{P}}_Q = -\frac{n}{2}\partial_x\left(\frac{\partial_x\sqrt{n}}{\sqrt{n}}\right)$ est un effet purement quantique, absent en mécanique classique. Elle provient de l'énergie cinétique des gradients de densité et est directement liée au principe d'incertitude : confiner des particules dans une région de densité élevée augmente leur quantité de mouvement (et donc leur énergie). Mathématiquement, ce terme émerge de la contribution $-\frac{1}{2}\partial_x^2\sqrt{n}$ de l'énergie cinétique dans la décomposition de *Madelung*. Dans la limite Thomas-Fermi (TF) ($\gamma \to 0$), le gradient de densité varie lentement et ce terme devient négligeable devant la pression classique.

$\mathcal{P} = \frac{1}{2}gn^2$. En utilisant la relation de Gibbs-Duhem $\frac{d\mathcal{P}}{d\mu} = n$, on obtient l'équation d'état classique du gaz qBEC :

$$\mu = gn + cts. \tag{III.76}$$

Les équations de *Madelung* ((III.71) (III.72)), se réduisent à :

$$\partial_t n + \partial_x(nu) = 0, \tag{III.77}$$
$$\partial_t(nu) + \partial_x\left(nu^2 + \mathcal{P}\right) = 0. \tag{III.78}$$

C-2 Description par les équations Hydrodynamiques Généralisées

Dans la suite, nous allons montrer que les équations (III.77) et (III.78) peuvent être retrouvées à partir des équations GHD.

À $t = 0$, le facteur d'occupation $\nu(x, \theta, 0)$ ne peut prendre que deux valeurs : il vaut 1 si θ appartient à l'intervalle $[\theta_-(x, 0),\ \theta_+(x, 0)]$, et 0 sinon. Comme ν satisfait l'équation de transport (III.62), sa valeur est conservée le long des caractéristiques.

Ainsi, la distribution prend la forme d'une *mer de Fermi*, délimitée par deux bords $\theta_\pm(x, t)$:

$$\nu(x, \theta, t) = \begin{cases} 1, & \theta \in [\theta_-(x, t), \theta_+(x, t)], \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \tag{III.79}$$

L'évolution temporelle des bords est donnée par deux équations de type transport (Fig III.4) [Doy+17] :

$$\partial_t\theta_+(x, t) + v^{\text{eff}}(\theta_+)\,\partial_x\theta_+(x, t) = 0, \tag{III.80}$$
$$\partial_t\theta_-(x, t) + v^{\text{eff}}(\theta_-)\,\partial_x\theta_-(x, t) = 0. \tag{III.81}$$

C-3 Connexion hydrodynamique : de la GHD à l'équation de Gross–Pitaevskii

C-3–i Vitesse efficace aux bords de la mer de Fermi. La vitesse du fluide au point x s'écrit simplement : [24]

$$u = \frac{\theta_- + \theta_+}{2}. \tag{III.82}$$

Dans la limite $\gamma \to 0$, la distribution de rapidité prend la forme d'un demi-cercle [LL63] :

$$\rho(\theta) = \frac{n}{2\pi c^2}\sqrt{-(\theta - \theta_-)(\theta - \theta_+)}, \tag{III.83}$$

avec la vitesse du son

$$c = \sqrt{gn}. \tag{III.84}$$

La largeur de la mer de Fermi, $\theta_+ - \theta_-$, est reliée à la densité par

$$n = \int_{\theta_-}^{\theta_+} d\theta\,\rho(\theta), \tag{III.85}$$

ce qui donne après intégration :

$$\theta_+ - \theta_- = 4c. \tag{III.86}$$

Considérons d'abord le cas où le centre de masse de la mer de Fermi est nul, c'est-à-dire $\theta_+ = -\theta_-$. Les bords se déplacent alors à la vitesse du son $\pm c$. Pour $\gamma \to 0$ et $t \to 0$, les bords se situent en $\theta_\pm = \pm 2c$ [LL63], et la vitesse effective s'écrit simplement :

$$v^{\text{eff}}(\theta_\pm) = \frac{1}{2}\theta_\pm. \tag{III.87}$$

24. La vitesse du fluide u est définie comme la moyenne des bords de la mer de Fermi, θ_- et θ_+, car elle représente la vitesse caractéristique du système à ce point. En prenant la moyenne, on obtient une estimation de la vitesse à laquelle les excitations se propagent dans le système, ce qui est cohérent avec le comportement attendu d'un fluide.

Si le centre de masse n'est pas nul ($\theta_+ \neq -\theta_-$), la vitesse effective peut être décomposée en une translation correspondant à la vitesse du barycentre u, à laquelle s'ajoute un décalage de $\pm c$ lié à l'écart des bords. On obtient alors les expressions explicites :

$$v^{\text{eff}}(\theta_+) = \tfrac{3}{4}\theta_+ + \tfrac{1}{4}\theta_-, \tag{III.88}$$
$$v^{\text{eff}}(\theta_-) = \tfrac{3}{4}\theta_- + \tfrac{1}{4}\theta_+. \tag{III.89}$$

Autrement dit, une petite déformation localisée aux extrémités de la mer de Fermi se propage à la vitesse du son par rapport au centre de masse du système, ce qui correspond à la valeur de v^{eff} aux bords.

C-3–ii Forme hydrodynamique des équations de Gross–Pitaevskii. En introduisant la densité n (via $4\sqrt{gn} = \theta_+ - \theta_-$) et la vitesse du fluide u définies plus haut, les équations (III.80)–(III.81) se réécrivent sous la forme

$$\partial_t n + \partial_x(nu) = 0, \tag{III.90}$$
$$\partial_t(nu) + \partial_x\left(nu^2\right) = -g\, n\, \partial_x n. \tag{III.91}$$

Il s'agit exactement des équations de continuité et d'Euler (III.77)–(III.78), mais écrites sans le terme de *pression quantique* ni le potentiel extérieur.

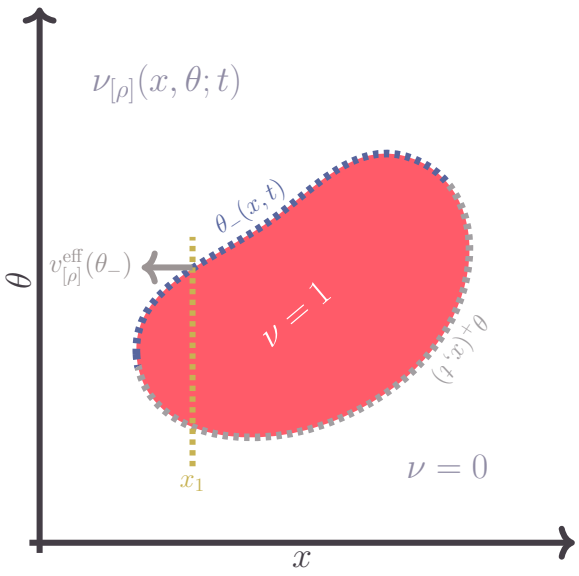


Figure III.4 – Schéma de l'évolution du facteur d'occupation $\nu(x,\theta,t)$ dans la limite $\gamma \to 0$. Initialement rectangulaire et homogène, la distribution forme une mer de Fermi délimitée par $\theta_\pm(x,t)$: rouge $\nu = 1$, blue $\nu = 0$.

C-3–iii Correspondance avec les équations Gross–Pitaevskii. Les équations (III.90)–(III.91) correspondent exactement aux équations hydrodynamiques (III.77)–(III.78), obtenues à partir de GP lorsque le terme de pression quantique est négligé. La correspondance est donc valable pour une configuration initiale correspondant à une seule mer de Fermi. En revanche, si le système initial contient plusieurs mers de Fermi (par exemple deux pics de densité séparés), cette équivalence avec les équations GP n'est plus vérifiée.

Information

Remarque C.1. **(Limite de la correspondance GHD–GP avec plusieurs mers de Fermi)** Si la distribution initiale $\nu(x,\theta,0)$ comporte plusieurs mers de Fermi distinctes, chaque mer évolue indépendamment selon les équations GHD. Cependant, cette situation ne peut pas être capturée par les équations hydrodynamiques dérivées de GP, qui supposent une seule mer de Fermi. En effet, dans le cadre de GP, la dynamique est décrite par un seul champ d'onde, ce qui ne permet pas de représenter plusieurs structures distinctes dans l'espace des rapidités. Par conséquent, la correspondance entre GHD et les équations de GP est limitée aux configurations initiales avec une unique mer de Fermi.

25

25.
Les équations (III.90)–(III.91) reproduisent exactement les équations hydrodynamiques (III.77)–(III.78) dérivées de GP dans la limite $\gamma \to 0$, à condition que trois hypothèses structurelles soient satisfaites simultanément.

Hypothèse 1 : Configuration initiale avec une unique mer de Fermi. La distribution initiale $\nu(x,\theta,0)$ doit être une fonction caractéristique sur l'espace des rapidités, c'est-à-dire que pour chaque position x, il existe un unique intervalle $[\,\theta_-(x,0),\,\theta_+(x,0)\,]$ où $\nu = 1$ et $\nu = 0$ ailleurs. Cette restriction est fondamentale car :

- L'équation GP postule un condensat décrit par un seul champ scalaire $\psi(x,t)$, duquel on déduit une seule phase $\theta(x,t)$ et une seule densité $n(x,t)$.
- Mathématiquement, cela implique qu'à chaque position x, la distribution $\nu(x,\theta,0)$ ne possède qu'une seule région d'occupation continue.

Hypothèse 2 : Conservation de la structure topologique. La condition $\partial_t \nu + v^{\text{eff}}\partial_x \nu + a^{\text{eff}}\partial_\theta \nu = 0$ (équation (III.62)) implique que ν est conservée le long des caractéristiques. Par conséquent, si ν commence avec une structure unique, elle préserve cette structure au cours du temps : il ne peut y avoir ni création ni fusion spontanée de mers de Fermi supplémentaires. La distribution demeure de la forme (III.79) avec des bords $\theta_\pm(x,t)$ évoluant continûment.

Hypothèse 3 : Paramètres thermodynamiques dans le régime quasi-condensé. La limite $\gamma \to 0$ (interaction faible) combinée à $t \to 0$ (température basse) assure que :

· La distribution de rapidité prend la forme de demi-cercle : $\rho(\theta) = \frac{n}{2\pi c^2}\sqrt{-(\theta-\theta_-)(\theta-\theta_+)}$ avec $c = \sqrt{gn}$.

· La pression quantique $\tilde{\mathcal{P}}_Q$ demeure négligeable devant la pression classique $\mathcal{P} = \frac{1}{2}gn^2$ car les variations spatiales de n restent douces à l'échelle de la longueur de corrélation quantique.

· L'énergie est dominée par les termes cinétiques classiques, justifiant l'utilisation de l'équation de *Madelung hydrodynamique*.

Correspondance rigoureuse. Sous ces trois conditions, les équations GHD pour ν se transforment exactement en équations hydrodynamiques pour (n,u) via le changement de variables :

$$n(x,t) = \frac{\theta_+(x,t) - \theta_-(x,t)}{4\sqrt{g}}, \quad u(x,t) = \frac{\theta_+(x,t) + \theta_-(x,t)}{2}. \tag{III.92}$$

Les équations (III.80)–(III.81) se réécrivent sous la forme (III.90)–(III.91), qui coïncident avec (III.77)–(III.78).

Information

Remarque C.2. **(Domaine de validité : configurations multi-mers de Fermi)**
Si la distribution initiale $\nu(x,\theta,0)$ contient plusieurs mers de Fermi distinctes — par exemple, deux régions d'occupation séparées $[\,\theta_1^-,\,\theta_1^+\,]$ et $[\,\theta_2^-,\,\theta_2^+\,]$ avec $\theta_1^+ < \theta_2^-$ — chaque mer évolue indépendamment selon l'équation (III.62), sans échange de population entre elles (conséquence de la conservation de ν le long des caractéristiques).
Cependant, les équations hydrodynamiques (III.77)–(III.78), dérivées de l'équation de Gross–Pitaevskii, supposent implicitement un seul champ condensé $\psi(x,t)$. Cette description ne peut représenter que *une seule* distribution de densité $n(x,t)$ et une seule phase $\theta(x,t)$, même si le système microscopique LL contient plusieurs structures indépendantes en rapidité.
Par conséquent, bien que la GHD soit rigoureusement applicable à ces configurations complexes, la correspondance directe avec les équations de Gross–Pitaevskii se brise dès qu'il existe plusieurs mers de Fermi : il faudrait alors utiliser une généralisation multi-composantes des équations hydrodynamiques (p.ex. un mélange de deux condensats), sortant du cadre standard de la théorie GP.

Résumé sur la dynamique hydrodynamique généralisée (GHD)

La dynamique d'un système quantique isolé intégrable possède des propriétés de relaxation particulières.

Dans un système chaotique (non intégrable), l'état localement relaxé est bien décrit par un GE classique, caractérisé par les trois quantités locales conservées : la densité de particules n,la quantité de mouvement par unité de longueur p et l'énergie par unité de longueur e_{int}.

En revanche, pour un système intégrable, la situation est radicalement différente : il existe une infinité de charges conservées (une pour chaque fonction test $f(\theta)$), et l'état stationnaire local est décrit par le GGE, paramétré par l'ensemble de la distribution de rapidités $\rho(\theta)$. L'état stationnaire local ne peut pas être capturé par un simple GE : il est correctement décrit par un GGE, entièrement déterminé par la distribution de rapidités $\rho(\theta)$.[a]

Lorsque l'on considère des variations spatiales lentes, cette description s'étend naturellement à une distribution de rapidités dépendant de la position, $\rho(x,\theta)$.

L'évolution de cette fonction est alors gouvernée, à l'échelle d'Euler, par les équations de GHD. Ces équations traduisent la propagation des quasi-particules et la réorganisation locale des charges conservées.

Dans certaines limites particulières, la théorie GHD se connecte aux descriptions hydrodynamiques plus familières. En particulier, dans l'état fondamental et pour un paramètre de Lieb $\gamma \to 0$, les équations de GHD se réduisent à celles de l'hydrodynamiques issues de l'équation de GP dépendante du temps, lorsque le terme de pression quantique peut être négligé.

Ainsi, la théorie GHD fournit un cadre cohérent et rigoureux pour décrire la dynamique hors équilibre des systèmes intégrables, reliant la description microscopique en termes de rapidités aux équations effectives de l'hydrodynamique macroscopique.

Conclusion

a. **Lien avec ce qui précède :** La distinction entre GE et GGE est cruciale pour comprendre pourquoi la théorie hydrodynamique généralisée est nécessaire. Dans un système non intégrable (chaotique), seules quelques conservations génériques (nombre de particules, impulsion, énergie) subsistent après relaxation, ce qui justifie l'usage d'un GE à trois paramètres. En revanche, dans les systèmes intégrables, l'infinité de lois de conservation (voir chapitre I sur l'ansatz de Bethe) se traduit par une infinité de paramètres effectifs—en pratique, la distribution complète $\rho(\theta)$. Cette richesse de structure conservée est précisément ce qui rend la description par GHD indispensable : il ne suffit plus de suivre quelques densités locales moyennes, mais il faut tracer l'évolution de la distribution de rapidité tout entière. C'est cette transition—de descriptions à variables réduites (GE) vers descriptions paramétrées par des fonctions (GGE et GHD)—qui illustre le rôle fondamental de l'intégrabilité dans la dynamique hors équilibre.

Bibliographie

[LL63] Elliott H. Lieb et Werner Liniger. "Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State". In : *Phys. Rev.* 130 (4 mai 1963), p. 1605-1616. doi : 10.1103/PhysRev.130.1605. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.1605.

[Per76] J. Percus. "Equilibrium state of a classical fluid of hard rods in an external field". In : *Journal of Statistical Physics* 15 (1976), p. 505-511.

[Spi80] Edward A. Spiegel. "Fluid dynamical form of the linear and nonlinear Schrödinger equations". In : *Physica D : Nonlinear Phenomena* 1 (1980), p. 236-240. url : https://api.semanticscholar.org/CorpusID:121071034.

[BDS83] C. Boldrighini, R. L. Dobrushin et Y. M. Sukhov. "One-dimensional hard rod caricature of hydrodynamics". In : *Journal of Statistical Physics* 31 (1983), p. 577-616.

[Str98] S. Stringari. "Dynamics of Bose-Einstein condensed gases in highly deformed traps". In : *Phys. Rev. A* 58 (3 sept. 1998), p. 2385-2388. doi : 10.1103/PhysRevA.58.2385. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.58.2385.

[BEL14] L. BONNES, F. H. L. ESSLER et A. M. LÄUCHLI. "Light-cone dynamics after quantum quenches in spin chains". In : *Physical Review B* 90.1 (2014), p. 014309. DOI : 10.1103/PhysRevB.90.014309. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.014309.

[Ber+16] B. BERTINI et al. "Transport in out-of-equilibrium XXZ chains : Exact profiles of charges and currents". In : *Physical Review Letters* 117.20 (2016), p. 207201. DOI : 10.1103/PhysRevLett.117.207201.

[CDY16] O. A. CASTRO-ALVAREDO, B. DOYON et T. YOSHIMURA. "Emergent hydrodynamics in integrable quantum systems out of equilibrium". In : *Physical Review X* 6.4 (2016), p. 041065. DOI : 10.1103/PhysRevX.6.041065.

[PS16] Lev PITAEVSKII et Sandro STRINGARI. *Bose-Einstein Condensation and Superfluidity*. Oxford University Press, jan. 2016. ISBN : 9780198758884. DOI : 10.1093/acprof:oso/9780198758884.001.0001. URL : https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780198758884.001.0001.

[DY17] Benjamin DOYON et Takato YOSHIMURA. "A note on generalized hydrodynamics : inhomogeneous fields and other concepts". In : *SciPost Phys.* 2 (2017), p. 014. DOI : 10.21468/SciPostPhys.2.2.014. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.2.2.014.

[Doy+17] Benjamin DOYON et al. "Large-Scale Description of Interacting One-Dimensional Bose Gases : Generalized Hydrodynamics Supersedes Conventional Hydrodynamics". In : *Phys. Rev. Lett.* 119 (19 nov. 2017), p. 195301. DOI : 10.1103/PhysRevLett.119.195301. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.195301.

[DBD18] Jacopo DE NARDIS, Denis BERNARD et Benjamin DOYON. "Hydrodynamic Diffusion in Integrable Systems". In : *Phys. Rev. Lett.* 121 (16 oct. 2018), p. 160603. DOI : 10.1103/PhysRevLett.121.160603. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.160603.

[NBD19] Jacopo De NARDIS, Denis BERNARD et Benjamin DOYON. "Diffusion in generalized hydrodynamics and quasiparticle scattering". In : *SciPost Phys.* 6 (2019), p. 049. DOI : 10.21468/SciPostPhys.6.4.049. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.6.4.049.

[Doy20a] Benjamin DOYON. "Lecture notes on Generalised Hydrodynamics". In : *SciPost Phys. Lect. Notes* (2020), p. 18. DOI : 10.21468/SciPostPhysLectNotes.18. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhysLectNotes.18.

[Doy20b] Benjamin DOYON. "Lecture notes on Generalised Hydrodynamics". In : *SciPost Physics Lecture Notes* 18 (2020), p. 1-138. DOI : 10.21468/SciPostPhysLectNotes.18. URL : https://scipost.org/SciPostPhysLectNotes.18.

[BCD22] Thibault BONNEMAIN, Vincent CAUDRELIER et Benjamin DOYON. "Hamiltonian formulation and aspects of integrability of generalised hydrodynamics". In : *Communications in Mathematical Physics* 391.3 (2022), p. 1485-1540. DOI : 10.1007/s00220-021-04228-z. URL : https://arxiv.org/pdf/2406.04924.

[BD22] Isabelle BOUCHOULE et Jérôme DUBAIL. "Generalized hydrodynamics in the one-dimensional Bose gas : theory and experiments". In : *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* 2022.1 (jan. 2022), p. 014003. DOI : 10.1088/1742-5468/ac3659. URL : https://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/ac3659.

[Ess23] Fabian H.L. ESSLER. "A short introduction to Generalized Hydrodynamics". In : *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* 631 (2023). Lecture Notes of the 15th International Summer School of Fundamental Problems in Statistical Physics, p. 127572. ISSN : 0378-4371. DOI : https://doi.org/10.1016/j.physa.2022.127572. URL : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437122003971.

[KK23] Matthew L KERR et Karen V KHERUNTSYAN. "The theory of generalised hydrodynamics for the one-dimensional Bose gas". In : *AAPPS Bulletin* 33.1 (2023), p. 25.

[Hüb+24] Friedrich HÜBNER et al. *Diffusive hydrodynamics from long-range correlations*. 2024. arXiv : 2408.04502 [cond-mat.stat-mech]. URL : https://arxiv.org/abs/2408.04502.

Chapitre IV

Fluctuations de la distribution de rapidités dans des états stationnaires du modèle de Lieb–Liniger homogène

Sommaire

A Fluctuation-réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés 64
A-1 Charges généralisées et dérivées fonctionnelles 65
A-2 Poids spectral et formulation du GGE 67
A-3 Vérification numérique : Echantillonnage du GGE 69
B Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilité 74
B-1 Susceptibilité spectrale et structure variationnelle de l'entropie 74
B-2 Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique 75
B-3 Expression de la Hessienne 77
B-4 Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne . . . 77
B-5 Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle 78
Bibliographie 83

Introduction

Pourquoi étudier les fluctuations ? On considère un sous-système quantique intégrable, préparé dans un état initial loin de l'équilibre, qui évolue sous l'action de son hamiltonien intégrable du modèle de LL. Après une période de relaxation, le système atteint un état stationnaire décrit par une distribution de rapidité moyenne $\rho_{\mathrm{eq}}(\theta)$.

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

Toutefois, la seule connaissance de la distribution de rapidité moyenne ρ_{eq} ne permet pas, à elle seule, de confirmer la validité du GGE[1]. En effet, plusieurs ensembles statistiques peuvent mener à une même valeur moyenne de $\rho(\theta)$. Pour lever cette ambiguïté, il est nécessaire d'étudier les **fluctuations** autour de

1. À titre d'exemple, considérons un système thermalisé en équilibre de Gibbs standard, caractérisé par une température unique T et un potentiel chimique μ. Un GGE différent, avec des multiplicateurs de Lagrange $\{\beta_i\}$ distincts, peut produire une distribution de rapidité moyenne identique $\rho_{\mathrm{eq}}(\theta)$, tout en possédant une structure de fluctuations fondamentalement différente. Ainsi, mesurer uniquement $\langle\rho(\theta)\rangle_w$ ne suffit pas à discriminer entre ces deux ensembles : il faut accéder aux corrélations à deux points $\langle\,\delta\rho(\theta)\,\delta\rho(\theta')\rangle_w$ pour confirmer que le système est décrit par le bon ensemble statistique.

la distribution typique, notées $\delta\rho$, définies par : $\rho = \rho_{\mathrm{eq}} + \delta\rho$. Cela nécessite de pousser le développement fonctionnel de la *fonction thermodynamique effective* $(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho]$ à l'ordre quadratique en $\delta\rho$.

Si la GGE décrit correctement la valeur moyenne de $\rho(\theta)$ après relaxation, il est naturel de se demander si elle capture également les *fluctuations* autour de cette moyenne. Autrement dit, notre objectif est de tester si la GGE constitue le *bon ensemble statistique* pour l'état stationnaire, en analysant non seulement la distribution moyenne des quasi-particules, mais aussi ses fluctuations.

Plusieurs travaux récents ont mis en lumière l'intérêt expérimental de sonder ces fluctuations. De Nardis et al. ont notamment montré que la mesure de la *structure dynamique* de la densité, après un quench, permet de reconstruire entièrement l'état stationnaire, c'est-à-dire la distribution $\rho(\theta)$ du GGE [Nar+17]. En particulier, l'analyse du facteur de structure dynamique permet d'extraire les différentes *températures effectives* β_i du GGE, et donc d'accéder à la distribution macroscopique des quasi-particules [GA14 ; CK12].

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

Concrètement, cela consiste à analyser la dispersion des rapidités sur plusieurs répétitions expérimentales d'un même quench. Si la GGE décrit correctement l'état stationnaire, la variance et les corrélations des fluctuations de $\rho(\theta)$ devraient être en accord avec les prédictions du formalisme fluctuationnel issu de on définit la matrice densité $\hat{\boldsymbol{\rho}}^{(\mathcal{S})}_{\mathrm{GGE}}$, cf. (II.2).

Le lien entre fluctuations, fonctions de réponse, et GGE a suscité un intérêt croissant dans les systèmes quantiques intégrables. Le formalisme des charges quasi-locales et des potentiels conjugués dans le GGE a été précisé dans le modèle de Lieb–Liniger par Pálmai et Konik [PK18], qui montrent comment structurer la matrice densité en termes de fonctionnelles de rapidité. L'identité fondamentale liant la dérivée fonctionnelle de l'entropie de YY au noyau de fluctuations $\chi_w(\theta, \theta')$ est également dérivée dans ce cadre.

La relation fluctuation–réponse dans les gaz bosoniques unidimensionnels a été étudiée en profondeur par De Nardis et al. [Nar+17], qui proposent une méthode pour reconstruire les fluctuations thermiques à partir de fonctions de réponse dynamiques, en comparant mesures expérimentales et théories thermodynamiques. D'autres travaux, comme ceux de Goldstein et Andrei [GA14], ou de Caux et Konik [CK12], examinent en détail la relaxation vers un GGE à la suite d'un quench quantique, et en particulier le rôle de la distribution de rapidité dans la description des états stationnaires.

En résumé, l'étude des fluctuations de la distribution de rapidités fournit un test clé de la validité du GGE pour modéliser les résultats expérimentaux dans le modèle de LL [Nar+17].

Ce chapitre est consacré à cette extension, qui permettra :

- d'obtenir les matrices de susceptibilité χ_w et les corrélations gaussiennes du GGE ;
- de fournir la base théorique des équations d'hydrodynamique généralisée au second ordre.

Nous commencerons par rappeler le formalisme variationnel, puis nous dériverons l'action quadratique régissant $\delta\rho$.

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

Dans ce chapitre, le caractère local des charges est implicite ; nous omettrons l'exposant $(\mathcal{S})$, introduit au chapitre (II), qui indiquait le caractère local $\mathcal{S}$ associé au support fini des charges.

A-1 Charges généralisées et dérivées fonctionnelles

A-1–i Rappel : Formulation fonctionnelle des moments et cumulants des charges. Considérons un sous-système unidimensionnel de taille finie L. Dans le chapitre (II), aux équations (II.21) et (II.22), nous avons introduit l'opérateur de charge généralisée $\hat{\boldsymbol{Q}}[f]$, défini à partir d'une fonction test $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ et de l'opérateur densité de rapidité $\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)$, selon la relation intégrale :

$$\hat{\boldsymbol{Q}}[f] = L \int d\theta f(\theta)\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta), \quad \text{où } \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta) \text{ agit comme } \quad \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\,|\{\theta_a\}\rangle = \frac{1}{L}\sum \delta(\theta-\theta_a)\,|\{\theta_a\}\rangle \tag{IV.1}$$

A-1–ii États d'équilibre généralisés et poids spectral. Dans un sous-système intégrable, on a vu dans l'équation (II.28) qu'un état d'équilibre est décrit par une matrice densité de la forme :

$$\hat{\boldsymbol{\varrho}}[w] \doteq \frac{1}{Z[w]}\, e^{-\hat{\boldsymbol{Q}}[w]}, \quad \text{avec} \quad Z[w] \doteq \mathrm{Tr}\left(e^{-\hat{\boldsymbol{Q}}[w]}\right), \tag{IV.2}$$

où l'opérateur **charge généralisée** $\hat{\boldsymbol{Q}}[w]$ est défini à partir du **poids spectral** $w(\theta)$ par l'équation (IV.1).

A-1–iii Rappel : Dérivée fonctionnelle directionnelle. Nous avons introduit dans les équations (II.51) et (II.52), la **dérivée fonctionnelle dans la direction d'une fonction test** f appliquée à une fonctionnelle $F[g]$, comme :

$$\mathscr{D}_{[f]}F[g] \doteq \lim_{\epsilon\to 0}\frac{F[g+\epsilon f]-F[g]}{\epsilon}, \tag{IV.3}$$

$$= \int dx\, \frac{\delta F[g]}{\delta g(x)} f(x) \tag{IV.4}$$

À partir de la définition précédente (IV.3), il est clair que $\mathscr{D}_{[f]}F[g]$, considérée comme fonctionnelle de f, est linéaire. En effet,

$$\mathscr{D}_{[c_1 f_1 + c_2 f_2]}F[g] = c_1\mathscr{D}_{[f_1]}F[g] + c_2\mathscr{D}_{[f_2]}F[g], \tag{IV.5}$$

avec c_1 et c_2 des réels et f_1 et f_2 des fonctions de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$.

La linéarité de $\hat{\boldsymbol{Q}}[g]$ implique que sa différentielle fonctionnelle dans la direction f vérifie [Whend ; Gou08] :

$$\mathscr{D}_{[f]}\hat{\boldsymbol{Q}}[g] = \hat{\boldsymbol{Q}}[f]. \tag{IV.6}$$

Cette notation permet une différentiation fonctionnelle claire, notamment dans les calculs de moments et cumulants.

Dans la suite, pour alléger les notations, nous noterons les moyennes $\langle\bullet\rangle_w$ au lieu de $\langle\bullet\rangle_{\hat{\boldsymbol{\varrho}}^{(S)}[w]}$.

A-1–iv Moments non centrés. En utilisant cette notation, nous avons défini les **moments non centrés** d'ordre q des charges de la manière suivante :

$$\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\,\hat{\boldsymbol{Q}}[f_2]\cdots\hat{\boldsymbol{Q}}[f_q]\rangle_w = (-1)^q\frac{1}{Z[w]}\mathscr{D}_{[f_1]}\mathscr{D}_{[f_2]}\cdots\mathscr{D}_{[f_q]}\,Z[w], \tag{IV.7}$$

De même, on a défini les moments d'ordre q de la distribution de rapidité à l'aide des dérivées ponctuelles :

$$\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_1)\,\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_2)\cdots\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_q)\rangle_w = (-1)^q\frac{1}{L^q}\frac{1}{Z[w]}\frac{\delta}{\delta w(\theta_1)}\frac{\delta}{\delta w(\theta_2)}\cdots\frac{\delta}{\delta w(\theta_q)}\,Z[w], \tag{IV.8}$$

A-1–v Cumulants et fluctuations. On définit les **fluctuations des charges et des distributions de rapidité** par :

$$\delta\hat{\boldsymbol{Q}}[f] \doteq \hat{\boldsymbol{Q}}[f] - \langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f]\rangle_w\,, \quad \delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta) \doteq \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta) - \langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w\,. \tag{IV.9}$$

Les **cumulants** d'ordre q des **charges** s'obtiennent comme dérivées fonctionnelles du logarithme de la fonction de partition :

$$\langle\delta\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\,\delta\hat{\boldsymbol{Q}}[f_2]\cdots\delta\hat{\boldsymbol{Q}}[f_q]\rangle_w \;=\; (-1)^q\mathscr{D}_{[f_1]}\mathscr{D}_{[f_2]}\cdots\mathscr{D}_{[f_q]}\,\ln(Z[w]), \tag{IV.10}$$

et le cumulant d'ordre q des **distributions de rapidité** comme dérivées partielles du logarithme de la fonction de partition :

$$\langle\delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_1)\,\delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_2)\cdots\delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_q)\rangle_w \;=\; (-1)^q\frac{1}{L^q}\frac{\delta}{\delta w(\theta_1)}\frac{\delta}{\delta w(\theta_2)}\cdots\frac{\delta}{\delta w(\theta_q)}\,\ln(Z[w]). \tag{IV.11}$$

A-1–vi Moyennes et corrélations d'ordre faible. À l'ordre 1, les **moments non centrés** sont simplement les **valeurs moyennes**. Les moyennes des charges (IV.7) et des distributions de rapidité (IV.8) peuvent être exprimées comme dérivées fonctionnelles respectivement ponctuelles du logarithme de la fonction de partition :

$$\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\rangle_w = -\mathscr{D}_{[f_1]}\ln(Z[w]), \quad \langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_1)\rangle_w = -\frac{1}{L}\frac{\delta\ln(Z[w])}{\delta w(\theta_1)}. \tag{IV.12}$$

Pour un état donné, la fonction $\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w$ n'est rien d'autre que la distribution de rapidités par unité de longueur.

À l'ordre 2, les **cumulants** correspondent aux **corrélations**. On constate, à partir des expressions ci-dessus (IV.12), que les fluctuations des charges (IV.10) et des distributions de rapidité (IV.11) peuvent être obtenues comme dérivées fonctionnelles respectivement ponctuelles des moyennes :

$$\langle\delta\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\,\delta\hat{\boldsymbol{Q}}[f_2]\rangle_w = -\mathscr{D}_{[f_2]}\,\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\rangle_w\,, \quad \langle\delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_1)\,\delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_2)\rangle_w = -\frac{1}{L}\frac{\delta\,\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_1)\rangle_w}{\delta w(\theta_2)}. \tag{IV.13}$$

Cette identité relie la fonction de corrélation des fluctuations aux dérivées fonctionnelles de la valeur moyenne : elle exprime une *susceptibilité fonctionnelle*, au sens où elle mesure la réponse linéaire d'une observable à une perturbation infinitésimale de poids $w(\theta)$. La susceptibilité s'identifie ainsi à la covariance entre charges généralisées, illustrant le principe de *fluctuation-réponse*.[2]

A-1–vii Notation susceptibilité et fluctuations. Considérons deux fonctions f_1 et f_2. On définit la **susceptibilité** (ou **fonction de réponse croisée**), $\chi_\omega[f_1, f_2]$ par

$$\chi_w[f_1, f_2] \doteq -\mathscr{D}_{[f_2]}\,\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\rangle_w\,. \tag{IV.14}$$

Cette fonction de réponse est reliée aux fluctuations dans le GGE. Plus précisément, $\chi_\omega[f_1, f_2]$ vérifie

$$C_w[f_1, f_2] = \chi_w[f_1, f_2], \tag{IV.15}$$

où les **corrélations à deux points** $C_w(f_1, f_2)$ sont définies par :

$$C_w[f_1, f_2] \doteq \langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\hat{\boldsymbol{Q}}[f_2]\rangle_w - \langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\rangle_w\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_2]\rangle_w, \tag{IV.16}$$

et quantifient les fluctuations dans le GGE.

L'équation précédente, qui relie la réponse linéaire aux fluctuations, est une relation très importante qui sera utilisée pour des tests numériques dans cette section.

2. La cohérence entre les équations (IV.7) et (IV.10) découle de la relation entre moments et cumulants. Rappelons que pour une variable aléatoire, les cumulants s'expriment comme des dérivées du logarithme de la fonction génératrice (ici $\ln Z[w]$), tandis que les moments non centrés correspondent à des dérivées de la fonction génératrice elle-même ($Z[w]$). En effet, si l'on note $Z[w] = \mathrm{Tr}(e^{-\hat{\boldsymbol{Q}}[w]})$, alors :

$$(-1)^q\mathscr{D}_{[f_1]}\cdots\mathscr{D}_{[f_q]}\ln(Z[w]) \;=\; (-1)^q\frac{1}{Z[w]}\mathscr{D}_{[f_1]}\cdots\mathscr{D}_{[f_q]}Z[w] + (\text{termes croisés}).$$

Pour $q = 1$, on retrouve $\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\rangle_w = -\mathscr{D}_{[f_1]}\ln(Z[w])$, ce qui établit directement le lien. Pour $q \geq 2$, les termes croisés disparaissent dans les cumulants (par construction), ce qui explique pourquoi les fluctuations (cumulants d'ordre 2) s'expriment uniquement en fonction de dérivées du logarithme, tandis que les moments mélangent les contributions de plusieurs ordres.

A-1–viii Lien entre distributions de rapidités et observables locales. À partir de l'équation (IV.1), on remarque que

$$\hat{\boldsymbol{Q}}[\delta(\cdot-\theta)/L] = \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta). \tag{IV.17}$$

Les moments non centrés des charges (IV.7) ainsi que leurs cumulants (IV.10) deviennent alors ceux des distributions de rapidités (respectivement (IV.8) et (IV.11)), en prenant les fonctions $f_i(\theta) = \delta(\cdot-\theta_i)/L$.

Cela est en accord avec le fait qu'en utilisant (IV.4)[3] les dérivées fonctionnelles deviennent :

$$\mathscr{D}_{[\,\delta(\cdot-\theta)\,]}F[g] \doteq \lim_{\epsilon\to 0}\frac{F\,[g+\epsilon\delta(\cdot-\theta)]-F[g]}{\epsilon}, \tag{IV.18}$$

$$= \frac{\partial F[g]}{\partial g(\theta)}\,. \tag{IV.19}$$

L'équation (IV.14) s'écrit dans ce cas, en utilisant la notation de l'équation (IV.18) et la propriété (IV.5) :

$$\chi_w(\theta,\theta') \doteq -\frac{1}{L}\frac{\delta\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w}{\delta w(\theta')} \tag{IV.20}$$

où l'on a utilisé la notation $\chi_w(\theta,\theta') = \chi_w\left[\frac{\delta(\cdot-\theta)}{L},\frac{\delta(\cdot-\theta')}{L}\right]$.

L'équation (IV.16), quant à elle, s'écrit :

$$C_w(\theta,\theta') \doteq \langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta')\rangle_w - \langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta')\rangle_w \tag{IV.21}$$

où l'on utilise la notation $C_w(\theta,\theta') = C_w\left[\frac{\delta(\cdot-\theta)}{L},\frac{\delta(\cdot-\theta')}{L}\right]$.

La relation (IV.15), qui relie la susceptibilité à la corrélation, implique alors :

$$C_w(\theta,\theta') = \chi_w(\theta,\theta'). \tag{IV.22}$$

A-2 Poids spectral et formulation du GGE

A-2–i Rappel : Lien entre poids spectral et multiplicateurs de Lagrange. Dans la formulation fonctionnelle, un GGE est entièrement déterminé par une fonction arbitraire $w(\theta)$, appelée *poids spectral*[a] . Cette description est donc plus générale que l'approche usuelle, où l'on considère uniquement une combinaison discrète de charges locales (ou quasi-locales). Dans ce cas particulier, le poids spectral prend la forme :

$$w(\theta) = \sum_i \beta_i f_i(\theta), \tag{IV.23}$$

ce qui ramène le GGE à la forme standard définie par les *multiplicateurs de Lagrange* β_i. Les fonctions régulières f_i sont des densités spectrales associées aux charges $\hat{\boldsymbol{Q}}_i$,de sorte que les charges soient bien $\hat{\boldsymbol{Q}}_i = \hat{\boldsymbol{Q}}[f_i]$.

a. Le poids spectral $w(\theta)$ est, dans la formulation fonctionnelle du GGE, une fonction arbitraire de la variable spectrale θ. Il n'a pas, en général, à être symétrique : une condition de parité $w(\theta) = w(-\theta)$ n'apparaît que si l'état considéré respecte une invariance sous inversion des rapides (par exemple en absence de courant). En l'absence d'une telle symétrie, les composantes impaires de $w(\theta)$ décrivent précisément les contributions associées aux charges de courant.

3. La dérivée fonctionnelle directionnelle d'une fonctionnelle $F[g]$ dans la direction de la distribution $\delta(\cdot-\theta)\colon\theta'\mapsto\delta(\theta'-\theta)$ vérifie :

$$\mathscr{D}_{[\theta'\mapsto\delta(\theta'-\theta)]}F[g] = \int d\theta'\,\frac{\delta F[g]}{\delta g(\theta')}\,\delta(\theta'-\theta) = \frac{\delta F[g]}{\delta g(\theta)},$$

où $\mathscr{D}_{[\theta'\mapsto\delta(\theta'-\theta)]}F[g]$ désigne la variation de F dans la direction $\delta(\cdot-\theta)\colon\theta'\mapsto\delta_\theta(\theta')\equiv\delta(\theta'-\theta)$. Cette notation permet de relier la variation ponctuelle de F à sa variation dans une direction arbitraire.

A-2–ii Lien entre dérivées fonctionnelles, paramétrisation spectrale et moments des charges. On peut considérer la variation fonctionnelle d'une fonctionnelle $F[w]$ par rapport à la direction f_i, ce qui revient à effectuer une perturbation $w \to w + \epsilon f_i$, autrement dit $\beta_i \to \beta_i + \epsilon$.La dérivée fonctionnelle de $F[w]$ dans la direction f_i s'écrit alors :

$$\mathscr{D}_{[f_i]}F[w] \doteq \lim_{\epsilon\to 0}\frac{F\left[\sum_j(\beta_j+\delta_{ij}\epsilon)f_j\right]-F\left[\sum_j\beta_j f_j\right]}{\epsilon}, \tag{IV.24}$$

$$= \frac{\partial F[w]}{\partial\beta_i}\Big)_{\beta_{j\neq i}}. \tag{IV.25}$$

Cette expression[4]

est valable tant que les fonctions f_j sont considérées comme fixées. En revanche, si les f_j peuvent varier, ainsi la différentiation par rapport aux β_j ne correspond plus à une dérivée fonctionnelle au sens strict. En injectant cette expression dans l'expression du *moment non-centré* (IV.7) nous l'obtenons l'expression (II.11).

Avec la condition (IV.23) et la définition (IV.24), nous pouvons donc réécrire les moments non centrés (des charges) (IV.7) et les cumulants (des charges) (IV.10), et ainsi les moyennes (IV.12) et corrélations (IV.13), en remplaçant les dérivées fonctionnelles $\mathscr{D}_{[f_i]}$ par $\frac{\partial}{\partial\beta_i}\Big)_{\beta_{j\neq i}}$.

De plus en remarquant que $\frac{\partial w(\theta)}{\partial\beta_i}\Big)_{\beta_{j\neq i}} = f_i(\theta)$, alors la dérivée selon β_i s'écrit

$$-\frac{\partial}{\partial\beta_i}\Big)_{\beta_{j\neq i}} = -\int d\theta\,\frac{\partial w(\theta)}{\partial\beta_i}\Big)_{\beta_{j\neq i}}\frac{\delta}{\delta w(\theta)},$$

$$= L\int d\theta\, f_i(\theta)\left(-\frac{1}{L}\frac{\delta}{\delta w(\theta)}\right). \tag{IV.26}$$

Nous pouvons donc, encore une fois, en utilisant (IV.26), réécrire les moments non centrés des charges (IV.7) en fonction des moments non centrés des distributions de rapidités (IV.8) :

$$\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\cdots\hat{\boldsymbol{Q}}[f_q]\rangle_w = L^q\int d\theta_1 f_1(\theta_1)\cdots\int d\theta_q f_q(\theta_q)\,\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_q)\rangle_w\,, \tag{IV.27}$$

De même, nous pouvons réécrire les cumulants des charges (IV.10) à partir des cumulants des distributions de rapidités (IV.11) :

$$\langle\delta\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\cdots\delta\hat{\boldsymbol{Q}}[f_q]\rangle_w = L^q\int d\theta_1 f_1(\theta_1)\cdots\int d\theta_q f_q(\theta_q)\,\langle\delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_1)\cdots\delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_q)\rangle_w\,. \tag{IV.28}$$

4. L'égalité $\mathscr{D}_{[f_i]}F[w] = \frac{\partial F[w]}{\partial\beta_i}\Big)_{\beta_{j\neq i}}$, provient du fait que la perturbation $w \to w + \epsilon f_i$ correspond exactement à la variation infinitésimale $\beta_i \to \beta_i+\epsilon$ dans la décomposition $w(\theta) = \sum_j \beta_j f_j(\theta)$, les fonctions f_j étant supposées fixes. La dérivée fonctionnelle dans la direction f_i se réduit alors à une dérivée ordinaire par rapport au paramètre β_i. Cette identification cesse toutefois d'être valable si les fonctions f_j peuvent elles-mêmes dépendre d'autres paramètres ou varier : dans ce cas, la différentiation par rapport aux β_i n'est plus équivalente à une dérivée fonctionnelle au sens strict, car la base fonctionnelle $\{f_j\}$ n'est plus considérée comme figée. Pour la démontrer, on part de la décomposition $w(\theta) = \sum_j \beta_j f_j(\theta)$ avec les fonctions f_j fixées. La variation fonctionnelle de F dans la direction f_i est, par définition,

$$\mathscr{D}_{[f_i]}F[w] \doteq \lim_{\epsilon\to 0}\frac{F[w+\epsilon f_i]-F[w]}{\epsilon}.$$

Or la perturbation $w \to w + \epsilon f_i$ se réécrit

$$w + \epsilon f_i = \sum_j \beta_j f_j + \epsilon f_i = \sum_j(\beta_j+\delta_{ij}\epsilon)f_j,$$

ce qui correspond simplement à remplacer β_i par $\beta_i + \epsilon$ à $\beta_{j\neq i}$ fixés. En notant de manière abrégée $F[w] = F(\{\beta_j\})$, on obtient alors

$$\mathscr{D}_{[f_i]}F[w] = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{F(\beta_1,\ldots,\beta_i+\epsilon,\ldots)-F(\beta_1,\ldots,\beta_i,\ldots)}{\epsilon} = \frac{\partial F[w]}{\partial\beta_i}\Big)_{\beta_{j\neq i}}.$$

Cette démonstration repose crucialement sur le fait que les fonctions f_j sont considérées comme indépendantes des β_j et, plus généralement, comme fixes dans l'espace fonctionnel.

Ces relations sont "naturelles". En particulier, on retiendra que les moyennes et les corrélations des charges s'écrivent :

$$\langle \hat{\boldsymbol{Q}}[f] \rangle_w = L \int d\theta f(\theta) \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta) \rangle_w , \tag{IV.29}$$

$$\langle \delta\hat{\boldsymbol{Q}}[f_1]\, \delta\hat{\boldsymbol{Q}}[f_2] \rangle_w = L^2 \iint d\theta_1 d\theta_2 f_1(\theta_1) \langle \delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_1)\, \delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta_2) \rangle_w f_2(\theta_2). \tag{IV.30}$$

A-3 Vérification numérique : Echantillonnage du GGE

On souhaite tester notre capacité à échantillonner le GGE avec l'*algorithme de Metropolis*[5] . Pour cela, nous utiliserons le principe de *fluctuation-réponse*, défini à l'équation (IV.22). Deux approches numériques seront comparées : (i) le calcul direct des corrélations de la distribution de rapidité à l'aide d'un algorithme de *Monte Carlo* basé sur les états propres du modèle de LL, et (ii) le calcul indirect à partir de la susceptibilité.

Pour introduire les notations employées dans cette sous-section, rappelons brièvement quelques éléments du chapitre (I) :

Rappel

A-3–i Rappel : Cadre de Bethe pour le modèle de Lieb–Liniger.

Équations de Bethe. Les états propres du gaz de LL sont décrits par les rapidités $\{\theta_a\}_{a\in[\![1,N]\!]}$ vérifiant les équations de BA (cf eq (I.75)) :

$$L\frac{m}{\hbar}\theta_a + \frac{m}{\hbar}\sum_{b\neq a} 2\arctan\left(\hbar\frac{\theta_a-\theta_b}{g}\right) = 2\pi I_a, \tag{IV.31}$$

où $\{I_a\}$ est un ensemble d'entiers (ou demi-entiers) caractérisant une configuration de type BA .

État fondamental. Dans le cas de l'état fondamental, les nombres quantiques sont distribués de façon régulière selon (I.76) :

$$I_a = a - \frac{N+1}{2}, \qquad a \in [\![1, N]\!]. \tag{IV.32}$$

Distribution de rapidité. La configuration $\{\theta_a\}$ définit une densité de rapidité, notée $\rho(\theta)$ (cf eq (I.80)) :

$$\rho(\theta) = \frac{1}{L}\sum_{a=1}^{N} \delta(\theta-\theta_a). \tag{IV.33}$$

A-3–ii Méthode numérique de *Monte Carlo*. Nous travaillons avec $\hbar = m = g = 1$.

5. L'algorithme de Metropolis permet d'échantillonner une mesure de probabilité $\mathbb{P}(\psi) \propto e^{-W(\psi)}$ sur un espace d'états ψ en construisant une chaîne de Markov irréductible et vérifiant la condition d'équilibre détaillé. À partir d'un état ψ, on génère une proposition ψ' suivant une probabilité de transition $\pi(\psi \to \psi')$ symétrique. L'acceptation de la mise à jour $\psi \to \psi'$ s'effectue alors avec la probabilité

$$A(\psi \to \psi') = \min\left(1,\, \exp\left[-(W(\psi') - W(\psi))\right]\right),$$

de sorte que la distribution stationnaire de la chaîne soit exactement $\mathbb{P}$. Dans notre cas, la fonction W correspond à la « fonctionnelle d'énergie » du GGE, typiquement $W = Q[w]$ ou une quantité équivalente définie à partir des charges conservées. Le théorème fondamental de Metropolis assure que, sous des conditions générales (apériodicité et connexité du graphe des propositions), la chaîne converge vers la mesure du GGE. Ceci permet d'estimer numériquement des observables $\langle O \rangle = \int \mathrm{d}\psi\, O(\psi)\, \mathbb{P}(\psi)$ par moyennage ergodique $\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} O(\psi_k)$.

Paramètres fixés. On fixe un *poids spectral*, par exemple quadratique[6] :

$$w(\theta) = \tfrac{1}{2}\theta^2, \tag{IV.34}$$

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

Initialisation : état fondamental.

1. On commence par fixer la configuration d'entier de BA $\{I_a\}$ correspondant à l'état fondamental. Celle-ci est donnée par l'équation (IV.32).
2. On résout ensuite les équations de BA (IV.31) associées afin d'obtenir l'ensemble des rapidités $\{\theta_a\}$.
3. Ces rapidités définissent une distribution empirique de rapidité, notée $\rho^e(\theta)$, que l'on enregistre sous la forme (IV.33). Pour rendre cette distribution exploitable numériquement, on la discrétise sur une grille discrète $\{\theta_a\}$.

À chaque étape du Monte Carlo *:*

1. Une nouvelle configuration $\{I'_a\}$ est proposée en faisant varier chaque entier I_a aléatoirement de ± 1, c'est-à-dire en posant $I'_a = I_a \pm 1$, le signe étant choisi au hasard.
   - Si les $\{I'_a\}$ sont tous distincts, on continue ; sinon, on propose une autre configuration.
2. À partir de cette configuration $\{I'_a\}$, on résout les équations de BA pour obtenir un nouvel ensemble de rapidités $\{\theta'_a\}$.
3. La nouvelle configuration est ensuite soumise au *critère de Metropolis* afin de décider si elle est acceptée ou rejetée ; l'acceptation de la nouvelle configuration $\{\theta_a\}$ se fait avec une probabilité $\min\left(1, e^{-\left(\sum_a w(\theta_a) - w(\theta'_a)\right)}\right)$, en se basant sur l'énergie associée à la fonction w.
   - Si la configuration est rejetée, on conserve les ensembles précédents : autrement dit $\{I_a\}$ et $\{\theta_a\}$.
   - Si la configuration est acceptée, on met à jour les ensembles : c'est-à dire $\{I_a\} \leftarrow \{I'_a\}$ et $\{\theta_a\} \leftarrow \{\theta'_a\}$.
4. Enfin, on enregistre la i-ième distribution de rapidité empirique, ρ^e_i, associée à la configuration $\{\theta_a\}$, en la discrétisant sur une grille.

Un grand nombre d'itérations est réalisé, conduisant à la génération de N_{conf} configurations (non nécessairement distinctes), permettant d'assurer une bonne convergence statistique des moyennes.

Cela permet de construire numériquement :

- la moyenne empirique du profil de distribution de rapidité, notée $\langle \rho^e(\theta) \rangle$, obtenue en effectuant la moyenne sur l'ensemble des configurations N_{conf} générées par la méthode de *Monte Carlo*. Il faudra vérifier que N_{conf} est suffisamment grand pour pour voir faire l'approximation

$$\langle \rho^e(\theta) \rangle \approx \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta) \rangle_w \,, \tag{IV.35}$$

6. Le choix d'un poids spectral quadratique $w(\theta) = \frac{1}{2}\theta^2$ est naturel pour plusieurs raisons physiques. D'une part, il correspond au cas où la mesure du GGE est dominée par les excitations de grande rapidité, puisqu'un poids quadratique pénalise fortement les configurations éloignées de $\theta = 0$, exactement comme une énergie cinétique $\frac{1}{2}p^2$ dans un gaz classique. D'autre part, ce choix est associé à l'intégration d'une charge d'ordre deux dans la hiérarchie intégrable (souvent identifiée à l'énergie totale du système), faisant de ce $w(\theta)$ l'analogue fonctionnel du multiplicateur de Lagrange couplé à l'énergie. Enfin, dans un contexte numérique, un poids quadratique constitue un banc d'essai idéal : il est suffisamment simple pour permettre des validations analytiques (par exemple via la relation fluctuation–réponse), tout en étant non trivial car il induit une distribution de rapidités strictement convexe.

Un poids spectral quadratique $w(\theta) = \frac{1}{2}\theta^2$ définit une mesure strictement convexe dans l'espace des rapidités, assurant l'unicité du minimiseur fonctionnel et la stabilité de la distribution stationnaire. Sur le plan mathématique, ce choix correspond à un élément de la classe des poids de type « potentiel convexe » pour lesquels les fluctuations sont bien contrôlées et les estimations variationnelles s'appliquent directement.

Dans l'équation TBA du modèle de LL, un poids spectral quadratique $w(\theta) = \frac{1}{2}\theta^2$ joue le rôle d'un potentiel externe dans l'équation pour le pseudo-énergie, $\varepsilon(\theta) = w(\theta) - \int K(\theta - \theta') \log\left(1 + e^{-\varepsilon(\theta')}\right) d\theta'$. Ce choix identifie w à la charge d'ordre deux de la hiérarchie intégrable, et produit une pseudo-énergie strictement convexe. Il conduit donc à une densité de rapides thermodynamique bien définie et monotone, qui peut être résolue efficacement numériquement tout en restant proche de la structure physique des états thermiques usuels.

- les fluctuations locales de la densité de rapidité définies par $\delta\rho_i^e(\theta) = \rho_i^e(\theta) - \langle\rho^e(\theta)\rangle$, obtenues en soustrayant à chaque profil la valeur moyenne,
- la corrélation empirique est obtenue en calculant, sur l'ensemble des configurations *Monte Carlo*, la moyenne du produit des fluctuations locales aux points θ et θ' :

$$C_w(\theta,\theta') \approx \frac{1}{N_{\text{conf}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{conf}}} \delta\rho_k^e(\theta)\,\delta\rho_k^e(\theta'). \tag{IV.36}$$

Autrement dit, il s'agit de la covariance empirique des profils générés et l'approximation devient une égalité dans la limite $N_{\text{conf}} \to \infty$.

Vérification de la convergence numérique . Les algorithmes de *Monte Carlo* produisent des estimations bruitées des grandeurs physiques, notamment de la densité de rapidité moyenne empirique $\langle\rho^e(\theta)\rangle$. Cette quantité présente une incertitude statistique (écart-type) entre deux réalisations indépendantes de la procédure de *Monte Carlo*. Pour réduire ce bruit, il est nécessaire de générer un grand nombre (N_{conf}) de configurations de I_a, ce qui augmente le coût numérique du calcul.

Pour $N_{\text{conf}} = 2\cdot 10^6$, nous avons répété dix fois l'algorithme de *Monte Carlo* afin de calculer l'écart-type des moyennes $\text{std}(\langle\rho^e(\theta)\rangle)$. On observe que, pour les valeurs de θ où $\langle\rho^e(\theta)\rangle$ est petite, le rapport [7]

$$\frac{\text{std}(\langle\rho^e(\theta)\rangle)}{\langle\rho^e(\theta)\rangle} \tag{IV.37}$$

est plus grand que pour les valeurs de θ où $\langle\rho^e(\theta)\rangle$ est plus grande. Ainsi, pour quantifier globalement la convergence, nous considérons la moyenne de ce rapport sur l'ensemble des θ. Dans notre cas, cette quantité est inférieure à 2%, ce qui montre que $\langle\rho^e(\theta)\rangle$ constitue une très bonne approximation de la moyenne $\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w$. Ainsi, pour $N_{\text{conf}} = 2\cdot 10^6$, les équations (IV.35) et (IV.36) sont bien vérifiées.

Dans la suite, pour plus de lisibilité, nous noterons $\langle\rho^e(\theta)\rangle$ par $\langle\rho(\theta)\rangle_w$ et la matrice empirique des corrélations par $C_w(\theta,\theta')$. Par exemple, le graphique 2D situé à gauche dans la figure (IV.1) représente la quantité $\frac{1}{N_{\text{conf}}}\sum_{k=1}^{N_{\text{conf}}}\delta\rho_k^e(\theta)\,\delta\rho_k^e(\theta')$. Le nombre de configurations N_{conf} est suffisamment grand pour que l'approximation (IV.36) soit valide [8] [9] pour l'usage du titre "$C_w(\theta,\theta')$" pour ce graphique soit corect. .

A-3–iii Calcul numérique de la susceptibilité par dérivée fonctionnelle. Pour évaluer la susceptibilité linéaire, définie comme la dérivée de $\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w$ par rapport à une perturbation infinitésimale du poids spectral $w(\theta')$, on adopte une approche numérique fondée sur les différences finies. La procédure est la suivante :

1. On modifie localement le potentiel $w(\theta)$ en y ajoutant une perturbation delta centrée en θ', selon :

$$w(\theta) \to w(\theta) + \varepsilon\,\delta_{\theta'}(\theta), \tag{IV.38}$$

où ε est un petit paramètre de perturbation.

7. Ce rapport quantifie l'erreur relative sur l'estimation de la densité de rapidité moyenne. Une valeur faible indique une bonne convergence statistique, tandis qu'une valeur élevée signale une incertitude importante. On fait l'hypothèse que les fluctuations statistiques de $\langle\rho^e(\theta)\rangle$ sont gaussiennes, ce qui est justifié par le théorème central limite lorsque N_{conf} est grand. Dans ce cas, l'écart-type $\text{std}(\langle\rho^e(\theta)\rangle)$ mesure la dispersion des estimations autour de la moyenne vraie $\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w$. Le rapport (IV.37) exprime donc l'erreur relative sur l'estimation de la densité de rapidité moyenne. On fait aussi l'hypothèse que $\langle\rho^e(\theta)\rangle \neq 0$ pour éviter une division par zéro.

8. Dans la limite d'un nombre de configurations $N_{\text{conf}} \to \infty$, la moyenne empirique $\frac{1}{N_{\text{conf}}}\sum_k \delta\rho_k^e(\theta)\,\delta\rho_k^e(\theta')$ converge vers la corrélation théorique $C_w(\theta,\theta') = \langle\delta\rho(\theta)\,\delta\rho(\theta')\rangle_w$ grâce à la loi des grands nombres. Ainsi, pour un N_{conf} suffisamment élevé, la matrice empirique est une estimation quasi-exacte de la matrice de corrélation propre au GGE défini par le poids spectral w. C'est cette convergence qui justifie l'usage du titre "$C_w(\theta,\theta')$" dans la figure : la quantité affichée coïncide, à précision statistique près, avec la corrélation théorique.

9. En notant $\delta\rho_k^e(\theta)$ les fluctuations de la k-ième configuration, la loi des grands nombres garantit que, lorsque $N_{\text{conf}} \to \infty$,

$$\frac{1}{N_{\text{conf}}}\sum_{k=1}^{N_{\text{conf}}}\delta\rho_k^e(\theta)\,\delta\rho_k^e(\theta') \overset{N_{\text{conf}}\to\infty}{\longrightarrow} C_w(\theta,\theta') \doteq \langle\delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\,\delta\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta')\rangle_w\,,$$

c'est-à-dire que la matrice empirique converge en probabilité vers la corrélation théorique du GGE défini par $w(\theta)$.

2. On relance ensuite le *Monte Carlo* avec ce potentiel perturbé, ce qui permet d'estimer la nouvelle moyenne $\langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_{w+\varepsilon\delta_{\theta'}}$.
3. Enfin, on évalue la dérivée fonctionnelle par la formule de différence finie suivante :

$$\chi_w(\theta,\theta') \approx -\frac{1}{L}\cdot\frac{\langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_{w+\varepsilon\delta_{\theta'}} - \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w}{\varepsilon}. \tag{IV.39}$$

Cette méthode permet ainsi d'approcher numériquement la matrice de réponse linéaire entre les coordonnées spectrales θ et θ', que l'on peut comparer à la matrice de corrélation obtenue précédemment.

Difficultés numériques : Le calcul de la susceptibilité nécessite d'estimer la dérivée fonctionnelle de la densité de rapidité par rapport au poids w selon (IV.39).

Cependant, pour que cette approximation soit valable, ε doit être suffisamment petit. Or, si ε est trop petit, la différence $\langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_{w+\varepsilon\delta_{\theta'}} - \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w$ devient du même ordre que leur bruit statistique, et la dérivée est alors noyée dans le bruit.

Pour limiter l'erreur statistique, on peut dans un premier temps ajuster à la fois le nombre de configurations (N_{conf}) et la valeur de ε, de sorte que l'écart-type de plusieurs $\langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w$ soit au moins dix fois plus petit que la variation $\langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_{w+\varepsilon\delta_{\theta'}} - \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w$, de sorte que (IV.39) donne une valeur correcte.

Nous avons généré $N_{\text{conf}} = 2\times 10^6$ configurations et évalué les susceptibilités avec un paramètre de perturbation $\varepsilon = 10^{-1}$. Par exemple, le graphique 2D situé à droite dans la figure (IV.1) représente la quantité $-\frac{1}{L}\cdot\frac{\langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_{w+\varepsilon\delta_{\theta'}} - \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w}{\varepsilon}$. Le paramètre de perturbation ε est suffisamment petit et le nombre de configurations N_{conf} est suffisamment grand pour que l'approximation (IV.39) soit valide [10] pour l'usage du titre "$\chi_w(\theta,\theta')$" pour ce graphique soit corect. .

A-3–iv Comparaison numérique. Les deux matrices obtenues présentent des différences. Pour quantifier leur similarité, on calcule une *norme relative* en utilisant la norme ℓ^2 [11] :

$$\frac{\|C_w - \chi_w\|_2}{\|C_w\|_2} = 13,5\%.$$

10. Pour une perturbation ε suffisamment petite, l'approximation par différence finie

$$-\frac{1}{L}\cdot\frac{\langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_{w+\varepsilon\delta_{\theta'}} - \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w}{\varepsilon} \xrightarrow{\varepsilon\to 0} \chi_w(\theta,\theta') \doteq -\frac{1}{L}\frac{\delta\langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w}{\delta w(\theta')}$$

converge vers la susceptibilité théorique, en vertu d'un argument standard de régularité fonctionnelle : lorsque $\varepsilon\to 0$, la différence quotient tend vers la dérivée fonctionnelle $\frac{\delta\langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w}{\delta w(\theta')}$, et la moyenne empirique converge (par la loi des grands nombres) vers la valeur exacte du GGE. Numériquement, avec $N_{\text{conf}} = 2\times 10^6$ et $\varepsilon = 10^{-1}$, la convergence était déjà atteinte dans les tolérances statistiques accessibles. C'est pour cette raison que la matrice représentée dans le graphique 2D de droite dans la figure (IV.1) est légitimement notée $\chi_w(\theta,\theta')$.

11. Pour tout vecteur $x\in\mathbb{R}^n$, on définit la famille des **normes ℓ^q** (aussi appelées **normes q-adiques** ou **normes de Schatten pour les matrices**) par

$$\|x\|_q \equiv \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^q\right)^{1/q}, \qquad q\in\mathbb{R}^*\equiv]0,\infty],$$

et la norme limite

$$\|x\|_\infty = \max_{1\le i\le n}|x_i|.$$

Ces normes sont toutes équivalentes au sens des espaces de Banach de dimension finie. Dans notre cas, nous mesurons la différence entre deux matrices C_w et χ_w. Les normes matricielles usuelles associées aux normes vectorielles ci-dessus sont :

$$\|A\|_1 = \max_j\sum_i |A_{ij}|, \qquad \|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^\top A)}, \qquad \|A\|_\infty = \max_i\sum_j |A_{ij}|,$$

où $\lambda_{\max}(A^\top A)$ est la plus grande valeur propre de la matrice $A^\top A$, et $A^\top$ est la transposée de A. Nous choisissons la norme ℓ^2 car elle correspond à la **plus grande valeur singulière**, ce qui fournit une mesure robuste et géométriquement naturelle de la « taille » d'une déformation linéaire. La norme ℓ^1 ou ℓ^∞ auraient pu être utilisées également : la première est plus sensible aux fluctuations colonne par colonne, tandis que la seconde est contrôlée par la distribution ligne par ligne. Le choix de la norme ℓ^2 est ici motivé par sa symétrie **invariance orthogonale** et son usage standard dans la comparaison matricielle.

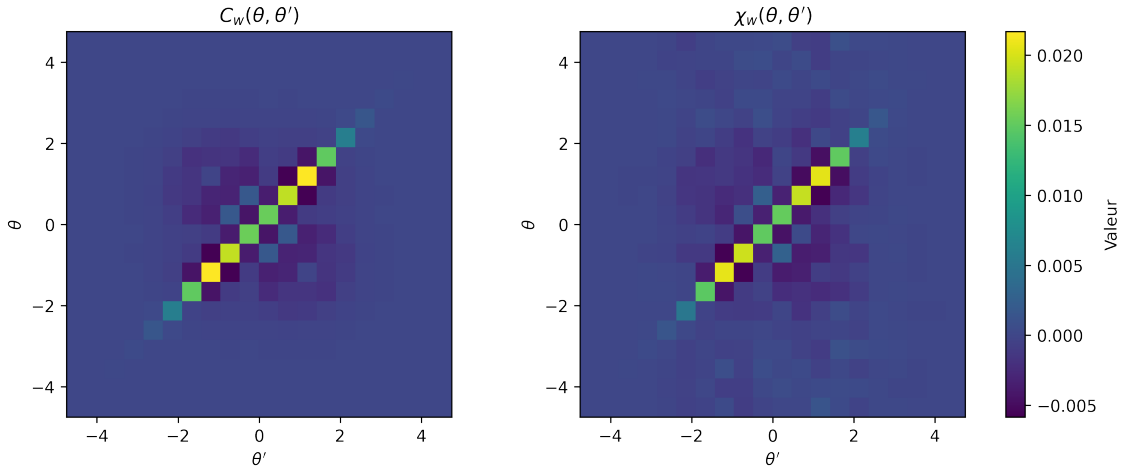


Figure IV.1 – Comparaison des matrices pour $\langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta')\rangle_w$: à gauche la corrélation $C_w(\theta, \theta')$; à droite la susceptibilité $\chi_w(\theta, \theta')$ obtenue par dérivée fonctionnelle pour $N_{\text{conf}} = 2 \times 10^6$ et $\varepsilon = 10^{-1}$.

A-3–v Discussion. Les figures montrent une concordance satisfaisante entre les deux matrices. L'écart relatif est d'environ 13,5 %, et provient principalement des erreurs statistiques liées à la méthode *Monte Carlo* et de l'approximation par différences finies dans le calcul de la dérivée fonctionnelle.

Le principe de fluctuation-réponse dans le cadre du GGE étant supposé valide, l'objectif de cette analyse n'est pas de le confirmer, mais de vérifier que l'on reste en capacité d'échantillonner correctement les fluctuations à partir de $\chi_w(\theta, \theta')$ avec un nombre fini de configurations. L'erreur relative observée est donc acceptable et reflète les limites statistiques de l'expérience numérique.

La précision peut être améliorée en augmentant le nombre de configurations N_{conf} :

- Dans ce point, les symboles de Landau $O(\cdot)$ désignent ici des *complexités en temps de calcul*. Le calcul de la matrice de corrélation $C_w(\theta, \theta')$ s'effectue en un temps de complexité $O(N_{\text{conf}})$, tandis que celui de la susceptibilité $\chi_w(\theta, \theta')$ nécessite un temps de complexité $O(N_{\text{conf}} \cdot N_{\text{cell}})$, où N_{cell} est le nombre de points de discrétisation de la variable θ.
- Pour un nombre de configurations*Monte Carlo* fixé à $N_{\text{conf}} = 2 \times 10^6$ et une grille de taille $N_{\text{cell}} = 20$, on obtient un temps de calcul d'environ 6 minutes pour la matrice $C_w(\theta, \theta')$, tandis que le calcul de $\chi_w(\theta, \theta')$, plus coûteux car nécessitant l'évaluation d'une réponse à une perturbation sur chaque cellule, demande environ 2 heures.
- Si l'on augmente le nombre de configurations à $N_{\text{conf}} = 10^7$, ce qui permet de réduire plus fortement le bruit statistique, alors le calcul de $C_w(\theta, \theta')$ prendrait environ 30 minutes, tandis que celui de $\chi_w(\theta, \theta')$ nécessiterait approximativement 10 heures, en raison du facteur multiplicatif supplémentaire lié à la grille $\theta \mapsto \theta_i$.

Pour de petits N_{conf}, la perturbation ε doit être augmentée pour que les fluctuations calculées ne soient pas noyées dans le bruit. Si ε est trop grand, on observe toujours la structure globale de $\chi_w(\theta, \theta')$, mais avec une amplitude réduite :

$$\chi_w(\theta, \theta') \approx \alpha C_w(\theta, \theta'), \quad 0 < \alpha < 1.$$

Par exemple, pour $N_{\text{conf}} = 10^5$, la mesure (IV.37) est de 8%. On peut utiliser $N_{\text{cell}} = 100$ et $\varepsilon = 1$, et obtenir :

$$\frac{\|\alpha C_w - \chi_w\|_2}{\|\alpha C_w\|_2} \sim 27\%$$

avec $\alpha = 0.078$ et pour un temps de calcul de 26 *min* (Fig IV.2).

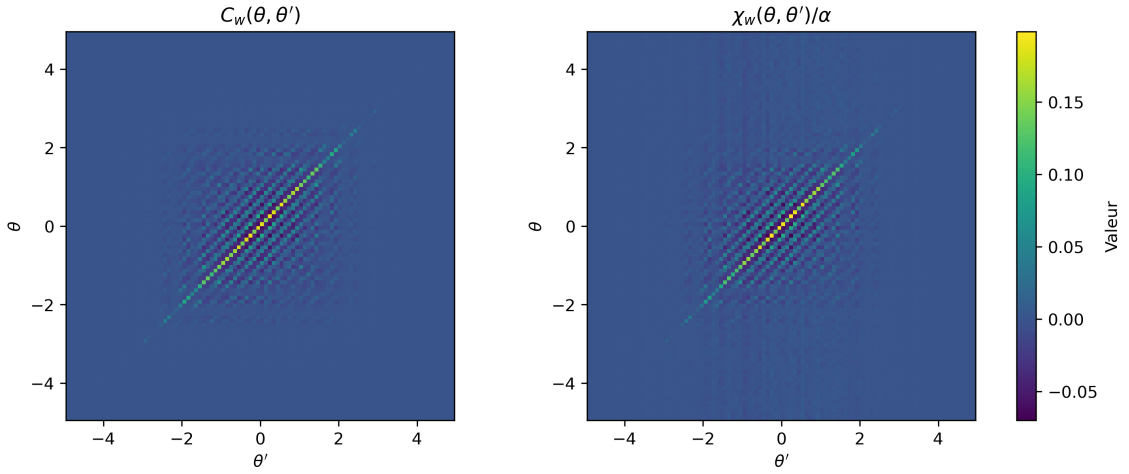


FIGURE IV.2 – Comparaison des matrices pour $\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta')\rangle_w$: à gauche la corrélation $C_w(\theta,\theta')$; à droite la susceptibilité $\chi_w(\theta,\theta')/\alpha$ obtenue par dérivée fonctionnelle, pour $N_{\text{cell}} = 100$, $\varepsilon = 1$ et $\alpha = 0.078$.

Physiquement, $\alpha < 1$ reflète le fait que pour un nombre limité de configurations, la réponse calculée par différences finies sous-estime légèrement l'amplitude des fluctuations par rapport à la covariance brute C_w, mais la structure globale reste correcte. En augmentant N_{conf}, $\alpha \to 1$ et $\chi_w(\theta,\theta')$ converge vers $C_w(\theta,\theta')$ dans la limite des grandes statistiques.

B Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilité

B-1 Susceptibilité spectrale et structure variationnelle de l'entropie

B-1–i Rappel : Approche thermodynamique (Yang–Yang et énergie généralisée). Dans l'approximation thermodynamique, le sous-système est décrit en termes de grandeurs macroscopiques, notamment par la distribution de rapidité $\rho(\theta)$. Dans l'équation (II.48), nous avons vu que, dans la limite thermodynamique, la moyenne d'une observable s'écrit :

$$\langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_w = \frac{\int \mathcal{D}\rho\; e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho]-\mathcal{W}[\rho])}\,\langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{[\rho]}}{\int \mathcal{D}\rho\; e^{L(\mathcal{S}_{YY}[\rho]-\mathcal{W}[\rho])}}. \tag{IV.40}$$

où $\mathcal{S}_{YY}$ est l'entropie de YY et $\mathcal{W}$ l'énergie généralisée, introduites respectivement dans (II.46) et (II.47), que l'on rappelle.

$$\mathcal{S}_{YY}[\rho] = \int d\theta\,[\rho_s\ln\rho_s - \rho\ln\rho - (\rho_s-\rho)\ln(\rho_s-\rho)](\theta), \tag{IV.41}$$

$$\mathcal{W}[\rho] = \int w(\theta)\rho(\theta)\,d\theta, \tag{IV.42}$$

où $\rho_s(\theta)$ désigne la *densité d'états* liée à ρ par les équations de BA (I.88) :

$$2\pi\rho_s = 1 + \Delta\star\rho. \tag{IV.43}$$

La quantité $\langle\hat{\boldsymbol{O}}\rangle_{[\rho]}$ désigne la valeur propre de l'observable associée aux états caractérisés par la distribution de rapidité ρ.

B-1–ii Rappel : Condition variationnelle du GGE. À l'équilibre thermodynamique ; dans la limite $L \to \infty$, la distribution $\rho_{\rm eq}(\theta)$ satisfait l'équation (II.35), et coïncide alors avec la moyenne de l'opérateur de densité de rapidité :

$$\rho_{\rm eq}(\theta) = \langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta) \rangle_w \,, \tag{IV.44}$$

représentant ainsi la densité continue de quasi-particules dans l'état stationnaire / d'équilibre.

Dans le cadre du GGE continu, l'état macroscopique est entièrement déterminé par la densité spectrale $\rho(\theta)$ qui maximise l'entropie de Yang–Yang, $\mathcal{S}_{\rm YY}[\rho]$, sous la contrainte de conservation des charges généralisées. Le poids spectral $w(\theta)$ est alors fixé. Comme nous l'avons vu (au chapitre (II)), la condition d'équilibre (II.57) peut s'écrire sous la forme variationnelle :

$$\left.\frac{\delta \mathcal{S}_{\rm YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta)}\right)_{\rho=\rho_{\rm eq}} = w(\theta). \tag{IV.45}$$

B-1–iii Dérivée fonctionnelle. On peut considérer l'équation d'équilibre comme une relation implicite définissant le poids spectral w comme une fonctionnelle de la distribution de rapidité ρ. La dérivée fonctionnelle de cette relation s'écrit :

$$\left.\frac{\delta w(\theta)}{\delta \rho(\theta')}\right)_{\rho=\rho_{\rm eq}} = \left.\frac{\delta^2 \mathcal{S}_{\rm YY}[\rho]}{\delta\rho(\theta)\,\delta\rho(\theta')}\right)_{\rho=\rho_{\rm eq}}, \tag{IV.46}$$

où le membre de droite représente l'opérateur hessien (ou courbure fonctionnelle) de l'entropie de YY, évalué à l'équilibre. Cet opérateur est défini négatif, conformément à l'interprétation de $\mathcal{S}_{\rm YY}$ comme une entropie à maximiser.

B-1–iv Inversion. On en déduit que la réponse de ρ à une variation infinitésimale du poids spectral w est donnée par l'inverse fonctionnel de (IV.46) :

$$-\frac{1}{L}\left.\frac{\delta\rho(\theta)}{\delta w(\theta')}\right)_{\rho=\rho_{\rm eq}} = -\left(L\left.\frac{\delta^2 \mathcal{S}_{\rm YY}[\rho]}{\delta\rho(\theta)\,\delta\rho(\theta')}\right)_{\rho=\rho_{\rm eq}}\right)^{-1}. \tag{IV.47}$$

La susceptibilité fonctionnelle $\chi_w(\theta,\theta')$, définie dans (IV.20), coïncide avec cette expression.

B-2 Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique

Une autre approche pour accéder aux fluctuations de la distribution de rapidité $\rho = \rho_{\rm eq} + \delta\rho$ est d'étudier la structure variationnelle de l'action effective $\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}$ autour du point d'équilibre $\rho_{\rm eq}$. En effet, par définition de ce point d'équilibre, toute variation infinitésimale $\delta\rho$ satisfait [Whend] :

$$(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{\rm eq} + \delta\rho] = \exp\{\mathscr{D}_{[\delta\rho]}\}\left((\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{\rm eq}]\right).$$

Dans la limite thermodynamique, l'intégrale fonctionnelle définissant le GGE est dominée par les configurations proches de l'extremum $\rho_{\rm eq}$. Cette approximation, dite gaussienne, repose alors sur le développement quadratique de la *fonction thermodynamique effective* $\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}$ en $\delta\rho$.

On peut ainsi développer la *fonction thermodynamique effective* $\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}$ au second ordre autour de ce point d'équilibre :

$$(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho] \approx (\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{\rm eq}] - \frac{1}{2}\int d\theta d\theta' \,\delta\rho(\theta)\mathcal{H}(\theta,\theta')\delta\rho(\theta') + O(\delta\rho^3) \tag{IV.48}$$

où $\mathcal{H}(\theta,\theta') = -\left.\dfrac{\delta^2(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho]}{\delta\rho(\theta)\,\delta\rho(\theta')}\right)_{\rho=\rho_{\rm eq}}$ est la *matrice hessienne* de la *fonction thermodynamique effective*.

Sous l'approximation gaussienne autour de l'état d'équilibre (en particulier lorsque $L \to \infty$, cf. Fig. IV.3), la covariance des fluctuations s'exprime comme suit :

$$\begin{aligned}\langle \delta\rho(\theta)\,\delta\rho(\theta')\rangle_w &= \frac{\displaystyle\int \mathcal{D}\delta\rho\ \delta\rho(\theta)\,\delta\rho(\theta')\ \exp\left[-\frac{L}{2}\iint d\theta_1 d\theta_2\ \delta\rho(\theta_1)\,\mathcal{H}(\theta_1,\theta_2)\,\delta\rho(\theta_2)\right]}{\displaystyle\int \mathcal{D}\delta\rho\ \exp\left[-\frac{L}{2}\iint d\theta_1 d\theta_2\ \delta\rho(\theta_1)\,\mathcal{H}(\theta_1,\theta_2)\,\delta\rho(\theta_2)\right]}, \\ &= (L\mathcal{H})^{-1}(\theta,\theta'),. \end{aligned} \tag{IV.49}$$

Ces relations posent les bases d'une description quantifiée des fluctuations de densité de rapidité, essentielles pour tester expérimentalement la validité du GGE, particulièrement pour la mesure des corrélations à longue distance, et accéder aux propriétés dynamiques fines des systèmes intégrables en une dimension.

Ce développement quadratique justifie le caractère gaussien des fluctuations dans le régime thermodynamique, et sera à la base des extensions hydrodynamiques de type Macroscopic Fluctuation Theory (MFT).

B-2–i Structure de $\mathcal{H}$. L'opérateur hessien de l'action effective se décompose naturellement comme la différence entre deux contributions fonctionnelles :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(\mathcal{W})} - \mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{\rm YY})}, \tag{IV.50}$$

$$\text{où}\quad \mathcal{H}^{(\mathcal{W})}(\theta,\theta') \doteq \frac{\delta^2\mathcal{W}[\rho]}{\delta\rho(\theta)\,\delta\rho(\theta')}\bigg)_{\rho=\rho_{\rm eq}}, \quad \text{et}\quad \mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{\rm YY})}(\theta,\theta') \doteq \frac{\delta^2\mathcal{S}_{\rm YY}[\rho]}{\delta\rho(\theta)\,\delta\rho(\theta')}\bigg)_{\rho=\rho_{\rm eq}}. \tag{IV.51}$$

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

$$(\mathcal{H}^{-1}\cdot\mathcal{H})(\theta,\theta') = (\mathcal{H}\cdot\mathcal{H}^{-1})(\theta,\theta') = \int d\theta''\ \mathcal{H}(\theta,\theta'')\,\mathcal{H}^{-1}(\theta'',\theta') = \delta(\theta-\theta'), \tag{IV.52}$$

où $\delta(\theta-\theta')$ désigne la distribution de Dirac, et non une variation.

On remarque tout d'abord que $\mathcal{H}^{(\mathcal{W})} = 0$, car l'énergie généralisée par unité de longueur s'écrit simplement comme un couplage linéaire en ρ avec un poids spectral $w(\theta)$ fixé (IV.42).

La courbure fonctionnelle provient donc entièrement de l'entropie de YY, donnée par l'expression (IV.41).

Ainsi, l'opérateur de fluctuation $\mathcal{H}$ coïncide avec la hessienne négative de l'entropie $\mathcal{S}_{\rm YY}$, et détermine complètement la covariance spectrale à l'équilibre.

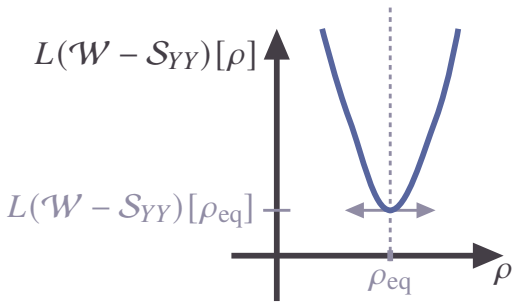


FIGURE IV.3 – Représentation schématique de l'action effective $L(\mathcal{S}_{YY}[\rho]-\mathcal{W}[\rho])$ en fonction de la distribution de rapidité ρ. La configuration la plus probable, (associée à $\rho_{\rm eq}$) , correspond au minimum (extremum) de l'action. Les fluctuations autour de l'équilibre sont modélisées par un développement quadratique de l'action, conduisant à une approximation gaussienne des fluctuations de ρ. Pour faciliter la compréhension, on représente ici ρ comme une variable unidimensionnelle, alors qu'en réalité il s'agit d'une fonction définie dans un espace de dimension infinie.

B-3 Expression de la Hessienne

En calculant la dérivée fonctionnelle seconde de l'entropie de YY, définie en (IV.41), dans la direction d'une variation $\delta\rho$, on obtient l'opérateur hessien $\mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{\rm YY})}$. L'opérateur hermien $\mathcal{H}$ est donné par $\mathcal{H} = -\mathcal{H}^{(\mathcal{S}_{\rm YY})}$, et se décompose comme suit :

$$\mathcal{H}(\theta,\theta') \;=\; \mathcal{D}(\theta,\theta') + \mathcal{V}(\theta,\theta') \tag{IV.53}$$

La contribution diagonale locale, notée $\mathcal{D}(\theta,\theta')$, présente une singularité caractéristique d'une structure de type Fermi–Dirac. Elle reflète l'exclusion statistique effective induite par l'intégrabilité, y compris dans un système bosonique. Elle s'écrit :

$$\mathcal{D}(\theta,\theta') \;=\; \left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta)\nu_{eq}(\theta)(1-\nu_{eq}(\theta))}\right)\delta(\theta,\theta'). \tag{IV.54}$$

La partie régulière symétrique, notée $\mathcal{V}(\theta,\theta')$, regroupe quant à elle les contributions non locales issues des interactions entre quasi-particules.

$$\left.\begin{aligned}\mathcal{V}(\theta,\theta') \;=\; & -\left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta)(1-\nu_{eq}(\theta))}+\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta')(1-\nu_{eq}(\theta'))}\right)\frac{\Delta(\theta-\theta')}{2\pi}\\ & +\int d\theta''\,\frac{\nu_{eq}(\theta'')}{\rho_{s,eq}(\theta'')(1-\nu_{eq}(\theta''))}\,\frac{\Delta(\theta-\theta'')}{2\pi}\,\frac{\Delta(\theta''-\theta')}{2\pi}\end{aligned}\right\} \tag{IV.55}$$

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

B-4 Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne

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

$$\mathcal{H}^{-1}(\theta,\theta') \;=\; \mathcal{D}^{-1}(\theta,\theta') + \mathcal{B}(\theta,\theta') \tag{IV.56}$$

avec une partie diagonale sans interaction

$$\mathcal{D}^{-1}(\theta,\theta') \;=\; (\rho_{s,eq}(\theta)\nu_{eq}(\theta)(1-\nu_{eq}(\theta)))\delta(\theta,\theta') \tag{IV.57}$$

tel que

$$(\mathcal{D}^{-1}\cdot\mathcal{D})(\theta,\theta') = (\mathcal{D}\cdot\mathcal{D}^{-1})(\theta,\theta') = \int d\theta''\;\mathcal{D}(\theta,\theta'')\,\mathcal{D}^{-1}(\theta'',\theta') = \delta(\theta-\theta'), \tag{IV.58}$$

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

À partir des équations (IV.53) , (IV.56) , (IV.52) et (IV.58) , il vient que cette série d'équivalences

$$\left\{\begin{array}{rcl}\mathcal{H}\cdot\mathcal{H}^{-1} &=& \delta\\ \mathcal{H}^{-1}\cdot\mathcal{H} &=& \delta\end{array}\right. \textit{i.e.} \left\{\begin{array}{rcl}\mathcal{H}\cdot\mathcal{B} &=& -\mathcal{V}\cdot\mathcal{D}^{-1}\\ \mathcal{B}\cdot\mathcal{H} &=& -\mathcal{D}^{-1}\cdot\mathcal{V}\end{array}\right. \textit{i.e.} \left\{\begin{array}{rcl}\mathcal{B} &=& -\mathcal{H}^{-1}\cdot\mathcal{V}\cdot\mathcal{D}^{-1}\\ \mathcal{B} &=& -\mathcal{D}^{-1}\cdot\mathcal{V}\cdot\mathcal{H}^{-1}\end{array}\right.$$

Du fait que toutes ces fonctions ($\mathcal{H}$, $\mathcal{D}$, $\mathcal{V}$ et inverse) soit symétriques, les équations ci-dessus sont tous équivalentes et $\mathcal{B}$ étant donc symétrique. Ainsi en utilisant (IV.55) et (IV.57)

$$\begin{aligned}\mathcal{B}(\theta,\theta') \;&=\; -(\mathcal{D}^{-1}\cdot\mathcal{V}\cdot\mathcal{H}^{-1})(\theta,\theta'), \qquad\qquad (\text{IV.59})\\ &=\; (\rho_{s,eq}(\theta)\nu_{eq}(\theta)(1-\nu_{eq}(\theta)))\times\\ &\qquad \left\{\frac{\Delta}{2\pi}\star\left[\left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta)(1-\nu_{eq}(\theta))}+\frac{1}{\rho_{s,eq}(\cdot)(1-\nu_{eq}(\cdot))}\right)\mathcal{H}^{-1}(\cdot,\theta')\right.\right.\\ &\qquad\qquad \left.\left.-\frac{\nu_{eq}(\cdot)}{\rho_{s,eq}(\cdot)(1-\nu_{eq}(\cdot))}\;\left(\frac{\Delta}{2\pi}\star\mathcal{H}^{-1}(\cdot,\theta')\right)\right]\right\}(\theta),\end{aligned}$$

où $(f\star g)(x)$ désigne la convolution définie par $(f\star g)(x) = \int f(x-t)\,g(t)\,dt$, l'intégration portant explicitement sur la variable t. En injectant cette dernière équation ainsi que (IV.56) dans (IV.49), on obtient

l'équation implicite suivante :

$$\begin{aligned}(L\mathcal{H})^{-1}(\theta,\theta') \;=\; & (L\mathcal{D})^{-1}(\theta,\theta')+ \\ & \tfrac{1}{L}(\rho_{s,eq}(\theta)\nu_{eq}(\theta)(1-\nu_{eq}(\theta)))\times \\ & \left\{\frac{\Delta}{2\pi}\star\left[\left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta)(1-\nu_{eq}(\theta))}+\frac{1}{\rho_{s,eq}(\cdot)(1-\nu_{eq}(\cdot))}\right)\mathcal{H}^{-1}(\cdot,\theta')\right.\right. \\ & \left.\left.-\frac{\nu_{eq}(\cdot)}{\rho_{s,eq}(\cdot)(1-\nu_{eq}(\cdot))}\left(\frac{\Delta}{2\pi}\star\mathcal{H}^{-1}(\cdot,\theta')\right)\right]\right\}(\theta),\end{aligned} \tag{IV.60}$$

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 $\rho(\theta)$. Une dérivation alternative est exposée en annexe D.

B-5 Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle

Dans cette sous-section, nous proposons de tester l'expression (IV.49) .

B-5-a Méthode.

B-5-a-i Calcul de la matrice hessienne On considère un gaz de bosons unidimensionnels intégrable, décrit par l'équation de BA, dans un état d'équilibre généralisé caractérisé par la *taille du sous-système* L, l'*intensité d'interaction* g, et un *poids spectral* fixé $w(\theta)$.

À partir de ces paramètres, on résout numériquement les *équations* TBA (cf (II.60)), ce qui permet d'obtenir les grandeurs thermodynamiques d'équilibre :

- la *distribution de rapidité* $\rho_{\mathrm{eq}}(\theta)$,
- la *densité d'états* $\rho_{s,\mathrm{eq}}(\theta)$
- et la *fonction d'occupation* $\nu_{\mathrm{eq}}(\theta)=\rho_{\mathrm{eq}}(\theta)/\rho_{s,\mathrm{eq}}(\theta)$.

Ces quantités permettent ensuite de construire :

- la contribution diagonale singulière $\mathcal{D}(\theta,\theta')$, définie par (IV.54), ainsi que son inverse $\mathcal{D}^{-1}(\theta,\theta')$ (voir (IV.57)) ;
- la contribution régulière non locale $\mathcal{V}(\theta,\theta')$, définie par (IV.55).

La matrice de fluctuations $\mathcal{H}(\theta,\theta')$, définie par (IV.53), est obtenue en combinant ces deux contributions. Son inverse $\left(L\mathcal{H}\right)^{-1}(\theta,\theta')$ s'obtient en inversant directement la matrice $L\mathcal{H}(\theta,\theta')$.

La partie avec interaction, $\mathcal{B}(\theta,\theta')/L$ (définie par (IV.59)), peut être déterminée de deux façons équivalentes : soit en soustrayant la partie sans interaction (diagonale), $(L\mathcal{D})^{-1}(\theta,\theta')$, de l'inverse $\left(L\mathcal{H}\right)^{-1}(\theta,\theta')$, soit directement en utilisant (IV.59).

B-5-a-ii Susceptibilité. Le membre de gauche de l'équation (IV.47), à savoir

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

peut être évalué numériquement sans avoir à recourir à l'entropie de YY. Il suffit en effet de calculer la variation de la *distribution de rapidité à l'équilibre* $\rho_{\mathrm{eq}}(\theta)$ en réponse à une petite perturbation ε du *poids spectral* $w(\theta')$ (voir(IV.39)).

B-5-b Dans un équilibre thermodynamique généralisé

Paramètres fixés. On fixe *un poids spectral* , par exemple quadratique

$$w(\theta)=\tfrac{1}{2}\theta^2, \tag{IV.61}$$

et on fixe les paramètres physiques du sous-système : $L=10$, et $g=1$.

Le nombre de particules N est fixé par ces paramètres, contrairement aux simulations de la partie *Monte-Carlo* considéré dans la section précédente.

On fait ce calcul numérique avec $\varepsilon = 10^{-10}$ suffisamment petit pour que l'approximation (IV.39) soit vérifiée.

B-5-b-i Comparaison. Nous obtenons deux matrices $(L\mathcal{H})^{-1}(\theta,\theta')$ et $\chi_w(\theta,\theta')$ (Fig (IV.4)). Afin de tester la validité l'expression (IV.60), nous quantifions leur similarité, en calculant une *norme relative* en utilisant la norme ℓ^2 :

$$\frac{\left\|(L\mathcal{H})^{-1} - \chi_w\right\|_2}{\left\|(L\mathcal{H})^{-1}\right\|_2} = 0.015\%.$$

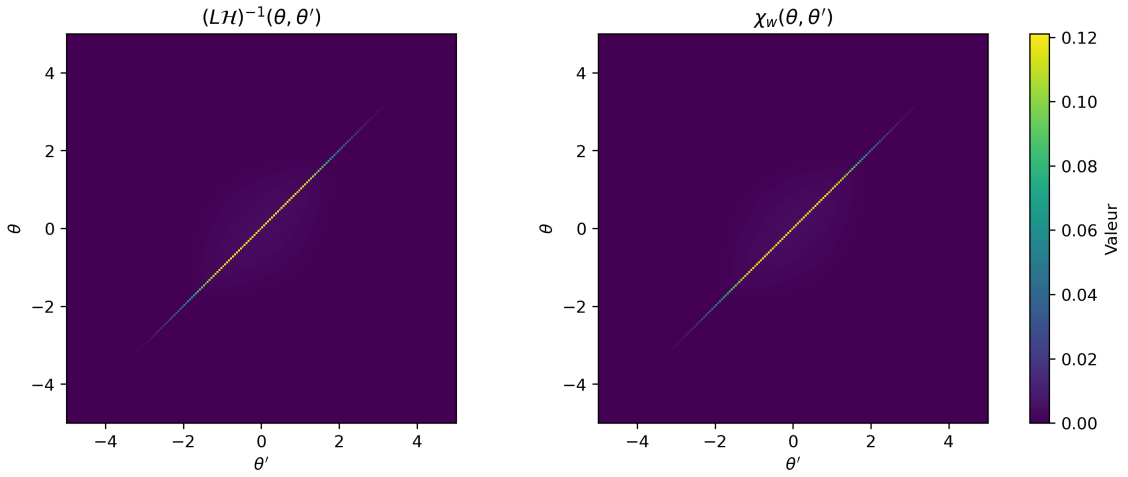


Figure IV.4 – Vérification numérique dans le régime thermodynamique. Gauche : $(L\mathcal{H})^{-1}$ par inversion de la courbure. Droite : χ_w par dérivée fonctionnelle.

B-5-b-ii Conclusion. Nous avons vérifié la formule (IV.60) de deux manières. D'une part, en évaluant directement à un *poids spectral* w fixé $(L\mathcal{H})^{-1}$; d'autre part, en calculant la différentielle de la distribution de rapidité par rapport au poids spectral χ_w, c'est-à-dire en appliquant le principe de fluctuation–réponse. Pour le *poids spectral* et les paramètres considérés, les deux approches donnent des résultats numériques concordants, ce qui constitue une validation de la formule (IV.60).

Dans un second temps, il est naturel de vouloir tester ce principe pour différentes formes du *poids spectral* w. Dans le cas général du GGE, w appartient à un espace de dimension infinie. Afin de réduire cette complexité, nous nous restreignons à une sous-famille à deux paramètres, en nous plaçant dans le cadre de l'équilibre thermique. Ce choix permet de comparer explicitement les fluctuations de grandeurs thermodynamiques macroscopiques, telles que le nombre total de particules et l'énergie cinétique.

B-5-c Vérification numérique thermique : énergie et nombre de particules

Nous testons à présent notre expression des fluctuations dans le cas particulier de l'équilibre thermique. Le sous-système est supposé en contact avec un bain à température T et potentiel chimique μ.

B-5-c-i Calcul de la matrice hermitienne. Dans la section B-2–x, nous avons présenté les différentes étapes de la résolution numérique de l'équation de TBA. Nous reprenons ici le formalisme de l'équation (IV.23), dans lequel le poids spectral s'écrit comme une combinaison linéaire :

$$w(\theta) = \beta_0 f_0(\theta) + \beta_2 f_2(\theta), \tag{IV.62}$$

où $f_0(\theta) = 1$ et $f_2(\theta) = \frac{1}{2}m\theta^2$ correspondent aux densités locales associées aux charges conservées. Les coefficients $\beta_0 = -\beta\mu$ et $\beta_2 = \beta(= (k_B T)^{-1})$ sont fixés de manière à imposer une température T et un potentiel chimique μ.

Le **paramètre de Lieb** et la **température réduite**, définis respectivement en (II.64) et (II.67),

$$\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 n}, \qquad t = \frac{\hbar^2}{m\beta g^2},$$

permettent également de paramétrer le couple (T, μ) (voir section B-2–x).

Information

On rappelle que le paramètre de Lieb γ caractérise la force d'interaction relative entre les particules, tandis que la température réduite t quantifie l'importance des effets thermiques par rapport aux interactions. En variant ces deux paramètres, on explore différents régimes physiques du système.

Information

Dans cette continuité, nous allons définir des unités naturelles adaptées au système étudié. Ces unités facilitent l'interprétation physique des résultats numériques en les reliant directement aux grandeurs expérimentales.

Conversion vers les unités réelles. Mais avant pour faciliter la comparaison avec les expériences, nous allons définir des unités caractéristiques :

$$\ell_0 = \frac{\hbar^2}{mg}, \quad \text{(longueur)} \tag{IV.63}$$

$$\tau_0 = \frac{m\ell_0^2}{\hbar}, \quad \text{(temps)} \tag{IV.64}$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{mL_0^2}, \quad \text{(énergie)} \tag{IV.65}$$

$$T_0 = \frac{E_0}{k_B}, \quad \text{(température).} \tag{IV.66}$$

Mes résultats numériques sont exprimés en unités naturelles adimensionnées. Pour revenir aux valeurs réelles, il suffit de les multiplier par les unités caractéristiques définies ci-dessus.

Paramètres fixes. Dans toute la suite, nous travaillons avec les conventions naturelles $\hbar = m = k_B = 1$, ainsi qu'avec

$$L = 10, \qquad g = 1.$$

Choix des paramètres. Nous considérons le point

$$\gamma = 0.02, \qquad t = 70,$$

qui est représenté par un **point rouge** dans le diagramme de phase du modèle de LL, présenté en figure IV.5a.

Information

Les paramètres choisis ne sont pas arbitraires : ils sont proches des régimes expérimentaux que nous considérons. La taille du sous-système L est en unité réelle de $22\,\mu m$, la densité linéaire n est de l'ordre de $23\,\mu m^{-1}$ et la température T est d'environ $81\,nK$.

À partir de ce paramètre, et suivant la même procédure numérique que dans la sous-section précédente, on obtient la distribution de rapidité à l'équilibre $\langle \hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta) \rangle_w \equiv \rho_{\text{eq}}(\theta)$, ainsi que les composantes de l'inverse de l'opérateur hessien $(L\mathcal{H})^{-1}$: la contribution diagonale sans interaction $(L\mathcal{D})^{-1}$ (Fig. IV.5b) et la contribution non locale issue des interactions $\mathcal{B}/L$ (Fig. IV.5c).

Plus précisément, dans la figure IV.5b, on représente

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

la fonction delta dans (IV.57) étant approximée numériquement par un pas de discrétisation, la matrice $\mathcal{D}^{-1}$ est proportionnelle à ce pas.

Enfin, en faisant varier t (*i.e.* la température T), on répète l'ensemble des calculs précédents. Les régimes ainsi obtenus sont indiqués par des **points bleus** dans le diagramme de phase (figure IV.5a).

B-5-c-ii Corrélation des observables thermodynamiques. Conformément à l'équation (IV.30), nous calculons les fluctuations du nombre total de particules ainsi que celles de l'énergie totale, respectivement données par :

$$C_w[f_0,f_0] \;=\; L^2 \iint d\theta\, d\theta'\; f_0(\theta)\,(L\mathcal{H})^{-1}(\theta,\theta')\,f_0(\theta'), \tag{IV.67}$$

$$C_w[f_2,f_2] \;=\; L^2 \iint d\theta\, d\theta'\; f_2(\theta)\,(L\mathcal{H})^{-1}(\theta,\theta')\,f_2(\theta'). \tag{IV.68}$$

Pour chaque régime simulé (correspondant aux **points bleus** et **rouge** sur la figure (IV.5a)), nous évaluons numériquement les quantités $C_w[f_0,f_0]$ et $C_w[f_2,f_2]$, qui représentent les fluctuations extensives des observables associées aux charges $\hat{\boldsymbol{Q}}_0$ (nombre de particules) et $\hat{\boldsymbol{Q}}_2$ (énergie cinétique).

Ces résultats sont représentés par des **points rouges** dans la figure IV.6, illustrant l'évolution des fluctuations en fonction du régime thermodynamique du sous-système.

B-5-c-iii Susceptibilité des observables thermodynamiques. En parallèle, pour chaque régime simulé (correspondant aux **points bleus** et **rouge** de la figure (IV.5a)), et conformément à l'équation (IV.29), nous calculons les moyennes des charges associées au nombre total de particules et à l'énergie cinétique totale, données respectivement par :

$$\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_0]\rangle_w \;=\; L\int d\theta\; f_0(\theta)\;\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w\,, \tag{IV.69}$$

$$\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_2]\rangle_w \;=\; L\int d\theta\; f_2(\theta)\;\langle\hat{\boldsymbol{\rho}}(\theta)\rangle_w\,. \tag{IV.70}$$

Nous souhaitons ensuite évaluer les susceptibilités thermodynamiques définies par :

$$\chi_w[f_i,f_i] \;=\; -\left.\frac{\partial\,\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_i]\rangle_w}{\partial\beta_i}\right)_{\beta_{j\neq i}\ \text{fixés}}. \tag{IV.71}$$

Pour cela, nous procédons à une variation infinitésimale du poids spectral w :

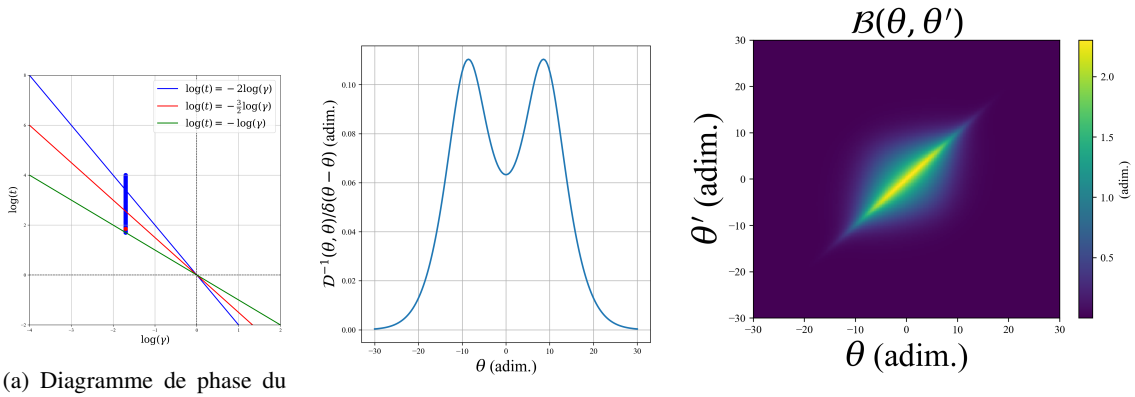
- Une variation infinitésimale ϵ_μ du potentiel chimique μ correspond à une perturbation du poids spectral de la forme :
$$w \longrightarrow w - \beta\epsilon_\mu f_0.$$
On résout alors numériquement les équations TBA pour ce nouveau poids, afin de calculer :
$$\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_0]\rangle_{w-\beta\epsilon_\mu f_0}\,.$$
- On effectue ensuite une variation infinitésimale ϵ_β de l'inverse de la température, de sorte que la combinaison $(\beta+\epsilon_\beta)(\mu+\epsilon_\mu) = \beta\mu$ reste constante, maintenant ainsi β_0 fixe. Cela conduit à une variation du poids spectral de la forme :
$$w \longrightarrow w + (\beta+\epsilon_\beta)(-\epsilon_\mu f_0 + f_2).$$
On résout à nouveau les équations TBA pour obtenir :
$$\langle\hat{\boldsymbol{Q}}[f_2]\rangle_{w+(\beta+\epsilon_\beta)(-\epsilon_\mu f_0+f_2)}\,.$$

Ces simulations permettent d'estimer numériquement les susceptibilités :

$$\chi_w[f_0, f_0] \approx \frac{\langle \hat{\boldsymbol{Q}}[f_0]\rangle_{w-\beta\epsilon_\mu f_0} - \langle \hat{\boldsymbol{Q}}[f_0]\rangle_w}{\beta\epsilon_\mu}, \tag{IV.72}$$

$$\chi_w[f_2, f_2] \approx -\frac{\langle \hat{\boldsymbol{Q}}[f_2]\rangle_{w+(\beta+\epsilon_\beta)(-\epsilon_\mu f_0+f_2)} - \langle \hat{\boldsymbol{Q}}[f_2]\rangle_w}{\epsilon_\beta}. \tag{IV.73}$$

Ces approximations numériques sont représentées par des **points bleus** dans la figure (IV.6), et permettent de comparer les résultats issus de la dérivée fonctionnelle avec ceux provenant de la réponse directe à une perturbation du poids spectral.



(a) Diagramme de phase du modèle de Lieb-Liniger.

(b) $\mathcal{D}^{-1}(\theta,\theta)/\delta(\theta,\theta)$.

(c) $\mathcal{B}(\theta,\theta')$.

FIGURE IV.5 – (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 $t = \frac{k_B T}{mg^2/\hbar^2}$. Les régimes choisis pour les simulations sont indiqués par les points bleus ($\gamma = 0.02$ constant) et le point rouge correspond à $t = 70$, utilisé dans les sous-figures (b) et (c). (b) Représentation de la diagonale $\mathcal{D}^{-1}(\theta,\theta)/\delta(\theta,\theta)$. (c) Représentation en niveaux de couleur de la partie régulière $\mathcal{B}$ des fluctuations de$\delta\rho$ pour $t = 70$ et $\gamma = 0.02$ (point rouge dans (a)).

B-5-c-iv Comparaison avec les dérivées thermodynamiques. Les résultats obtenus à partir de l'analyse quadratique de l'action (fluctuations de ρ) sont comparés aux fluctuations extraites directement par différentiation des observables thermodynamiques $\langle \hat{\boldsymbol{Q}}\rangle_w$ et $\langle \hat{\boldsymbol{H}}\rangle_w$. Ces comparaisons sont présentées dans la Fig. IV.6 et révèlent une excellente concordance. On le quantifie avec :

$$\left|\frac{C_w[f_0, f_0] - \chi_w[f_0, f_0]}{C_w[f_0, f_0]}\right| < 0.004\%, \quad \left|\frac{C_w[f_2, f_2] - \chi_w[f_2, f_2]}{C_w[f_2, f_2]}\right| < 0.14\%.$$

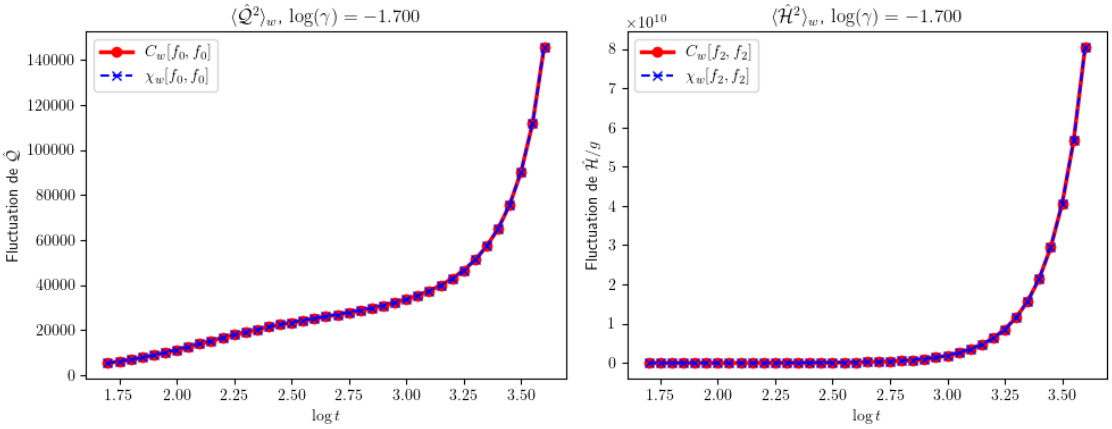


FIGURE IV.6 – Comparaison numérique entre $C_w[f_0, f_0]$ et $\chi_w[f_0, f_0]$ et entre $C_w[f_2, f_2]$ et $\chi_w[f_2, f_2]$.

Conclusion

Conclusion

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

Nous avons d'abord introduit le formalisme général des GGE, dans lequel les observables macroscopiques sont dérivées fonctionnellement du potentiel conjugué $w(\theta)$. Dans ce cadre, nous avons montré que la matrice de susceptibilité spectrale $\chi_w(\theta, \theta')$ décrit à la fois la réponse linéaire de la densité spectrale moyenne à une perturbation infinitésimale du potentiel et les corrélations entre fluctuations de la densité, conformément au principe de *fluctuation-réponse*. En utilisant ce lien, nous avons vu que nous pouvons *échantillonner GGE*.

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

Enfin, nous avons relié ces objets locaux à des susceptibilités globales via une projection sur les fonctions test $f_i(\theta)$, en considérant le poids spectral $w(\theta)$ comme une combinaison linéaire des charges $\hat{\boldsymbol{Q}}_i$. Ce formalisme nous a permis d'interpréter la dérivée de l'observable $\langle \hat{\boldsymbol{Q}}_i \rangle_w$ par rapport au multiplicateur de Lagrange β_i comme une dérivée fonctionnelle projetée de la matrice $\chi_w(\theta, \theta')$, et d'en valider la structure par une comparaison numérique explicite pour l'énergie et le nombre de particules.

Nous avons vérifié numériquement la validité de notre formule des fluctuations (eq (IV.60)), ce qui confirme son exactitude et sa pertinence dans le cadre du formalisme développé.

Bibliographie

[Gou08] Xavier GOURDON. *les maths en tête Analyse*. 2e éd. ? ? ? : ellipses, 2008.

[CK12] Jean-Sébastien CAUX et Robert M. KONIK. "Constructing the Generalized Gibbs Ensemble after a Quantum Quench". In : *Phys. Rev. Lett.* 109 (17 oct. 2012), p. 175301. DOI : 10.1103/PhysRevLett.109.175301. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.175301.

[GA14] Garry GOLDSTEIN et Natan ANDREI. *Equilibration and Generalized GGE in the Lieb Liniger gas*. 2014. arXiv : 1309.3471 [cond-mat.quant-gas]. URL : https://arxiv.org/abs/1309.3471.

[Nar+17] Jacopo De NARDIS et al. “Probing non-thermal density fluctuations in the one-dimensional Bose gas”. In : *SciPost Phys.* 3 (2017), p. 023. DOI : 10.21468/SciPostPhys.3.3.023. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.3.3.023.

[PK18] T. PALMAI et R. M. KONIK. “Quasilocal charges and the generalized Gibbs ensemble in the Lieb-Liniger model”. In : *Phys. Rev. E* 98 (5 nov. 2018), p. 052126. DOI : 10.1103/PhysRevE.98.052126. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.98.052126.

[Whend] Nicolas WHEELER. *Classical Field Theory : Chapter 5 — Calculus of Functionals*. PDF lecture notes. Available online at : https ://www.reed.edu/physics/faculty/wheeler/documents/Classical Physical Field Theory/Class Notes/Field Theory Chapter 5.pdf, accessed on 2025-12-09. n.d.

Chapitre V

Dispositif expérimental

Sommaire

A Le dispositif expérimental . . . 86
A-1 Système laser et contrôle de fréquence . . . 86
A-2 Production et refroidissement des atomes . . . 86
A-3 Piégeage magnétique sur puce . . . 88
A-4 Génération de potentiels modulés . . . 91
B Sélection spatiale avec DMD . . . 92
B-1 Motivation et principe . . . 92
B-2 Mise en place technique . . . 93
B-3 Utilisation dans les protocoles . . . 94
C Techniques d'imagerie et d'analyse . . . 95
C-1 Imagerie par absorption . . . 95
D Expériences et protocoles étudiés . . . 96
D-1 Expansion longitudinale . . . 96
D-2 Sonde locale de distribution de rapidités . . . 101
Bibliographie . . . 106

Introduction

Ce chapitre présente l'expérience utilisée pour étudier les gaz unidimensionnels de rubidium ultra-froids. Nous décrivons l'architecture du dispositif, les méthodes d'imagerie et d'analyse, ainsi que les protocoles expérimentaux auxquels j'ai participé. Le développement initial du refroidissement et du piégeage avant la puce a été réalisé par d'anciens doctorants [Jac12 ; Fan14 ; Joh16] . La mise en place du piégeage sur la puce a été réalisé par d'anciens doctorants [Jac12 ; Fan14 ; Joh16 ; Sch19 ; Dub24]. La mise en place du système de sélection spatiale à l'aide d'un DMD a été initiée par Léa Dubois [Dub24], alors en première année de doctorat à mon arrivée. Mon travail était concentré principalement sur la prise de données, l'analyse et la participation à certaines expériences spécifiques telles que l'étude de l'expansion longitudinale et la mesure de la distribution de rapidité locale.

-0–i Objectif du chapitre Ce chapitre a pour objectif de fournir une présentation synthétique et structurée du dispositif expérimental utilisé pour étudier la dynamique de gaz de Bose unidimensionnels ultra-froids. Il constitue un socle indispensable pour comprendre les protocoles expérimentaux développés au cours de ma thèse et les analyses présentées dans les chapitres suivants.

-0–ii Architecture générale Nous présentons d'abord l'architecture complète de l'expérience, depuis la production des atomes jusqu'à leur imagerie, en passant par les étapes de refroidissement, de piégeage magnétique sur puce, de manipulation optique, et de génération de potentiels. Cette description s'accompagne d'une mise en contexte des contributions historiques au dispositif.

-0–iii Contributions successives et personnelles Une attention particulière est portée à la répartition chronologique des contributions. Les étapes initiales (source atomique, Piège Magnéto-Optique (PMO), piège DC pour Direct Current en anglais) ont été développées par d'anciens doctorants. La mise en place du piégeage 1D sur puce ainsi que l'utilisation du DMD pour la sélection spatiale ont été réalisées au cours de la thèse de L. Dubois [Dub24]. Mon travail s'inscrit dans cette continuité et concerne principalement la prise de données, l'analyse de protocoles dynamiques, ainsi que la participation à certaines opérations de maintenance et d'optimisation du système.

-0–iv Rôle du dispositif dans la thèse Ce dispositif permet d'explorer des phénomènes hors équilibre dans des gaz quantiques 1D. Il constitue une plateforme particulièrement adaptée à l'étude de protocoles d'expansion, de sondes locales, ou de dynamiques guidées par GHD, qui sont au cœur de cette thèse.

A Le dispositif expérimental

A-1 Système laser et contrôle de fréquence

A-1–i Laser maître 1 : référence de fréquence La stabilité en fréquence de l'ensemble des faisceaux employés dans l'expérience est assurée par un laser à cavité étendue conçu selon un schéma du Systèmes de Référence Temps-Espace (SYRTE). Ce laser est verrouillé par spectroscopie d'absorption saturée sur la raie D2 du ^{87}Rb, en ciblant le croisement des transitions $|F = 2\rangle \rightarrow |F' = 2, 3\rangle$. Ce verrouillage fournit la référence absolue de fréquence à partir de laquelle les autres sources laser sont synchronisées par battement optique.

A-1–ii Laser repompeur Le faisceau de repompage, qui transfère les atomes tombés dans l'état $|F = 1\rangle$ vers l'état $|F = 2\rangle$, est produit par une diode Distributed Feedback (DFB) . Sa fréquence est décalée de 6 GHz par rapport au maître 1 par battement optique et mélange avec un oscillateur à micro-ondes de 6.6 GHz. Une diode Fabry–Perot, injectée par la DFB, élève la puissance de sortie au-delà de 200 mW.

A-1–iii Laser maître 2 : source principale de manipulation Un second laser à cavité étendue, est verrouillé par battement optique sur la fréquence du maître 1. L'émission est amplifiée au moyen d'un amplificateur à semi-conducteur évasé (Tapered Amplifier (TA)), fournissant plus de 1 W en sortie. Le faisceau ainsi produit est distribué vers différentes parties de l'installation expérimentale : alimentation du piège magnéto-optique PMO, formation de la mélasse optique, réalisation du pompage optique, imagerie par absorption,génération du faisceau de sélection.

A-1–iv Gestion des fréquences et polarisations Les faisceaux peuvent être interrompus soit à l'aide d'obturateurs mécaniques, soit via des modulateurs acousto-optiques (en anglais Acousto-Optic Modulator (AOM)). Ces derniers offrent un temps de commutation beaucoup plus court que les systèmes mécaniques, car ils permettent de sélectionner uniquement un ordre de diffraction non nul et d'éteindre en quelque ms le faisceau en interrompant l'alimentation radiofréquence. L'intensité et la polarisation sont réglées via des cubes séparateurs (Polarizing Beam Splitter (PBS)) associés à des lames demi-onde, fixes ou motorisées. Ce dispositif offre une grande souplesse pour adapter la configuration optique aux différentes étapes de l'expérience.

A-1–v Note Une présentation plus exhaustive du montage laser et de son système de verrouillage est disponible dans la thèse de A.Johnson[Joh16]. Le dispositif a été conservé dans son architecture d'origine tout au long de mes travaux, avec seulement un entretien régulier.

A-2 Production et refroidissement des atomes

Le dispositif expérimental permet de produire des gaz ultra-froids de rubidium, en vue d'obtenir des gaz unidimensionnels dans le régime quantique dégénéré. La séquence expérimentale suit un protocole établi, initialement développé par d'anciens doctorants (voir par exemple la thèse d'A. Johnson [Joh16]) et réoptimisé au début de la thèse de L. Dubois [Dub24] sous la supervision d'I. Bouchoule.

A-2–i Libération des atomes de rubidium Les atomes de ^{87}Rb sont émis à partir d'un dispositif appelé *dispenser*, placé directement dans l'enceinte à vide à proximité de la monture de la puce atomique. Un courant de 4.5 A y est appliqué pendant environ 5 s, ce qui génère un flux d'atomes thermiques dans la chambre à vide.

A-2–ii Capture par le piège magnéto-optique (PMO) Les atomes thermiques sont ralentis et confinés dans un piège magnéto-optique. Quatre faisceaux laser (dont deux réfléchis par la puce) combinés à un champ quadrupolaire magnétique produit par des bobines permettent de former un nuage atomique situé à quelques millimètres de la surface de la puce.

A-2–iii Rapprochement vers la puce Le nuage est rapproché de la surface de la puce en transférant le champ quadrupolaire des bobines vers un champ homogène produit par ces bobines, combiné au champ généré par le fil en forme de U de la puce (fil bleu, Fig. V.2). Le courant dans ce fil est ajusté lentement de 3.6 A à 1.5 A, ce qui positionne le nuage à quelques centaines de micromètres de la surface.

A-2–iv Mélasse optique Après la capture dans le PMO, une étape de mélasse optique est appliquée pour refroidir davantage le nuage atomique, au-delà de la limite de Doppler. La mélasse optique repose sur l'utilisation de faisceaux laser légèrement désaccordés en fréquence par rapport à la résonance de la transition atomique utilisée pour le refroidissement et polarisés de manière appropriée, qui interagissent avec les atomes selon le mécanisme de refroidissement sub-Doppler.

Le principe physique est le suivant : les atomes en mouvement voient les faisceaux laser avec un décalage Doppler, ce qui modifie la probabilité d'absorption selon leur vitesse et leur position. Combiné avec les effets de polarisation (notamment les forces de type Sisyphus dans un champ de polarisation variable), cela crée un potentiel de friction optique qui ralentit les atomes. Contrairement au refroidissement Doppler standard, la mélasse optique permet de réduire l'énergie cinétique des atomes en dessous de la limite Doppler, atteignant des températures beaucoup plus basses.

Ainsi, cette étape permet d'obtenir un nuage plus dense et plus froid, condition essentielle pour les manipulations ultérieures et la formation de gaz unidimensionnels dans le régime quantique dégénéré.

A-2–v Pompage optique Enfin, les atomes sont préparés dans l'état magnétique $|F = 2, m_F = 2\rangle$ par pompage optique. Un faisceau circulairement polarisé σ^+, résonant sur la transition $|F = 2\rangle \rightarrow |F' = 2\rangle$, assure la polarisation du nuage (Fig V.1).

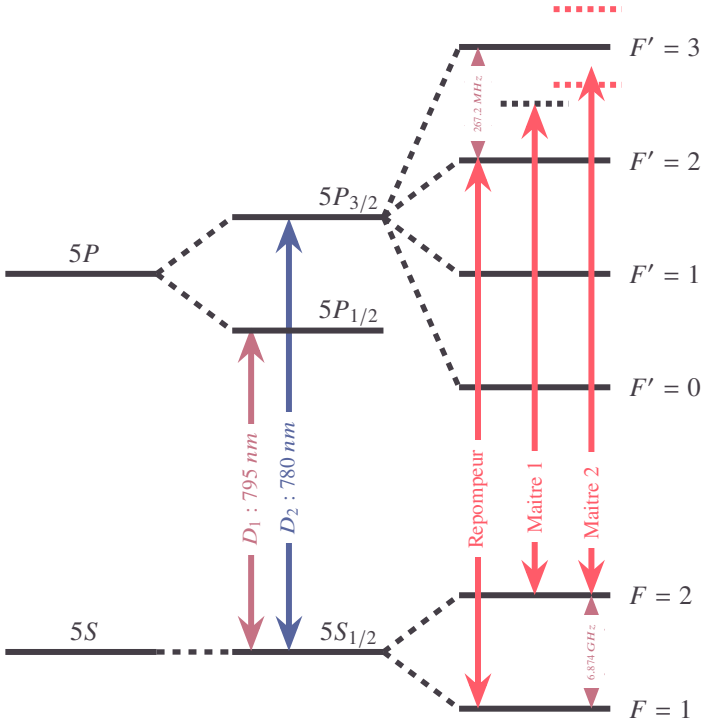


FIGURE V.1 – Structure hyperfine (transitions D1 et D2) de l'atome de Rubidium ^{87}Rb. Les longueurs d'onde des différents lasers utilisés dans l'expérience sont représentées en rouge vif

A-3 Piégeage magnétique sur puce

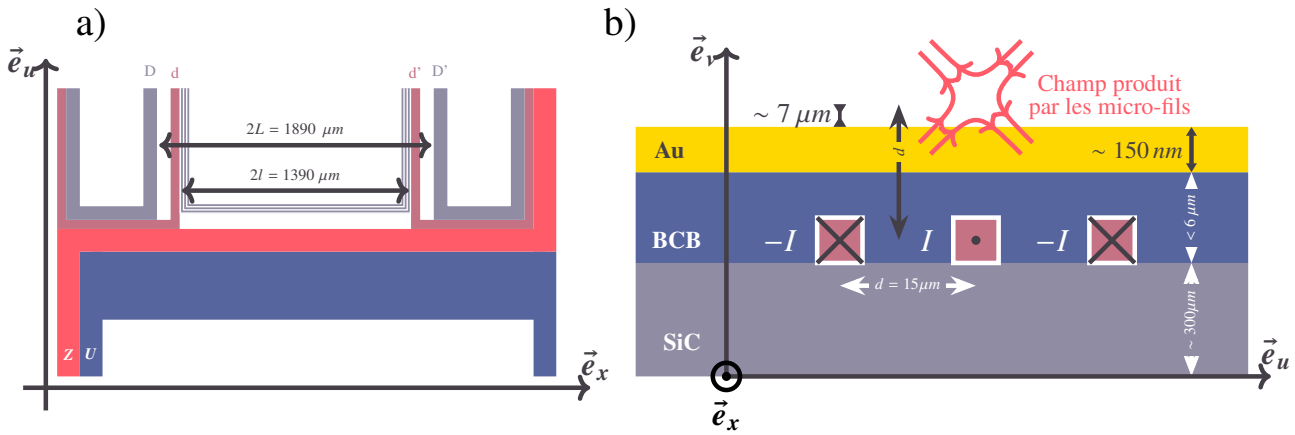


FIGURE V.2 – a) **Zoom sur la zone d'intérêt**. Les fils U (bleu) et Z (rouge vif) créent des pièges magnétiques intermédiaires, les trois micro-fils gris forment le guide longitudinal, et les fils d/d' (marron) et D/D' (gris) assurent le confinement longitudinal. b) Schéma des différentes couches constituant la puce atomique.

A-3-a Piégeage magnétique sur puce

On peut créer des structures atomiques allongées en utilisant des techniques de piégeage optique. Par exemple, plusieurs groupes de recherche ont recours à des réseaux optiques bidimensionnels (2D) pour former un ensemble de tubes atomiques longitudinaux [KWW04 ; Tol+04 ; Par+04 ; Mor+03]. Ces réseaux 2D permettent de produire un grand nombre de systèmes atomiques quasi-unidimensionnels, offrant ainsi une plateforme idéale pour l'étude des gaz 1D. Ce type de dispositif est particulièrement adapté à l'étude de gaz faiblement denses, car les densités peuvent être moyennées sur l'ensemble des tubes. Cependant, avec ce type de configuration, on observe essentiellement une moyenne sur l'ensemble des tubes, ce qui rend

difficile l'étude des fluctuations locales dans chaque tube individuellement. Pour surmonter cette limitation, on utilise le piégeage à l'aide de puces atomiques.

A-3-a-i Principe général Pour contourner cette contrainte, les puces atomiques offrent une solution efficace. Ces dispositifs microfabriqués intègrent des micro-fils parcourus par des courants, générant des champs magnétiques de géométrie contrôlée et permettant des confinements très forts [DCS99 ; For+98 ; Fol+00 ; RHH99]. La miniaturisation ainsi obtenue a permis l'obtention des premiers condensats de Bose–Einstein sur puce dès 2001 [Hän+01 ; Ott+01], et dès 2003 au LCF [Aus03]. Grâce à ces confinements, il devient possible d'étudier expérimentalement les propriétés d'un nuage unique de gaz de Bose unidimensionnel et ses fluctuations locales [Sch+05 ; Tre+06]..

A-3-a-ii Structure de la puce utilisée La puce utilisée au cours de cette expérience a été conçue en collaboration avec S. Bouchoule, A. Durnez et A. Harouri (Centre de nanosciences et de nanotechnologies (C2N)). Elle repose sur un substrat de carbure de silicium (silicon carbide (SiC)) sur lequel est déposé sur le circuit électrique. Ce dernier est recouvert d'une couche de résine benzocyclobuténe (BCB), aplanie par des cycles d'enduction et d'attaque plasma. Une fine couche d'or (aurum (Au)) ($\sim$ 150 nm) est finalement évaporée afin de permettre l'utilisation de la puce comme miroir pour l'imagerie à 780 nm (Fig V.2 b)). La puce est soudée à l'indium sur une monture en cuivre inclinée à 45° par rapport à l'axe optique.

A-3-a-iii Fils de piégeage et géométrie des champs La puce atomique intègre plusieurs ensembles de conducteurs, chacun conçu pour une étape spécifique de la capture, du transport et du confinement des atomes. L'ensemble de la séquence de transfert, depuis le PMO jusqu'au guide unidimensionnel, repose sur une succession de configurations magnétiques générées par ces différents fils.

Phase U : approche de la surface Après la phase de pré-refroidissement, le nuage est initialement capturé dans un PMO situé au-dessus de la puce. Il est ensuite rapproché de la surface en transférant progressivement le champ quadrupolaire des bobines externes vers celui produit par un fil en forme de U intégré à la puce (fils bleus dans la Fig. V.2 a)). Cette étape (*phase U*) est accompagnée d'un mélange optique et d'un pompage optique afin de préparer les atomes pour le piégeage magnétique.

Phase Z : piège DC et refroidissement À l'issue du pompage optique, les atomes sont transférés dans un piège magnétique combinant un courant continu circulant dans un fil en forme de Z (fil rouge vif) et un champ magnétique externe. Ce *piège (DC) pour Direct Current* assure un confinement transverse fort. Un refroidissement par évaporation radiofréquence, d'une durée d'environ 2.3 s, abaisse la température du nuage à environ 1 μK, pour un nombre typique d'atomes de l'ordre de 2.5×10^5.

Transfert vers le guide unidimensionnel Une fois refroidi, le nuage est acheminé vers la zone expérimentale où trois micro-fils parallèles et symétriques (fils gris) parcourus par des courants alternatifs (Alternating Current (AC)) génèrent un guide magnétique unidimensionnel assurant le confinement transverse. Le confinement longitudinal est fourni par deux paires de fils : d/d' (marron) et D/D' (gris).

Le passage du piège Direct Current (DC) au guide 1D est réalisé de manière adiabatique grâce à cinq rampes linéaires de courant d'une durée comprise entre 50 et 60 ms chacune. Durant cette opération : (i) le courant dans le fil Z est progressivement réduit, (ii) le courant dans les micro-fils du guide est augmenté jusqu'à environ 50 mA, (iii) un courant initial de 0.5 A est appliqué dans les fils D et D', puis ajusté pour maintenir fixe la position du centre de masse du nuage.

La configuration des fils de cette puce permet de réduire au minimum les oscillations résiduelles dans le guide. Sa géométrie assure également un découplage efficace entre la dynamique longitudinale et le confinement transverse. Ce dispositif, développé dans le cadre des thèses [Fan14 ; Sch19 ; Dub24], a été utilisé dans mes protocoles expérimentaux pour étudier l'expansion longitudinale et réaliser des mesures locales de la distribution de rapidité.

Optimisation géométrique La géométrie des conducteurs de la puce a été conçue pour réduire la dissipation thermique, limiter les couplages parasites et garantir une bonne symétrie des champs magnétiques. Dans la zone expérimentale, les atomes sont piégés à environ 15 μm au-dessus des fils, soit 8 μm au-dessus de la surface de la puce.

A-3-a-iv Refroidissement final et accès au régime unidimensionnel Une dernière phase de refroidissement par évaporation radiofréquence est effectuée directement dans le guide AC. Grâce à l'anisotropie marquée du piège, le confinement transverse atteint une fréquence $\omega_\perp$ telle que l'énergie quantique $\hbar\omega_\perp$ dépasse largement les énergies thermique et chimique du système. On atteint ainsi le régime unidimensionnel, caractérisé par la hiérarchie d'énergies :

$$k_B T, \mu \ll \hbar\omega_\perp,$$

où μ désigne le potentiel chimique et T la température du gaz.

Dans ce régime, le confinement transverse est assuré principalement par la géométrie des micro-fils et la présence de champs magnétiques externes, tandis que le confinement longitudinal, plus faible, est ajustable via une combinaison de champs magnétiques externes et de courants circulant dans des fils additionnels (d/d' et D/D').

Les gaz obtenus contiennent typiquement entre 3×10^3 et 1.5×10^4 atomes, pour des températures de l'ordre de 50 à 200 nK.

A-3-a-v Avantages du piégeage sur puce Comparé aux systèmes utilisant des réseaux optiques 2D, le piégeage sur puce ne fournit qu'un seul tube, ce qui permet un meilleur accès aux fluctuations locales de densité et aux observables résolues spatialement. Ce type de dispositif est ainsi particulièrement adapté à l'étude de la thermodynamique et de la dynamique de gaz 1D isolés.

A-3-a-vi Limitations et effets parasites Parmi les limitations spécifiques au piégeage sur puce, on peut citer la rugosité des potentiels magnétiques liée aux imperfections des fils, pouvant induire des défauts parasites dans le confinement longitudinal. De plus, la stabilité du dispositif est sensible aux champs magnétiques externes parasites et aux échauffements provoqués par les courants continus, qui peuvent entraîner une déformation de la puce.

A-3-a-vii Remarques expérimentales Lorsque j'ai rejoint l'équipe, la première année thèse de L.Dubois touchait à sa fin et le dispositif expérimental était en fonctionnement stable. Les différentes étapes du cycle (dispenser, PMO, mélasse, pompage optique, piège DC, transfert vers le guide, évaporation finale) avaient été mises en place et optimisées pendant les premières années de sa thèse, sous la supervision d'I. Bouchoule. Le cycle expérimental complet dure environ 15 secondes. Une description plus détaillée peut être trouvée dans la thèse d'A. Johnson [Joh16].

Pendant ma première année, j'ai principalement participé à la prise de données en collaboration avec L. Dubois. Grâce à la qualité de son travail, le dispositif était globalement très fiable, ce qui a permis de mener des campagnes expérimentales riches sans intervention lourde. Néanmoins, cette stabilité avait pour contrepartie que je n'ai pas été directement impliqué dans la résolution des pannes complexes ou dans le reconditionnement complet de la manipulation, ce qui a limité ma formation sur les aspects de maintenance approfondie du dispositif.

En revanche, peu avant la fin de la thèse de L. Dubois et au début de ma troisième année, nous avons observé que le nombre d'atomes tombait à zéro. Il s'est avéré que les connecteurs du "*dispenser*", responsable de la libération de ^{87}Rb, étaient rompus. Cette opération a été mise à profit pour installer un nouveau "*dispenser*". Cette opération nécessite une intervention assez lourde et implique de rompre le vide de l'enceinte. Comme la puce avait déjà plus de trois ans, nous avons décidé de la remplacer par une nouvelle puce atomique.

Cette opération a mobilisé plusieurs personnes du laboratoire et de ses partenaires : Sophie Bouchoule (C2N) et Anne-Lise Coutrot (LCF) ont participé à la manipulation et à la pose de la puce, tandis que j'ai pu assister à l'étuvage de l'enceinte à vide avec Florence Nogrette (LCF). Après cette intervention, j'ai suivi avec I. Bouchoule le réajustement progressif de la séquence de refroidissement : alignement des faisceaux, réglages de la mélasse, optimisation du chargement dans le piège (DC), puis dans le guide.

Cet épisode m'a permis de me confronter plus directement aux paramètres critiques du cycle d'évaporation et à la reprise d'une séquence complète. Toutefois, le départ de L. Dubois, qui maîtrisait tous les aspects de la manipulation, a marqué une rupture importante dans la continuité des savoir-faire pratiques liés à cette expérience.

A-4 Génération de potentiels modulés

A-4–i Champ des micro-fils. Les atomes sont préparés dans l'état $m_F = 2$ (l'axe de quantification étant donné par le champ magnétique $\vec{B}$) par pompage optique. Le potentiel magnétique ressenti par les atomes est donné par $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}(\vec{r})$, où $\vec{\mu}$ est le moment dipolaire magnétique de l'atome et $\vec{B}(\vec{r})$ le champ magnétique total. Pour cet état, ce potentiel est proportionnel à $|\vec{B}(\vec{r})|$, de sorte que les atomes sont attirés vers les régions de champ magnétique minimal.

Les micro-fils, alignés selon l'axe horizontal $\vec{e}_x$, sont parcourus par des courants alternatifs déphasés $\pm I$, produisant le champ de confinement. Un fil central est parcouru par un courant I, tandis que deux fils latéraux portent des courants opposés $-I$ (Fig. V.2b).

A-4–ii Champ d'Ioffe. Afin d'éviter les pertes de Majorana [BS06] liées à la présence d'un champ nul, un champ longitudinal $B_0\,\vec{e}_x$ est ajouté, garantissant que le minimum de champ reste non nul.

A-4–iii Fréquence de piégeage transverse. Dans la configuration étudiée, les atomes sont confinés à $d = 15\,\mu m$ au-dessus de la puce, soit l'espacement entre deux micro-fils. Cette faible distance maximise le gradient de champ et donc la fréquence de piégeage transverse, qui s'écrit

$$\omega_\perp^{(0)} = \sqrt{\frac{\mu_B}{mB_0}}\frac{\mu_0 I}{2\pi d^2}$$

avec μ_B le magnéton de Bohr, m la masse atomique et μ_0 la perméabilité du vide.

A-4–iv Rugosité et suppression par modulation Les imperfections géométriques des micro-fils engendrent des fluctuations parasites du champ magnétique le long du guide, créant une rugosité du potentiel [Kra+02 ; Est+04]. Pour la supprimer, les courants sont modulés à haute fréquence ($\sim 400\,KHz$) [Tre+07 ; Jac12], bien au-delà des fréquences de piégeage. Dans ce régime, les atomes ne perçoivent que le potentiel moyenné temporellement, où la composante parasite longitudinale est fortement réduite. Le confinement effectif reste harmonique, avec une fréquence transverse donnée par

$$\omega_\perp = \frac{\omega_\perp^{(0)}}{\sqrt{2}}. \tag{V.1}$$

A-4–v Découplage des confinements transverses et longitudinaux. Les courants qui parcourent les fils D, D', d et d' sont orientés selon $\vec{e}_u$. Les champs magnétiques induits possèdent alors une composante selon $\vec{e}_x$, notée $B_\parallel^x$, et une composante selon $\vec{e}_v$ (axe normal à la puce), notée $B_\parallel^v$. Si le champ selon $\vec{e}_x$ est négligeable devant B_0, alors le potentiel moyen se sépare en une partie transverse et une partie longitudinale découplées : $\langle V \rangle = V_\perp(y,z) + V_\parallel(x)$.

A-4–vi Potentiel longitudinal harmonique. Dans la configuration où seuls les fils D et D' sont utilisés, le potentiel longitudinal peut, à l'ordre 2 en x, être considéré comme harmonique :

$$V_\parallel(x) = V_0 + \frac{1}{2}m\omega_\parallel^2 x^2, \tag{V.2}$$

On note $2L = 1.89\ mm$ est la distance séparant les fils D et D' (Fig V.2a)). Les courants circulant dans ces deux fils sont identiques et notés $I_D = I_{D'}$. Si la condition $B_0 \gg \mu_0 I_D d/(\pi L)^2$ est vérifiée, alors le terme constant du potentiel vaut approximativement $V_0 \simeq \mu_B B_0$.

La pulsation longitudinale totale $\omega_\parallel$ se décompose en deux contributions[Jac12] : (i) une pulsation $\omega_\parallel^x = \sqrt{\frac{6\,d\,\mu_B\,\mu_0\,I_D}{\pi\,L^4\,m}}$ induite par le champ longitudinal $B_\parallel^x$ et (ii) une pulsation $\omega_\parallel^v = \sqrt{\frac{\mu_B}{m\,B_0}}\frac{\mu_0\,I_D}{\pi\,L^2}$ liée au champ $B_\parallel^v$. Pour des courants $I > 1A$, on a $\omega_\parallel^v \gg \omega_\parallel^x$, et ainsi :

$$\omega_\parallel \propto \frac{I_D}{\sqrt{B_0}L^2}.$$

La fréquence longitudinale est donc réglée expérimentalement en ajustant I_D.

Avec les dimensions caractéristiques de la puce et des fils, il est possible d'atteindre des confinements longitudinaux de fréquence $f_\parallel = \omega_\parallel/2\pi$ allant jusqu'à $\sim 150\,H_z$, la limite étant imposée par le chauffage des fils pour $I_D \leq 4\ A$.

Mesure des fréquences transverse et longitudinale. Pour caractériser le piège, la pulsation transverse $\omega_\perp$ a été mesurée en excitant le mode de respiration transverse. On s'attend à ce que ce mode oscille à une fréquence $2\,f_\perp$, quel que soit le régime considéré (qBEC, Tonks, ...)[KSS96]. La pulsation longitudinale $\omega_\parallel$ a, quant à elle, été obtenue à partir des oscillations dipolaires longitudinales. Les détails expérimentaux de ces méthodes sont décrits dans le manuscrit de thèse de L. Dubois [Dub24], pp. 73 et 78.

A-4–vii Potentiel longitudinal quartique. Si l'on ajoute un courant dans les fils d et d', on peut générer un potentiel longitudinal comportant un terme significatif à l'ordre 4 en x . Pour simplifier, on suppose $I_d = I_{d'}$. On obtient alors :

$$\begin{aligned} V_\parallel(x) \;=\; \mu_B B_0 \quad &+ \quad \frac{\mu_B\,\mu_0}{\pi} d \left[\frac{I_D}{L^2} + \frac{I_d}{l^2} + 3\left(\frac{I_D}{L^4} + \frac{I_d}{l^4}\right) x^2 + 5\left(\frac{I_D}{L^6} + \frac{I_d}{l^6}\right) x^4 \right] \\ &+ \quad \frac{\mu_B}{B_0}\left(\frac{\mu_0}{\pi}\right)^2 \left[\left(\frac{I_D}{L^2} + \frac{I_d}{l^2}\right) x^2 + 2\left(\frac{I_D}{L^2} + \frac{I_d}{l^2}\right)\left(\frac{I_D}{L^4} + \frac{I_d}{l^4}\right) x^4 \right]. \end{aligned}$$

En ajustant I_D et I_d, on peut réaliser par exemple un double puits [Sch+19], ou bien supprimer le terme quadratique x^2 afin d'obtenir un potentiel quartique pur :

$$V_\parallel(x) = a_0 + a_4 x^4$$

comme on le fait dans [Dub+25].

En pratique, la puce présente des dimensions finies et n'est pas parfaitement symétrique. Un calcul plus précis, prenant en compte la géométrie exacte (disposition et épaisseur des fils), est présenté en annexe de la thèse de Thibault Jacqmin [Jac12], p. 151. Cela impose un ajustement fin et asymétrique des courants I_D, $I_{D'}$, I_d et $I_{d'}$.

A-4–viii Caractérisation des potentiels longitudinal et transverse. Pour atteindre le régime unidimensionnel, les confinements doivent être fortement anisotropes : un piégeage transverse très fort et un piégeage longitudinal faible. La condition $\mu, k_B T \ll \hbar\omega_\perp$ garantit le gel des degrés de liberté transverses.

Cette configuration est particulièrement adaptée pour obtenir des profils de densité homogènes, nécessaires à certaines expériences de transport. Le transfert des atomes du piège harmonique vers le piège quartique est réalisé de manière *diabatique* (changement rapide du potentiel), car un transfert adiabatique entraîne des pertes importantes.

B Sélection spatiale avec DMD

B-1 Motivation et principe

B-1–i Objectif du dispositif de sélection L'outil de sélection spatiale a été conçu pour permettre une action locale sur le gaz atomique. Il présente deux objectifs principaux. D'une part, il permet de mesurer la distribution de rapidité localement résolue, en sélectionnant une tranche du gaz avant de la libérer et de suivre son expansion. D'autre part, il offre la possibilité de créer des situations hors équilibre en retirant une partie du gaz à l'équilibre, ce qui perturbe la configuration initiale et initie une dynamique.

B-1–ii Intérêt pour les protocoles hors équilibre Ce dispositif permet ainsi de générer des protocoles analogues à des configurations classiques comme le *pendule de Newton*, ou de sonder directement la dynamique d'un gaz de Lieb–Liniger dans des conditions contrôlées. Il constitue une brique essentielle pour les expériences de dynamique et de transport quantique.

B-2 Mise en place technique

B-2–i Principe de sélection par pression de radiation. La sélection s'effectue en illuminant une zone définie du gaz avec un faisceau quasi-résonant sur la transition cyclique $F = 2 \rightarrow F' = 3$ de la ligne D2 du rubidium ^{87}Rb (Fig. V.1). Les atomes subissent alors une pression de radiation au cours d'une vingtaine de cycles d'absorption et d'émission spontanée, ce qui les expulse du piège ou les place dans un état non piégé.

B-2–ii Façonnage spatial du faisceau. La sélection doit être spatialement résolue. Le profil d'intensité dans le plan des atomes est de type binaire :

$$I(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [x_1, x_2] \\ I_0 & \text{sinon} \end{cases}$$

ce qui permet de préserver ou d'éjecter les atomes selon leur position longitudinale.

B-2–iii Utilisation du DMD. Pour générer ce profil, un DMD (Dispositif de Micromirroirs Digitaux) est utilisé. Il s'agit d'une matrice de 1024×768 micro-miroirs de 14 μm de coté et orientables individuellement ($\pm 12°$). En inclinant ces miroirs, on contrôle localement la réflexion de la lumière. L'image du DMD est projetée directement sur le plan des atomes, en imagerie directe.

B-2–iv Avantages du DMD. Le DMD permet une reconfiguration rapide et programmable du motif de lumière. Cette technologie est largement utilisée dans les expériences d'atomes froids pour produire des potentiels structurés, homogénéiser un faisceau ou adresser localement les atomes.

B-2–v Alternatives possibles. Il est possible, en théorie, d'atteindre un effet similaire par un transfert cohérent des atomes vers un état anti-piégé via un pulse micro-onde ou une transition Raman. Cependant, la méthode par pression de radiation est plus simple à mettre en œuvre et adaptée à nos objectifs expérimentaux.

B-2–vi Principe de l'expulsion par pression de radiation Un atome illuminé par un faisceau proche de la résonance peut être expulsé du piège soit par transition vers un état anti-piégé, soit par effet de pression de radiation. Cette dernière génère une accélération suffisante pour fournir une énergie cinétique supérieure à la profondeur du puits magnétique. Le nombre de photons diffusés nécessaire peut être estimé à partir de la conservation de l'impulsion : une vingtaine de photons suffisent typiquement à extraire un atome du piège dans nos conditions.

B-2–vii Modèle de diffusion et estimation du seuil Le taux de diffusion de photons est modélisé à l'aide d'un taux Γ_{sc}, dépendant de l'intensité I, de l'intensité de saturation I_{sat}, d'un paramètre α (lié à la polarisation et au champ magnétique) et du désaccord. À résonance, et pour un temps d'illumination τ_p, on peut estimer le nombre total de photons diffusés par atome par $N_{sc} = \tau_p \Gamma_{sc}$.

B-2–viii Mesures expérimentales de la puissance nécessaire La puissance minimale nécessaire pour éjecter tous les atomes d'une zone illuminée est déterminée en fixant un temps d'illumination donné, puis en variant l'intensité du faisceau. L'analyse est réalisée après un délai d'attente de $\sim$ 10 ms, pour s'assurer que seuls les atomes encore piégés soient détectés. Il est observé que 99% des atomes sont retirés à partir d'un rapport $I/I_{sat} \simeq 0.12$.

B-2–ix Mesures de photons diffusés par fluorescence La quantité de photons diffusés est également mesurée par l'analyse du signal de fluorescence capté par la caméra. En calibrant le rapport entre photons détectés et photons diffusés (en tenant compte de l'efficacité optique du système), le nombre moyen de photons nécessaires pour éjecter un atome est confirmé expérimentalement autour de 20. Un ajustement du modèle de diffusion permet d'estimer le paramètre $\alpha \simeq 0.4$.

B-2–x Saturation et effets Doppler À fort temps d'illumination ($\tau_p > 150\,\mu$s), une saturation du nombre de photons diffusés est observée, interprétée comme un effet géométrique : les atomes accélérés atteignent physiquement la puce atomique et cessent de contribuer au signal. Une correction Doppler peut être introduite dans le modèle, mais reste négligeable ($< 5\%$) dans les régimes expérimentaux utilisés.

B-2–xi Limitations expérimentales de la sélection Plusieurs effets peuvent limiter l'efficacité ou la propreté de la sélection :

- La diffraction liée à la taille finie de l'objectif entraîne un flou de l'ordre de $1-2\,\mu$m au bord des zones éclairées.
- Une diffusion parasite par la puce peut se produire à forte intensité si tout le DMD est illuminé ; cela est évité en réduisant la taille transverse du faisceau à quelques micro-miroirs seulement.
- Des inhomogénéités d'éclairement dues à la gaussienne du faisceau et au speckle peuvent conduire à une sur-illumination de certaines zones. Un effort a été fait pour homogénéiser l'intensité en sortie de fibre.
- La réabsorption des photons diffusés pourrait entraîner un échauffement du gaz restant. Un désaccord en fréquence de 15 MHz a été testé pour éviter ce phénomène, sans effet visible sur la température du gaz.

B-2–xii Mesures de l'impact sur le gaz restant La température du gaz sélectionné est comparée avant et après sélection via l'analyse des fluctuations de densité après temps de vol. Aucun changement significatif de température ni d'élargissement n'a été observé. Ces résultats suggèrent que, dans les conditions expérimentales utilisées, la sélection ne perturbe pas significativement les atomes restants.

B-3 Utilisation dans les protocoles

B-3–i Sélection locale et mesure de rapidité. En sélectionnant une tranche du gaz, on peut ensuite couper le confinement longitudinal et laisser cette tranche s'étendre. Le profil de densité asymptotique obtenu après un long temps d'expansion est proportionnel à la distribution de rapidité locale du gaz initial. Ce protocole permet ainsi une mesure résolue en x de $t\,n(x, t \to \infty) \sim \tilde{n}(x/t, t \to \infty)$.

B-3–ii Génération d'états hors équilibre La sélection permet également de créer des discontinuités dans le profil de densité, et donc d'initier une dynamique hors équilibre. Par exemple, on peut ne conserver que deux paquets séparés de gaz, qui vont alors osciller l'un vers l'autre. Cette configuration est analogue à un *pendule de Newton quantique* [Cau+19 ; KWW06].

B-3–iii Formes utilisées Les motifs projetés par le DMD peuvent prendre différentes formes : boîtes, barrières, coupures, etc. Cette flexibilité rend l'outil extrêmement précieux pour explorer diverses configurations initiales et protocoles dynamiques.

B-3–iv Contrôle logiciel du DMD Le pilotage du DMD repose sur l'utilisation d'un module intégré fourni par Vialux (V7001-SuperSpeed), qui comprend les bibliothèques logicielles ALP-4. Plusieurs configurations du DMD peuvent être chargées en mémoire au début de chaque cycle expérimental, puis sélectionnées en cours de séquence à l'aide d'un signal digital. Le temps de commutation des miroirs est inférieur à $30\,\mu$s, ce qui est compatible avec les protocoles étudiés.

B-3–v Partage du faisceau avec la voie d'imagerie Le faisceau utilisé pour la sélection spatiale est prélevé à partir du faisceau "sonde" déjà accordé sur la transition $F = 2 \to F' = 3$ de la raie D2. Le partage est réalisé à l'aide d'un cube séparateur de polarisation placé en aval d'une lame demi-onde, permettant de contrôler la puissance injectée dans la fibre optique. Ce choix simplifie la mise en œuvre en évitant d'ajouter une source laser supplémentaire.

B-3–vi Blocage du faisceau de sélection Deux systèmes permettent de couper le faisceau de sélection pendant le cycle expérimental :

- un cache mécanique (type électro-aimant), utilisé pour un blocage longue durée ;
- un AOM, permettant de produire des impulsions brèves de quelques dizaines de μs, en amont du séparateur.

Pour garantir que le faisceau ne perturbe pas l'imagerie, le cache mécanique reste fermé pendant l'utilisation du faisceau "sonde", l'AOM étant placé avant la lame séparatrice des faisceaux.

B-3–vii Montage optique de projection Le faisceau façonné par le DMD est projeté dans le plan des atomes à l'aide d'un système optique permettant de sélectionner l'ordre 0 de diffraction. L'ensemble des optiques est dimensionné (diamètre 50 mm) pour limiter la diffraction. L'alignement est effectué en superposant le faisceau de sélection à la voie d'imagerie.

B-3–viii Grandissement et champ couvert Le montage permet de couvrir une zone de l'ordre de 600 μm dans le plan des atomes, soit plus que la longueur typique d'un nuage ($\sim$ 400 μm pour $\omega_{\|} = 2\pi \times 5$ Hz). Le grandissement est déterminé par les focales utilisées : une focale $f_{\mathrm{DMD}} = 750$ mm du côté du DMD, et $f_{\mathrm{at}} = 32$ mm pour l'objectif côté atomes, donnant $G = f_{\mathrm{at}}/f_{\mathrm{DMD}} \approx 0.043$ (Fig V.3).

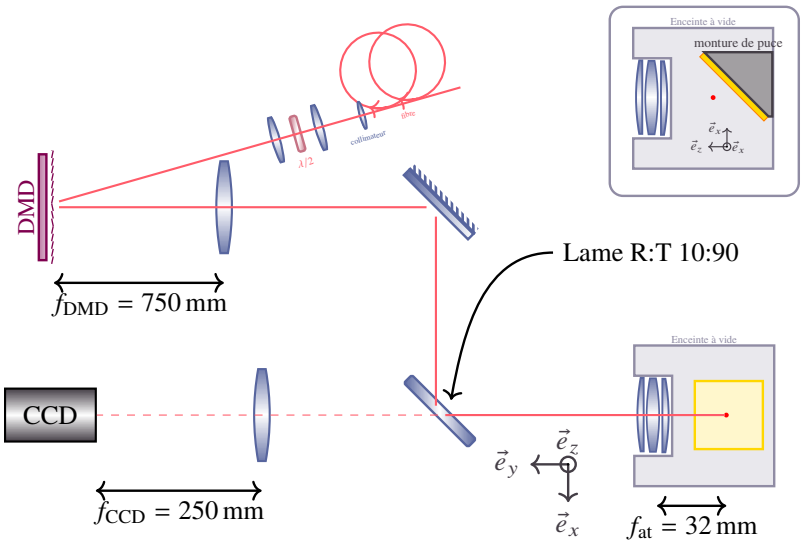


Figure V.3 – Schéma du montage optique

B-3–ix Visualisation et interface Le contrôle du DMD s'effectue via une interface graphique permettant de prévisualiser les configurations de miroirs. Cette interface graphique à été programmé par F. Nogrette . Cette interface est pilotée de manière automatisée pendant le déroulement de la séquence expérimentale.

C Techniques d'imagerie et d'analyse

C-1 Imagerie par absorption

C-1–i Système d'imagerie par absorption L'imagerie est réalisée à l'aide d'une caméra Charge-Coupled Device (CCD) à déplétion profonde, optimisée pour une grande efficacité quantique à la longueur d'onde de 780 nm. On utilise des techniques d'imagerie par absorption permettant d'extraire la densité optique $D(x, z)$, elle-même reliée à la densité atomique 3D via la loi de Beer-Lambert. Le profil de densité linéaire $n(x)$ est obtenu par intégration sur les directions transverses.

C-1–ii Imagerie après temps de vol En appliquant un champ magnétique vertical ($B = 8$ G), la polarisation du faisceau peut être rendue circulaire (σ^+) pour adresser la transition fermée $|F = 2, m_F = 2\rangle \rightarrow |F' = 3, m'_F = 3\rangle$. Cette configuration assure une meilleure définition de la section efficace d'absorption. Un temps de vol de quelques ms est utilisé avant l'imagerie, permettant également de décomprimer le nuage.

C-1–iii Imagerie "in situ" Les atomes sont imagés à 7 μm de la puce, ce qui implique une double absorption du faisceau incident et réfléchi. Dans ce cas, la transition n'est pas fermée, ce qui nécessite une calibration du facteur de conversion entre la densité mesurée et la densité réelle. Un ajustement linéaire permet de relier les profils in situ aux profils obtenus après temps de vol. En pratique, un temps de vol d'une centaine de microsecondes est utilisé.

C-1–iv Choix des paramètres d'imagerie L'intensité du faisceau "sonde" est choisie typiquement à $I_0/I_{\text{sat}} \approx 0.3$ pour optimiser le rapport signal sur bruit tout en restant dans une zone de linéarité acceptable. Dans ces conditions, le nombre de photons diffusés est de l'ordre de $N_{\text{sc}} \approx 230$.

C-1–v Défauts et instabilités expérimentales Plusieurs limitations instrumentales ont été identifiées :

- La caméra initialement utilisée montrait des motifs parasites aléatoires ainsi qu'un offset variant au cours du temps. Le remplacement de la caméra a permis de résoudre ces problèmes.
- Des franges d'interférences apparaissaient lors de la division des images d'absorption, probablement dues à des effets *Fabry-Pérot* dans les optiques. Le désaxage du faisceau d'imagerie a permis d'en limiter l'impact.
- Des photons résiduels, même en l'absence de faisceau "sonde", ont été détectés. Ces derniers proviennent vraisemblablement de diffusions multiples dans le système optique.

C-1–vi Conclusion La combinaison de l'imagerie in situ et après temps de vol, ainsi qu'une calibration soigneuse des paramètres optiques et expérimentaux, permettent d'accéder à des profils de densité fiables malgré les limites intrinsèques du système d'imagerie. Une attention particulière a été portée à la réduction des artefacts expérimentaux afin de garantir la précision des mesures.

D Expériences et protocoles étudiés

D-1 Expansion longitudinale

D-1-a Motivation et protocole expérimental d'expansion longitudinale

D-1-a-i Motivation. Une partie essentielle de mon travail de thèse a consisté à sonder la distribution de rapidités résolue spatialement, ce qui constitue une information clé pour comprendre la dynamique hors équilibre d'un gaz quantique unidimensionnel. Pour accéder à cette observable, il est nécessaire de réaliser un protocole qui relie la distribution de rapidités à des profils de densité mesurables expérimentalement.

D-1-a-ii Considérations physiques. Au-delà de son intérêt pratique, l'expansion longitudinale offre une fenêtre sur la physique des gaz bosoniques 1D. Elle permet d'étudier comment un système initialement confiné évolue vers un état dilué, révélant à la fois l'impact du régime transverse (TF 3D vs TF 1D).

D-1-a-iii Protocole expérimental. Concrètement, l'expansion longitudinale est réalisée selon la séquence :

- Le nuage est initialement piégé dans un potentiel magnétique caractérisé par une fréquence longitudinale $\omega_{\parallel} = 2\pi \times 5.0$ ou $2\pi \times 9.4\,\text{Hz}$ selon les jeux de données, et une fréquence transverse $\omega_{\perp} = 2\pi \times 2.56\,\text{kHz}$.
- À $t = 0$, le confinement longitudinal est éteint en annulant les courants $I_D = I_{D'} = 0$. La coupure est réalisée sur un temps fini $t_{\parallel} = 70\,\mu\text{s} \ll 2\pi/\omega_{\parallel}$, ce qui évite un pic de courant parasite.
- Le nuage se dilate librement dans la direction longitudinale pendant une durée τ. Ensuite, le confinement transverse est relâché en annulant $I_{\perp}$, avec un temps de coupure $t_{\perp} = 5\,\mu\text{s} \ll 2\pi/\omega_{\perp}$.
- Une image par absorption est enfin prise après un temps de vol t_v. Pour l'étude des profils de densité, on utilise typiquement $t_v = 1\,\text{ms}$.

D-1-a-iv Perspective. La mise en œuvre de ce protocole d'expansion longitudinale ne répond donc pas seulement à un besoin technique de mesure, mais s'inscrit dans une stratégie plus générale : relier les prédictions théoriques de la GHD.

D-1-a-v Équations Gross-Pitaevskii dépendantes du temps. Pour un système dans les régimes qBEC (pour un paramètre de Lieb définie en II.64 , $\gamma \ll 1$ et $T \sim 0$), la dynamique du système étudié est décrite par l'équation de GP (III.70) :

$$i\partial_\tau \phi = \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r}) + g_{3D} N |\phi|^2 \right\} \phi,$$

avec $g_{3D} = 4\pi a_{3D}$ et en présence d'un potentiel externe (voir (V.1) et (V.2)) :

$$V(\vec{r}) = V_\perp(\vec{r}_\perp) + V_\parallel(x), \qquad V_\perp(\vec{r}_\perp) = \tfrac{1}{2}\,\omega_\perp^2\,\vec{r}_\perp^{\,2}, \qquad V_\parallel(x) = \tfrac{1}{2}\,\omega_\parallel^2\,x^2.$$

D-1-a-vi Séparation des degrés de liberté. Dans un piège de type cigare, caractérisé par $\omega_\perp \gg \omega_\parallel$, la dynamique transverse se déroule sur des temps caractéristiques beaucoup plus courts que la dynamique longitudinale. On fait alors l'hypothèse d'un *suivi adiabatique transverse* : l'état reste en permanence dans son état fondamental transverse. Ainsi, les degrés de liberté transverses et longitudinaux se découplent et la fonction d'onde peut se factoriser sous la forme

$$\phi(r,\tau) = \psi(x,\tau)\,\Phi(\vec{r}_\perp, n(x,\tau))\,, \tag{V.3}$$

où $\psi(x,\tau)$ décrit la dynamique longitudinale et Φ est la fonction d'onde transverse dépendant paramétriquement de la densité linéaire $n(x,\tau)$. La condition de normalisation $\int d\vec{r}_\perp \left|\Phi(\vec{r}_\perp, n)\right|^2 = 1$ permet de réécrire la densité linéaire définie par $n \doteq N \int d\vec{r}_\perp\, |\phi|^2$ sous la forme

$$n(x,\tau) = N\,|\psi(x,\tau)|^2.$$

L'équation de Gross-Pitaevskii se réécrit alors

$$\left(i\partial_\tau + \tfrac{1}{2}\partial_x^2 - V_\parallel(x) - \mu(n)\right)\psi = 0, \qquad \mu(n)\,\Phi = \left(-\tfrac{1}{2}\Delta_{\vec{r}_\perp} + V_\perp + g_{3D}\,n\left|\Phi(\vec{r}_\perp, n)\right|^2\right)\Phi. \tag{V.4}$$

D-1-a-vii Équations hydrodynamiques. En utilisant la transformation de *Madelung* $\psi(x,\tau) = \sqrt{n(x,\tau)}\,e^{i\vartheta(x,\tau)}$, et en introduisant la vitesse $u = \partial_x\vartheta$, on obtient les équations hydrodynamiques associées [Spi80 ; PS16] :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \partial_\tau n + \partial_x(nu) & = & 0, \\ \partial_\tau u + \partial_x\left(\frac{u^2}{2} + V_\parallel + \mu(n) + \frac{\mathcal{P}_Q}{n}\right) & = & 0, \end{array} \right. \tag{V.5}$$

où le terme de pression quantique est donné par $\mathcal{P}_Q = -\frac{1}{2}\,\sqrt{n}\,\partial_x^2\sqrt{n}$.

En tenant compte de la relation thermodynamique $dP = n\,d\mu$, ce sont les mêmes équations que (III.71) et (III.74).

En négligeant le terme de pression quantique $\mathcal{P}_Q$, on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \partial_\tau n + \partial_x(nu) & = & 0, \\ \partial_\tau u + \partial_x\left(\frac{u^2}{2} + V_\parallel + \mu(n)\right) & = & 0, \end{array} \right. \tag{V.6}$$

Pour notre protocole, pour $\tau < 0$ le système est à l'équilibre, avec la condition

$$\mu(n(x)) + V_\parallel(x) = \mu\big(n(x=0)\big). \tag{V.7}$$

Pour $\tau \geq 0$, le potentiel longitudinal est éteint : $V_\parallel(x) = 0$.

D-1-a-viii Solutions analytiques homothétiques. Si n est solution des équations hydrodynamiques (V.6), pour $\tau \geq 0$; On fait l'hypothèse que la densité linéaire suit une forme homothétique

$$n(x,\tau) = \frac{1}{\lambda(\tau)} n_0\left(\frac{x}{\lambda(\tau)}\right), \tag{V.8}$$

avec n_0 le profil de densité à $\tau = 0$ et $\lambda(\tau)$ le facteur d'échelle à un temps d'expansion τ. Avec les contraintes $\lambda(0) = 1$, $\lambda'(0) = 0$ et $N = \int dx\, n(x,\tau)$. En injectant dans (V.5) il vient que

$$\begin{cases} u(x,\tau) &= \dfrac{\dot\lambda(\tau)}{\lambda(\tau)}x, \\ \partial_x\mu(n(x,\tau)) &= -\dfrac{\ddot\lambda(\tau)}{\lambda(\tau)}x, \end{cases} \tag{V.9}$$

(car $\partial_\tau u = (\ddot\lambda/\lambda - \dot\lambda^2/\lambda^2)x$ et $u\partial_x u = (\dot\lambda/\lambda)^2 x$, leur somme donne $(\ddot\lambda/\lambda)x$) et initialement

$$\mu_0(x) = \mu_p - \frac{1}{2}\omega_\parallel^2 x^2, \tag{V.10}$$

avec $\mu_0(x) = \mu(n_0(x))$ et $\mu_p = \mu(n_0(x=0))$.

Calculons maintenant $\partial_x\mu(n(x))$. Tout d'abord, on utilise

$$\partial_x\mu(n(x)) = \mu'(n)\partial_x n. \tag{V.11}$$

Intéressons nous maintenant à $\partial_x n$. Comme $n(x)$ vérifie (V.8) :

$$\partial_x n(x) = \frac{1}{\lambda^2}\, n_0'\Big(\frac{x}{\lambda}\Big). \tag{V.12}$$

En utilisant l'équilibre $\mu\big(n_0(y)\big) = \mu_p - \frac{1}{2}\omega_\parallel^2 y^2$, soit $\mu'(n_0(y))\, n_0'(y) = -\omega_\parallel^2 y$ soit

$$n_0'(y) = -\frac{\omega_\parallel^2\, y}{\mu'(n_0(y))}. \tag{V.13}$$

En injectant (V.13) dans (V.12) et en injectant ensuite (V.12) dans (V.11) on obtient finalement

$$\partial_x\mu(n(x)) = -\frac{\omega_\parallel^2}{\lambda^3}\, f(\lambda, n)\, x \tag{V.14}$$

où

$$f(\lambda, n) \equiv \frac{\mu'(n)}{\mu'(\lambda n)}. \tag{V.15}$$

En substituant dans la deuxième équation d'Euler (V.9), on obtient

$$\frac{\ddot\lambda}{\lambda} = \frac{\omega_\parallel^2}{\lambda^3}\, f(\lambda, n). \tag{V.16}$$

On en déduit que f ne dépend que du facteur d'échelle λ, c'est-à-dire

$$f(\lambda, n) = f(\lambda). \tag{V.17}$$

En utilisant le résultat de l'annexe E, l'équation (V.17) conduit à

$$\mu \propto n^\alpha. \tag{V.18}$$

Et de plus

$$f(\lambda) = \lambda^{1-\alpha}. \tag{V.19}$$

D-1-a-ix Équation pour le facteur d'échelle λ. En utilisant (V.19), l'équation d'évolution du facteur d'échelle obtenue précédemment (V.16) s'écrit :

$$\ddot\lambda\, \lambda^{\alpha+1} = \omega_\parallel^2 \tag{V.20}$$

On pose $v = \dot\lambda$. Comme $\ddot\lambda = \dot\lambda \frac{d\dot\lambda}{d\lambda}$, on obtient

$$\dot\lambda \frac{d\dot\lambda}{d\lambda} = \omega_\parallel^2\, \lambda^{-(\alpha+1)}. \tag{V.21}$$

Cas $\alpha \neq 0$. Intégration par rapport à λ :

$$\frac{1}{2}\dot{\lambda}^2 = \omega_\parallel^2 \int \lambda^{-(\alpha+1)}\, d\lambda = -\frac{\omega_\parallel^2}{\alpha}\,\lambda^{-\alpha} + C, \tag{V.22}$$

où C est une constante d'intégration déterminée par les conditions initiales $\lambda(0) = \lambda_0$, $\dot{\lambda}(0) = \dot{\lambda}_0$:

$$C = \frac{1}{2}\dot{\lambda}_0^2 + \frac{\omega_\parallel^2}{\alpha}\,\lambda_0^{-\alpha}. \tag{V.23}$$

On a donc la première intégrale

$$\dot{\lambda}^2 = \dot{\lambda}_0^2 + \frac{2\omega_\parallel^2}{\alpha}\left(\lambda_0^{-\alpha} - \lambda^{-\alpha}\right). \tag{V.24}$$

Cas $\alpha = 0$. L'équation devient $\ddot{\lambda}\,\lambda = \omega_\parallel^2$. On obtient

$$\dot{\lambda}^2 = \dot{\lambda}_0^2 + 2\omega_\parallel^2 \ln\left(\tfrac{\lambda}{\lambda_0}\right). \tag{V.25}$$

On impose les conditions initiales $\lambda(0) = 1$, $\dot{\lambda}(0) = 0$, et l'on considère le cas $\alpha > 0$.

D-1-a-x Régime à temps courts ($\tau \ll 1/\omega_\parallel$). On linéarise l'équation autour de l'équilibre $\lambda = 1$ en posant $\lambda(\tau) = 1 + \epsilon(\tau)$ avec $|\epsilon| \ll 1$. L'équation de mouvement se réduit alors à un oscillateur harmonique forcé :

$$\ddot{\epsilon} + (1+\alpha)\,\omega_\parallel^2 \epsilon - \omega_\parallel^2 = 0. \tag{V.26}$$

Pour les conditions initiales choisies, la solution à petits temps est approximativement

$$\epsilon(\tau) \simeq \frac{1}{2}\,\omega_\parallel^2 \tau^2, \tag{V.27}$$

ce qui conduit à

$$\lambda(\tau) \simeq 1 + \frac{\omega_\parallel^2 \tau^2}{2}. \tag{V.28}$$

Ce comportement est indépendant de l'équation d'état $\mu(n)$.

D-1-a-xi Régime à temps longs ($\tau \gg 1/\omega_\parallel$). Lorsque $\lambda^{-\alpha} \ll 1$, l'intégration de l'équation de mouvement montre que la vitesse $\dot{\lambda}$ tend vers $\sqrt{2\omega_\parallel^2/\alpha}$. En conséquence, à longs temps, l'évolution de $\lambda(\tau)$ est approximativement linéaire et s'écrit

$$\lambda(\tau) \simeq \sqrt{\frac{2}{\alpha}}\,\omega_\parallel\,\tau. \tag{V.29}$$

En particulier, pour le régime TF 1D, correspondant à $\alpha = 1$, on obtient $\lambda(\tau) \simeq \sqrt{2}\,\omega_\parallel\,\tau$. Pour le régime TF 3D, correspondant à $\alpha = 1/2$, on a $\lambda(\tau) \simeq 2\,\omega_\parallel\,\tau$.

D-1-a-xii Le potentiel chimique. Dans le régime quasi-1D on utilise l'expression d'interpolation [FLC03].

$$\mu(n) = \hbar\omega_\perp\left(\sqrt{1 + 4\,a_{3\mathrm{D}}\,n} - 1\right), \tag{V.30}$$

où n désigne la densité linéique et $a_{3\mathrm{D}}$ la longueur de diffusion en trois dimensions, dont la valeur est $a_{3\mathrm{D}} = 5.3$ nm. De cette formule on obtient deux limites asymptotiques :

- *Régime transverse Thomas–Fermi (TF 3D),* $4a_{3D}n \gg 1$. Alors $\sqrt{1+4a_{3D}n} \simeq 2\sqrt{a_{3D}n}$ et

$$\mu(n) \simeq 2\hbar\omega_\perp \sqrt{a_{3D}\, n}, \tag{V.31}$$

  ce qui correspond à $\mu \propto n^{1/2}$ (donc $\alpha = \frac{1}{2}$). Ce régime décrit la situation où $\mu \gg \hbar\omega_\perp$ et de nombreux niveaux transverses sont excités.

- *Régime quasi-1D (transverse fondamental) (TF 1D),* $4a_{3D}n \ll 1$. Alors $\sqrt{1+4a_{3D}n} \simeq 1 + 2a_{3D}n$ et

$$\mu(n) \simeq 2\hbar\omega_\perp\, a_{3D}\, n \equiv g\, n, \tag{V.32}$$

  avec $g = 2\hbar\omega_\perp a_{3D}$. Ici $\mu \propto n$ (donc $\alpha = 1$) ; on est proche de l'état fondamental.

Les deux formes ci-dessus sont bien les limites asymptotiques de l'expression d'interpolation donnée plus haut.

D-1-b Analyse des données expérimentales

L'étude de la dynamique du profil de densité a été réalisée sur un nuage atomique initialement à l'équilibre dans un potentiel harmonique de fréquence longitudinale $\omega_\parallel = 2\pi\times 9.4$ Hz et transverse $\omega_\perp = 2\pi\times 2.5$ kHz.

Le profil de densité mesuré est représenté en rouge sur la Fig. V.4(a), tandis que le profil attendu à l'équilibre dans le piège harmonique est tracé en noir pointillé. Ce dernier est obtenu à partir de l'expression (V.30) du potentiel chimique :

$$\mu_p - \frac{1}{2}\omega_\parallel^2 x^2 = \hbar\omega_\perp \left[\sqrt{1+4\, n_0(x)\, a_{3D}} - 1\right], \tag{V.33}$$

avec $\mu_p/\hbar\omega_\perp = 1.4$. L'ajustement est très bon au centre du nuage, mais les données expérimentales présentent des ailes supplémentaires, dues à un effet d'entropie non nulle.

Après un temps d'expansion longitudinal τ, un facteur d'échelle λ est extrait en ajustant les profils expérimentaux avec un profil de la forme (V.8).

Les facteurs d'échelle extraits expérimentalement sont montrés sur la Fig. V.4(b) et sont en bon accord avec les résultats numériques obtenus en résolvant les équations hydrodynamiques (Eq. (V.30)) avec $\mu_p/\hbar\omega_\perp = 1.40$.

L'évolution des profils de densité mesurée expérimentalement est en bon accord avec les simulations numériques réalisées dans le régime cros-over (Fig. V.4(b)).

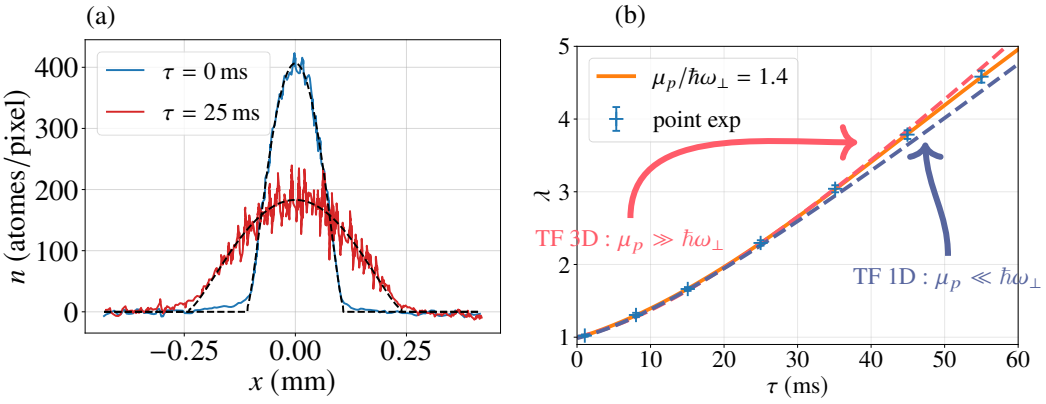


FIGURE V.4 – (a) Profil de densité à l'équilibre dans le piège harmonique longitudinal (bleu), ajusté par $n_0(x)$ selon Eq. (V.33) (noir pointillé). La courbe rouge montre le profil après une expansion longitudinale $\tau = 25$ ms, avec un facteur d'échelle λ extrait en ajustant le profil par une courbe homothétique à la densité initiale (noir pointillé), cf. eq. (V.8). (b) Points bleus : facteurs d'échelle $\lambda(\tau)$ extraits expérimentalement. Courbe orange : résultats numériques obtenus en résolvant les équations hydrodynamiques (eq. (V.30)) avec $\mu_p/\hbar\omega_\perp = 1.4$. Les courbes pointillées montrent les évolutions attendues de λ en résolvant l'eq. (V.20) pour $\alpha = 1$ (TF 1D) et $\alpha = 1/2$ (TF 3D).

D-2 Sonde locale de distribution de rapidités

D-2-a Distribution de rapidités locale dans les gaz 1D

D-2-a-i Motivation. La compréhension des gaz de bosons unidimensionnels avec interactions de contact répulsives repose sur la notion de distribution de rapidités $\rho(\theta)$. Chaque état propre du système peut être caractérisé par un ensemble de rapidités $\{\theta_i\}$, interprétées comme les vitesses de quasi-particules à durée de vie infinie.

Dans le cadre des expansions 1D, une définition pratique consiste à assimiler les rapidités aux vitesses asymptotiques des atomes après une expansion libre, via la relation $x_j \simeq \tau\theta_j$ pour un temps d'expansion long τ [1]. .

Ainsi, la distribution de vitesses mesurée à long temps tend vers la distribution de rapidités $\Pi(v)$:

$$\tilde{n}(v,\tau) \underset{\tau\to\infty}{\longrightarrow} \Pi(v).$$

Cette définition est directement exploitable expérimentalement : à temps long, la distribution spatiale devient homothétique à la distribution de vitesses,

$$\tau n(x,\tau) \underset{\tau\to\infty}{\longrightarrow} \Pi(x/\tau).$$

D-2-a-ii Distribution locale et LDA. Pour un nuage atomique piégé dans un potentiel longitudinal variant lentement, on peut appliquer la LDA. Le gaz est alors vu comme un fluide décomposé en cellules mésoscopiques de densité homogène et relaxée. Dans chaque cellule, l'état d'équilibre est décrit par un GGE, ou équivalemment par une distribution de rapidités locale $\rho(x,\theta)$. Cette description permet d'étudier non seulement l'équilibre, mais aussi la dynamique hors équilibre à grandes échelles spatiales et temporelles, via la théorie GHD.

D-2-a-iii Protocole expérimental. Pour mesurer $\rho(x,\theta)$ localement :

1. Une zone du nuage atomique de taille ℓ centrée en x_0 est sélectionnée à l'aide du DMD. La pression de radiation supprime instantanément les atomes en dehors de la zone, laissant uniquement ceux de la cellule (Fig V.5).

2. Après la sélection, le confinement longitudinal est relâché, tandis que le confinement transverse reste actif. Les atomes réalisent une expansion 1D pendant un temps τ, puis le profil de densité est imagé (typiquement pour $\tau \sim 60$ ms).

3. Le protocole est répété pour plusieurs positions x_0, permettant d'obtenir la distribution de rapidités locale sur l'ensemble du nuage.

1. Dans la limite champ classique, le gaz de Lieb–Liniger est décrit par l'équation de Schrödinger non-linéaire. La théorie de diffusion inverse permet alors de construire un ensemble de quantités conservées. Dans ce cadre, la distribution de rapidités peut être définie comme la distribution en impulsion asymptotique des atomes après une expansion 1D, ce qui établit un lien direct entre rapidités et quantités conservées [BDB23]

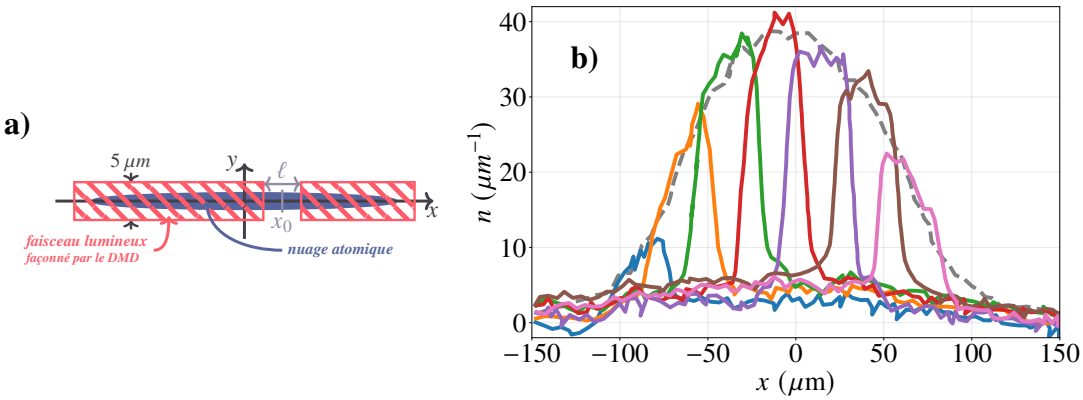


FIGURE V.5 – (a) Schéma illustrant la sélection d'une région du nuage atomique, ici représentée par une ellipse bleue illuminée par un faisceau modulé à l'aide du DMD.
(b) Exemple de sélections sur un gaz initialement à l'équilibre : superposition du profil de densité initial du nuage (courbe grise) et des profils mesurés après $\tau = 1$ ms pour différentes régions de sélection de taille $\ell = 37\ \mu$m centrées en différentes positions x_0 (courbes colorées).

D-2-a-iv Mesures à l'équilibre. Pour un gaz initialement à l'équilibre dans un piège harmonique, le profil de densité de chaque zone sélectionnée est analysé via TBA et la LDA, donnant température T et potentiel chimique μ. Après un temps d'expansion long, le profil devient homothétique à la distribution de rapidités locale $\rho(x, \theta)$. La comparaison avec les prédictions numériques montre une bonne cohérence, confirmant que le protocole permet de sonder efficacement $\rho(x, \theta)$.

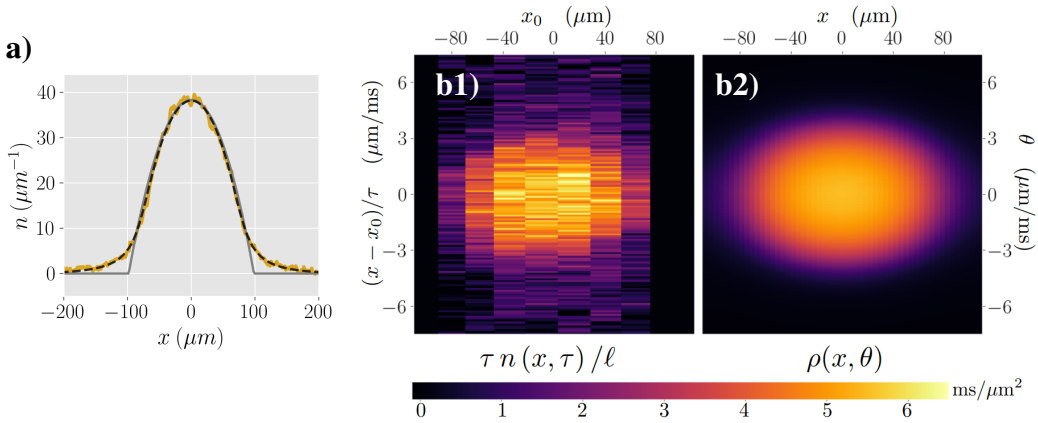


FIGURE V.6 – a) Profil de densité d'un nuage atomique initialement à l'équilibre dans un piège harmonique avec $\omega_\perp = 2\pi \times 2.6$ kHz et $\omega_\parallel = 2\pi \times 5$ Hz (jaune). La courbe grise représente le profil parabolique attendu à l'état fondamental dans le régime qBEC, décrit par l'équation d'état $n(x) = [\mu - V_\parallel(x)]/g$. La courbe noire en pointillés correspond à un ajustement des données expérimentales en supposant que le système soit bien décrit par un ensemble thermique (TBA (Sec. B-2–x)). Cet ajustement permet d'extraire une température $T = 90$ nK et un potentiel chimique $\mu/k_B = 49$ nK. (b1) Profils de densités pour différents centres de sélection x_0 représentés sur la Fig.V.5(b). Les sélections sont de taille $\ell = 37\,\mu m$ et les profils obtenus après un temps d'expansion $\tau = 40\,ms$. Pour comparer les résultats à une distribution de rapidités, les profils de densités sont multipliés par le rapport τ/ℓ et sont tracés en fonction de $(x - x_0)/\tau$. (b2) Prédiction théorique de la distribution de rapidités spatialement résolue $\rho(x, \theta)$ à l'équilibre thermique dans un potentiel harmonique longitudinal avec $\omega_\parallel = 2\pi \times 5$ Hz. La température T et le potentiel chimique μ utilisés sont ceux obtenus à partir du profil in situ (a).

D-2-a-v Résumé. Nous avons développé une méthode permettant de sonder localement la distribution de rapidités à l'aide du DMD. Les atomes extraits par la sélection sont ensuite laissés en expansion le long

du guide unidimensionnel. Après un temps d'évolution suffisamment long, la forme du profil de densité obtenu correspond directement à la distribution de rapidités locale. Ce protocole a été testé avec succès sur un gaz initialement préparé à l'équilibre.

D-2-a-vi Dynamique.

Motivation. Pour vérifier si le régime asymptotique des expansions longitudinales est atteint, il est nécessaire de comparer les résultats expérimentaux à une théorie dynamique. L'outil adapté est GHD, déjà introduite au Chapitre III, qui décrit l'évolution spatio-temporelle de la distribution de rapidités.

Invariance d'échelle hydrodynamique. On considère une sélection initiale homogène de taille ℓ centrée en x_0. Dans ce cas, les équations GHD (III.61) s'écrivent sans potentiel, avec la condition initiale $\rho(x,\theta,0) = \rho_0(\theta)$ si $|x - x_0| \leq \ell/2$, et 0 sinon. En introduisant les variables sans dimension $\alpha = (x - x_0)/\ell$ et $\beta = \tau/\ell$, l'équation devient indépendante de ℓ.

$$\begin{cases} \partial_\beta \tilde{\rho}(\alpha,\theta;\beta) + \partial_x(v^{\text{ell}}_{[\tilde{\rho}]}(\theta)\tilde{\rho}(\alpha,\theta;\beta)) = 0 \\ \tilde{\rho}(\alpha,\theta;0) = \begin{cases} \rho_0(\theta) & \text{si } |\alpha| \leq \frac{1}{2}, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \end{cases}$$

Il en résulte que les profils de densité $n(x,\tau)$, exprimés en fonction de α, ne dépendent que du rapport β. Autrement dit, deux sélections de tailles différentes mais telles que τ/ℓ soit constant doivent conduire aux mêmes profils après expansion. Cette invariance a été vérifiée expérimentalement : les profils se superposent de manière remarquable (Fig V.7 a)) .

Lien avec les équations de Gross–Pitaevskii Dans le régime qBEC, à basse température, la dynamique peut aussi être décrite par les équations hydrodynamiques issues de GP (en négligeant la pression quantique) Après changement de variables ($\alpha = (x - x_0)/\ell$, $\beta = \tau/\ell$, $\tilde{n} = n/n_0$), on retrouve un système d'équations qui ne dépend plus de ℓ, mais uniquement du rapport adimensionné $\eta = \beta g n_0/m$.

$$\begin{cases} \partial_\beta \tilde{n} + \partial_\alpha(\tilde{v}\tilde{n}) = 0, \qquad \partial_\beta \tilde{v} + \tilde{v}\,\partial_\alpha \tilde{v} = -\dfrac{g n_0}{m}\,\partial_\alpha \tilde{n}, \\ \tilde{n}(\alpha,\beta=0) = \begin{cases} 1 & \text{si } |\alpha| \leq \frac{1}{2}, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}, \qquad \tilde{v}(\alpha,\beta=0) = 0. \end{cases}$$

Il en découle que les profils de densité sont universels lorsqu'ils sont exprimés en fonction de (α,η). Expérimentalement, ce comportement est bien confirmé : les centres des profils se superposent pour des conditions initiales différentes, et l'accord est même bon sur les bords.

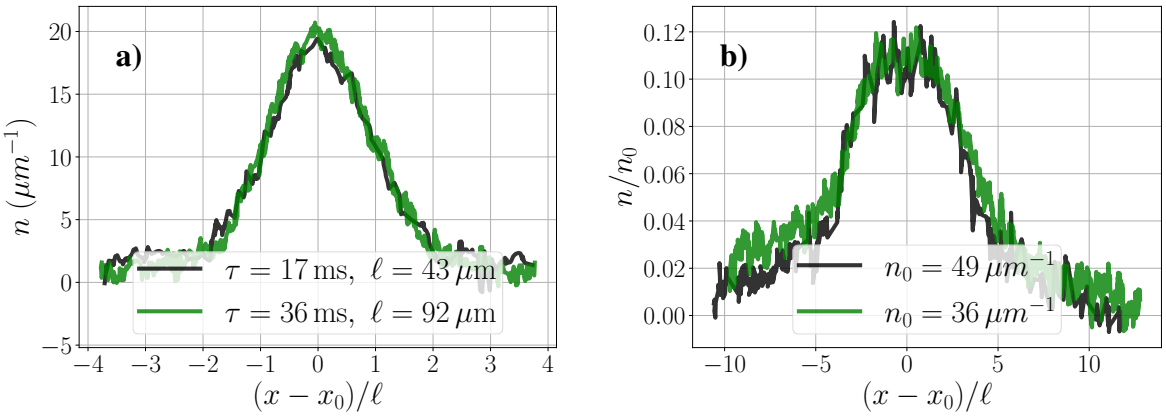


FIGURE V.7 – (a) Illustration du comportement hydrodynamique prédit par les équations de GHD. Deux profils de densité sont représentés en fonction de α pour un même paramètre $\beta = \tau/\ell = 0.39$ ms/μm.(b) Analyse du comportement hydrodynamique selon le formalisme GP. Deux profils de densité sont tracés pour un même ratio $\eta = (\tau/\ell)\, g n_0/m = 2.65$, avec une taille de sélection $\ell = 37\ \mu$m, mais pour des densités initiales n_0 différentes. Les sélections ont été réalisées sur plusieurs régions distinctes d'un même nuage.

Régime asymptotique. L'expansion des tranches est bien décrite par GHD. Les comparaisons entre données expérimentales et simulations GHD (avec des distributions thermiques initiales) montrent un bon accord au centre des profils, mais révèlent que le régime asymptotique complet n'est pas atteint dans les temps accessibles expérimentalement. On définit un écart-type

$$\sigma(\tau) = \sqrt{\frac{\int |\frac{\tau}{\ell} n_{\mathrm{GHD}}(\frac{x-x_0}{\tau}) - \rho(\frac{x-x_0}{\tau})|^2 d\tau}{\int |\rho(\frac{x-x_0}{\tau})|^2 d\tau}} \tag{V.34}$$

avec n_{GHD} les profils tirés des simulations GHD. Pour $\tau = 50$ ms, l'écart-type reste d'environ 12%, et une convergence complète nécessiterait des temps irréalistes (~ 500 ms). L'extraction de la distribution de rapidité à partir des profils reste donc approximative.

Dans la Fig V.8 a), on compare les profils expérimentaux obtenus après une expansion de différentes durées à ceux issus des simulations GHD pour une distribution thermique initiale. L'écart-type $\sigma(\tau)$ (eq. (V.34)) est tracé en fonction du temps d'expansion dans la Fig V.8 b). On constate que le régime asymptotique n'est pas encore atteint pour le temps d'expansion utilisé expérimentalement ($\tau = 40$ ms). Et il faudrait des temps d'expansion bien plus longs pour que l'écart-type diminue significativement.

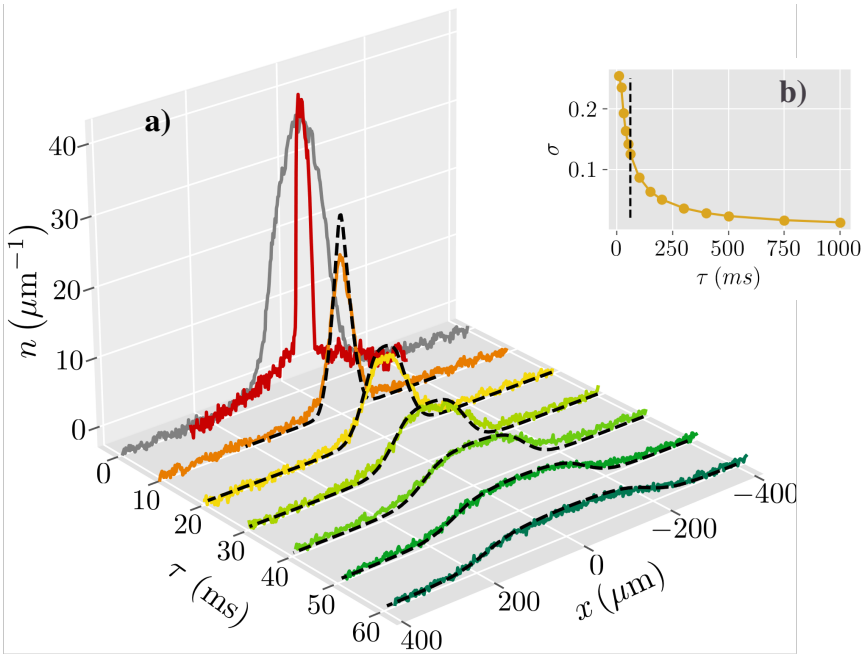


Figure V.8 – (a) La tranche , centrée en $x_0 = 0\,\mu$m, subit une expansion le long de l'axe longitudinal et d'une largeur $\ell = 37\,\mu$m. Le profil initial du gaz est montré en gris. Les variations de densité pour différents temps d'expansion sont représentées par des courbes colorées. Les lignes pointillées noires indiquent les résultats des simulations GHD pour une distribution de rapidités initialement thermique, paramétrée par la température T et le potentiel chimique $\mu(x_0) = \mu$, tels qu'ils sont extraits du profil de densité in situ.(b) L'écart-type $\sigma(\tau)$ (eq. (V.34)) est calculé entre la distribution de rapidités et les résultats des simulations GHD en fonction du temps d'expansion τ. La ligne verticale noire correspond au temps d'expansion utilisé dans l'expérience.

8.6 Mesure locale de distribution de rapidités hors équilibre

D-2-a-vii Mise en place d'une distribution locale hors équilibre. Le faisceau pousseur (DMD) permet non seulement de sonder la distribution de rapidités locale, mais aussi de créer des situations hors équilibre. Un protocole illustratif consiste à retirer les atomes d'une région centrale de taille $\ell_0 = 70\,\mu$m, puis à laisser le gaz évoluer librement longitudinalement (1D). Après un temps $\tau = 15$ ms, la distribution de rapidités développe une structure doublement piquée, très différente d'une distribution thermique. Une seconde sélection locale ($\ell = 35\,\mu$m) suivie d'une expansion révèle expérimentalement ce profil, en excellent accord avec les simulations GHD (Fig V.9).

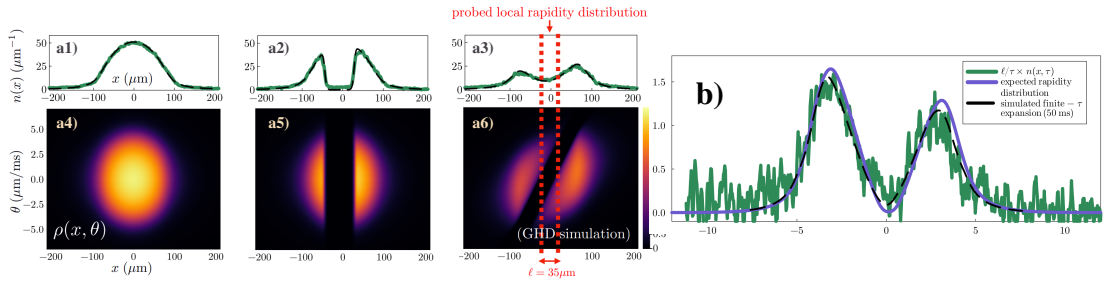


FIGURE V.9 – Les profils de densité sont montrés à différents stades : à l'équilibre initial (a1), 1 ms après la première sélection (a2), et 15 ms après une expansion le long du guide 1D (a3). Les distributions de rapidités résolues spatialement correspondantes sont illustrées dans les panels (a4) à (a6). Les lignes pointillées rouges indiquent la deuxième sélection. (b) Pour obtenir la distribution locale de rapidités, on trace $\tau\, n(x,\tau)/\ell$ sur une région de largeur $\ell = 36\,\mu$m après un temps d'expansion longitudinal $\tau = 50$ ms. Le profil présente une double crête et montre un excellent accord avec la prédiction théorique de la distribution de rapidités (courbe violette), y compris les corrections dues à un temps d'expansion fini (courbe noire pointillée).

D-2-a-viii Analyse des distributions locales hors équilibre Cette approche démontre l'importance d'une mesure locale : alors que la distribution globale $\int dx\, \rho(x,\theta)$ est conservée, la distribution locale $\rho(x,\theta)$ reflète directement la dynamique hors équilibre. Le dispositif basé sur le DMD offre ainsi un outil puissant pour générer et caractériser divers protocoles hors équilibre (cisaillement, jonctions de densité, états stationnaires non thermiques, etc.), ouvrant de nouvelles perspectives pour l'étude des gaz de Bose 1D. Pour une présentation plus détaillée de ces résultats, le lecteur pourra se référer à notre article [Dub+24].

Conclusion

Résumé

Dans ce chapitre, nous avons décrit les principaux dispositifs expérimentaux utilisés dans notre étude. Le système atomique est préparé dans une géométrie unidimensionnelle, avec un confinement longitudinal réalisé par un potentiel de la forme $V_{\parallel}(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4$, qui permet d'ajuster finement la forme du piège. Par ailleurs, l'utilisation du DMD joue un rôle essentiel : cet outil permet non seulement de sélectionner localement une portion du nuage atomique afin de sonder la distribution des rapidités, mais également de générer des dynamiques hors équilibre. Ces protocoles incluent, par exemple, l'analogue du *pendule de Newton*, ainsi que la situation présentée dans la dernière section.

Bibliographie

[Spi80] Edward A. SPIEGEL. "Fluid dynamical form of the linear and nonlinear Schrödinger equations". In : *Physica D : Nonlinear Phenomena* 1 (1980), p. 236-240. URL : https://api.semanticscholar.org/CorpusID:121071034.

[KSS96] Yu. KAGAN, E. L. SURKOV et G. V. SHLYAPNIKOV. "Evolution of a Bose-condensed gas under variations of the confining potential". In : *Phys. Rev. A* 54 (3 sept. 1996), R1753-R1756. DOI : 10.1103/PhysRevA.54.R1753. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.54.R1753.

[For+98] J. FORTAGH et al. "Miniaturized Wire Trap for Neutral Atoms". In : *Phys. Rev. Lett.* 81 (24 déc. 1998), p. 5310-5313. DOI : 10.1103/PhysRevLett.81.5310. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.5310.

[DCS99] Johannes DENSCHLAG, Donatella CASSETTARI et Jörg SCHMIEDMAYER. "Guiding Neutral Atoms with a Wire". In : *Phys. Rev. Lett.* 82 (10 mars 1999), p. 2014-2017. DOI : 10.1103/PhysRevLett.82.2014. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.82.2014.

[RHH99] J. Reichel, W. Hänsel et T. W. Hänsch. “Atomic Micromanipulation with Magnetic Surface Traps”. In : *Phys. Rev. Lett.* 83 (17 oct. 1999), p. 3398-3401. doi : 10.1103/PhysRevLett.83.3398. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.83.3398.

[Fol+00] Ron Folman et al. “Controlling Cold Atoms using Nanofabricated Surfaces : Atom Chips”. In : *Phys. Rev. Lett.* 84 (20 mai 2000), p. 4749-4752. doi : 10.1103/PhysRevLett.84.4749. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.84.4749.

[Hän+01] Wolfgang Hänsel et al. “Bose–Einstein Condensation on a Microelectronic Chip”. In : *Nature* 413 (nov. 2001), p. 498-501. doi : 10.1038/35097032.

[Ott+01] H. Ott et al. “Bose-Einstein Condensation in a Surface Microtrap”. In : *Phys. Rev. Lett.* 87 (23 nov. 2001), p. 230401. doi : 10.1103/PhysRevLett.87.230401. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.87.230401.

[Kra+02] S Kraft et al. “Anomalous longitudinal magnetic field near the surface of copper conductors”. In : *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* 35.21 (oct. 2002), p. L469. doi : 10.1088/0953-4075/35/21/102. url : https://dx.doi.org/10.1088/0953-4075/35/21/102.

[Aus03] Christine Aussibal. “Réalisation d’un condensat de Bose-Einstein sur une microstructure”. Thèse de doct. Université Paris Sud - Paris XI, nov. 2003. url : https://pastel.hal.science/tel-00004429.

[FLC03] J. N. Fuchs, X. Leyronas et R. Combescot. “Hydrodynamic modes of a one-dimensional trapped Bose gas”. In : *Phys. Rev. A* 68 (4 oct. 2003), p. 043610. doi : 10.1103/PhysRevA.68.043610. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.68.043610.

[Mor+03] Henning Moritz et al. “Exciting Collective Oscillations in a Trapped 1D Gas”. In : *Phys. Rev. Lett.* 91 (25 déc. 2003), p. 250402. doi : 10.1103/PhysRevLett.91.250402. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.250402.

[Est+04] J. Estève et al. “Role of wire imperfections in micromagnetic traps for atoms”. In : *Phys. Rev. A* 70 (4 oct. 2004), p. 043629. doi : 10.1103/PhysRevA.70.043629. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.70.043629.

[KWW04] Toshiya Kinoshita, Trevor Wenger et David S. Weiss. “Observation of a one-dimensional Tonks-Girardeau gas”. In : *Science* 305.5687 (2004), p. 1125-1128. doi : 10.1126/science.1100700. url : https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1100700.

[Par+04] Belén Paredes et al. “Tonks-Girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice”. In : *Nature* 429.6989 (2004), p. 277-281. doi : 10.1038/nature02530. url : https://hal.science/hal-00002239.

[Tol+04] B. Laburthe Tolra et al. “Observation of Reduced Three-Body Recombination in a Correlated 1D Degenerate Bose Gas”. In : *Phys. Rev. Lett.* 92 (19 mai 2004), p. 190401. doi : 10.1103/PhysRevLett.92.190401. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.190401.

[Sch+05] T. Schumm et al. “Matter-wave interferometry in a double well on an atom chip”. In : *Nature Phys.* 1.1 (2005), p. 57-62. doi : 10.1038/nphys125.

[BS06] D. M. Brink et C. V. Sukumar. “Majorana spin-flip transitions in a magnetic trap”. In : *Phys. Rev. A* 74 (3 sept. 2006), p. 035401. doi : 10.1103/PhysRevA.74.035401. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.74.035401.

[KWW06] Toshiya Kinoshita, Trevor Wenger et David Weiss. “A quantum Newton’s cradle”. In : *Nature* 440 (mai 2006), p. 900-3. doi : 10.1038/nature04693.

[Tre+06] J.-B. Trebbia et al. “Experimental Evidence for the Breakdown of a Hartree-Fock Approach in a Weakly Interacting Bose Gas”. In : *Phys. Rev. Lett.* 97 (25 déc. 2006), p. 250403. doi : 10.1103/PhysRevLett.97.250403. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.250403.

[Tre+07] J.-B. Trebbia et al. “Roughness Suppression via Rapid Current Modulation on an Atom Chip”. In : *Phys. Rev. Lett.* 98 (26 juin 2007), p. 263201. doi : 10.1103/PhysRevLett.98.263201. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.263201.

[Jac12] Thibaut JACQMIN. "Mesures de corrélations dans un gaz de bosons unidimensionnel sur puce". 2012PA112261. Thèse de doct. 2012. URL : http://www.theses.fr/2012PA112261/document.

[Fan14] Yiyuan Bess FANG. "Equilibrium and Nonequilibrium Behaviours of 1D Bose Gases". 2014IOTA0005. Thèse de doct. 2014. URL : http://www.theses.fr/2014IOTA0005/document.

[Joh16] Aisling JOHNSON. "One-dimensional Bose Gases on an Atom Chip : Correlations in Momentum Space and Theoretical Investigation of Loss-induced Cooling." 2016SACLO013. Thèse de doct. 2016. URL : http://www.theses.fr/2016SACLO013/document.

[PS16] Lev PITAEVSKII et Sandro STRINGARI. *Bose-Einstein Condensation and Superfluidity*. Oxford University Press, jan. 2016. ISBN : 9780198758884. DOI : 10.1093/acprof:oso/9780198758884.001.0001. URL : https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780198758884.001.0001.

[Cau+19] Jean-Sébastien CAUX et al. "Hydrodynamics of the interacting Bose gas in the Quantum Newton Cradle setup". In : *SciPost Phys.* 6 (2019), p. 070. DOI : 10.21468/SciPostPhys.6.6.070. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.6.6.070.

[Sch+19] M. SCHEMMER et al. "Generalized Hydrodynamics on an Atom Chip". In : *Phys. Rev. Lett.* 122 (9 mars 2019), p. 090601. DOI : 10.1103/PhysRevLett.122.090601. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.122.090601.

[Sch19] Maximilian SCHEMMER. "Out-of-equilibrium dynamics in 1D Bose gases". 2019SACLO002. Thèse de doct. 2019. URL : http://www.theses.fr/2019SACLO002/document.

[BDB23] Yasser BEZZAZ, Léa DUBOIS et Isabelle BOUCHOULE. *Rapidity distribution within the defocusing non-linear Schrödinger equation model*. 2023. arXiv : 2301.11098 [cond-mat.quant-gas]. URL : https://arxiv.org/abs/2301.11098.

[Dub+24] L. DUBOIS et al. "Probing the Local Rapidity Distribution of a One-Dimensional Bose Gas". In : *Phys. Rev. Lett.* 133 (11 sept. 2024), p. 113402. DOI : 10.1103/PhysRevLett.133.113402. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.133.113402.

[Dub24] Léa DUBOIS. "Dynamique hors d'équilibre d'un gaz de Bosons unidimensionnel étudiée via la mesure spatialement résolue de la distribution des quasiparticules". 2024UPASP066. Thèse de doct. 2024. URL : http://www.theses.fr/2024UPASP066/document.

[Dub+25] L. DUBOIS et al. "Experimental Investigation of a Bipartite Quench in a 1D Bose gas". Laboratoire Charles Fabry, Institut d'Optique, CNRS, Université Paris-Saclay ; CESQ and ISIS (UMR 7006), University of Strasbourg and CNRS. Mai 2025. URL : https://arxiv.org/pdf/2505.05839.

Chapitre VI

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

Sommaire

A Dynamique balistique d'un gaz 1D après une coupure bipartite . . . 111
A-1 Préparation expérimentale et protocole de coupure . . . 111
A-2 Cadre de la GHD et dynamique balistique . . . 111
A-3 Validation expérimentale de la dynamique hydrodynamique . . . 113
B Sonder la distribution locale des rapidités . . . 114
B-1 Sélection d'une tranche localisée après déformation du bord . . . 115
B-2 Expansion de la tranche et observation d'une asymétrie . . . 116
C Simulations numériques . . . 118
C-1 Système homogène à l'équilibre thermique . . . 118
C-2 Dynamique du contour dans l'espace des phases (x,θ). . . . 118
C-3 Simulation de la déformation du bord . . . 120
C-4 Simulation de l'expansion. . . . 120
C-5 Comparaison avec les données expérimentales et discussion . . . 124
Bibliographie . . . 126

Introduction

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

Le problème de *Riemann* en hydrodynamique : Un test fondamental de la dynamique hors équilibre est fourni par le problème dit de *Riemann* [Rie60 ; Bre13], qui consiste à étudier l'évolution d'un système à partir d'une discontinuité initiale dans l'espace. Dans sa formulation générale, on considère une équation de conservation de la forme

$$\partial_t u + \partial_x f(u) = 0. \tag{VI.1}$$

Le problème de *Riemann* correspond au cas où la situation initiale est composée de deux régions homogènes, juxtaposées de part et d'autre de l'origine :

$$u(x,t=0) = \begin{cases} u_g & \text{si} \quad x<0 \\ u_d & \text{si} \quad x>0 \end{cases} . \tag{VI.2}$$

Ce type de configuration, appelé problème de *Riemann* à données discontinues, permet de sonder la réponse non linéaire du système.

Le problème de *Riemann quantique* : un cadre paradigmatique. Considérons le cas d'un système quantique intégrable. Un macro-état est caractérisé par un ensemble infini de paramètres, chacun associé à une charge conservée locale reliée à une charge globale, comme discuté au chapitre II. Les équations de continuité correspondantes, de la forme (VI.1), forment alors un système infini de relations couplées. Dans ce cadre, le problème de *Riemann* (VI.2) se généralise naturellement au cas d'un nombre infini de champs hydrodynamiques u, engendrant une dynamique gouvernée par une hiérarchie de lois de conservation.

Notre système : un gaz de bosons 1D faiblement interactifs : Nous considérons un gaz quantique unidimensionnel de bosons faiblement interactifs, confiné dans une géométrie strictement 1D, et bien décrit par le modèle intégrable de LL avec interactions répulsives.

Préparation expérimentale et protocole de coupure : La configuration initiale consiste à préparer un gaz homogène à densité constante n_0, et à température contrôlée (voir Fig. VI.3). Un protocole de coupe abrupte est ensuite appliqué : la partie gauche du système ($x<0$) est vidée de ses atomes, tandis que la partie droite ($x>0$) reste occupée. Ce *quench bipartite* génère une discontinuité initiale de densité, analogue au problème de *Riemann*, mais dans un système quantique doté d'un nombre infini de lois de conservation. Ce protocole a déjà fait l'objet d'une première étude expérimentale dans la thèse de L. Dubois [Dub24], qui en a révélé le potentiel pour sonder la dynamique hors équilibre.

Observation d'une propagation balistique. Nous analysons la dynamique unitaire du gaz à l'aide du formalisme de GHD. À l'échelle d'*Euler*, le cadre de la GHD ne décrit pas l'état initial de type *Riemann*(VI.2), mais devient valide après une courte évolution temporelle. Nous montrons que la discontinuité initiale engendre une propagation balistique, en accord avec la solution du problème de *Riemann généralisé*. Le profil de densité, mesuré à différents instants t, présente une dépendance universelle en x/t (voir Fig. VI.4 (e)–(g)). De légers écarts subsistent néanmoins, que nous attribuons à des effets entropiques ainsi qu'à des imperfections expérimentales.

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

Accès expérimental au facteur d'occupation $\nu(x,\theta)$: Nous développons également une méthode expérimentale originale permettant de mesurer localement le facteur d'occupation $\nu(x,\theta)$ dans la région de déformation. La GHD prédit que cette quantité révèle une forte asymétrie : large et lisse du côté initialement occupé, abrupte et tronquée du côté initialement vide. Cette asymétrie reflète le fait que, localement, le système est dans un état non thermique, alors que dans un état thermique, le facteur d'occupation $\nu(\theta)$ serait symétrique par rapport à $\theta=0$. Cette asymétrie reflète le fait que, localement, le système est dans un état non thermique. En effet, dans un état thermique, le facteur d'occupation $\nu(\theta)$ est symétrique, tandis qu'ici, il présente une coupure nette du côté initialement vide.

Conclusion : Ce chapitre explore ainsi, à la fois théoriquement et expérimentalement, la dynamique d'un gaz intégrable soumis à une discontinuité initiale de densité.

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

Introduction

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

L'objectif est double :

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

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

A-1 Préparation expérimentale et protocole de coupure

A-1–i Contexte expérimental et références Les détails concernant l'imagerie, le piégeage et la sélection spatiale sont présentés de manière approfondie dans le chapitre (V), ainsi que dans la thèse de L. Dubois [Dub24]. Dans cette sous-section, nous nous limitons aux éléments essentiels à la compréhension du protocole de coupure et de la dynamique qui en résulte.

A-1–ii Préparation et coupure bipartite Comme décrit en détail au Chap. V, nous préparons un gaz unidimensionnel de bosons ^{87}Rb dans l'état hyperfin $|F = 2, m_F = 2\rangle$, piégé sur une puce atomique. Le confinement transverse, assuré par des microfils RF, place le système dans le régime 1D ($\mu, k_B T \ll \hbar\omega_\perp$), tandis qu'un confinement longitudinal quartique $V(x) = a_4 x^4$ assure une densité homogène sur environ 250 μm. Cette homogénéité est cruciale pour simuler le problème de *Riemann*.

La coupure bipartite est ensuite obtenue par illumination sélective d'une extrémité du gaz à l'aide d'un faisceau quasi-résonant modulé par un DMD, expulsant localement les atomes par pression de radiation [Dub+24]. On crée ainsi une discontinuité nette de densité entre une région vide ($x < 0$) et une région homogène ($x > 0$).

A-1–iii Évolution après coupure Une fois la coupure effectuée, le confinement longitudinal est supprimé tandis que le confinement transverse est maintenu. Le gaz évolue alors librement dans une direction, ce qui est analogue à (VI.1), mais depuis une condition initiale de deux régions homogènes (problème de *Riemann*) (VI.2). L'évolution du profil de densité $n(x, t)$ est mesuré par imagerie après différentes durées t d'évolution.

A-2 Cadre de la GHD et dynamique balistique

Dans cette section, nous présentons le cadre théorique de GHD appliqué à l'expérience décrite précédemment. L'objectif est de décrire analytiquement la dynamique balistique induite par une coupure bipartite dans un gaz quantique unidimensionnel, en exploitant les équations de GHD appliquées au modèle de LL.

A-2–i Pourquoi travailler avec v plutôt qu'avec ρ ?

Équation de GHD en termes de ρ. L'évolution à grande échelle du système est gouvernée par les équations de GHD [Ber+16 ; CDY16]. L'évolution pour la distribution des rapidités $\rho(x, \theta; t)$ (Eq (III.61)), en l'absence de potentiel extérieur, prend la forme d'une équation convective :

$$\partial_t \rho + \partial_x \left(v^{\text{eff}}_{[\rho]} \rho \right) = 0, \tag{VI.3}$$

où $v^{\text{eff}}_{[\rho]}(\theta)$ est la vitesse effective des quasi-particules de rapidité θ, fonctionnelle non linéaire de ρ et où un terme de compression $\partial_x(v^{\text{eff}}_{[\rho]}\rho)$ apparaît lorsqu'on développe la dérivée. Cela complique l'analyse, notamment lorsque les vitesses effectives varient fortement dans l'espace ou le temps.

Pour chaque rapidité θ, l'équation (VI.3) constitue un cas particulier de (VI.1). Nous considérons ici une condition initiale de type « coupure bipartite », représentant un état homogène à droite ($x > 0$) et vide à gauche ($x < 0$) :

$$\rho(x,\theta;t=0) = \begin{cases} \rho_0(\theta) & \text{si } x > 0, \\ 0 & \text{si } x < 0. \end{cases} \tag{VI.4}$$

Ce type de condition correspond, pour chaque rapidité θ, aux conditions introduites dans l'introduction ((VI.2)).

Équation de GHD en termes de ν. En comparaison, l'évolution du facteur d'occupation $\nu(x,\theta;t)$ (eq. (III.62)), qui, en l'absence de potentiel extérieur, suit une équation de transport pur :

$$\partial_t \nu + v^{\text{eff}}_{[\nu]}\,\partial_x \nu = 0, \tag{VI.5}$$

où la dérivée temporelle est directement couplée à une dérivée spatiale. Cette forme préserve l'information le long des caractéristiques associées aux vitesses effectives $v^{\text{eff}}_{[\nu]}$, ce qui rend la dynamique plus lisible et plus simple à analyser.

Les équations de transport pur (VI.5) diffèrent structurellement des équations de conservation générales de la forme (VI.1) : en effet, l'équation de transport pur ne comporte pas de terme de divergence du flux $\partial_x f(u)$, mais seulement un couplage direct entre la dérivée temporelle et la dérivée spatiale, ce qui modifie profondément la nature de ses solutions. Ainsi, même les conditions initiales sont de type « coupure bipartite » pour ν :

$$\nu(x,\theta;t=0) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } x > 0, \\ 0 & \text{si } x < 0. \end{cases} \tag{VI.6}$$

On remarque toutefois que les conditions initiales pour ν sont formellement du type (VI.2).

Dans ce travail, nous choisissons de formuler la dynamique hydrodynamique généralisée en termes de la fonction d'occupation $\nu(x,\theta;t)$, plutôt que de la distribution de rapidité $\rho(x,\theta,t)$. Cette approche présente plusieurs avantages. D'une part, l'équation vérifiée par ν est une équation de transport pur (VI.5), ce qui permet une résolution naturelle par la méthode des caractéristiques, et donc une résolution plus simple que dans (VI.3). D'autre part, ν possède une interprétation physique claire comme facteur d'occupation, borné entre 0 et 1, ce qui en fait une variable plus stable et mieux adaptée aux calculs analytiques ou numériques. De plus, la dynamique effective des observables s'exprime naturellement en fonction de ν. Enfin, ν et ρ étant liés (par (I.90)), résoudre l'équation en ν revient, une fois $v^{\text{eff}}_{[\nu]}$ déterminé, à résoudre complètement la dynamique de ρ.

A-2–ii Structure auto-similaire de la solution. Un point central est que les conditions initiales (VI.6) sont invariantes par dilatation. En effet, quel que soit $\alpha > 0$, et pour tout x réel, on a $\nu(\alpha x,\theta;t=0) = \nu(x,\theta;t=0)$. Un autre point central de la GHD est l'invariance d'échelle des solutions de l'équation (VI.5) ((VI.3) aussi et plus généralement de (VI.1)). En effet, si $\nu(x,\theta;t)$ est solution de l'équation (VI.5), alors $\nu(\alpha x,\theta;\alpha t)$ l'est également, pour tout $\alpha > 0$, avec les conditions initiales $\nu(\alpha x,\theta;t=0)$. Comme les fonctions $\nu(\alpha\cdot,\theta;t=0)$ et $\nu(\alpha x,\theta;t=0)$ coïncident, ainsi si (VI.5) admet au plus une solution physique ("entropique" [Cou09]) pour chaque donnée initiale, on doit avoir $\nu(\alpha x,\theta;\alpha t) = \nu(x,\theta;t)$ pour tout $\alpha > 0$. Cette propriété implique que :

$$\nu(x,\theta;t) = \nu^*\left(\frac{x}{t},\theta\right), \tag{VI.7}$$

autrement dit les solutions dépendent uniquement du rapport $\xi = x/t$ (, appelé *variable auto-similaire*).

A-2–iii Résolution de l'évolution de ν. L'équation (VI.7) montre que la dynamique est entièrement encodée dans la fonction $\nu^*(\xi,\theta)$, qui décrit la structure locale du gaz le long des rayons de vitesse ξ. Pour différent θ , (VI.5), se réécrit, en utilisant (VI.7), avec une dérivée selon ξ :

$$(\xi - v^{\text{eff}}_{[\nu^*(\xi,\cdot)]}(\theta))\,\partial_\xi \nu^* = 0. \tag{VI.8}$$

Autrement dit, pour chaque θ, soit la vitesse effective est égale à ξ, soit la dérivée $\partial_\xi \nu^*(\xi,\theta)$ s'annule.

La vitesse effective, $v^{\text{eff}}[\nu^*(\xi,\cdot)](\theta)$, est strictement monotone en θ ; il existe donc au plus un unique point θ^* tel que $\xi = v^{\text{eff}}[\nu^*](\theta^*)$, c'est-à-dire une seule discontinuité dans la solution.

Autrement dit : pour une valeur fixée de ξ, **la fonction $\nu^*(\xi,\theta)$ est constante** en θ, sauf au point θ^* où une **discontinuité** apparaît.

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

$$\nu^*(\xi,\theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } \theta < \theta^*, \\ 0 & \text{si } \theta > \theta^*, \end{cases} \quad \theta^* \text{ est tel que } v^{\text{eff}}_{[\nu^*(\xi,\cdot)]}(\theta^*) = \xi. \tag{VI.9}$$

L' équation implicite peut être résolue numériquement afin d'obtenir $\theta^*(\xi)$ pour chaque valeur de ξ.

A-2–iv Résumé Une prédiction remarquable de la GHD est l'apparition d'une discontinuité dans la fonction du facteur d'occupation local $\nu^*(\xi,\theta)$. Cette discontinuité se produit en θ^*, avec $\nu^*(\xi,\theta) = 0$ pour $\theta > \theta^*$. Un tel comportement est analogue à la discontinuité présente au bord de la mer de Fermi dans l'état fondamental du système (voir Chapitre II). Du côté des petites valeurs de θ, la fonction $\nu^*(\xi,\theta)$ coïncide avec la distribution initiale $\nu_0(\theta)$. Ainsi, pour un état initial thermique, ce côté reste lisse et sans discontinuité.

Le fait qu'à grande échelle le gaz présente localement un facteur d'occupation avec une singularité typique d'un état d'entropie nulle constitue une conséquence directe de l'intégrabilité du système. En effet, dans un système intégrable, les quasi-particules conservent leur individualité et se propagent à vitesse bien définie, sans diffusion. Cela permet de maintenir, à temps long, des structures non thermalisées telles que des discontinuités, qui disparaîtraient dans un système non intégrable.

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

A-3 Validation expérimentale de la dynamique hydrodynamique

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

A-3–i Mise en évidence de l'auto-similarité (régime d'*Euler*). Avec l'équation (VI.9) on a $\nu^*(\xi,\theta)$, puis $\rho^*(\xi,\theta)$ via les équations (I.92) et (I.90), ce qui permet finalement de déterminer le profil de densité linéaire $n^*(\xi)$ à un instant donné :

$$n^*(\xi) = \int d\theta\, \rho^*(\xi,\theta). \tag{VI.10}$$

Or (VI.7) implique que $\rho(x,\theta;t) = \rho^*(\xi,\theta)$. En injectant dans l'equation (VI.10), il vient que :

$$n(x;t) = n^*(\xi)\,. \tag{VI.11}$$

.

Cette propriété est testée expérimentalement en superposant les profils mesurés à différents temps, après mise à l'échelle selon $\xi = x/t$. La Fig. VI.1 montre les profils normalisés mesurés entre $t = 10$ ms et $t = 18$ ms. L'excellent recouvrement obtenu confirme la validité du régime balistique et la pertinence de la description auto-similaire prédite par la GHD.

A-3–ii Contraintes expérimentales. L'application de la GHD à l'échelle d'*Euler* dans notre expérience est limitée par des contraintes pratiques qui définissent une fenêtre temporelle $t \in [t_m, t_{\max}]$ d'observation fiable :

- Pour $t > t_{\max} \simeq 18$ ms, la densité atomique devient trop faible et les effets de taille finie compromettent l'approximation d'un système quasi-infini.
- Pour $t < t_{\min} \simeq 6 \pm 2$ ms, plusieurs facteurs réduisent la pertinence de la comparaison avec la GHD :
  - la coupure initiale n'est pas parfaitement abrupte (longueur caractéristique ~ 1 μm) ;
  - la résolution de l'imagerie limite la détection précise du bord de densité ;
  - la GHD décrit par construction les grandes échelles spatio-temporelles.

Ainsi, dans nos conditions expérimentales, la comparaison avec la GHD est la plus pertinente pour des temps compris entre $t_{\min} \approx 6$ ms et $t_{\max} \approx 18$ ms.

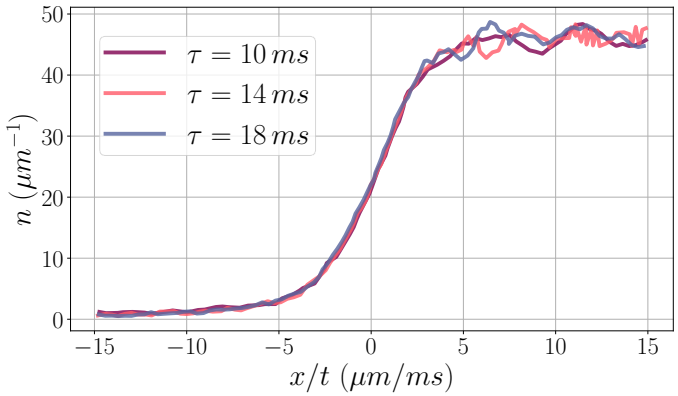


FIGURE VI.1 – Profils de densité mesurés pour différents temps t, représentés en fonction de la variable x/t. L'excellent recouvrement des courbes confirme l'auto-similarité et la dynamique balistique.

A-3–iii Conclusion Nous avons étudié la dynamique hors équilibre d'un gaz unidimensionnel de bosons après une coupure bipartite, créant une discontinuité initiale dans le profil de densité. Cette configuration, analogue au problème de *Riemann quantique*, engendre une évolution balistique qui peut être décrite par la Théorie d'Hydrodynamique Généralisée (GHD).

Sur le plan expérimental, un protocole précis a été mis en œuvre pour préparer un gaz homogène, le scinder spatialement à l'aide d'un DMD, puis le libérer dans un guide unidimensionnel. L'évolution du profil de densité $n(x,t)$ a été mesurée pour différents temps, révélant une structure auto-similaire caractéristique du régime hydrodynamique.

Côté théorique, nous avons présenté les équations de GHD dans leur forme convective et montré que la solution du problème de *Riemann* s'exprime sous la forme d'une distribution auto-similaire $v(\xi,\theta)$, avec $\xi = x/t$. Cette structure permet de prédire analytiquement les profils de densité et de comparer directement les résultats expérimentaux aux prédictions théoriques.

La confrontation entre données expérimentales et GHD à température nulle montre une bonne correspondance dans un régime temporel intermédiaire ($t \in [6, 18]$ ms). Ces observations confirment que la dynamique induite par une coupure bipartite est bien capturée par la GHD à l'échelle d'*Euler*, validant ce cadre pour décrire la relaxation balistique des systèmes quantiques intégrables. Elles ouvrent également la voie à des explorations plus fines des effets thermiques et des corrections hors-échelle d'*Euler*.

B Sonder la distribution locale des rapidités

Introduction

Dans la section précédente, nous avons analysé l'auto-similarité des profils de densité $n(\xi)$, confirmant la description hydrodynamique de la dynamique bipartite. Nous poursuivons ici en considérant une observable plus fine : la distribution locale en rapidité $\rho(\xi, \theta)$. Contrairement à la densité, cette distribution révèle une asymétrie marquée entre les deux côtés de la jonction, c'est-à-dire que la forme de la distribution diffère nettement selon que l'on se place du côté initialement occupé ou vide ; cette asymétrie se manifeste expérimentalement par une coupure abrupte du facteur d'occupation du côté occupé, alors qu'elle reste lisse du côté vide. En particulier, la GHD prédit l'apparition d'une discontinuité abrupte dans le facteur d'occupation du côté occupé, signature d'un état local proche du fondamental, tandis que du côté vide la distribution demeure lisse.

Pour accéder expérimentalement à cette observable, nous nous appuyons sur un protocole développé dans notre équipe [Dub+24] (présenté en détail en fin du Chapitre V), qui permet de reconstruire indirectement la distribution en rapidité à partir de l'expansion libre d'une tranche localisée du gaz. En parallèle, nous comparons ces mesures aux simulations numériques issues de la GHD, afin de tester directement la présence de la discontinuité prédite.

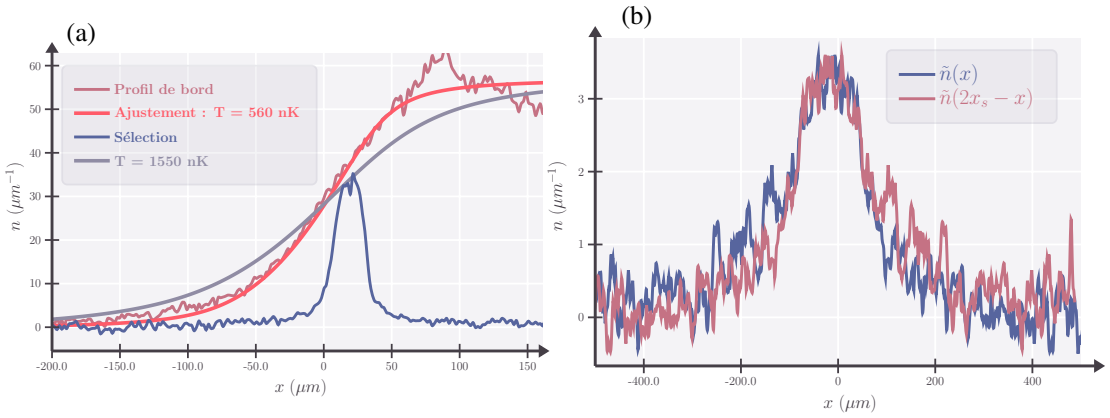


Figure VI.2 – (a) *Profil de bord et tranche sélectionnée.* Le profil de bord après 18 ms est montré en rouge. L'ajustement thermique donne une température $T = 560\,\mathrm{nK}$ (rouge). Le profil de densité mesuré 1 ms après la sélection de la tranche est en bleu. (b) *Asymétrie du profil d'expansion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

B-1 Sélection d'une tranche localisée après déformation du bord

B-1–i Sélection locale d'une tranche du gaz. Afin d'accéder localement à la distribution de rapidité, nous exploitons le fait qu'après un temps $t = 18$ ms, le bord du gaz s'étale sur plusieurs centaines de microns — environ 350 μm — comme illustré en Fig. VI.4(e)-(f) et Fig. VI.2(a). Cette large extension spatiale permet d'identifier des régions à la fois assez étendues pour être sélectionnées expérimentalement, et suffisamment étroites pour que le gaz puisse y être considéré comme localement homogène dans le cadre de l'hydrodynamique généralisée.

Pour isoler une telle région, un **faisceau pousseur** est appliqué afin d'**éliminer tous les atomes situés hors d'un intervalle spatial** centré en $x_0 = 18$ μm et de largeur ℓ. Cette technique, inspirée de la Réf. [Dub+24] (cf Chap V), permet de ne conserver qu'une **tranche localisée du gaz**, dont la distribution en rapidité reflète l'état local $\rho(x, \theta)$ aux abords de $x \approx x_0$, comme illustré en Fig. VI.6(a)–(c).

B-1–ii Contrôle expérimental du faisceau de sélection. Le profil du faisceau pousseur est caractérisé par sa position centrale x_0 et sa largeur ℓ. Lors des expériences présentées ici, seule la position x_0 a été enregistrée (ici $x_0 = 18$ μm). Tandis que la largeur ℓ n'a pas été enregistré. Cette limitation a depuis été

corrigée, mais pour les données utilisées dans cette thèse, la valeur de ℓ sera déterminée a posteriori par analyse des profils expérimentaux.

B-1–iii Inhomogénéité de la tranche sélectionnée Dans l'idéal, la tranche sélectionnée devrait être suffisamment étroite pour assurer l'homogénéité de la densité locale. Avec le protocole utilisé, la largeur minimale des tranches est d'environ 20 μm. Pour des tranches plus fines, les effets de bord deviennent significatifs. Même avec cette largeur minimale, l'inhomogénéité de la distribution de rapidité dans la tranche n'est pas négligeable, comme le montre la figure VI.4(e). Cette inhomogénéité a été prise en compte dans les calculs.

B-1–iv Estimation de ℓ et conséquences Une difficulté provient du fait que les paramètres programmés du DMD n'ont pas été sauvegardés pour ces acquisitions. Cette erreur a été corrigée pour les mesures ultérieures. Pour les données actuelles, la position et la largeur de la tranche ont été extraites directement des profils expérimentaux :

- le profil de densité du nuage juste avant l'impulsion du faisceau pousseur (courbe rose de la figure VI.2 a)) ;
- le profil de densité après l'application du faisceau pousseur, après un délai incompressible de 1 ms (courbe bleu de la figure VI.2 a)).

Les simulations GHD indiquent que, pendant ce délai, la distribution réelle de densité ne subit ni déplacement significatif ni déformation notable.

Détermination de la taille de la tranche ℓ. La largeur ℓ est estimée à partir de la conservation du nombre d'atomes : elle est ajustée de sorte que le nombre d'atomes contenus dans l'intervalle $[x_0 - \ell/2,\, x_0 + \ell/2]$ corresponde au nombre total d'atomes effectivement expulsés par la sélection.

Les simulations d'expansion conservent le nombre de particules à mieux que 3 %. Nous avons donc choisi d'ajuster ℓ de manière à ce qu'après une expansion unidimensionnelle, le nombre total de particules prédit par la simulation coïncide avec celui mesuré expérimentalement (voir Fig. VI.7(b)).

Une première simulation a été effectuée pour une température $T = 560$ nK, valeur déterminée précédemment par ajustement sur la déformation du bord. Pour reproduire correctement le nombre total de particules après une expansion unidimensionnelle de durée $\tau = 30$ ms, il est nécessaire de fixer la largeur de la tranche à $\ell = 24$ μm.

B-2 Expansion de la tranche et observation d'une asymétrie

B-2–i Principe de l'expansion et lien avec la distribution en rapidités. Après la sélection, la tranche est laissée en expansion libre unidimensionnelle pendant un temps τ, puis son profil de densité longitudinal $\tilde{n}(x,\tau)$ est mesuré. Cette expansion permet de convertir l'information spatiale en une information sur la distribution en rapidité. En effet, pour un temps τ suffisamment grand, on s'attend à ce que la densité observée soit proportionnelle à la distribution totale des rapidités dans la tranche :

$$\tau\, \tilde{n}(\tau\theta - x_0; \tau) \underset{\tau\to\infty}{\longrightarrow} \Pi(\theta), \tag{VI.12}$$

où la distribution de rapidités extensive $\Pi(\theta) = \int \rho(x,\theta;\tau \geq 0)\, dx$ est une constante du mouvement. Cette distribution peut etre calculée en utilisant l'état initial :

$$\Pi(\theta) = \int_{x_0-\ell/2}^{x_0+\ell/2} \rho(x,\theta;\tau = 0)\, dx. \tag{VI.13}$$

B-2–ii Observation expérimentale de l'asymétrie Comme discuté en section A-2, la théorie prédit que la distribution locale de rapidités $\rho(x,\theta)$ est fortement asymétrique en θ. Cette asymétrie se retrouve dans $\Pi(\theta)$ et doit donc se manifester dans le profil d'expansion $\tilde{n}(x,\tau)$. Cette asymétrie est effectivement observée dans nos données expérimentales, comme illustré en Fig. VI.2(b) pour un temps d'expansion $\tau = 30$ ms.

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

$$\tilde{n}(x) = \tilde{n}^{(x_s)}_{\text{pair}}(x) + \tilde{n}^{(x_s)}_{\text{impair}}(x), \quad \text{où} \begin{cases} \tilde{n}^{(x_s)}_{\text{pair}}(x) &= \dfrac{\tilde{n}(x) + \tilde{n}(2x_s - x)}{2}, \\ \tilde{n}^{(x_s)}_{\text{impair}}(x) &= \dfrac{\tilde{n}(x) - \tilde{n}(2x_s - x)}{2} \end{cases} . \tag{VI.14}$$

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

Un profil asymétrique est un profil pour lequel il n'existe aucune valeur de x_s pour laquelle la composante impaire s'annule. Pour le profil expérimental obtenu après expansion de la tranche, nous avons ajusté x_s de façon à minimiser la composante impaire. Plus précisément, nous avons minimisé la quantité

$$\delta^2(x_s) = \int dx \left[\frac{\tilde{n}(x) - \tilde{n}(2x_s - x)}{2}\right]^2 \Big/ \int dx\, n(x)^2 \tag{VI.15}$$

La valeur optimale de x_s minimise $\delta^2(x_s)$ et fournit un axe de symétrie effectif pour le profil. Cette méthode permet de comparer de manière robuste différentes conditions expérimentales ou différents temps d'expansion, en s'affranchissant d'un ajustement arbitraire de centre. Le profil $\tilde{n}^{(x_s)}_{\text{pair}}(x)$ et $\tilde{n}^{(x_s)}_{\text{impair}}(x)$ obtenus pour cette valeur de x_s sont montrés figure VI.2 (b). Une asymétrie est bien visible. Nous pouvons donc affirmer que le profil expérimental présente une asymétrie.

Effet de l'homogénéité de la tranche sélectionnée Π est l'intégrale (VI.13). Si $\rho(x,\theta)$ est uniforme sur la largeur ℓ, $\Pi(\theta) \simeq \ell\, \rho(x_0,\theta)$ soit :

$$\tau\, \tilde{n}(\tau\theta - x_0;\tau) \simeq \ell\, \rho(x_0,\theta), \tag{VI.16}$$

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

Deux stratégies permettent d'améliorer cette homogénéité :

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

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

La figure VI.7(a) montre que la courbe en pointillé bleu $\ell\rho(\theta)$ s'annule pour $\theta^*(x/\tau) < \theta$. La valeur $\theta^*(x/\tau)$ correspond à l'abscisse de la discontinuité. Pour un temps d'expansion τ fixé, $\theta^*(x/\tau)$ dépend de x. L'intégrale (VI.13), calculée sur l'intervalle $[x - \ell/2, x + \ell/2]$, atténue donc cette discontinuité, mais l'asymétrie reste néanmoins visible (voir Fig. VI.7(a), courbe Π).

Limites sur le temps d'expansion Allonger le temps d'expansion τ permet d'approcher plus fidèlement le régime asymptotique $\tau \to \infty$ où la correspondance avec $\Pi(\theta)$ est exacte. Toutefois, cette expansion est limitée expérimentalement par la taille longitudinale du confinement 1D, de l'ordre de 1 mm, correspondant à la taille typique des microfils (Fig V.2a)). Comme illustré en Fig. VI.2(b), le nuage atteint cette taille à $\tau \sim 30$ ms, ce qui constitue une limite pratique. Par ailleurs, des simulations GHD (voir Ref. [Dub+24]) montrent que des temps significativement plus longs seraient nécessaires pour que $\tau\tilde{n}$ converge véritablement vers $\Pi(\theta)$.

Renforcer l'asymétrie observée Enfin, une asymétrie plus marquée peut être obtenue en modifiant l'état initial du gaz. En particulier, une bipartition réalisée à partir d'un état initial légèrement excité, donc plus éloigné du fondamental, renforcerait le contraste entre les deux côtés. Cette stratégie permet d'amplifier la discontinuité attendue dans la distribution de rapidité, et par conséquent dans le profil d'expansion. C'est pour cette raison que nous avons utilisé un nuage plus chaud que celui employé pour l'étude de l'autosimilarité (Fig. VI.1, Sec A-3), tout en restant dans le régime unidimensionnel.

Résumé

Dans cette section, nous avons présenté un protocole permettant de sonder la distribution locale des rapidités dans un gaz unidimensionnel hors équilibre, en sélectionnant une tranche étroite après déformation du bord, puis en la laissant s'étendre librement. Cette procédure permet d'accéder indirectement à la distribution intégrée en rapidité $\Pi(\theta)$ dans la tranche, et de tester les prédictions de la GHD sur la structure locale du facteur d'occupation $\nu(x,\theta)$.

L'analyse expérimentale révèle une forte asymétrie du profil d'expansion, signature d'une distribution de rapidité non thermique. La méthode de symétrisation introduite permet de mettre en évidence cette asymétrie de manière robuste.

Pour approfondir cette analyse, nous nous appuyons sur des simulations numériques basées sur l'équation de GHD. Celles-ci permettent de modéliser la dynamique complète de la tranche sélectionnée, depuis la déformation du bord jusqu'à son expansion, et de confronter quantitativement les distributions mesurées aux prédictions théoriques.

C Simulations numériques

Cette section présente en détail les étapes nécessaires à la résolution numérique de l'équation de GHD dans le cadre des simulations effectuées. Dans un premier temps, nous explicitons le calcul du facteur d'occupation $\nu(\theta)$ et de la densité de rapidité $\rho(\theta)$ à l'équilibre thermique, obtenus à partir d'un couple (T,μ) donné. Nous décrivons ensuite l'évolution du système sous l'effet du potentiel de piégeage : en particulier, nous nous intéressons à la dynamique du contour délimitant la région occupée dans l'espace des phases (x,θ), en exploitant la conservation lagrangienne du facteur d'occupation. La simulation permet alors de suivre la déformation du bord au cours du temps. Une fois ce bord suffisamment évolué, nous extrayons une tranche du système pour en simuler l'expansion. Enfin, nous comparons la distribution de rapidité issue de cette expansion numérique avec celle mesurée expérimentalement, dans des conditions analogues.

C-1 Système homogène à l'équilibre thermique

Nous considérons d'abord un gaz unidimensionnel homogène infini, à l'équilibre thermique, caractérisé par le couple de paramètres thermodynamiques (T,μ). Comme expliqué au chapitre II, la thermodynamique de Bethe-Ansatz TBA permet de déterminer le facteur d'occupation $\nu_0(\theta)$, la distribution de rapidités $\rho_0(\theta)$ et la densité d'état $\rho_s(\theta)$ via (I.91).

Pour les simulations présentées ici, nous utilisons la densité expérimentale $n_0 = 45\ \mu\mathrm{m}^{-1}$ et une température $T = 560$ nK. La figure VI.3(a-c) illustre le facteur d'occupation $\nu_0(\theta)$ ainsi que la densité spatiale homogène correspondante.

Dans ce régime homogène, le facteur d'occupation est indépendante de la position :

$$\nu(x,\theta) = \nu_0(\theta), \quad \forall x, \tag{VI.17}$$

C-2 Dynamique du contour dans l'espace des phases (x,θ).

Une fois le facteur d'occupation initial $\nu_0(\theta)$ déterminé, nous cherchons à décrire l'évolution temporelle de la région occupée dans l'espace des phases (x,θ). Cette région, notée Γ_t, est définie comme le support du facteur d'occupation $\nu(x,\theta,t)$: elle contient l'ensemble des points pour lesquels ν est non nul à l'instant t.

Dans ce qui suit, nous proposons de dériver l'équation (VI.9) en adoptant une approche plus générale, qui sera utilisée par la suite.

C-2–i Interprétation lagrangienne et trajectoires caractéristiques . Dans le formalisme de l'hydrodynamique généralisée, l'évolution de ν est gouvernée par l'équation de transport (VI.5). Cette équation

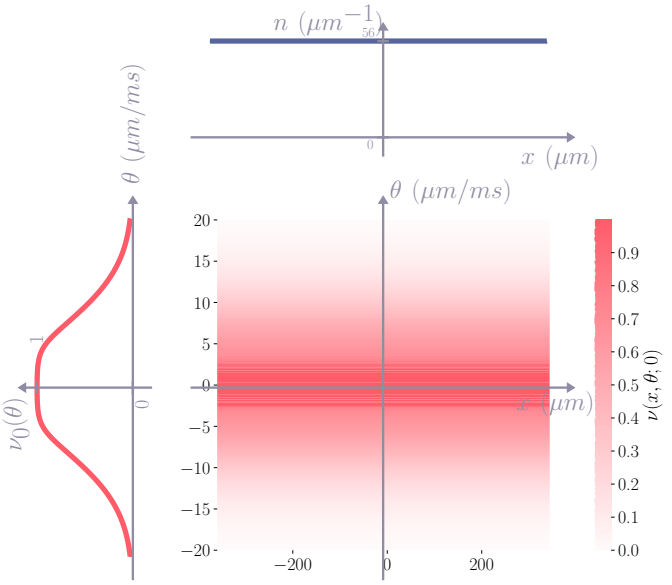


Figure VI.3 – a) Facteur d'occupation initial $\nu(x,\theta) = \nu_0(\theta)$ correspondant à un état d'équilibre thermique à la température $T = 560$ nK, pour une densité linéique homogène $n_0 = 56\ \mu\text{m}^{-1}$. Ces paramètres correspondent à un potentiel chimique $\mu = 65$ nK. b) Densité spatiale linéique $n(x) = \int \rho_{[\nu]}(x,\theta)\, d\theta$, 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).

admet une interprétation **lagrangienne** : le facteur d'occupation ν reste constant lorsqu'on le suit le long des trajectoires caractéristiques $(x(t), \theta(t))$, c'est-à-dire

$$\nu\big(x(t),\theta(t);t\big) = \nu\big(x(0),\theta(0);0\big). \tag{VI.18}$$

Autrement dit, $\frac{d\nu}{dt}(x,\theta;t) = 0$, ce qui conduit au système d'équations caractéristiques (III.49) :

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} x(t) \\ \theta(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v^{\text{eff}}_{[\nu]}(\theta(t)) \\ 0 \end{pmatrix} \text{ soit } \begin{cases} \dot{x}(t) &= v^{\text{eff}}_{[\nu]}(\theta), \\ \theta(t) &= \theta(0) \equiv \theta. \end{cases} \tag{VI.19}$$

C-2–ii État initial en "patch" et Propagation du support . Nous définissons un état de type «patch» comme un état pour lequel le facteur d'occupation $\nu(x,\theta;0)$ prend la valeur $\nu_0(\theta)$ à l'intérieur d'une région initiale Γ_0, et est nul en dehors de cette région, où t représente le temps d'évolution.

En suivant chaque point $(x(t),\theta)$ de cette région selon l'équation (VI.19), on détermine la région atteinte à l'instant t, notée Γ_t. Par construction, le facteur d'occupation reste constant le long de ces trajectoires d'après (VI.18), $\nu(x(t),\theta,t) = \nu(x(0),\theta,0)$ soit :

$$\nu(x(t),\theta,t) = \nu_0(\theta). \tag{VI.20}$$

Par conséquent, on peut écrire l'évolution du facteur d'occupation de manière explicite :

$$\nu(x,\theta,t) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } (x,\theta) \in \Gamma_t, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{VI.21}$$

Cette propriété est une conséquence directe du cadre intégrable sous-jacent et de la forme particulière de l'équation de GHD, qui assure que les caractéristiques $(x(t),\theta)$ suivent une dynamique conservant localement le facteur d'occupation.

Enfin, notons que, dans ce cadre, la vitesse efficace $v^{\text{eff}}_{[\nu]}(x,\theta,t)$ est fonctionnelle de la fonction $\nu(x,\cdot;t)$
.

C-3 Simulation de la déformation du bord

Dans la configuration initiale correspondant à l'expérience de déformation du bord (Fig. VI.4), la région occupée par le gaz est $x > 0$, avec un facteur d'occupation uniforme $\nu(x,\theta;t=0) = \nu_0(\theta)$ pour $x > 0$, et nul pour $x < 0$. Le contour initial séparant ces deux domaines dans le plan (x,θ) est la ligne $x = 0$.

Avec cette condition initiale, le contour $\partial\Gamma_t^b$ reste bijectif, c'est-à-dire que pour une position donnée x, il n'existe qu'une seule rapidité θ^* appartenant à $\partial\Gamma_t^b$. Réciproquement, pour chaque θ^*, il n'existe qu'un unique x appartenant à $\partial\Gamma_t^b$, noté $x(\theta^*,t)$. Nous pouvons donc paramétrer le contour par θ^*. [1]

La théorie GHD permet de calculer $x(\theta^*,t)$ de la manière suivante. D'après l'équation (VI.21), la distribution du facteur d'occupation au point $x(\theta^*,t)$ est donnée par

$$\nu^*(x(\theta^*,t),\theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta), & \text{si } \theta < \theta^*, \\ 0, & \text{si } \theta > \theta^*. \end{cases} \tag{VI.22}$$

Nous avons retrouvé l'équation (VI.9).

Cette distribution est indépendante du temps. La vitesse effective au point $(x(\theta^*,t),\theta^*)$, notée $v^{\text{eff}}_{[\nu^*]}(\theta^*)$, est donc constante. L'intégration de l'équation (VI.19) donne alors

$$x(\theta^*,t) = v^{\text{eff}}_{[\nu^*]}(\theta^*)\, t, \tag{VI.23}$$

ce qui définit le contour $\partial\Gamma_t^b$. Notons que cette expression reprend l'équation (VI.9) de la section A-2. Cette dérivation est intéressante car elle peut être adaptée à d'autres configurations initiales, comme nous le verrons dans la section suivante.

Pour reconstruire le profil de densité du gaz, nous procédons de la manière suivante. Nous échantillonnons θ^* de façon linéaire avec N points répartis entre une valeur inférieure θ_1^* suffisamment petite pour que $\nu_0(\theta < \theta_1^*) \simeq 0$ et une valeur supérieure θ_N^* telle que $\nu_0(\theta > \theta_N^*) \simeq 0$. Pour chaque θ^*, les équations (VI.21) et (III.58) permettent de calculer $v^{\text{eff}}_{[\nu^*]}(\theta^*)$, ce qui donne $x(\theta^*,t)$ via l'équation précédente.

Au point $x(\theta^*,t)$, la densité d'atomes n est obtenue en utilisant les équations (VI.21) et (I.90). Nous obtenons ainsi un ensemble de données (x_i,n_i) pour $i = 1,\dots,N$. La densité linéique en tout point x est ensuite estimée par interpolation linéaire à partir de ces points (Fig. VI.4) . Cette méthode permet de comparer directement les prédictions numériques aux données expérimentales.

Enfin, en fixant $n_0 = 56\ \mu\text{m}^{-1}$, nous ajustons la température T des simulations GHD pour reproduire les données expérimentales de déformation du bord (Fig. VI.2). Cet ajustement donne $T = 560$ nK.

C-4 Simulation de l'expansion.

Après la déformation du bord, une sélection spatiale est réalisée pour isoler une tranche du gaz (voir Fig. VI.6(a)), que l'on laisse ensuite se dilater librement en une dimension pendant un temps τ. Contrairement au cas de la déformation du bord, le contour de la région occupée dans (x,θ) n'est plus bijectif ($\theta \mapsto x$, $(x,\theta) \in \partial\Gamma_\tau$ n'est pas injectif) : pour une position donnée de x, plusieurs rapidités θ peuvent exister telles que (x,θ) appartiennent au contour $\partial\Gamma_\tau$ de la région occupée.

Pour surmonter cette difficulté, nous décomposons le contour Γ_τ en deux branches bijectives : le bord gauche, noté $\partial\Gamma_\tau^g$, constitué des points $(x_g(\tau),\theta_g)$, et le bord droit, noté $\partial\Gamma_\tau^d$, constitué des points $(x_d(\tau),\theta_d)$. Cette décomposition garantit que, sur chaque branche, la correspondance $\theta \mapsto x$ est bijective, c'est-à-dire $(x,\theta) \in \Gamma_\tau^{g/d}$.

1. Cette bijectivité est une conséquence de la nature monotone de la vitesse efficace $v^{\text{eff}}_{[\nu]}(\theta)$ en fonction de θ pour un facteur d'occupation de type « patch ». En effet, $v^{\text{eff}}_{[\nu]}(\theta)$ est une fonction croissante de θ. Par conséquent, les trajectoires caractéristiques ne se croisent pas, assurant ainsi la bijectivité du contour.

Avec cette condition initiale, le contour $\partial\Gamma_t^b$ reste bijectif, c'est-à-dire que pour une position donnée x, il n'existe qu'une seule rapidité θ^* appartenant à $\partial\Gamma_t^b$. Réciproquement, pour chaque θ^*, il n'existe qu'un unique x appartenant à $\partial\Gamma_t^b$, noté $x(\theta^*,t)$.Nous pouvons donc paramétrer le contour par θ^*.

La notation ∂A désigne la frontière (ou bord) d'un ensemble A dans le sens de la topologie : $\partial A = \overline{A} \setminus A^\circ$, où $\overline{A}$ est l'adhérence de A et A° son intérieur. Dans notre contexte, $\partial\Gamma_t^b$ représente donc la courbe délimitant le domaine Γ_t^b dans l'espace (x,θ).

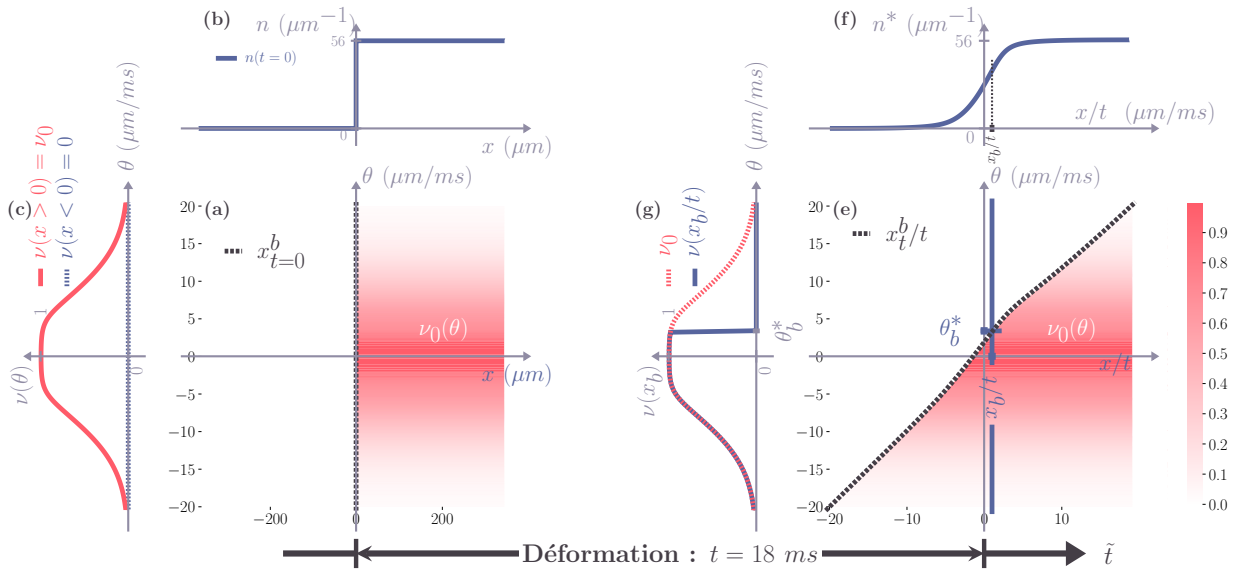


Figure VI.4 – (a) À l'instant $t = 0^+$, immédiatement après le « quench bipartite » en $x = 0$, le facteur d'occupation est donné par $\nu(x, \theta; t = 0^+) = \nu_0(\theta)$ pour $x > 0$ et est nul pour $x < 0$. Le bord initial représenté en tirets par l'ensemble des points $(x_b(t = 0^+) = 0,\ \theta)$. (b) Densité spatiale linéique $n(x)$: en pointillés, $n(x; t = 0^-) = \int \rho(x, \theta; t = 0^-)\, \mathrm{d}\theta = n_0 = 56\, \mu\mathrm{m}^{-1}$ 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, $\nu(x, \theta; t = 0^+) = 0$. (e) À l'instant $t = 18$ ms, après l'évolution balistique post-quench, le facteur d'occupation est donné par $\nu^*(x_b(t)/t, \theta) = \nu_0(\theta)$ pour $\theta < \theta_b$, il est nul pour $\theta > \theta_b$, résolvant l'équation (VI.9), pour $t > 0$. $\nu(x(t), \theta)(= \nu^*(x(t)/t, \theta))$ est invariant de la déformation pour $t > 0$. Le bord est représenté en tirets par l'ensemble des points $(x_b(t)/t,\ \theta(t))$. Étant donné que la coupure initiale est en $x = 0$ et que l'évolution du bord est balistique, cette courbe résout $v^{\mathrm{eff}}_{[\nu^*(x(t)/t,\cdot)]}(\theta) = x(t)/t = v$) (VI.5). (f) Densité spatiale $n^*(x/t)$ en régime hydrodynamique (scaling). (g) Pour les atomes à droite de la coupure : en pointillés, $\nu^*(x(t)/t, \theta) = \nu_0(\theta)$; en ligne pleine, $\nu^*(x_b(t)/t, \theta) = \nu_0(\theta)$ pour $\theta < \theta_b$ et nul pour $\theta > \theta_b$. Le raisonnement est similaire pour les atomes à gauche de la coupure.
Dans les panneaux (e), (f) et (g), les facteurs d'occupation ν sont représentés ; une description équivalente peut être donnée en termes de distributions de rapidités ρ (cf. Fig. VI.5).

Pour une position $x(\tau)$ donnée, θ_g et θ_d sont définis de sorte que $(x(\tau), \theta_g) \in \partial\Gamma^g_\tau$ et $(x(\tau), \theta_d) \in \partial\Gamma^d_\tau$. Le facteur d'occupation après un temps τ est alors donné par (VI.21) :

$$\nu(x(\tau), \theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta) & \text{si } \theta \in [\theta_g, \theta_d], \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{VI.24}$$

La vitesse efficace dépend désormais explicitement du temps τ et de la position, puisqu'elle est fonction du facteur d'occupation local :

$$v^{\mathrm{eff}}_{[\nu(x(\tau),\cdot)]}(\theta), \tag{VI.25}$$

Pour résoudre numériquement (VI.19) on est ici obligé d'induire des pas de temps $d\tau$:

$$x(\tau + d\tau) = x(\tau) + v^{\mathrm{eff}}_{[\nu(x(\tau),\cdot)]}(\theta) d\tau. \tag{VI.26}$$

C-4–i Les étapes du calcul numérique. Nous notons les deux rapidités caractéristiques θ_+ et θ_-, définies comme celles associées aux positions $x_0 + \ell/2$ et $x_0 - \ell/2$, respectivement, sur le contour $\partial\Gamma^b_t$ (voir Fig. VI.4(d)). De plus, nous introduisons une rapidité suffisamment négative, notée θ^*_1, telle que $\nu_0(\theta < \theta^*_1) \simeq 0$.

Nous construisons alors une liste discrète de rapidités, notée θ_{disc}, de la manière suivante :

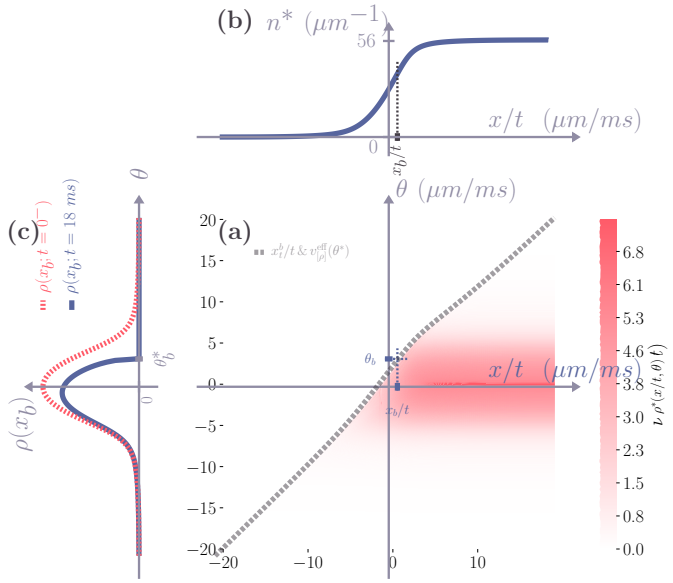


FIGURE VI.5 – (a) À l'instant $t = 18$ ms, après l'évolution balistique post-quench, le facteur d'occupation est donné par $\rho^*(x_b(t)/t,\theta) = \nu_0(\theta)$ pour $\theta < \theta_b$, il est nul pour $\theta > \theta_b$, résolvant l'équation (VI.9), pour $t > 0$. $\rho(x(t),\theta)(= \rho^*(x(t)/t,\theta))$ est invariant de la déformation pour $t > 0$. Le bord est représenté en tirets par l'ensemble des points $(x_b(t)/t,\ \theta(t))$. Étant donné que la coupure initiale est en $x = 0$ et que l'évolution du bord est balistique, cette courbe résout $v^{\rm eff}_{[\rho^*(x(t)/t,\cdot)]}(\theta) = x(t)/t = v)$ (VI.5). (b) la densité spatiale $n^*(x/t)$ en régime hydrodynamique (scaling). (c) Pour les atomes à droite de la coupure : en pointillés, $\rho^*(x(t)/t,\theta) = \rho_0(\theta)$; en ligne pleine, $\rho^*(x_b(t)/t,\theta) = \nu_0(\theta)$ pour $\theta < \theta_b$ et nul pour $\theta > \theta_b$. Le raisonnement est similaire pour les atomes à gauche de la coupure.

- $N = 400$ points répartis linéairement entre θ_1^* et θ_-,
- N points répartis linéairement entre θ_- et θ_+.

À partir de cette discrétisation :

- nous définissons une liste $x_{g,\rm disc}$ contenant la valeur fixe $x_0 - \ell/2$ pour chaque $\theta \in [\theta_1^*, \theta_-[$, et les points $(x(\theta),\theta)$ du contour $\partial\Gamma_t^b$ pour $\theta \in [\theta_-, \theta_+[$ (voir Fig. VI.4(a)) ;
- nous définissons une liste $x_{b,\rm disc}$ contenant la valeur fixe $x_0 + \ell/2$ pour $\theta \in \theta_{\rm disc}$.

Ainsi, chaque élément (x_i,θ_i) de $x_{g,\rm disc}$ (resp. $x_{b,\rm disc}$) appartient au bord $\partial\Gamma^g_{\tau=0}$ (resp. $\partial\Gamma^b_{\tau=0}$), comme illustré Fig. VI.6(a). Afin d'assurer la bijectivité décrite plus haut, nous ajoutons à $x_{b,\rm discr}$ et $x_{b,\rm discr}$ un petit décalage proportionnel à $\theta_{\rm disc}\cdot d\tau\cdot 10^{-10}$. Ce décalage est suffisamment faible pour ne pas affecter la précision des simulations. Les éléments des listes sont ensuite triés par ordre croissant.

Pour un temps d'expansion τ, nous introduisons deux interpolations continues :

$$\theta_{g,\rm fit}(x) \quad \text{et} \quad \theta_{b,\rm fit}(x),$$

définies de sorte que pour tout $x \in x_{g,\rm disc}$ (resp. $x \in x_{b,\rm disc}$), on ait $\theta_{g,\rm fit}(x) = \theta_g$ (resp. $\theta_{b,\rm fit}(x) = \theta_b$).

Pour chaque $\theta_g \in \theta_{\rm disc}$, on détermine la position correspondante x telle que $\theta_{g,\rm fit}(x) = \theta_g$. Deux cas se présentent alors :

- si le premier élément de $x_{b,\rm disc}$ est supérieur à x, nous échantillonnons 600 points de rapidité dans une nouvelle liste $\theta_{\rm disc,2}$ uniformément répartis sur l'intervalle $[\theta_1^*, \theta_g[$ (cf. Fig. VI.6(a)) ;
- sinon, nous échantillonnons 600 points entre $[\theta_{b,\rm fit}(x), \theta_g[$ (cf. Fig. VI.6(d)).

Pour chaque $\theta \in \theta_{\rm disc,2}$, le facteur d'occupation est

$$\nu(x,\theta) = \begin{cases} \nu_0(\theta), & \text{si } \theta \in \theta_{\rm disc,2}, \\ 0, & \text{sinon,} \end{cases}$$

conformément à l'équation (VI.24).

Nous définissons ensuite une liste ν_{disc} contenant les valeurs $\nu_i = \nu_0(\theta_i)$ pour chaque $\theta_i \in \theta_{\text{disc}}$. Cette liste permet de calculer la vitesse effective $v^{\text{eff}}_{[\nu(x,\cdot)]}(\theta)$ via l'équation (III.58). Les listes $x_{g,\text{disc}}$ et $x_{b,\text{disc}}$ sont ensuite mises à jour en ajoutant la contribution $v^{\text{eff}}_{[\nu(x,\cdot)]}(\theta_{\text{disc}}) \cdot d\tau$ (cf. Eq. (VI.26)).

La densité d'atomes $n(x,\tau)$ est obtenue à partir des équations (VI.21) et (I.90). On obtient ainsi un ensemble discret de points (x_i, n_i), $i = 1, \ldots, 2N$. La densité linéaire est ensuite reconstruite pour tout x par interpolation linéaire à partir de ces points (voir Fig. VI.6(e)).

Ce processus est répété à chaque pas de temps, $\tau \leftarrow \tau + d\tau$, jusqu'à $\tau = 30$ ms. En suivant l'évolution de chaque point du contour par la vitesse effective, on reconstruit ainsi le profil de densité $n(x,\tau)$, directement comparable aux données expérimentales (Fig. VI.6(f)).

Cette expansion unidimensionnelle est modélisée en supposant que le facteur d'occupation $\nu(x,\theta)$ est conservé localement au sein de la tranche sélectionnée. La figure VI.6 illustre les différentes étapes de cette procédure. Dans un premier temps, la tranche est extraite du bord du système, tel qu'il a évolué jusqu'à l'instant $t = 18\ ms$ dans le piège. L'évolution unidimensionnelle à partir de cette condition initiale repose sur le transport lagrangien du bord dans l'espace des phases (x,θ), en l'absence de piégeage.

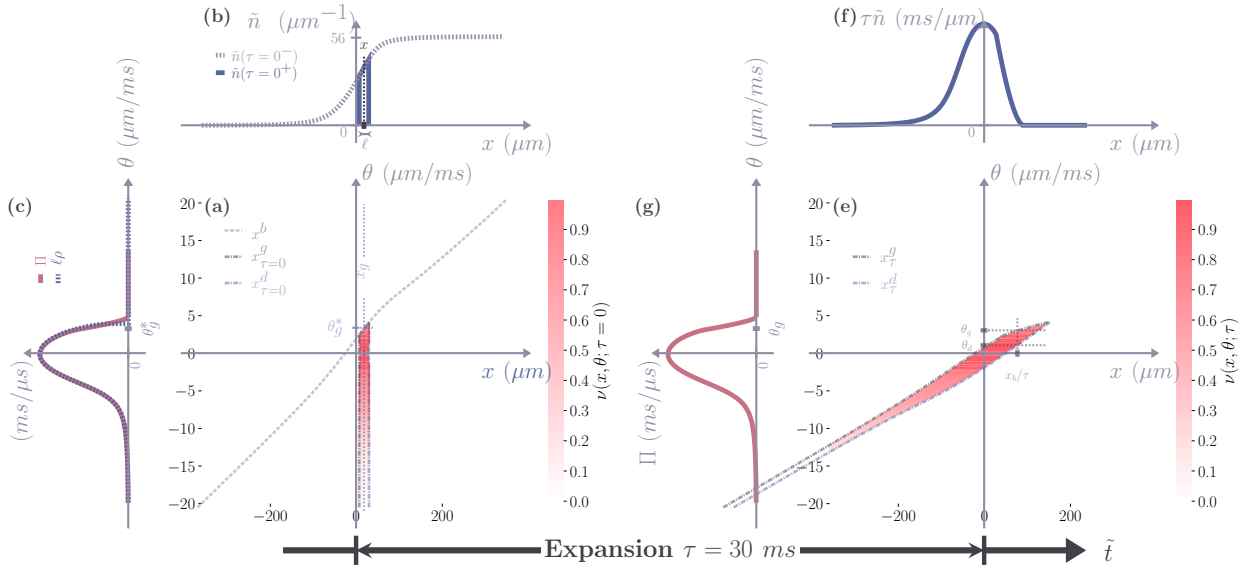


Figure VI.6 – (a) À l'instant $\tau = 0^+$, immédiatement après la sélection de la tranche centrée en $x = x_0$ et de largeur ℓ, la distribution de rapidité localement résolue est donnée par $\rho(x,\theta;\tau = 0^+) = \nu(x,\theta;t = 18\text{ ms})\,\rho_s(x,\theta;t = 18\text{ ms})$ pour $|x - x_0| < \ell/2$, et est nulle pour $|x - x_0| > \ell/2$. Le bord gauche immédiatement après la sélection est représenté en pointillés par l'ensemble des points $(x_g(\tau = 0^+),\ \theta_g)$, et le bord droit en tiret-point par l'ensemble des points $(x_d(\tau = 0^+),\ \theta_d)$. Le bord complet est donc la concaténation de ces deux ensembles. (b) Densité linéique spatiale $\tilde{n}(x)$: en pointillés, $n(x;t = 18\text{ ms})$ juste avant la sélection ; en ligne pleine, $\tilde{n}(x;\tau = 0^+)$, égal à $n(x;t = 18\text{ ms})$ pour $|x - x_0| < \ell/2$ et nul ailleurs. (c) Distribution de rapidité après sélection, $\Pi(\theta) = \int \rho(x,\theta;\tau)\,\mathrm{d}x$, invariante sous l'évolution unidimensionnelle, représentée en rouge. La distribution localement résolue en $x_b(s;\tau = 0^+)$, $\rho(x_b(\tau = 0^+),\theta;\tau = 0^+)$, est représentée en pointillés. Cette distribution est localement conservée, i.e., $\rho(x(\tau),\theta)$ reste inchangée au cours de l'évolution unidimensionnelle, indépendamment de τ. (e) Distribution localement résolue $\rho(x,\theta;\tau = 30\text{ ms})$ après une évolution unidimensionnelle de 30 ms. Le bord gauche est représenté en pointillés par les points $(x_g(\tau = 30\text{ ms}),\ \theta(\tau = 30\text{ ms}))$, et le bord droit en tiret-point par $(x_d(\tau = 30\text{ ms}),\ \theta(\tau = 30\text{ ms}))$. (f) Densité spatiale $\tilde{n}(x;\tau = 30\text{ ms})$. (g) Distribution de rapidité $\Pi(\theta)$ après la sélection (identique à celle de (c)).

C-5 Comparaison avec les données expérimentales et discussion

Nous comparons dans cette section les profils de densité obtenus par simulation GHD à ceux mesurés expérimentalement après expansion d'une tranche extraite du bord du système.

La figure VI.7(a) montre le profil de densité après expansion simulé à partir d'un état initial à température $T = 560\,nK$, déterminé indépendamment par ajustement sur la déformation du bord (cf. Fig.VI.2). Le profil présente une forte asymétrie caractéristique, avec un bord droit abrupt et une densité qui s'annule au-delà d'une certaine position. Toutefois, cette chute est moins abrupte que celle de la distribution locale des rapidités $\rho(x,\theta)$ au centre de la tranche (courbes τn_{GHD} et $\ell\rho$ de la figureVI.7(a)). Deux effets principaux expliquent cet élargissement :

(i) La distribution de rapidité n'est pas homogène dans la tranche, si bien que la distribution intégrée $\Pi(\theta) = \int \rho(x,\theta)\,dx$ diffère de $\ell\rho(x,\theta)$, comme visible sur la Fig. VI.7(a), ligne pleine versus pointillée ;

(ii) Le temps d'expansion $\tau = 30\ \ ms$ est fini, de sorte que la densité spatiale observée $\tilde{n}(x,\tau)$ diffère de la transformation directe $\Pi((x-x_0)/\tau)/\tau$, comme le montre la comparaison entre les courbes rouge et marron dans la même figure.

La Fig. VI.7(b) compare la densité simulée pour une température initiale $T = 560\,nK$ avec les données expérimentales. Bien que la forme générale du profil soit qualitativement bien reproduite, des écarts significatifs apparaissent, en particulier autour de $x \simeq \pm 350\,\mu m$, et jusqu'à 25% dans la région centrale.

Afin d'améliorer cet accord, nous avons traité la température T de l'état initial comme un paramètre libre. L'ajustement donne une température apparente de $T = 1550\,nK$, représentée par la ligne magenta dans la Fig. VI.7(b). Cette valeur permet de mieux reproduire le profil d'expansion, en particulier dans la région périphérique.

Cependant, le profil au bord correspondant à cette température, présenté en Fig. VI.2(a), est incompatible avec les observations expérimentales. En particulier, la courbure du bord simulé à cette température est beaucoup plus prononcée que celle mesurée. Ceci suggère que l'ajustement par température libre masque d'autres effets physiques non pris en compte dans le modèle.

Une analyse plus fine du profil expérimental met en évidence, du côté des petites valeurs de x (courbe bleue, Fig. VI.7(b)), la présence de défauts absents des prédictions de la théorie GHD à l'échelle d'*Euler*. Ces écarts pourraient résulter de mécanismes échappant au cadre du modèle, notamment :

- **Effets de sélection de tranche** : le faisceau pousseur utilisé pourrait chauffer localement les atomes en bordure, entraînant des distributions de rapidité plus étendues que prévu.
- **Effets diffusifs** : dans les régions de forts gradients, notamment au bord du gaz, des termes de diffusion (omnis présents dans la GHD à l'échelle d'*Euler*) pourraient devenir significatifs. De telles corrections ont été proposées récemment pour modéliser la GHD au-delà de l'approximation eulérienne.

En résumé, bien que la GHD reproduise globalement la forme du profil d'expansion, des écarts importants subsistent. Leur origine semble liée à des effets microscopiques non capturés par la description eulérienne (en particulier la dynamique hors équilibre aux bords) soulignant l'intérêt d'une extension du modèle pour mieux décrire ces régimes.

Résumé

Cette section a détaillé la mise en œuvre des simulations numériques basées sur GHD, permettant de modéliser finement la dynamique du système dans les régimes explorés expérimentalement.

Nous avons ajusté la température pour reproduire au mieux le profil de densité du bord (Fig. VI.7(b)).

Les simulations reproduisent qualitativement les principaux traits observés expérimentalement, notamment l'asymétrie du profil d'expansion et la chute abrupte du bord. Cependant, des écarts significatifs subsistent, notamment dans les régions périphériques et dans la forme fine des profils. Ces différences soulignent les limites du modèle à l'échelle d'*Euler*, et suggèrent que des effets hors modèle — tels que le chauffage local, ou des corrections diffusives — peuvent jouer un rôle non négligeable.

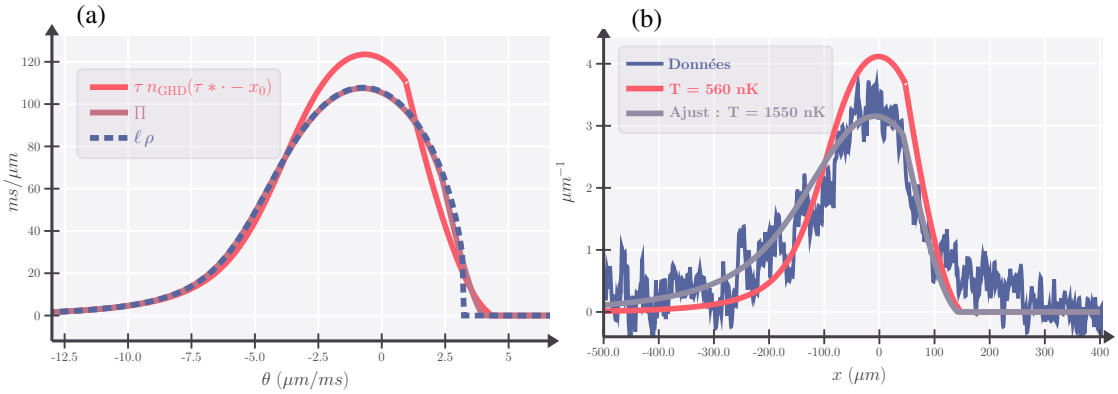


Figure VI.7 – (a) *Profil de densité après expansion de la tranche : effets de la largeur finie et du temps d'expansion fini.* Courbe rouge : profil obtenu par simulation GHD après expansion pendant $\tau = 30$ ms, avec $T = 560$ nK. Courbe marron : distribution asymptotique $\Pi((x - x_0)/\tau)/\tau$. Courbe pointillée bleue : 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 $\tau = 30$ ms. En rouge : simulation GHD avec $T = 560$ nK. En gris : ajustement du profil expérimental donnant $T = 1550$ nK.

Ces résultats confirment la pertinence de la théorie GHD pour décrire la dynamique collective d'un gaz unidimensionnel hors équilibre, tout en ouvrant la voie à des extensions du modèle pour capturer des effets plus fins, au-delà de l'approximation hydrodynamique idéale.

Conclusion

Conclusion

Ce chapitre a présenté une exploration conjointe expérimentale et théorique de la dynamique hors équilibre d'un gaz unidimensionnel de bosons, initiée par une coupure bipartite. Ce protocole génère un état initial présentant une discontinuité macroscopique de densité, dont l'évolution constitue une réalisation physique du problème de *Riemann quantique*.

L'analyse repose sur la théorie GHD, cadre théorique récent permettant de décrire, à l'échelle d'*Euler*, la dynamique de systèmes quantiques intégrables. Nous avons vu que la théorie GHD permet non seulement de prédire les profils de densité issus de la dynamique balistique du gaz, mais également de modéliser la distribution locale des rapidités, accessibles via un protocole de sélection spatiale.

Les mesures expérimentales confirment l'existence d'une structure auto-similaire de la dynamique, ainsi que l'asymétrie caractéristique des distributions de rapidité hors équilibre. Les écarts résiduels entre théorie et expérience soulignent la nécessité de développer des extensions de la GHD, intégrant des effets hors d'équilibre plus subtils, tels que la diffusion, le chauffage local ou les défauts de sélection.

Ainsi, ce travail établit une correspondance quantitative entre un cadre mathématique hydrodynamique issu de l'intégrabilité quantique et des observations expérimentales (fines), consolidant la théorie GHD comme un outil efficace pour décrire la relaxation déterministe de systèmes quantiques unidimensionnels et ouvrant des perspectives pour explorer les limites de cette approche dans des régimes plus complexes.

Cette étude fait partie des résultats présentés dans [Dub+25], où une analyse complémentaire portant sur un état initial non thermique est également développée et que le lecteur intéressé pourra consulter.

Bibliographie

[Rie60] Bernhard RIEMANN. "über die Fortpflanzung ebener Luftwellen von endlicher Schwingungsweite". In : *Abhandlungen der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften in Göttingen* 8 (1860), p. 43-66. URL : http://eudml.org/doc/135717.

[Cou09] Jean-François COULOMBEL. "Equations hyperboliques non-linéaires". DEA. Lecture. Université de Lille 1, France, sept. 2009. URL : https://cel.hal.science/cel-00616496.

[Bre13] Alberto BRESSAN. "Hyperbolic Conservation Laws An Illustrated Tutorial". In : *Lecture Notes in Mathematics* 2062 (jan. 2013). DOI : 10.1007/978-3-642-32160-3-2.

[Ber+16] B. BERTINI et al. "Transport in out-of-equilibrium XXZ chains : Exact profiles of charges and currents". In : *Physical Review Letters* 117.20 (2016), p. 207201. DOI : 10.1103/PhysRevLett.117.207201.

[CDY16] O. A. CASTRO-ALVAREDO, B. DOYON et T. YOSHIMURA. "Emergent hydrodynamics in integrable quantum systems out of equilibrium". In : *Physical Review X* 6.4 (2016), p. 041065. DOI : 10.1103/PhysRevX.6.041065.

[Dub+24] L. DUBOIS et al. "Probing the Local Rapidity Distribution of a One-Dimensional Bose Gas". In : *Phys. Rev. Lett.* 133 (11 sept. 2024), p. 113402. DOI : 10.1103/PhysRevLett.133.113402. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.133.113402.

[Dub24] Léa DUBOIS. "Dynamique hors d'équilibre d'un gaz de Bosons unidimensionnel étudiée via la mesure spatialement résolue de la distribution des quasiparticules". 2024UPASP066. Thèse de doct. 2024. URL : http://www.theses.fr/2024UPASP066/document.

[Dub+25] L. DUBOIS et al. "Experimental Investigation of a Bipartite Quench in a 1D Bose gas". Laboratoire Charles Fabry, Institut d'Optique, CNRS, Université Paris-Saclay ; CESQ and ISIS (UMR 7006), University of Strasbourg and CNRS. Mai 2025. URL : https://arxiv.org/pdf/2505.05839.

Chapitre VII

Mise en place d'un confinement longitudinale dipolaire

Sommaire

A Transformation de jauge et simplification de l'Hamiltonien . . . 128
B Potentiel Dipolaire d'un atome à deux niveaux - généralité . . . 128
B-1 Système à deux niveaux et interaction avec le champ . . . 129
B-2 Interprétation du traitement du second ordre : transition virtuelle et origine du potentiel dipolaire (AC-Stark) . . . 129
B-3 Expression explicite du potentiel dipolaire . . . 131
C Piégeage dipolaire d'un atome à plusieurs niveaux . . . 132
C-1 Atomes multiniveaux et origine du potentiel dipolaire dans le formalisme quantique 132
D Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne . . . 136
D-1 Structure électronique du Rubidium . . . 136
D-2 Structure matricielle du potentiel dipolaire . . . 137
D-3 Régime de désaccord très important . . . 138
D-4 Structure fine et base des états $|L, S; J, m_J\rangle$. . . . 140
E Notre dispositif expérimental . . . 142
E-1 Choix du laser pour le piégeage dipolaire . . . 142
E-2 Amplification par Tapered Amplifier (TA) . . . 146
Bibliographie . . . 149

Introduction

Dans le chapitre précédent VI, notre objectif était de préparer un système aussi homogène que possible sur une large région spatiale. Pour cela, nous avions recours à un potentiel longitudinal quartique, qui permettait d'obtenir un gaz quasi-homogène tout en conservant une occupation suffisante. Toutefois, dans la perspective d'améliorer encore cette homogénéité et d'optimiser la mesure des fluctuations présentée au chapitre IV, il devient nécessaire de disposer d'un contrôle plus flexible et plus local du paysage de potentiel. C'est dans ce cadre que nous introduisons ici une implémentation d'un potentiel dipolaire repoussoir, capable de créer des barrières nettes et ajustables. Couplé à un DMD et à un AOM, ce schéma ouvre la possibilité de générer des géométries de piégeage plus sophistiquées et adaptées à la préparation d'états quasi-uniformes ou à l'ingénierie de potentiels plus exotiques.

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

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

A Transformation de jauge et simplification de l'Hamiltonien

A-0–i 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 $A^\mu = \left\{A^0 \equiv \Phi/c,\ A^i \equiv \vec{A}\right\}$. 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 la forme :

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

A-0–ii Hamiltonien simplifié. Dans une autre jauge $\mathcal{J}'$, le potentiel s'écrit $A'^\mu = \{\Phi'/c, \vec{A}'\}$ avec $A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu\chi$, où χ est une fonction scalaire dépendant de l'espace et du temps. Un argument rapide pour garantir que cette transformation conserve les équations de Maxwell et 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 dérivée covariante 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

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

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

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\mathcal{J}'} \quad = \quad \tilde{\hat{\boldsymbol{H}}}_\mathcal{J} + \hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}, \tag{VII.3}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}} = -\vec{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{\boldsymbol{E}}_\perp, \tag{VII.4}$$

où $\vec{\boldsymbol{D}}$ est l'opérateur de moment dipolaire électrique, défini par : $\vec{\boldsymbol{D}} = q\vec{\boldsymbol{R}}$.

A-0–iii Conclusion – Simplification par transformation de jauge La transformation de jauge que nous avons appliquée permet de travailler dans un cadre avec lequel le **potentiel vecteur** est nul. Dans cette jauge particulière, l'Hamiltonien du système est considérablement simplifié, car le couplage au champ électromagnétique ne se fait plus par le terme de couplage minimal $(\vec{\boldsymbol{P}} - q\vec{\boldsymbol{A}})^2$, 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.

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

Introduction.

Avant d'effectuer le calcul du potentiel dipolaire, donnons une image classique.

Un atome neutre placé dans un champ électrique $\vec{\boldsymbol{E}}_\perp$ développe un moment dipolaire induit $\vec{\boldsymbol{D}}(t) = \alpha\vec{\boldsymbol{E}}_\perp$. L'énergie potentielle d'interaction, moyennée temporellement sur une période optique, est alors $-\alpha\|\vec{\boldsymbol{E}}_\perp\|^2/2$

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

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*.

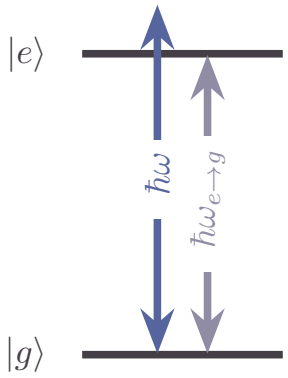


Figure VII.1 – Structure à deux niveaux : $|g\rangle$ pour l'état fondamental ("ground") et $|e\rangle$ pour l'état excité ("excited"). La différence d'énergie entre les deux niveaux, notée $\hbar\omega_{e\to g}$, est représentée, ainsi que la transition induite par le couplage laser de fréquence ω. Dans cet exemple, la transition est dans le bleu.

B-1 Système à deux niveaux et interaction avec le champ

Pour donner une vision simplifiée du phénomène, on considère un atome modélisé par **deux niveaux** : l'état fondamental $|g\rangle$ d'énergie $\hbar\omega_g$ et l'état excité $|e\rangle$ d'énergie $\hbar\omega_e$, couplés par un champ électrique $\vec{\boldsymbol{E}}_\perp(\vec{r},t) = \vec{\boldsymbol{\mathcal{E}}}(\vec{r})\cos(\omega t)$. On suppose que le champ laser est **désaccordé par rapport à la résonance** et que le désaccord $\Delta \doteq \omega - \omega_{g\to e}$ (avec la fréquence de transition $\omega_{g\to e} \doteq \omega_e - \omega_g$), est **grand devant la fréquence de Rabi**, qui caractérise le couplage dipôle–champ dont l'expression est [CDG88 ; GWO99 ; Sch01 ; Dar06] :

$$\Omega(\vec{r}) = -\langle e|\,\vec{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{\boldsymbol{\mathcal{E}}}(\vec{r})\,|g\rangle/\hbar \tag{VII.5}$$

$$= -\vec{d}_{g\leftrightarrow e}\cdot\vec{\boldsymbol{\mathcal{E}}}(\vec{\boldsymbol{r}})/\hbar, \tag{VII.6}$$

où $\vec{d}_{g\leftrightarrow e} = \langle e|\,\hat{\vec{D}}\,|g\rangle$ est l'élément de matrice dipolaire réel entre les niveaux $|g\rangle$ et $|e\rangle$.

B-2 Interprétation du traitement du second ordre : transition virtuelle et origine du potentiel dipolaire (AC-Stark)

B-2–i Transitions virtuelles et suppression des transitions réelles. Lorsque le champ laser est fortement désaccordé par rapport à la résonance atomique, c'est-à-dire lorsque le désaccord $\Delta = \omega - \omega_{g\to e}$ vérifie $\Gamma \ll |\Delta|$, l'excitation réelle de l'atome devient négligeable. Le paramètre Γ désigne la *largeur naturelle* de la transition $|e\rangle \to |g\rangle$, c'est-à-dire le taux d'émission spontanée d'un photon par un atome excité. Il est relié à la durée de vie τ de l'état $|e\rangle$ par $\Gamma = 1/\tau$. Dans le cas d'une transition dipolaire électrique de type S–P, il peut être calculé à partir de l'électrodynamique quantique selon la formule [GWO99] :

$$\Gamma = \frac{\omega_{g\to e}^3}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3}|\vec{d}_{g\leftrightarrow e}|^2, \tag{VII.7}$$

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

Ainsi, lorsque $\Gamma \ll |\Delta|$, la probabilité d'exciter réellement l'atome vers l'état $|e\rangle$ devient négligeable.

De plus, pour que l'occupation réelle de l'état excité reste négligeable, il faut également que la fréquence de Rabi Ω, qui mesure la force du couplage lumière–atome, satisfasse la condition $\Omega \ll |\Delta|$. Dans ce régime de fort désaccord et de couplage faible, le champ ne peut alors induire qu'une *transition virtuelle* $|g\rangle \to |e\rangle$, sans véritable occupation de l'état excité.

B-2–ii Effet de second ordre : origine du potentiel dipolaire. Toutefois, même si le champ laser ne permet pas de peupler réellement l'état excité, il peut induire des transitions *virtuelles* via l'interaction dipolaire $\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}$. Le système passe temporairement par l'état $|e\rangle$ sans s'y stabiliser :

$$|g\rangle \xrightarrow{\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}} |e\rangle \xrightarrow{\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}} |g\rangle\,, \tag{VII.8}$$

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

Analyse perturbative à différents ordres :

- **Ordre 0** — énergie non perturbée : L'atome est dans l'état fondamental $|g\rangle$. Son énergie propre est simplement :
$$E_g^{(0)} = E_g. \tag{VII.9}$$
- **Ordre 1** — pas de correction diagonale :
Dans l'approximation des grandes longueurs d'onde $\lambda \gg \langle\vec{r}\rangle$, c'est-à-dire lorsque la longueur d'onde du champ laser est grande devant la taille de l'atome, l'interaction lumière-matière se décrit par le *Hamiltonien dipolaire électrique* . Dans ce cadre, la correction d'énergie au premier ordre est donnée par :
$$\delta E_g^{(1)} = \langle g|\,\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}\,|g\rangle\,. \tag{VII.10}$$
Or, pour un champ oscillant typiquement de la forme $\vec{E}_\perp(t) = \frac{1}{2}\vec{\mathcal{E}}\,e^{-i\omega t}$ + c.c., ce terme est rapide et oscille à la fréquence du laser. De plus, dans une base d'états propres de parité définie (comme c'est le cas pour les niveaux atomiques), l'opérateur $\vec{\boldsymbol{D}}$ étant de parité impaire, son **élément diagonal est nul** :
$$\langle g|\,\vec{\boldsymbol{D}}\,|g\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle g|\,\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}\,|g\rangle = 0. \tag{VII.11}$$
Ainsi, non seulement $\delta E_g^{(1)}(t) \sim \cos(\omega t)$ est une oscillation à haute fréquence, mais sa moyenne temporelle est aussi nulle :
$$\langle \delta E_g^{(1)} \rangle_t = 0. \tag{VII.12}$$
Par conséquent, il n'y a **aucun décalage d'énergie net à l'ordre 1** : c'est uniquement à l'ordre 2 que l'interaction induit un potentiel stationnaire, correspondant au déplacement AC-Stark.
- **Ordre 2** — transitions virtuelles : nous verrons dans la section C-1 que l'effet du potentiel à l'ordre 2 est
$$\delta E_g^{(2)} = \left(\frac{|\,\langle e|\,\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}\,|g\rangle\,|^2}{\hbar(\omega - \omega_{g\to e})} + \frac{|\,\langle e|\,\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}\,|g\rangle\,|^2}{\hbar(\omega + \omega_{g\to e})}\right). \tag{VII.13}$$
Le premier terme, en $1/(\omega - \omega_{g\to e}) = 1/\Delta$, correspond au processus *quasi-résonant* qui domine lorsque le laser est proche d'une transition atomique. Le second terme, en $1/(\omega + \omega_{g\to e})$, est dit *anti-résonant*. Dans l'approximation de l'ordre tournant (ou approximation séculière, RWA), ce terme est négligé car il est fortement décalé en énergie ($\omega + \omega_{g\to e} \gg \omega - \omega_{g\to e}$, ou $\omega \gg \Delta$) .
On obtient alors, dans cette approximation, la correction simplifiée
$$\delta E_g^{(2)} \simeq \frac{|\,\langle e|\,\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}\,|g\rangle\,|^2}{\hbar\Delta}. \tag{VII.14}$$

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

B-3 Expression explicite du potentiel dipolaire

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

$$\vec{E}_\perp(\vec{r},t) = \frac{1}{2}\vec{\mathcal{E}}(\vec{r})\, e^{-i\omega t} + \text{c.c.}, \quad \text{avec } \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) = \mathcal{E}(\vec{r})\,\vec{u} \tag{VII.15}$$

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

B-3–i Potentiel dipolaire. En utilisant l'expression de la fréquence de *Rabi* (VII.5), la correction d'énergie à l'ordre 2 (VII.14), que l'on notera *potentiel dipolaire* (*i.e.* $U_{\text{dip}}(\vec{r}) \equiv \delta E_g^{(2)}$), s'écrit pour $\omega \gg \Delta$:

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) = \frac{\hbar\,\Omega^2(\vec{r})}{4\Delta}, \tag{VII.16}$$

En utilisant l'expression de l'intensité locale du champ laser $I(\vec{r}) = \frac{1}{2}\varepsilon_0 c\,|\vec{\mathcal{E}}(\vec{r})|^2$, de l'intensité de saturation $I_{\text{sat}} = \frac{\hbar\,\omega_{g\to e}^3\,\Gamma}{12\pi c^2}$, de la largeur naturelle (VII.7) et de la fréquence de Rabi (VII.6), on obtient également :

$$\Omega^2(\vec{r}) = \frac{I(\vec{r})}{I_{\text{sat}}}\frac{\Gamma^2}{2}. \tag{VII.17}$$

Le potentiel dipolaire (VII.16) s'écrit alors sous la forme opérationnelle suivante :

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) = \frac{\hbar\,\Gamma^2}{8\,I_{\text{sat}}}\,\frac{I(\vec{r})}{\Delta}, \tag{VII.18}$$

ce qui montre que le potentiel dipolaire est proportionnel à l'intensité lumineuse locale.

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

Conditions de validité. Les expressions (VII.16) et (VII.18) pour le potentiel dipolaire sont obtenues sous les hypothèses suivantes, qui assurent la validité du modèle à deux niveaux et du traitement perturbatif :

- **Approximation du sous-espace résonant** : le champ est quasi-résonant avec une seule transition atomique, ce qui implique que le désaccord Δ reste petit par rapport à l'écart énergétique entre l'état excité considéré et les autres états excités de l'atome. Cette condition permet de réduire le système à un modèle à deux niveaux et de négliger les autres transitions dipolaires.
- **Régime de moyen 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. [1]
- **Régime de faible saturation** : on suppose que la fréquence de *Rabi* Ω est beaucoup plus faible que le désaccord, i.e. $\Omega \ll |\Delta|$. Cette condition garantit que la population de l'état excité reste négligeable, ce qui justifie l'approximation adiabatique sur l'état fondamental.

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

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

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

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

1. Il faut aussi $\omega \gg \Delta$ pour justifier l'approximation de l'ordre tournant (RWA).

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

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

En revanche, pour un désaccord rouge ($\Delta < 0$), les atomes sont attirés vers les régions de forte intensité. En focalisant un faisceau laser, on peut créer des *puits de potentiel* où les atomes sont piégés au centre du faisceau. Ce principe est largement utilisé dans les expériences de refroidissement et de confinement d'atomes ultrafroids, permettant de manipuler et d'étudier des gaz quantiques avec une grande précision.

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

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

$$\Gamma_{\text{sp}}(\vec{r}) = \frac{\Gamma^3}{8I_{\text{sat}}} \cdot \frac{I(\vec{r})}{\Delta^2}. \tag{VII.19}$$

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

Optimisation du régime dispersif pour un potentiel donné. À partir des expressions (VII.7) et (VII.19), on peut analyser comment minimiser le taux de diffusion spontanée Γ_{sp}, sous la contrainte de produire un potentiel dipolaire U_{dip} fixé.

On observe en effet que :

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) \propto \frac{I(\vec{r})}{\Delta}, \quad \text{tandis que} \quad \Gamma_{\text{sp}}(\vec{r}) \propto \frac{I(\vec{r})}{\Delta^2}. \tag{VII.20}$$

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

$$I(\vec{r}) \propto \Delta \quad \Rightarrow \quad \Gamma_{\text{sp}}(\vec{r}) \propto \frac{1}{\Delta}. \tag{VII.21}$$

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

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

Cependant, d'un point de vue pratique, l'augmentation de l'intensité I pose des contraintes expérimentales : puissance laser plus élevée, coûts financiers plus importants et difficultés techniques accrues.

C Piégeage dipolaire d'un atome à plusieurs niveaux

C-1 Atomes multiniveaux et origine du potentiel dipolaire dans le formalisme quantique

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

C-1-a Description quantique de l'atome et du champ laser

C-1-a-i Quantification de champ laser. Considérons un atome immobile possédant un état fondamental $|g\rangle$ et une série d'états excités $|e_i\rangle$, d'énergies respectives $\hbar\omega_g$ et $\hbar\omega_{e_i}$. Le champ laser (VII.15) est quantifié dans un volume V ; on le suppose polarisé selon $\vec{u}$; son expression [CDG88] est alors :

$$\vec{\boldsymbol{E}}_\perp = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 V}}\,\vec{u}\,(\hat{\boldsymbol{a}} + \hat{\boldsymbol{a}}^\dagger), \tag{VII.22}$$

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

C-1-a-ii Champ cohérent et états de Fock. Le champ électromagnétique émis par le laser est un état **cohérent**, noté $|\alpha\rangle$, qui est une superposition d'états de Fock $|N\rangle$ avec une distribution de Poisson centrée autour d'une valeur moyenne $\langle N\rangle = |\alpha|^2 \gg 1$. Cela signifie que les composantes principales du champ se trouvent dans une bande étroite $\Delta N \ll \langle N\rangle$. Dans cette situation, les amplitudes de transition impliquant des changements d'un seul photon, comme $\langle N|\,\vec{\boldsymbol{E}}_\perp\,|N+1\rangle$, varient très peu avec N, et l'on peut faire l'approximation :

$$\langle N|\,\vec{\boldsymbol{E}}_\perp\,|N+1\rangle \approx \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 V}}\sqrt{N+1}\,\vec{u} \simeq \sqrt{\frac{\hbar\omega\langle N\rangle}{2\varepsilon_0 V}}\,\vec{u}. \tag{VII.23}$$

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

Donc, dans l'approximation cohérente et intense ($\langle N\rangle \gg 1$), le champ quantique peut être remplacé par un **champ classique** :

$$\vec{\boldsymbol{E}}_\perp \longrightarrow \hat{\boldsymbol{\mathcal{E}}}\,\vec{\boldsymbol{u}}\cos(\omega t), \tag{VII.24}$$

ce qui justifie l'usage des amplitudes de champ classiques dans le calcul de la fréquence de Rabi et du potentiel dipolaire.

C-1-a-iii Hamiltonien total. Pour décrire complètement l'interaction entre l'atome et le champ laser, il est utile de présenter l'Hamiltonien total du système, qui se compose de trois parties principales correspondant à l'atome, au champ et à leur interaction [CDG88] :

$$\hat{\boldsymbol{H}} = \hat{\boldsymbol{H}}_{\text{at}} + \hat{\boldsymbol{H}}_{\text{L}} + \hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}. \tag{VII.25}$$

Nous travaillons ici dans le formalisme **atome + champ quantifié**. Ce formalisme est aussi appelé **formalisme de l'atome habillé**. Ainsi :

- $\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{at}} = \sum_{e_i} \hbar\omega_{g\to e_i}\,|e_i\rangle\langle e_i|$, l'Hamiltonien de l'atome. Il décrit les états propres internes (typiquement les niveaux électroniques) sans interaction avec le champ. Ici, chaque état excité $|e_i\rangle$ est associé à une énergie $\hbar\omega_i$;
- $\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{L}} = \hbar\omega\left(\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\hat{\boldsymbol{a}} + \frac{1}{2}\right)$, l'Hamiltonien du **champ électromagnétique quantifié** dans un mode unique (celui du laser). Il est représenté comme un oscillateur harmonique quantique avec énergie $\hbar\omega$ par photon, et opérateurs $\hat{\boldsymbol{a}}$, $\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger$ de création/annihilation de photons. Le terme $\frac{1}{2}\hbar\omega$ est l'énergie du vide (qui peut être ignorée dans la plupart des cas) ;
- $\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}} = -\vec{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{\boldsymbol{E}}_\perp$, l'interaction **dipolaire quantifiée** entre l'atome et le champ électrique transverse $\vec{\boldsymbol{E}}_\perp$ (VII.22), qu'on peut écrire sous la forme :

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 V}}\,(\vec{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{u})\,(\hat{\boldsymbol{a}} + \hat{\boldsymbol{a}}^\dagger). \tag{VII.26}$$

  Dans l'*approximation des grandes longueurs d'onde* ($\lambda \gg \langle\vec{r}\rangle$, où $\vec{r}$ désigne la coordonnée électronique relative au noyau), cet Hamiltonien prend la forme de l'**Hamiltonien dipolaire électrique** [CDG88 ; GWO99]. L'opérateur de moment dipolaire atomique $\vec{\boldsymbol{D}}$ se décompose comme $\vec{\boldsymbol{D}} = \sum_{e_i} \vec{d}_{g\leftrightarrow e_i}\,|g\rangle\langle e_i| + \text{h.c.}$, où $\vec{d}_{g\leftrightarrow e_i} = \langle g|\,\vec{\boldsymbol{D}}\,|e_i\rangle$ est l'élément de matrice dipolaire entre les états $|g\rangle$ et $|e_i\rangle$, et "h.c." désigne le terme hermitien conjugué.

  Cette écriture traduit le fait que seules les transitions dipolaires électriques permises par les règles de sélection (changement de parité et conservation du moment angulaire) participent au couplage avec le champ quantifié dans le cadre de l'approximation dipolaire.

C-1-a-iv Équivalence entre champ quantique et champ classique Considérons un champ électromagnétique monochromatique de fréquence ω, quantifié dans un volume V, contenant en moyenne $\langle N \rangle$ photons.

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

$$E_{\text{quantique}} = \langle N \rangle \hbar\omega. \tag{VII.27}$$

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

$$E_{\text{classique}} = \frac{1}{2}\varepsilon_0 \mathcal{E}^2 V. \tag{VII.28}$$

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

$$\langle N \rangle \hbar\omega = \frac{1}{2}\varepsilon_0 \mathcal{E}^2 V, \tag{VII.29}$$

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

C-1-b États habillés et structure des niveaux

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

$$E_{g,N} = \hbar\omega_g + N\hbar\omega, \qquad E_{e_i,N} = \hbar\omega_{e_i} + N\hbar\omega.$$

On parle d'« états habillés » pour désigner cette base atome + champ, qui servira à construire les états propres du système complet en présence d'interaction. L'interaction dipolaire $H_{\mathrm{int}} = -\vec{D} \cdot \vec{E}_{\perp}$ couple spécifiquement les états $|g, N+1\rangle$ et $|e_i, N\rangle$, correspondant respectivement à l'absorption et à l'émission d'un photon. Dans l'approximation séculaire, seul ce couplage résonant est conservé : tous les autres termes — en particulier le couplage $|g, N\rangle \leftrightarrow |e_i, N+1\rangle$ — oscillent rapidement dans l'interaction et sont ainsi négligeables devant les termes quasi résonants.[2]

C-1-b-i Annulation de la correction d'énergie au premier ordre. [LSR13 ; GWO99]

- **Ordre 1 — pas de correction diagonale :**
  Dans le cadre de la théorie des perturbations indépendantes du temps, la correction d'énergie au premier ordre pour un état $|i\rangle$ est donnée par :

$$\delta E_i^{(1)} = \langle i | \hat{H}_{\mathrm{int}} | i \rangle . \tag{VII.30}$$

  Or, dans le cas de l'interaction dipolaire, l'opérateur $\hat{\boldsymbol{H}}_{\mathrm{int}} = -\vec{\boldsymbol{D}} \cdot \vec{\boldsymbol{E}}_{\perp}$ est de parité impaire[3], alors que les états électroniques $|g\rangle, |e_i\rangle, \ldots$ ont une parité bien définie.

2. Dans l'approximation séculaire, on ne conserve que les termes de l'interaction dont la fréquence d'oscillation est proche de zéro dans l'image d'interaction. Les énergies $E_{g,N} = N\hbar\omega$ et $E_{e_i,N} = \hbar\omega_{e_i \to g} + N\hbar\omega$ montrent que la différence d'énergie entre $|g, N+1\rangle$ et $|e_i, N\rangle$ est proche de la résonance atomique. En revanche, les termes tels que $|g, N\rangle \leftrightarrow |e_i, N+1\rangle$ contiennent un facteur oscillant $e^{\pm i(\omega + \omega_{e_i \to g})t}$, loin de la résonance, et moyennent à zéro. On ne garde donc que le seul bloc résonant $|g, N+1\rangle \leftrightarrow |e_i, N\rangle$.

3. Un opérateur O est dit *de parité impaire* si son comportement sous l'opérateur de parité $P : \vec{r} \mapsto -\vec{r}$ vérifie $POP^{-1} = -O$. Le moment dipolaire $\vec{D} = -e\,\vec{r}$ est ainsi un vecteur qui change de signe sous $\vec{r} \to -\vec{r}$. Les états électroniques atomiques $|g\rangle, |e_i\rangle, \ldots$ sont en revanche des fonctions propres de la parité : $P|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$. Dès lors, l'élément de matrice $\langle g | \vec{D} | g \rangle$ ou $\langle e_i | \vec{D} | e_i \rangle$ est nul par symétrie, alors que $\langle e_i | \vec{D} | g \rangle \neq 0$ si et seulement si les parités de $|g\rangle$ et $|e_i\rangle$ sont opposées.

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

$$\langle g|\,\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}\,|g\rangle = 0, \qquad \langle e_i|\,\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}\,|e_i\rangle = 0. \tag{VII.31}$$

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

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

$$\delta E_i^{(1)} = 0. \tag{VII.32}$$

La première contribution non nulle provient donc du second ordre, qui décrit des transitions virtuelles de type

$$\begin{aligned} |g, N\rangle &\xrightarrow{\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}} |e, N-1\rangle \\ |g, N\rangle &\xleftarrow{\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}} |e, N+1\rangle\,, \end{aligned} \tag{VII.33}$$

responsables du décalage AC-Stark (ou potentiel dipolaire optique).

- **Ordre 2 — décalage d'énergie :**
  Le champ étant loin de la résonance avec les états $|e_i\rangle$, on applique la théorie des perturbations indépendantes du temps au second ordre. L'interaction induit un décalage de l'énergie de l'état $|g\rangle$ donné par :

$$\delta E_g^{(2)} = \sum_{e_i} \left(\frac{|\,\langle e_i, N-1|\,\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}\,|g, N\rangle\,|^2}{E_{g,N} - E_{e_i,N-1}} + \frac{|\,\langle e_i, N+1|\,\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}\,|g, N\rangle\,|^2}{E_{g,N} - E_{e_i,N+1}} \right). \tag{VII.34}$$

C-1-b-ii Approximation pour un couplage quasi-résonant. Dans le cadre du piégeage dipolaire, nous considérons que le champ laser est quasi-résonant avec une seule transition atomique. Autrement dit, le désaccord $\Delta = \omega - \omega_{g\to e}$ reste petit devant la fréquence de la transition atomique : $|\Delta| \ll \omega_{g\to e}$.

Dans ce régime, le deuxième terme du membre de droite des équations (VII.34) devient négligeable, et le potentiel dipolaire se simplifie alors en :

$$\delta E_g^{(2)} \simeq \sum_{e_i} \frac{\left|\langle e,\, N-1|\,\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{int}}\,|g,\, N\rangle\right|^2}{\hbar\Delta}. \tag{VII.35}$$

Cette approximation consiste à ne conserver que la transition $|g,\, N\rangle \to |e,\, N-1\rangle$, c'est-à-dire le couplage entre les états $|g,\, N\rangle$ et $|e,\, N-1\rangle$, qui sont quasi-résonants.[4]

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

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

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

4. Dans ce couplage, l'atome passe de l'état électronique $|g\rangle$ à $|e\rangle$ tandis que le champ voit son nombre de photons diminuer de N à $N-1$. Cela correspond à l'absorption *d'exactement un photon* par l'atome. Autrement dit, l'énergie manquante entre $E_{g,N}$ et $E_{e,N-1}$ provient d'un unique quantum $\hbar\omega$ du champ. Toutes les autres transitions, telles que $|g,\, N\rangle \to |e,\, N+1\rangle$ (émission stimulée hors résonance) ou les couplages multi-photoniques, sont fortement décalées en énergie et donc négligées dans l'approximation séculaire. La notion « d'un seul photon échangé » signifie donc qu'on ne retient que les processus pour lesquels la variation du nombre de photons est $\Delta N = -1$, ce qui est l'ordre dominant dans la limite de couplage dipolaire faible et de résonance proche.

C-1-b-iii Conclusion. En conséquence, l'élément de matrice d'interaction s'écrit finalement :

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

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

D Cas du Rubidium 87 dans une polarisation rectiligne

D-1 Structure électronique du Rubidium

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

En première approximation, on peut donc modéliser le Rubidium comme un système à un électron, à la manière de l'atome d'hydrogène, mais avec un potentiel effectif tenant compte du *blindage* dû aux électrons du cœur[5] . Ce modèle permet de comprendre les transitions optiques dominantes de l'atome.

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

- **Structure fine** : Elle résulte du couplage spin-orbite entre le moment angulaire orbital $\vec{L}$ et le spin $\vec{S}$ de l'électron de valence. Ce couplage divise chaque niveau orbital (par exemple, le niveau $5p$) en deux sous-niveaux caractérisés par le moment angulaire total $J = L \pm \frac{1}{2}$. Ainsi, la transition $5S \leftrightarrow 5P$ donne naissance aux deux raies bien connues :
  - raie **D2** : $\lambda = 780$ nm, correspondant à la transition $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$,
  - raie **D1** : $\lambda = 795$ nm, correspondant à la transition $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2}$.
- × **Structure hyperfine (non traitée ici)** : Elle résulte du couplage entre le moment angulaire total de l'électron ($\vec{J}$) et celui du noyau ($\vec{I}$), introduisant une subdivision supplémentaire des niveaux d'énergie. Bien que cette structure hyperfine soit essentielle dans certains contextes (résonances hyperfines, refroidissement laser, etc.), elle ne sera pas considérée ici car nous nous limitons à l'étude des effets associés à la structure fine.

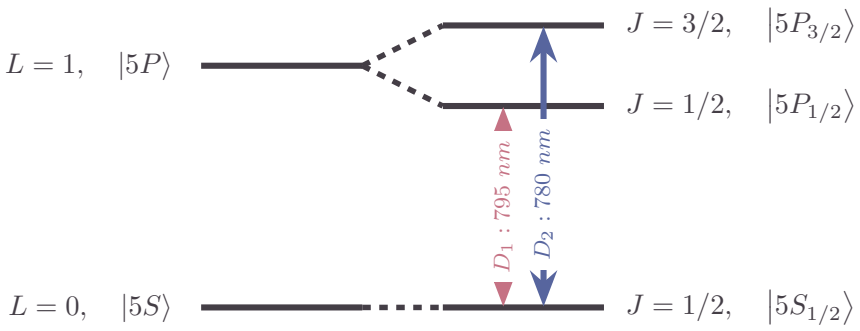


FIGURE VII.2 – Structure fine (transitions D1 et D2) de l'atome de Rubidium ^{87}Rb.

En effet, un faisceau à ~ 770 nm est *hors résonance* des transitions D1 et D2 du Rubidium, mais avec un désaccord suffisamment grand pour que la structure hyperfine puisse être négligée dans un premier temps.

5. Le terme *blindage* (ou *screening*) désigne la réduction du champ électrique coulombien du noyau ressentie par l'électron de valence. Dans un atome alcalin comme le Rubidium, les électrons du cœur forment une distribution de charge qui repousse partiellement l'électron externe et « masque » (écrante) en partie la charge nucléaire. Ainsi, l'électron de valence n'interagit pas avec la charge $+Ze$ complète du noyau, mais avec une charge effective plus faible $+Z_{\text{eff}}e$. Le potentiel central ressenti n'est donc plus strictement coulombien, ce qui explique la structure fine particulière des niveaux et leurs écarts par rapport à l'atome d'hydrogène.

Plus précisément, dans ce régime où $\Delta \gg \Delta_{\text{hfs}}$ [6], la réponse de l'atome est dominée par les seules transitions fines D1 ($5S_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2}$) et D2 ($5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$). Dans ce régime, le potentiel dipolaire s'écrit comme une somme pondérée des contributions de ces deux transitions proches en énergie, c'est-à-dire de toutes les transitions dont le désaccord est du même ordre de grandeur que Δ, tandis que les transitions beaucoup plus énergétiques sont fortement suppressées et peuvent être ignorées.

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

D-2 Structure matricielle du potentiel dipolaire

Lorsque la structure fine est prise en compte, le potentiel dipolaire ne se réduit plus à une simple fonction scalaire, mais se décompose en contributions scalaire, vectorielle et tensorielle, définies dans l'espace des états électroniques $|J, m_J\rangle$.

Dans un scénario expérimental où l'on restreint l'espace interne de l'atome à deux sous-niveaux hyperfins ou Zeeman (par exemple pour définir un pseudo-spin), le potentiel dipolaire peut être représenté par une matrice 2×2 de la forme générale [LSR13] :

$$U_{\text{dip}} \;=\; U^{(0)}_{\text{scal}} \cdot \text{Id}_2 \;+\; U^{(1)}_{\text{vec}}\;(\vec{\boldsymbol{J}} \cdot \vec{\boldsymbol{B}}_{\text{fict}}) \;+\; U^{(2)}_{\text{tens}}(\vec{\boldsymbol{J}}, \vec{\boldsymbol{u}}). \tag{VII.36}$$

où :

- **Terme scalaire** : $U^{(0)}_{\text{scal}}$ génère un décalage isotrope du niveau atomique qui est indépendant du sous-niveau de J (ou F). Ce décalage est la composante « classique » de l'effet Stark AC, proportionnelle à l'intensité lumineuse, et n'entraîne pas de structure fine dépendant de la polarisation de la lumière. Ce terme domine dans la plupart des configurations expérimentales, notamment avec un champ lumineux polarisé rectiligne, comme c'est le cas ici.
- **Terme vectoriel (Zeeman optique)** : $U^{(1)}_{\text{vec}}$ agit comme un champ magnétique fictif (optical Zeeman effect) le long de $\vec{\boldsymbol{B}}_{\text{fict}} \propto i(\vec{\boldsymbol{E}}^* \times \vec{\boldsymbol{E}})$. En effet, il est proportionnelle à l'opérateur $i(\vec{\boldsymbol{u}}^* \times \vec{\boldsymbol{u}}) \cdot \vec{\boldsymbol{J}}$ se comportant comme $\vec{\boldsymbol{J}} \cdot \vec{\boldsymbol{B}}_{\text{fict}}$. Ainsi, la polarisation circulaire du champ ($i[\vec{\boldsymbol{u}}^* \times \vec{\boldsymbol{u}}] \neq 0$) donne un décalage dépendant de l'orientation de $\vec{\boldsymbol{J}}$ (analogue à un effet Zeeman), alors que pour une polarisation rectiligne ($\vec{\boldsymbol{u}}$ 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 $\mu_B g_J\,(\vec{\boldsymbol{J}} \cdot \vec{\boldsymbol{B}}_{\text{fict}})$. Dans notre cas (polarisation rectiligne), ce terme est donc négligeable. [7]
- × **Terme tensoriel (négligé)** : $U^{(2)}_{\text{tens}}$ introduit une anisotropie du potentiel selon l'orientation du moment angulaire par rapport à la polarisation du champ. Ce terme est proportionnel à une combinaison quadrupolaire des composantes de $\vec{\boldsymbol{J}}$:

$$\frac{3[(\vec{\boldsymbol{u}}^* \cdot \vec{\boldsymbol{J}})(\vec{\boldsymbol{u}} \cdot \vec{\boldsymbol{J}}) + (\vec{\boldsymbol{u}} \cdot \vec{\boldsymbol{J}})(\vec{\boldsymbol{u}}^* \cdot \vec{\boldsymbol{J}})] - 2\vec{\boldsymbol{J}}^2}{2J(2J-1)}. \tag{VII.37}$$

  Le terme tensoriel ne contribue que pour les états atomiques ayant un moment cinétique total $J \geq 1$. Pour les atomes alcalins, comme le ^{87}Rb, l'état fondamental est un état S avec $J = 1/2$, et ce terme est donc strictement nul. En effet, un spin $1/2$ ne peut posséder de quadrupôle : seules les composantes scalaire et vectorielle du potentiel dipolaire subsistent (voir Annexe G pour une démonstration détaillée).

6. Pour le Rubidium, l'écart hyperfin entre les deux multiplets excités est $E_{5P_{3/2}} - E_{5P_{1/2}} \simeq 7$ THz. Si le laser est désaccordé d'une valeur Δ bien supérieure à cette séparation, les différents sous-niveaux hyperfins contribuent de manière indiscernable à la polarisation induite, de sorte que l'on peut les regrouper dans une description à deux raies effectives correspondant aux transitions fines D1 et D2. Autrement dit, lorsque $\Delta \gg \Delta_{\text{hfs}}$, l'atome réagit comme si les niveaux hyperfins étaient dégénérés.

7. Pour un champ électrique harmonique $\vec{\boldsymbol{E}}(\mathbf{r}, t) = \vec{\boldsymbol{E}}(\mathbf{r})\, e^{-i\omega t}$ + c.c., le vecteur complexe $\vec{\boldsymbol{E}}(\mathbf{r})$ encode l'amplitude et la polarisation. Le produit vectoriel complexe $\vec{\boldsymbol{E}}^* \times \vec{\boldsymbol{E}}$ mesure précisément la *chiralité* ou la *densité de moment cinétique spin* du champ électromagnétique : il est nul pour une polarisation linéaire ($\vec{\boldsymbol{E}}$ réel) et non nul pour une polarisation circulaire ou elliptique, où il pointe dans la direction de propagation. La quantité $i(\vec{\boldsymbol{E}}^* \times \vec{\boldsymbol{E}})$ est proportionnelle à la densité de moment angulaire orbital interne du champ et produit un « champ magnétique fictif » ressenti par le moment angulaire atomique via le terme vectoriel du potentiel ac-Stark. Une présentation détaillée de ces propriétés, dans le cadre du couplage lumière–atome et du potentiel optique dipolaire, peut être trouvée dans [LSR13].

D-2–i Résumé. La décomposition (VII.36) montre que :

(i) en toute généralité, le potentiel dipolaire comporte trois contributions (scalaire, vectorielle et tensorielle) ;

(ii) pour les atomes alcalins au repos dans leur état fondamental ($J = 1/2$), seul le terme vectoriel peut subsister (si la polarisation est elliptique), tandis que le terme tensoriel disparaît.

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

D-3 Régime de désaccord très important

Dans ce chapitre, nous ne considérons le régime de désaccord très important que dans le but de calculer les éléments de matrice du moment dipolaire $\vec{\boldsymbol{D}}$. En effet, pour un laser fortement désaccordé par rapport aux transitions électroniques ($|\Delta| \gg \Delta_{\text{fs}}, \Delta_{\text{hfs}}$, où typiquement pour le rubidium $\Delta_{\text{fs}} \sim 7\,\text{THz}$ et $\Delta_{\text{hfs}} \sim 6.8\,\text{GHz}$), le champ lumineux ne peut plus distinguer les différents niveaux excités liés aux sous-niveaux J ou F (par exemple les niveaux $5P_{1/2}$ et $5P_{3/2}$ pour le rubidium).

Dans ce régime, les niveaux excités peuvent être traités uniquement en termes de moment angulaire orbital L et de sa projection m_L, car le moment dipolaire $\vec{\boldsymbol{D}}$ ne dépend pas du spin de l'électron. Les éléments de matrice $\langle e|\,\vec{\boldsymbol{D}}\,|g\rangle$ se calculent donc simplement en utilisant les états orbitaux, ce qui permet de négliger, dans cette approximation, les détails de la structure fine ou hyperfine .

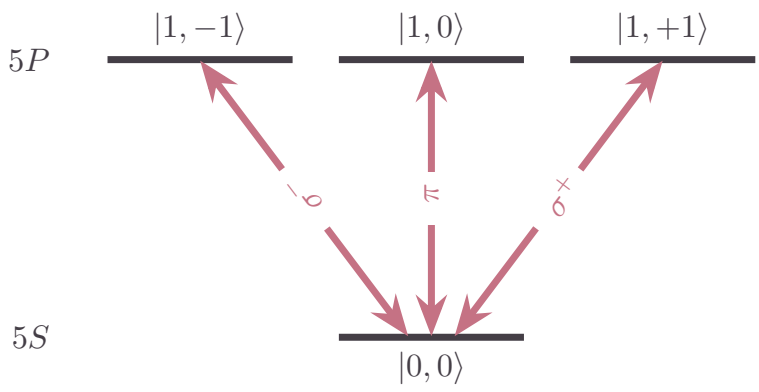


FIGURE VII.3 – Structure des niveaux électroniques $|L, m_L\rangle$ de l'atome de rubidium.

D-3–i Décalage d'énergie au second ordre. On considère des états électroniques notés $|g\rangle = |nL\rangle$ et $|e\rangle = |n'L'\rangle$. Dans le régime de désaccord important, l'effet de la lumière sur ces états peut être traité par la théorie des perturbations indépendantes du temps au second ordre. Cette perturbation implique le carré de l'opérateur dipolaire et donne naissance au potentiel dipolaire. On note que l'interaction ne couple que les sous-niveaux orbitaux via des règles de sélection simples sur L et m_L.

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

D-3–ii Structure orbitale et opérateur dipolaire. L'opérateur dipolaire, en tant que vecteur, peut être exprimé dans la base sphérique :

$$\vec{\boldsymbol{D}} \;=\; \sum_{q=-1}^{+1} \hat{\boldsymbol{D}}_q\, \vec{u}_q, \tag{VII.38}$$

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

Dans cette base, seule la composante $\hat{\boldsymbol{D}}_q$ associée au changement de moment orbital $m_L \to m'_L = m_L + q$ est non nulle. En effet,

$$\langle m'_L | \, \vec{\boldsymbol{D}} \cdot \vec{\boldsymbol{u}}_q \, | m_L \rangle \propto \delta_{m'_L, m_L+q}, \tag{VII.39}$$

ce qui montre que l'opérateur dipolaire ne couple que les états dont les nombres quantiques diffèrent exactement de q.

D-3–iii Application du théorème de *Wigner-Eckart*. L'opérateur dipôle électrique $\vec{\boldsymbol{D}}$ est un opérateur vectoriel, que l'on peut exprimer en termes de composantes sphériques $\hat{\boldsymbol{D}}_q$ avec $q = 0, \pm 1$, correspondant aux polarisations π et $\sigma^\pm$.

Le théorème de *Wigner-Eckart*[8] permet d'évaluer les éléments de matrice de l'opérateur dipolaire entre états de moment angulaire en factorisant la dépendance radiale et angulaire :

$$\langle L', m'_L | \, \vec{\boldsymbol{D}} \cdot \vec{\boldsymbol{u}}_q \, | L, m_L \rangle \quad = \quad \langle L' \| \vec{\boldsymbol{D}} \| L \rangle \cdot \langle L, 1; m_L, q | L', m'_L \rangle \, , \tag{VII.40}$$

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

Pour une polarisation linéaire parallèle à l'axe z, on a $q = 0$ (polarisation π).

Application au cas $5S \to 5P$ et avec une polarisation π. Considérons la transition électronique entre les niveaux $5S$ et $5P$ du rubidium 87, en négligeant la structure fine (*i.e.*, on travaille dans la base des moments angulaires orbitaux $|L, m_L\rangle$ Dans cette approximation, l'état fondamental est noté $|L = 0, m_L = 0\rangle$, et l'état excité $|L' = 1, m_{L'}\rangle$, car la transition dipolaire électrique autorise $\Delta L = \pm 1$.

L'élément de matrice s'écrit alors, en utilisant le théorème de Wigner-Eckart :

$$\langle L' = 1, m'_L | \, \vec{\boldsymbol{D}} \cdot \vec{\boldsymbol{u}}_{q=0} \, | L = 0, m_L = 0 \rangle \quad = \quad d_{5S \leftrightarrow 5P} \cdot \langle L = 0, 1; m_L = 0, q = 0 | 1, m'_L \rangle \, . \tag{VII.41}$$

où :

- $d_{5S \leftrightarrow 5P} = \langle L' = 1 \| \hat{\boldsymbol{D}}_0 \| L = 0 \rangle$ est l'élément de matrice réduit, indépendant de m_L ou de la polarisation q ;
- $\langle L = 0, 1; m_L = 0, q = 0 | 1, m'_L \rangle$ est un **coefficient de Clebsch-Gordan**.

Ce dernier impose une condition stricte de conservation de la projection du moment angulaire : $m_{L'} = m_L + q = 0 + 0 = 0$. Par conséquent, seule la composante $m_{L'} = 0$ de l'état excité est couplée à $|L = 0, m_L = 0\rangle$ sous l'action du champ π-polarisé. Et comme $\langle 0, 1; 0, 0 | 1, 0 \rangle = 1$, on obtient finalement :

$$d_{5S \leftrightarrow 5P} = \langle L' = 1, m'_L = 0 | \, \vec{\boldsymbol{D}} \cdot \vec{\boldsymbol{u}}_{q=0} \, | L = 0, m_L = 0 \rangle \, . \tag{VII.42}$$

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

Valeur de l'élément de matrice réduit. L'expression (VII.40) reste valable pour les éléments de matrice réduits. Dans le cas du rubidium 87, on peut ainsi déterminer numériquement la valeur de l'élément $\langle L' \| \vec{\boldsymbol{D}} \| L \rangle$, noté $d_{5S \leftrightarrow 5P}$, à partir des données spectroscopiques expérimentales (fréquence de transition, largeur naturelle, etc.) [Ste02].

$$d_{5S \leftrightarrow 5P} \quad \approx \quad 2{,}5 \times 10^{-29} \ \mathrm{C \cdot m}. \tag{VII.43}$$

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

8. Le théorème de *Wigner-Eckart* affirme que tout élément de matrice d'un opérateur tensoriel irréductible peut se factoriser en un élément réduit, indépendant des projections magnétiques, et un coefficient de Clebsch–Gordan contenant toute la dépendance angulaire. Autrement dit, pour un opérateur tensoriel $T_q^{(k)}$, on a $\langle j', m' | \, T_q^{(k)} \, | j, m \rangle = \langle j' \| T^{(k)} \| j \rangle \, \langle j, k; m, q \mid j', m' \rangle$. Cette factorisation simplifie considérablement le calcul des couplages dipolaires.

D-4 Structure fine et base des états $|L, S; J, m_J\rangle$.

Le moment angulaire électronique total J résulte du couplage entre le moment angulaire orbital total L et le moment angulaire de spin S des électrons, formellement noté $J = L + S$[9], 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 VII.4.

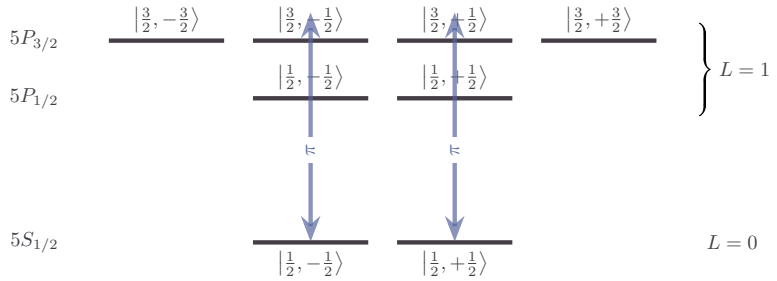


FIGURE VII.4 – Structure fine (niveaux $|J, m_J\rangle$) de l'atome de rubidium.

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

$$\delta E^{(2)}_{5S_{1/2}} = \frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar} \sum_{J' \in \left\{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\}} \frac{|\langle 5P_{J'}|\vec{\boldsymbol{u}} \cdot \vec{\boldsymbol{D}}|5S_{1/2}\rangle|^2}{\omega - \omega_{5S_{1/2}\to 5P_{J'}}}. \tag{VII.44}$$

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

Projection dans la base découplée. 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 découplée $|L, S; m_L, m_S\rangle$. 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.

Pour effectuer ces calculs, on utilise les coefficients de Clebsch-Gordan, qui permettent de relier la base $|L, S; J, m_J\rangle$ à la base produit $|L, m_L; S, m_S\rangle$ selon la relation :

$$|L, S; J, m_J\rangle = \sum_{\substack{-L\le m_L\le L,\\ ,-S\le m_S\le S}}^{m_L+m_S=m_J} \langle L, m_L; S, m_S|J, m_J\rangle \; |L, m_L; S, m_S\rangle. \tag{VII.45}$$

Cette décomposition permet ensuite de calculer les éléments de matrice du moment dipolaire selon

$$\langle L', S'; J', m'_J|\, \vec{\boldsymbol{D}} \cdot \vec{\boldsymbol{u}}_q \,|L, S; J, m_J\rangle\,. \tag{VII.46}$$

9. Ici, L représente le moment cinétique orbital total des électrons, et non une longueur. La notation $J = L + S$ est symbolique : il s'agit d'un couplage vectoriel de moments angulaires quantiques, et non d'une simple addition de nombres. Pour un électron de valence dans un atome alcalin, le spin est fixé à $S = 1/2$, et L correspond à la valeur quantique associée à la configuration orbitale de l'électron externe. Cette notation est largement utilisée dans la littérature (cf. par exemple Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, chap. 3).

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 :

$$|5\,^2S_{1/2}, m_J = \pm\tfrac{1}{2}\rangle \ \equiv\ |5S, J = \tfrac{1}{2}, m_J = \pm\tfrac{1}{2}\rangle \ \equiv\ |n = 5; L = 0, S = \tfrac{1}{2}; J = \tfrac{1}{2}, m_J = \pm\tfrac{1}{2}\rangle\,. \quad \text{(VII.47)}$$

Dans le but de faciliter les calculs, nous projetons cet état dans la base découplée $|L,\ m_L;\ S,\ m_S\rangle$. Étant donné que $L = 0$ pour l'état S, on a $m_L = 0$ nécessairement. L'état se réécrit donc simplement :

$$|5\,^2S_{1/2}, m_J = \pm\tfrac{1}{2}\rangle \quad = \quad |m_L = 0, m_S = \pm\tfrac{1}{2}\rangle \quad \text{(VII.48)}$$

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 découplé, 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 :

$$|5\,^2P_{J'}, m'_J\rangle \ \equiv\ |5P, J', m'_J\rangle \ \equiv\ |n = 5; L' = 1, S' = \tfrac{1}{2}; J', m'_J\rangle\,. \quad \text{(VII.49)}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{A}}_\pm|n, A, m_A\rangle \quad = \quad \hbar\sqrt{A(A+1) - m_A(m_A \pm 1)}|n, A, m_A \pm 1\rangle, \quad \text{(VII.50)}$$

où l'opérateur $\hat{\boldsymbol{A}} \in \{\hat{\boldsymbol{S}}, \hat{\boldsymbol{L}}, \hat{\boldsymbol{J}}, \cdots\}$.

Donc

$$|5\,^2P_{1/2}, m'_J = \pm\tfrac{1}{2}\rangle \quad = \quad \mp\sqrt{\tfrac{1}{3}}\ |m'_L = 0,\ m'_S = \pm\tfrac{1}{2}\rangle \ \pm\ \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |m'_L = \pm1,\ m'_S = \mp\tfrac{1}{2}\rangle\,, \quad \text{(VII.51)}$$

$$|5\,^2P_{3/2}, m'_J = \pm\tfrac{1}{2}\rangle \quad = \quad +\sqrt{\tfrac{2}{3}}\ |m'_L = 0,\ m'_S = \pm\tfrac{1}{2}\rangle \ +\ \sqrt{\tfrac{1}{3}}\ |m'_L = \pm1,\ m'_S = \mp\tfrac{1}{2}\rangle\,, \quad \text{(VII.52)}$$

$$|5\,^2P_{3/2}, m'_J = \pm\tfrac{3}{2}\rangle \quad = \quad +\,|m'_L = \pm1, m'_S = \pm\tfrac{1}{2}\rangle\,. \quad \text{(VII.53)}$$

Cette notation sera utile par la suite pour analyser les transitions permises et les amplitudes associées lors de l'interaction dipolaire avec une lumière polarisée ($q = 0$ correspondant à une polarisation π). En se rappelant que dans ce cas

$$d_{5S\rightarrow5P} \quad \doteq \quad \langle L' = 1|\,|\vec{\boldsymbol{D}}|\,|L = 1\rangle = \langle L' = 1, m'_L = 0|\,\vec{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{\boldsymbol{u}}\,|L = 0, m_L = 0\rangle\,, \quad \text{(VII.54)}$$

il vient que les éléments de matrice du moment dipolaire entre les états de structure fine s'évaluent comme suit. En utilisant la décomposition des états dans la base découplée (équations (VII.48), (VII.51), (VII.52), (VII.53)) et les règles de sélection (équation (VII.39)), on trouve :

$$\langle 5\,^2P_{1/2}, m'_J = \pm\tfrac{1}{2}|\vec{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{\boldsymbol{u}}|5\,^2S_{1/2}, m_J = \pm\tfrac{1}{2}\rangle \quad = \quad \mp\sqrt{\frac{1}{3}}d_{5S\rightarrow5P}, \quad \text{(VII.55)}$$

$$\langle 5\,^2P_{3/2}, m'_J = \pm\tfrac{1}{2}|\vec{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{\boldsymbol{u}}|5\,^2S_{1/2}, m_J = \pm\tfrac{1}{2}\rangle \quad = \quad \sqrt{\frac{2}{3}}d_{5S\rightarrow5P}, \quad \text{(VII.56)}$$

$$\langle 5\,^2P_{3/2}, m'_J = \pm\tfrac{3}{2}|\vec{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{\boldsymbol{u}}|5\,^2S_{1/2}, m_J = \pm\tfrac{1}{2}\rangle \quad = \quad 0. \quad \text{(VII.57)}$$

Potentiel dipolaire En utilisant les résultats précédents, on peut maintenant calculer le potentiel dipolaire ressenti par un atome de rubidium 87 dans l'état fondamental $|5S_{1/2}, m_J = \pm\frac{1}{2}\rangle$, lorsqu'il est soumis à un champ électromagnétique de polarisation linéaire (composante $q = 0$) et de grande fréquence de désaccord par rapport aux transitions D1 et D2. Le Potentiel dipolaire s'écrit :

$$U_{\text{dip}}(\vec{\boldsymbol{r}}) \quad = \quad \frac{|\mathcal{E}|^2}{4\hbar}\left(\frac{|\langle 5\,^2P_{1/2}|\vec{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{\boldsymbol{u}}|5\,^2S_{1/2}\rangle|^2}{\Delta_1} + \frac{|\langle 5\,^2P_{3/2}|\vec{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{\boldsymbol{u}}|5\,^2S_{1/2}\rangle|^2}{\Delta_2}\right) \quad \text{(VII.58)}$$

$$= \quad \frac{d^2_{5S\rightarrow5P}|\mathcal{E}|^2}{4\hbar}\left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2}\right). \quad \text{(VII.59)}$$

Ainsi finalement

$$U_{\text{dip}}(\vec{r}) = \frac{\hbar\Gamma^2}{8I_{\text{sat}}}\left(\frac{1}{3\Delta_1}+\frac{2}{3\Delta_2}\right)I(\vec{r}), \tag{VII.60}$$

avec $\Delta_1 = \omega - \omega_{5S_{1/2}\to 5P_{1/2}}$ et $\Delta_2 = \omega - \omega_{5S_{1/2}\to 5P_{3/2}}$.

Taux d'émission spontanée Le même hamiltonien d'interaction qui génère le potentiel dipolaire est aussi responsable des processus de diffusion de photons (absorption suivie de réémission spontanée), qui conduisent à des effets dissipatifs.

Dans le cas d'un champ à polarisation linéaire et pour un laser fortement désaccordé (par rapport aux transitions D1 et D2), le **taux d'émission spontanée** $\Gamma_{\text{sc}}(\vec{r})$ associé à la diffusion de photons par l'atome de Rubidium 87 est donné par :

$$\Gamma_{\text{sc}}(\vec{r}) = \frac{\Gamma^3}{8I_{\text{sat}}}\left(\frac{1}{3\Delta_1^2}+\frac{2}{3\Delta_2^2}\right)I(\vec{r}). \tag{VII.61}$$

Ce résultat repose sur les hypothèses suivantes :

- **Désaccords** $\Delta_{1,2}$ grands devant la largeur naturelle Γ,
- **État fondamental unique** $|5S_{1/2}\rangle$,
- **Décomposition des contributions** de D1 et D2 avec poids $1/3$, $2/3$ respectivement, comme dans le potentiel dipolaire,
- **Polarisation linéaire du champ**, ce qui annule les composantes vectorielles du potentiel.

E Notre dispositif expérimental

E-1 Choix du laser pour le piégeage dipolaire

Notre objectif est de réaliser un piégeage dipolaire optique pour des atomes de rubidium-87 confinés dans une géométrie unidimensionnelle. Pour cela, nous utilisons un potentiel dipolaire induit par un faisceau laser décalé vers le bleu des transitions atomiques D1 ($5S_{1/2} \to 5P_{1/2}$, à $\lambda_{D1} = 794.98$ nm) et D2 ($5S_{1/2} \to 5P_{3/2}$, à $\lambda_{D2} = 780.24$ nm). Le décalage spectral $\Delta > 0$ garantit que les atomes sont repoussés des zones d'intensité maximale, ce qui permet de construire une "boîte" optique où les atomes sont piégés entre plusieurs faisceaux.

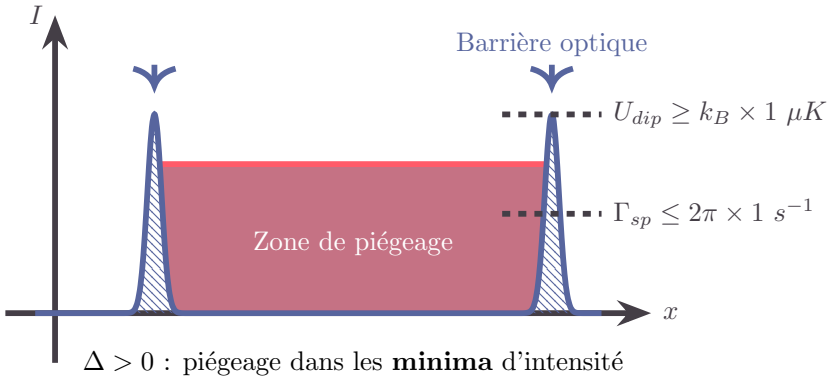


FIGURE VII.5

Dans cette configuration, les faisceaux lasers génèrent un potentiel optique conservatif $U_{dip}(\vec{r})$ et induisent un taux de diffusion spontané $\Gamma_{sc}(\vec{r})$, tous deux proportionnels à l'intensité locale $I(\vec{r})$. Ces deux

effets ont des conséquences opposées sur les atomes : le premier permet de les confiner, le second les chauffe et peut entraîner leur perte. Il est donc crucial d'optimiser le choix du laser (longueur d'onde, puissance) pour maximiser la profondeur du piège tout en minimisant la diffusion photonique.

Critères de sélection de la longueur d'onde du laser

Deux critères fondamentaux guident notre choix de laser :

- Le **potentiel dipolaire** au niveau des atomes, $U_{dip}(0)$, doit être supérieur à une valeur minimale $U_{dip}^{(min)}$, fixée à :
$$U_{dip}(0) \geq U_{dip}^{(min)} \equiv k_B \times 1\mu K. \tag{VII.62}$$
Cette valeur garantit une barrière suffisante pour confiner les atomes contre leur agitation thermique résiduelle ou leur expansion quantique.
- Le **taux de diffusion spontané** au point x^* défini par $U_{dip}(x^*) = U_{dip}(0)/2$ doit rester inférieur à une valeur seuil pour limiter l'échauffement et les pertes :
$$\Gamma_{sp}(x^*) \leq \Gamma_{sp}^{(max)} \equiv 2\pi \times 1\ s^{-1}. \tag{VII.63}$$
Ce critère conduit, en utilisant le fait que le potentiel $U_{dip}^{(min)}(\vec{r})$ et le taux de diffusion spontanée $\Gamma_{sp}(\vec{r})$ sont proportionnels à l'intensité $I(\vec{r})$, à la borne stricte suivante :
$$\Gamma_{sp}(0) \leq 2\pi \times 2\ s^{-1}. \tag{VII.64}$$

Figure de mérite : ratio potentiel / diffusion

Les conditions des équations (VII.62) et (VII.63) impliquent que, pour un point particulier $\vec{r}^*$, le rapport entre la profondeur du piège et la diffusion photonique satisfait

$$\frac{U_{\mathrm{dip}}(\vec{r}^*)}{\hbar\Gamma_{\mathrm{sc}}(\vec{r}^*)} > \frac{2\,U_{\mathrm{dip}}^{(min)}}{\hbar\Gamma_{\mathrm{sc}}^{(max)}}.$$

En utilisant les équations (VII.60) et (VII.61), cette condition se réécrit explicitement sous la forme

$$\frac{U_{dip}(\vec{r}^*)}{\hbar\Gamma_{sc}(\vec{r}^*)} = \frac{1}{\Gamma} \cdot \frac{\left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2}\right)}{\left(\frac{1}{3\Delta_1^2} + \frac{2}{3\Delta_2^2}\right)} \geq \frac{2U_{dip}^{(min)}}{\hbar\Gamma_{sc}^{(max)}} \tag{VII.65}$$

Un calcul numérique montre que, sous ces contraintes, il est nécessaire de sélectionner des lasers dont la longueur d'onde est inférieure à une valeur maximale

$$\lambda_{abs}^{(max)} \simeq 778{,}4\ \mathrm{nm}.$$

Contraintes sur la puissance laser

Le faisceau utilisé est gaussien. On rappelle que le *waist* w_0 désigne le rayon du faisceau, défini comme la distance radiale r pour laquelle l'intensité transverse chute à $1/e^2$ de sa valeur au centre du faisceau qui est la position où le faisceau est le plus focalisé. Nous considérons ici des faisceaux avec un waist de l'ordre de $w_0 \sim 1\ \mu$m.

Dans le cadre d'un piégeage avec un laser désaccordé vers le bleu, les atomes sont confinés dans une région **centrale de faible intensité**, située entre deux faisceaux focalisés. Le piégeage repose alors sur la formation de **parois optiques abruptes**, engendrées par les gradients d'intensité des faisceaux. Pour obtenir un gradient suffisamment marqué, il est nécessaire que chaque faisceau possède un **waist étroit**.

L'intensité maximale atteinte au centre du faisceau est donnée par :

$$I(0) = \frac{2P}{\pi w_0^2}, \tag{VII.66}$$

avec P la puissance incidente. Cette expression relie directement la puissance requise aux contraintes de piégeage, et sera utilisée pour définir les bornes admissibles sur $P(\lambda)$ pour une longueur d'onde donnée.

Les conditions des équations (VII.62) et (VII.63) impliquent alors, en utilisant les expressions (VII.60) et (VII.61) pour le potentiel dipolaire et le taux de diffusion de photons, que la puissance laser doit satisfaire

$$P_{\min}(\lambda) \leq P(\lambda) \leq P_{\max}(\lambda), \tag{VII.67}$$

avec

$$P_{\min}(\lambda) = U_{\text{dip}}^{(min)} \frac{\pi w_0^2}{2} \frac{8 I_{\text{sat}}}{\hbar \Gamma^2} \left(\frac{1}{3\Delta_1} + \frac{2}{3\Delta_2} \right)^{-1}, \tag{VII.68}$$

$$P_{\max}(\lambda) = \Gamma_{\text{sc}}^{(max)} \pi w_0^2 \frac{8 I_{\text{sat}}}{\Gamma^3} \left(\frac{1}{3\Delta_1^2} + \frac{2}{3\Delta_2^2} \right)^{-1}. \tag{VII.69}$$

La région vérifiant le critère ci-dessus est représentée sur la figure (VII.6), dans un diagramme (λ, P) où λ est la longueur d'onde du laser.

Le seuil inférieur $P_{\min}(\lambda)$ est extrêmement faible et n'a pratiquement aucune influence sur le choix expérimental de la puissance laser, contrairement à $P_{\max}(\lambda)$ qui fixe la limite supérieure imposée par la diffusion photonique.

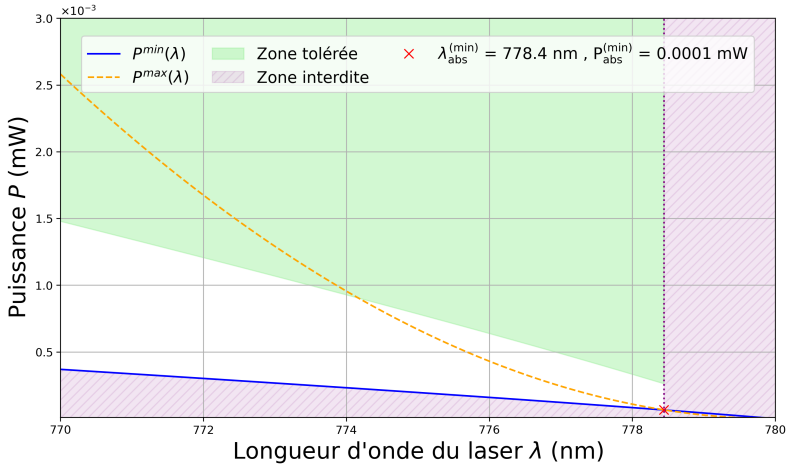


FIGURE VII.6 – Puissance requise en fonction de la longueur d'onde pour $w_0 = 1\,\mu m$

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

$$\lambda_{abs}^{(max)} \simeq 778.4\ nm, \quad P_{abs}^{(min)} \simeq 0.0001\ \ mW$$

Un premier filtrage des sources laser admissibles impose que la longueur d'onde soit inférieure à $\lambda_{\text{abs}}^{(max)}$ et que la puissance disponible dépasse $P_{\text{abs}}^{(min)}$.

Prise en compte des pertes optiques

L'ensemble des éléments optiques traversés par le faisceau — incluant la sortie de fibre, les lentilles de collimation et de focalisation, les miroirs de redirection, les trous de filtrages, ainsi que le diviseur de faisceau — induit des pertes cumulées non négligeables. Une estimation réaliste, fondée sur les caractéristiques typiques des composants et l'expérience de montage, indique que les pertes globales s'élèvent à environ 60 à 75%.

Ces pertes doivent être prises en compte dès le dimensionnement initial du système laser, afin de garantir que la puissance effectivement disponible au niveau des atomes soit suffisante pour atteindre les profondeurs de piège souhaitées. En pratique, on modélise cette efficacité par un facteur global η, défini comme :

$$P_{\text{utile}} = \eta \cdot P_{\text{laser}}, \quad \text{avec} \quad \eta \simeq 0.25.$$

Ce coefficient sera utilisé dans la suite pour évaluer les puissances minimales requises des sources laser candidates. Une marge de sécurité est également conservée pour pallier les éventuels désalignements ou dégradations optiques en conditions expérimentales réelles.

Au niveau des atomes, la puissance des lasers doit donc satisfaire (VII.67), soit être entre la courbe (en bleue) $P^{(\min)}(\lambda)$ et (en jaune) $P^{(\max)}(\lambda)$ de la figure (VII.6) (et après dans la figure (VII.7)). En tenant compte des pertes optiques, cela se traduit par la condition suivante sur la puissance initiale des lasers. Donc, nous cherchons des lasers dans la zone de tolérances (en vert) de la figure (VII.6) (et après dans la figure (VII.7)).

Sources laser utilisées et pureté spatiale

Trois sources laser ont été identifiées pour la réalisation de la boîte optique blue-detuned destinée au piégeage dipolaire du Rubidium-87, dont deux répondent aux conditions de puissance admissibles $P^{(\min)}(\lambda)$ et $P^{(\max)}(\lambda)$.

- **DFB** à $\lambda = 772.5$ nm, puissance $P = 75$ mW.
- **DBR** à $\lambda = 778.0$ nm, puissance $P = 60$ mW.
- **DBR** à $\lambda = 770.5$ nm, puissance $P = 32$ mW.

Le laser DFB (Distributed Feedback) intègre un réseau de Bragg directement dans la région active, ce qui permet un couplage efficace entre la rétroaction optique et le gain, assurant une émission monomode stable tant sur le plan spectral que spatial. Cette architecture confère au DFB une excellente stabilité et une robustesse appréciées en physique atomique.

Le laser Distributed Bragg Reflector (DBR) (Distributed Bragg Reflector), quant à lui, dispose d'un réseau de Bragg séparé de la région active. Cette configuration offre une plus grande flexibilité dans le réglage de la longueur d'onde, mais entraîne généralement une stabilité spectrale un peu moindre par rapport aux lasers DFB.

Ces diodes sont pigtaillées[10] sur des fibres monomodes à maintien de polarisation (type PM780-HP), assurant un profil spatial très pur. En effet, bien que des modes transverses supérieurs puissent être émis par la puce laser, la fibre ne guide que le mode fondamental LP_{01}, équivalent au mode gaussien TEM_{00}, dans la gamme spectrale 770−780 nm. Cette configuration agit comme un filtre spatial puissant, garantissant une sortie de faisceau gaussien avec une pureté supérieure à 99.5% en puissance.

Cette haute pureté spatiale est cruciale pour obtenir une focalisation optimale et des gradients de champ suffisamment intenses dans la zone de piégeage, tout en minimisant les pertes optiques et les effets parasites liés à la présence de modes non fondamentaux.

Les troix lasers se situent dans la zone de tolérance définie par les conditions sur la puissance minimale et maximale en fonction de la longueur d'onde, validant leur adéquation pour la construction de notre boîte optique blue-detuned.

Avec un waist de $w_0 = 1$ μm, les puissances minimales requises pour satisfaire les conditions $U_{dip}^{(min)}$ et $\Gamma_{sp}^{(max)}$ sont extrêmement faibles : environ 1.1 μW pour la DFB à 772.5 nm, 0.3 μW pour la DBR à 778.0 nm, et 1.4 μW pour la DBR à 770.5 nm. Ces valeurs sont très largement inférieures aux puissances disponibles pour chacun de ces lasers, même en tenant compte des pertes optiques, ce qui confirme la faisabilité expérimentale du dispositif.

E-1–i Choix du waist pour les projets futurs. On souhaite choisir une source laser adaptée à différents projets. Notamment, on peut n'utiliser qu'un seul faisceau focalisé sur les atomes, et avec un acousto-optique dessiner un potentiel sur le plan focal des atomes. L'avantage par rapport à la double barrière expliquée plus haut est qu'ici un seul faisceau suffit. Il faut cependant que le modulateur acousto-optique AOM puisse modifier l'intensité et la position du faisceau plus rapidement que le temps de réaction du mouvement du centre de masse des atomes. Ce projet est mené par Florence Nogrette.

Un autre projet, plus simple et utilisant également un seul faisceau, consiste à employer un faisceau gaussien avec un waist suffisamment grand pour recouvrir tous les atomes et à utiliser le DMD pour

10. "couplées à des fibres"

façonner un potentiel sur le plan des atomes. Afin de garder une marge pour ces projets, nous avons choisi un waist de 300 μm.

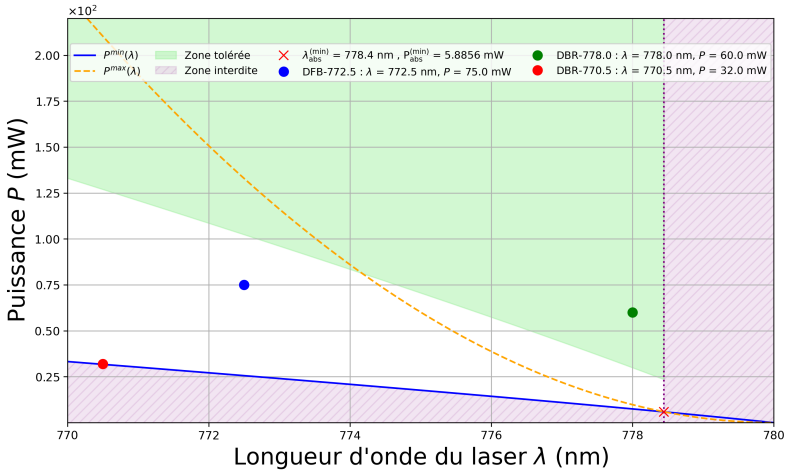


FIGURE VII.7 – Puissance requise en fonction de la longueur d'onde pour $w_0 = 300\,\mu m$

Avec un waist de $w_0 = 300$ μm, les puissances minimales requises augmentent considérablement pour conserver la même intensité au centre du faisceau. On obtient ainsi des puissances nécessaires de l'ordre de 102 mW pour la DFB à 772.5 nm, 30 mW pour la DBR à 778.0 nm, et 127 mW pour la DBR à 770.5 nm (Fig. VII.7).

Afin d'assurer un potentiel dipolaire plus propre, avec le moins de diffusion et de chauffage possible, nous avons choisi la source laser présentant le plus grand désaccord : la DBR à 770.5 nm. Néanmoins, pour obtenir un puits suffisamment profond, la puissance disponible reste insuffisante.

Ce constat a motivé l'ajout d'un amplificateur optique (TA — *Tapered Amplifier*) en sortie du laser à 770.5 nm, afin de compenser la puissance limitée et de garantir des conditions de piégeage satisfaisantes malgré les pertes optiques du système.

E-2 Amplification par Tapered Amplifier (TA)

Principe et motivation

Afin de compenser le déficit de puissance du laser DBR à 770.5 nm — notamment dans le scénario initialement envisagé avec un waist focalisé important — un amplificateur optique de type TA a été ajouté en aval de la source laser.

Un TA est un semi-conducteur optique amplificateur non résonant, composé d'une région d'entrée étroite (guidée) et d'une région de sortie évasée (tapered), permettant d'amplifier efficacement un faisceau monomode tout en conservant un profil spatial de bonne qualité. Contrairement aux lasers, le TA n'oscille pas par lui-même : il agit uniquement sur une source laser fournie en entrée. Il peut amplifier des puissances faibles, de l'ordre de 20 mW, jusqu'à plusieurs centaines de mW, voire au-delà, en sortie.

Ce dispositif est particulièrement adapté aux expériences de piégeage optique, où une puissance laser relativement élevée est nécessaire tout en maintenant une bonne qualité spatiale.

Contraintes et précautions

L'utilisation d'un TA s'accompagne de plusieurs contraintes expérimentales importantes :

- **Sensibilité aux rétro-réflexions :** la puce du TA ne supporte pas les retours optiques parasites, qui peuvent entraîner des instabilités, des dégradations de performance, voire endommager le composant. Un **isolateur optique** est donc placé en sortie pour bloquer tout retour de lumière vers le TA.

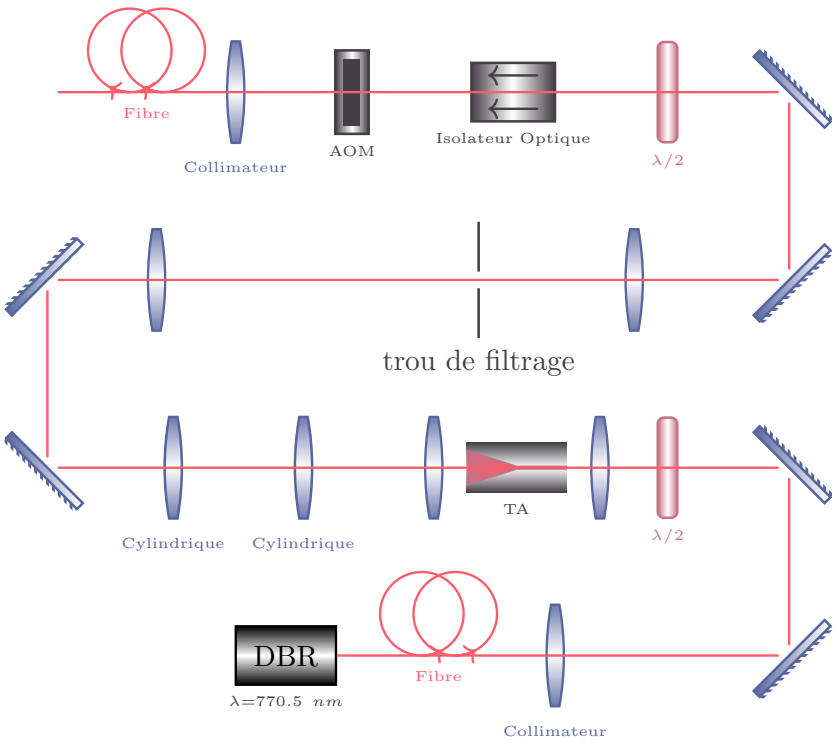


FIGURE VII.8 – Schéma global de l'amplification

- **Mode spatial en sortie :** la sortie du TA reste monomode, mais le profil spatial est fortement déformé et s'éloigne d'un mode TEM_{00} parfait. Un **trou de filtrage** de 50 μm (à ajuster selon le profil observé) peut être utilisé pour filtrer et améliorer la qualité spatiale du faisceau.

Mise en œuvre expérimentale

Le schéma global de l'amplification est présenté sur la figure VII.8 .

- **Laser utilisé pour injecter le TA :** le laser DBR à 770.5 nm est stabilisé en température et en courant à l'aide du contrôleur Thorlabs ITC-510, et injecté dans le TA à l'aide d'une optique de couplage sur table optique.
- **Boîtier de protection et régulation thermique :** le TA est installé dans un boîtier métallique maison, conçu pour assurer à la fois une protection mécanique et une stabilité thermique. Ce boîtier intègre un module Peltier et une thermistance pour la régulation active de la température, pilotés par un contrôleur thermique (Arrow OEM). L'ensemble est alimenté par une alimentation dédiée (Delta Electronics), garantissant un fonctionnement stable du système de refroidissement. Cette stabilisation thermique est cruciale pour limiter les dérives du TA et préserver la qualité spatiale du faisceau amplifié.
- **Filtrage spatial :** un trou de filtrage (trou de filtrage) placé dans le plan de Fourier d'un système en configuration télescopique, positionné en sortie de l'amplificateur TA, permet de sélectionner efficacement le mode spatial fondamental.
- **Isolateur optique :** un isolateur optique est placé immédiatement après le TA pour éviter tout retour de lumière vers la puce.
- **Modulation de puissance :** un modulateur acousto-optique AOM est inséré juste avant une fibre optique, permettant de couper la lumière à la demande (switch rapide) ou de moduler dynamiquement l'intensité laser. Cela permet un contrôle fin de l'illumination au niveau des atomes.
- **Mesure de puissance :** une photodiode ou un puissance-mètre placé après l'AOM permet de mesurer précisément la puissance en fonction du courant injecté dans le TA, et de corriger les effets d'instabilité

si nécessaire.

Caractérisation et performance

La diode laser et le TA sont asservis à une température stable afin d'éviter toute fluctuation susceptible d'affecter leur fonctionnement. Une courbe de puissance de sortie du TA en fonction du courant injecté a été mesurée (voir figure VII.9), avec la diode laser fournissant une puissance maximale d'environ 31.2 mW et le TA testé jusqu'à un courant d'injection de 2.5 A.

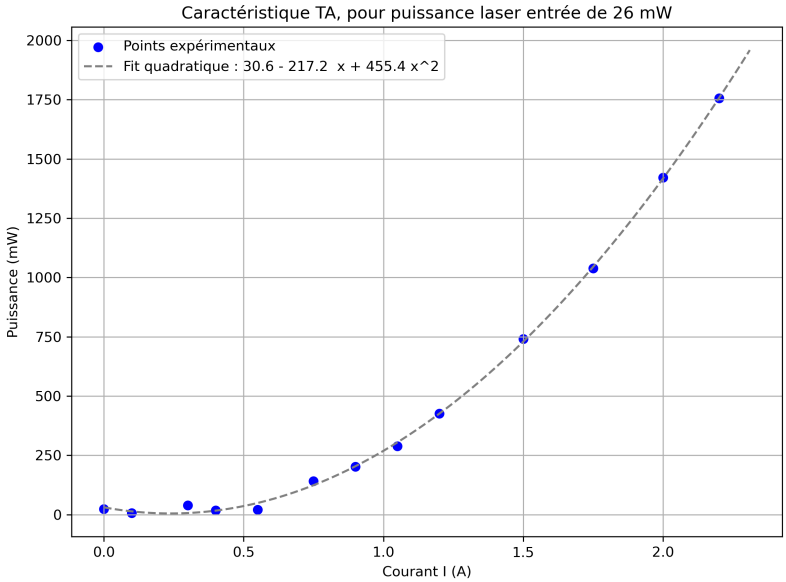


FIGURE VII.9 – Puissance de sortie du TA en fonction du courant d'injection, pour une puissance d'entrée provenant de la diode laser fixée à 25 mW.

Afin d'éviter une dégradation prématurée des composants, il a été choisi de ne pas les faire fonctionner à leurs limites maximales. La diode laser est ainsi réglée pour fournir une puissance d'environ 25 mW (courant $I_{\text{diode}} = 150.6\,\text{mA}$) et le TA est exploité avec un courant d'environ 1.5 A. Cette configuration assure un bon compromis entre puissance de sortie et longévité des dispositifs, tout en garantissant une amplification stable et un profil spatial préservé.

Pour un courant d'injection de 1.5, A dans le TA, la puissance mesurée en sortie, après passage dans l'AOM, est d'environ 62, mW. Or, d'après la figure VII.8, à 1.5, A, la puissance en sortie directe du TA atteint environ 750, mW. Cela signifie qu'après l'AOM, il ne reste qu'environ 8% de la puissance initiale, ce qui n'est pas raisonnable.

Cette perte importante s'explique par le fait que l'on ne souhaite sélectionner que l'ordre fondamental gaussien du faisceau, alors que le TA émet une superposition de modes. Une fraction trop importante de la puissance est ainsi distribuée dans les modes d'ordre supérieur, qui sont rejetés.

De plus, le TA installé présente un rendement maximal (proche de 100% de la puissance spécifiée) lorsque le laser d'entrée est à 780, nm, alors qu'à 770.5, nm le rendement chute à environ 45%. Dans notre cas, nous avons utilisé un TA déjà disponible au laboratoire, choisi comme le plus adapté parmi ceux dont nous disposions, afin d'éviter l'achat d'un modèle plus spécifique.

Il semble donc nécessaire d'envisager, à terme, le remplacement par un TA mieux adapté à la longueur d'onde utilisée.

L'AOM génère plusieurs ordres de diffraction : le mode zéro (non diffracté), les modes ±1, etc. Afin d'optimiser le transfert d'énergie dans un mode diffracté souhaité (par exemple le premier ordre ±1), le cristal AOM a été ajusté finement en rotation. Ce réglage permet de maximiser la puissance dans ce mode non nul.

Le faisceau correspondant à ce mode diffracté, qui concentre la majorité de la puissance utile, est ensuite injecté dans une fibre monomode à maintien de polarisation.

Ainsi, l'AOM est configuré de manière à transférer efficacement la puissance vers le mode diffracté utile, avec une puissance d'environ 62 mW disponible à l'entée de la fibre, garantissant une qualité spatiale et une polarisation stables pour l'expérience.

Le système ainsi mis en place permet d'obtenir, de manière stable, une puissance suffisante en sortie pour alimenter la fibre de piégeage, même en tenant compte des pertes optiques du système.

Conclusion

Résumé

Dans ce chapitre, nous avons présenté les dispositifs expérimentaux permettant de réaliser et de contrôler des gaz atomiques confinés en une dimension. Le potentiel dipolaire offert par la puce atomique permet déjà de créer des profils de densité variés, jusqu'à un potentiel quartique en ordre 4. L'introduction du DMD offre une flexibilité supplémentaire : il permet de sélectionner des régions du nuage atomique et de générer des découpes locales, ouvrant ainsi la voie à des préparations plus complexes.

En combinant le potentiel de la puce et le DMD, il est possible de préparer des nuages atomiques homogènes sur des zones plus étendues que celles limitées par le potentiel quartique de la puce seule. Cependant, pour générer des potentiels encore plus exotiques et modulables, l'utilisation d'un TA est nécessaire. Après optimisation, nous avons injecté environ 62 mW dans la fibre conduisant vers le DMD. Cette configuration est satisfaisante pour le projet en cours, mais elle révèle certaines limitations du TA utilisé : le profil spatial du faisceau s'écarte significativement d'un mode TEM_{00}, ce qui explique la faible puissance réellement injectée. Pour atteindre des performances supérieures et exploiter pleinement la flexibilité du DMD, il serait nécessaire de remplacer le TA actuel par un modèle offrant un profil spatial plus adapté.

Bibliographie

[CDG88] Claude COHEN-TANNOUDJI, Jacques DUPONT-ROC et Gilbert GRYNBERG. *Processus d'interaction entre photons et atomes*. Savoirs actuels. InterEditions / Éditions du CNRS, 1988.

[GWO99] Rudolf GRIMM, Matthias WEIDEMÜLLER et Yurii B. OVCHINNIKOV. *Optical dipole traps for neutral atoms*. 1999. arXiv : physics/9902072 [physics.atom-ph]. URL : https://arxiv.org/abs/physics/9902072.

[Sch01] Nicolas SCHLOSSER. "Étude et réalisation de micro-pièges dipolaires optiques pour atomes neutres". Thèse de doctorat. Université Paris XI, 2001. URL : http://tel.ccsd.cnrs.fr/documents/archives0/00/00/11/95/index_fr.html.

[Ste02] D. A. STECK. *Rubidium 87 D Line Data*. http://george.ph.utexas.edu/~dsteck/alkalidata/rubidium87numbers.pdf. Revision 1.6. 2002.

[Dar06] Benoît DARQUIÉ. "Manipulation d'atomes dans des pièges dipolaires microscopiques et émission contrôlée de photons par un atome unique". Submitted on 14 Feb 2006. Thèse de doctorat. Physique Atomique [physics.atom-ph], 2006. URL : https://pastel.hal.science/tel-00011604v1.

[LSR13] Fam LE KIEN, Philipp SCHNEEWEISS et Arno RAUSCHENBEUTEL. "Dynamical polarizability of atoms in arbitrary light fields : general theory and application to cesium". In : *The European Physical Journal D* 67.5 (mai 2013). ISSN : 1434-6079. DOI : 10.1140/epjd/e2013-30729-x. URL : http://dx.doi.org/10.1140/epjd/e2013-30729-x.

Conclusion

Introduction de la conclusion

Dans cette thèse, j'ai exploré les gaz de bosons 1D intégrables, où l'état relaxé ne suit pas la statistique Gibbs classique, mais est caractérisé par la distribution de rapidités. L'objectif central était de sonder cette distribution spatialement résolue et de confronter les données expérimentales aux prédictions de la théorie d'Hydrodynamique Généralisée (GHD).

Résumé des travaux réalisés

Cette thèse a permis de combiner théorie, simulation et expérimentation pour mieux comprendre et manipuler les gaz de bosons 1D intégrables. Mes contributions se situent dans trois axes :

Approche théorique

J'ai approfondi mes compréhensions dans les fondements du modèle de Lieb–Liniger et de l'Ansatz de Bethe (BA), ainsi que leur encadrement par le cadre théorique des systèmes intégrables : GGE, TBA et GHD. Ces mécanismes, au carrefour de la théorie quantique et de l'hydrodynamique quantique, ont renforcé ma compréhension conceptuelle, tout en illustrant mes cours dans un contexte applicatif.

Simulations numériques et modélisation

Dans cette thèse, j'ai développé des simulations GHD pour étudier la dynamique des gaz de bosons 1D, notamment dans le cadre de protocoles impliquant des déformations locales des profils de densité. En parallèle, j'ai calculé les fluctuations de la distribution de rapidité en utilisant le formalisme TBA, et validé ces résultats par des vérifications numériques fondées sur le principe de fluctuation–réponse.

Afin d'explorer la faisabilité de l'échantillonnage du GGE, j'ai amorcé des simulations Monte Carlo adaptées. Ces outils fournissent un cadre théorique robuste pour anticiper de futures mesures expérimentales locales, bien que celles-ci n'aient pas été réalisées au cours de cette thèse.

Mise en place expérimentale

Sur le plan expérimental, j'ai initié la mise en place d'un piégeage dipolaire en complément de la puce atomique, visant à préparer des configurations initiales de gaz atomiques peu conventionnelles. Cette étape permet de générer des potentiels longitudinaux complexes et modulables, ouvrant la voie à l'étude future de distributions de rapidité spatialement résolues et de dynamiques hors équilibre dans des états initialement « exotiques ».

Perspectives, faisabilité et réflexion critique

Développement du piégeage dipolaire. La poursuite de la réalisation d'un piège dipolaire plus abouti offrirait une plus grande liberté dans la préparation des systèmes, tout en garantissant une meilleure reproductibilité des conditions expérimentales. Une telle maîtrise constitue un prérequis essentiel, par exemple

pour envisager la mesure de fluctuations, mais elle demeure exigeante en termes d'optique, d'alignement et de stabilité.

Optimisation des simulations et étude des pertes. Une piste prometteuse consiste à améliorer les méthodes de simulation Monte Carlo afin de générer plus efficacement des états GGE et d'accéder à des corrélations de fluctuations d'ordre supérieur. Dans ce cadre, l'inclusion des effets de pertes atomiques et la modélisation récente de l'évolution de la distribution de rapidités sous pertes [BDD20] constitue un enjeu central : ouvrir la voie à l'étude de déviations non thermiques, intégrables dans le cadre de la GHD. La prise en compte des pertes multibody, notamment dans une géométrie confinée, permettrait en outre d'évaluer la robustesse des distributions de rapidité face à ces processus dissipatifs. La confrontation de ces résultats, théoriques et numériques, à des données expérimentales demeure une perspective majeure.

Bien que techniquement complexes et exigeant une résolution spatiale et statistique élevée, des mesures directes des fluctuations de densité, après expansion ou *in situ*,deviennent aujourd'hui envisageables grâce aux techniques modernes d'imagerie à haute résolution, et offriraient une comparaison directe avec les prédictions issues des approches Monte Carlo.

Annexe A

De la transformation de Fourier aux états de Bethe : Représentations et intégrabilité

Sommaire

a. Transformée de Fourier, variables conjuguées et changements de représentation . . . 153
a.i. Transformée de Fourier : définition et cadre fonctionnel $\mathcal{L}^1$ . . . 154
a.ii. Dérivation et dualité Fourier . . . 156
a.iii. Interprétation géométrique : rotation symplectique . . . 159
a.iv. Passage à l'espace $\mathcal{L}^2$ et unitarité . . . 165
a.v. Espace de Hilbert $\mathscr{H}$ séparable et exemples canoniques . . . 169
a.vi. Distributions, Bras et Kets . . . 173
b. États propres de Bethe pour le modèle de Lieb-Liniger . . . 178
b.i. Pour une particule libre : première quantification . . . 178
b.ii. Pour N (inconue) de particule(s) : seconde quantification . . . 184
b.iii. Résumé synthétique — opérateurs à un et deux corps . . . 187
b.iv. États de Bethe et structure unitaire des collisions . . . 187
b.v. Formulation variationnelle unifiée des spectres de la RMT . . . 192
b.vi. Méthode de Scattering Inverse et hiérarchie d'invariants . . . 197
Bibliographie . . . 200

a. Transformée de Fourier, variables conjuguées et changements de représentation

La transformée de Fourier occupe une place singulière en analyse et en physique mathématique, en ce qu'elle réalise un changement de représentation fondamental entre variables conjuguées. Elle intervient aussi bien comme outil technique que comme opérateur structurel, reliant des espaces fonctionnels a priori distincts et révélant les symétries profondes des modèles considérés. Dans ce manuscrit, on supposera le lecteur familier avec les définitions usuelles de la transformée de Fourier ainsi qu'avec les bases de la théorie des distributions (voir par exemple [App19 ; Gér21 ; Bab21 ; Mar21 ; Har20]). Néanmoins, afin d'assurer la cohérence interne de l'exposé et d'unifier les notations employées par la suite, nous rappelons ici les définitions et propriétés essentielles qui seront utilisées, parfois de manière implicite, tout au long de cette section.

L'accent sera mis sur les espaces de Hilbert séparables

$$\ell^2(\mathbb{Z}), \qquad \mathcal{L}^2([0,L]), \qquad \mathcal{L}^2(\mathbb{R}),$$

qui jouent un rôle central tant en analyse harmonique qu'en mécanique quantique. Ces espaces, bien que définis sur des ensembles de nature différente (continu non borné, intervalle compact, ensemble discret), sont isomorphes du point de vue hilbertien. Ils constituent ainsi des cadres équivalents pour la description des états physiques, la différence entre eux relevant essentiellement du choix de représentation — position, impulsion, ou modes discrets — plutôt que d'une distinction intrinsèque des degrés de liberté. Cette équivalence structurelle est au cœur de l'interprétation énergétique de ces espaces et sous-tend de nombreux modèles physiques et spectraux [App19 ; Gou08b ; Gou08a].

Dans ce contexte, la transformée de Fourier apparaît comme un opérateur unitaire reliant ces différentes représentations. Sur $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, elle définit une isométrie surjective, et donc un automorphisme hilbertien, échangeant — à des facteurs de normalisation près — l'opérateur de dérivation et l'opérateur de multiplication par la variable. Cette propriété, qui dépasse le simple cadre des fonctions intégrables, confère à $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ un statut privilégié : cet espace est stable par transformée de Fourier et constitue le cadre naturel de l'analyse spectrale des opérateurs différentiels, ainsi que de la formulation mathématique de la mécanique quantique [**cohen1973mecanique3** ; App19 ; Har20 ; CDL73a ; CDL73b].

L'étude de la transformée de Fourier sur des domaines compacts ou discrets conduit naturellement aux séries de Fourier et à leurs généralisations. Le passage de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ à $\mathcal{L}^2([0, L])$, puis à $\ell^2(\mathbb{Z})$, peut être interprété comme une succession de restrictions, de périodisations et de discrétisations, dont le peigne de Dirac fournit un modèle distributionnel unificateur. Cette perspective permet de traiter de manière cohérente les liens entre transformée de Fourier continue, séries de Fourier et transformations unitaires entre espaces de Hilbert isomorphes.

Au-delà de son rôle analytique, la transformée de Fourier admet une interprétation géométrique naturelle. Elle peut être vue comme une rotation dans l'espace des phases, ou plus précisément comme une transformation symplectique agissant sur les variables conjuguées. Cette interprétation éclaire le lien profond entre transformée de Fourier, relations de commutation canoniques et principe d'incertitude. En mécanique quantique, elle formalise le passage entre les représentations position et impulsion, et justifie l'introduction des opérateurs de position et d'impulsion comme générateurs infinitésimaux de translations dans des représentations unitaires équivalentes.

Enfin, l'introduction du formalisme des kets et des bras permet d'étendre cette analyse au cadre des distributions tempérées [App19 ; Leb24]. Les états propres généralisés de la position ou de l'impulsion, bien qu'ils n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, prennent un sens rigoureux dans le dual d'un espace de test convenablement choisi. Cette extension est indispensable pour une formulation cohérente de la mécanique quantique et pour l'interprétation physique des changements de représentation induits par la transformée de Fourier.

Dans toute cette section, nous adopterons un jeu de conventions générales pour la transformée de Fourier, choisi de manière à englober les conventions usuelles employées aussi bien en analyse qu'en physique, et à faciliter les passages entre les différentes représentations.

a.i. Transformée de Fourier : définition et cadre fonctionnel $\mathcal{L}^1$

Dans cette sous-section, on commence par définir et établir les principales propriétés de la transformée de Fourier d'une fonction intégrable [App19 ; Gér21 ; Bab21 ; Mar21 ; Har20 ; Gou08b ; Gou08a].

a.i.1. Définition intégrale de la transformée de Fourier sur $\mathbb{R}$

On trouve des différentes définitions de la **transformée de Fourier** dans différent domaine comme en numérique, optique, mécanique quantique, etc. Pour englober ces cas usuels, on se prend la définition suivante :

Définition a..1 (Transformée de Fourier). Soit f une fonction, réelle ou complexe, d'une variable *réelle*. On appelle **transformée de Fourier** (ou **spectre**) de f, *s'il existe*, la fonction notée $\tilde{f}$ de la variable réelle définie par :

$$\tilde{f}(k) \doteq \alpha \int_{\mathbb{R}} f(x)\, e^{\mp i\gamma kx}\, dx,, \tag{A.1}$$

avec $(\alpha, \gamma) \in \mathbb{C} \times \mathbb{R}$. On écrit alors symboliquement :

$$\tilde{f} \equiv \mathcal{F}[f], \tag{A.2}$$

et l'opérateur[1] $\hat{\mathcal{F}}$ (avec le chapeau) tel que

$$f \overset{\hat{\mathcal{F}}}{\longmapsto} \hat{\mathcal{F}} f = \mathcal{F}[f] \tag{A.3}$$

et inversement

$$\mathcal{F}^{-1}[f](k) \equiv \beta \int_{\mathbb{R}} f(x)\, e^{\pm i\gamma k x}\, dx, \tag{A.4}$$

avec $\beta \in \mathbb{C}$ et avec la contrainte $\gamma = 2\pi\alpha\beta$.

Le choix usuel en traitement du signal est $\alpha = \beta = 1$ et $\gamma = 2\pi$, et la variable conjuguée de x est alors une fréquence ; en optique, on utilise le plus souvent $\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ et $\gamma = 1$; en mécanique quantique, on peut conserver le choix de l'optique, mais la variable conjuguée de x est ainsi $k = \frac{p}{\hbar}$, ou bien on fait comme ici $\gamma = \frac{1}{\hbar}$ et $\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$. On notera qu'en optique, où les champs sont réels, on peut aussi choisir le signe $\mp$ que l'on préfère devant γ, alors qu'en mécanique quantique, on doit faire $\mp \longrightarrow -$ et $\pm \longrightarrow +$. En dimension d, le pré-facteur est mis à la puissance d et dans la phase $\frac{px}{\hbar}$ devient $\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}$.

a.i.2. Cadre minimal de définition : Espaces $\mathcal{L}^1(\mathbb{R})$ et $\mathcal{L}^\infty(\mathbb{R})$

On considère l'espace, noté $\mathcal{L}^1(\mathbb{R})$, des fonctions intégrables (au sens de Lebesgue).

Soit $\mathbb{K}$ un corps.

Définition a..2 (Espace $\mathcal{L}^1$). On note $\mathcal{L}^1(\mathbb{R}, \mathbb{K})$ ou $\mathcal{L}^1(\mathbb{R})$ ou $\mathcal{L}^1$, l'espace vectoriel des fonctions sommables, définies « à une égalité presque partout près », muni de la norme 1 $\| \bullet \|_1$:

$$\|f\|_1 \doteq \int_{\mathbb{R}} |f(x)|\, dx. \tag{A.5}$$

Ainsi, la *transformation de Fourier est naturellement définie sur l'ensemble $\mathcal{L}^1$ des fonctions intégrables définies à une égalité presque partout près*.

Définition a..3 (Espace $\mathcal{L}^\infty$). On note $\mathcal{L}^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{K})$ ou $\mathcal{L}^\infty(\mathbb{R})$ ou $\mathcal{L}^\infty$, l'espace vectoriel des fonctions mesurables bornées. On le munit de la « norme du sup / ∞[2] » $\| \bullet \|_\infty$:

$$\|f\|_\infty \doteq \sup_{x \in \mathbb{R}} |f(x)|. \tag{A.6}$$

Cet espace nous intéresse ici, car la transformée de Fourier d'une fonction intégrable est une fonction bornée :

Proposition a..4 (La transformation de Fourier envoie $\mathcal{L}^1$ dans $\mathcal{L}^\infty$). *Soit $f \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R})$ une fonction intégrable et notons $\tilde{f}$ sa transformée de Fourier. Alors $\tilde{f}$ est une fonction continue de $\mathbb{R}$. De plus, elle est bornée et $\|\tilde{f}\|_\infty \leq \|f\|_1$.*

Théorème a..5 (Continuité de la transformation de Fourier dans $\mathcal{L}^1$). *La transformation de Fourier, définie sur $\mathcal{L}^1(\mathbb{R})$ et à valeurs dans $\mathcal{L}^\infty(\mathbb{R})$, est une opération linéaire et continue.*

1. On notera les actions des opérateurs $f \overset{\hat{\mathcal{A}}}{\longmapsto} \mathcal{A}[f]$ comme l'action de l'opérateur $\hat{\mathcal{A}}$ sur le vecteur f. On peut aussi noter $\hat{\mathcal{A}} : f \mapsto \mathcal{A}[f]$. Pour différentier avec les applications sur des scalaires, on gardera la première notation
2. Il est possible de définir les fonctions de $\mathcal{L}^\infty$ à une égalité presque partout près. On doit alors modifier la norme en conséquence.

a.ii. Dérivation et dualité Fourier

a.ii.1. Opérateur de multiplication et opérateur de dérivation

On définit l'opérateur dérivation noté $\hat{\boldsymbol{\partial}}$ tel que pour toute fonction f dérivable :

$$f \overset{\hat{\partial}}{\longmapsto} \partial f, \quad \text{tel que } \partial f : x \mapsto f'(x). \tag{A.7}$$

Si on fixe le nom la variable de dérivation, par exemple «x», on définit l'opérateur $\hat{\boldsymbol{\partial}}_x$ tel que :

$$f \overset{\hat{\partial}_x}{\longmapsto} \partial_x f \equiv \frac{\partial f}{\partial x}. \tag{A.8}$$

Dans les démonstrations, afin d'améliorer la lisibilité, nous écrirons directement $\partial_x(\text{˝valeur de fonction˝})$ pour désigner la dérivée, par rapport à la variable notée «x», d'une fonction[3]. Par exemple sur l'opération « multiplication par la variable», on notera,

$$\partial_x \left(e^{\mp i\gamma k x}\right) \equiv \partial_x \left(x \mapsto e^{\mp i\gamma k x}\right). \tag{A.9}$$

Lorsque la fonction ne dépend que d'une seule variable, il n'est pas nécessaire de préciser explicitement le nom de celle-ci ; on pourra alors écrire, par exemple,

$$\partial\big(x f(x)\big) \equiv \partial\left(x \mapsto x f(x)\right). \tag{A.10}$$

a.ii.2. Conjugaison des opérateurs par la transformée de Fourier (dualité dérivation–multiplication)

On a la relation très importante entre transformation de Fourier et dérivation :

Théorème a..6 (**Transformation de Fourier et dérivation**). *Soit $f \in \mathcal{L}^1$ une fonction décroissant suffisamment vite pour que $\mathrm{id}_{\mathbb{R}}^q f : x \mapsto x^q f(x)$ soit également dans $\mathcal{L}^1$ pour $q \in [\![0, n]\!]$. Alors $\mathcal{F}[f]$ est n fois dérivable et on a*

$$\mathcal{F}[x \mapsto (\mp i\gamma x)^q f(x)] = \partial^q \mathcal{F}[f] \quad q \in [\![0, n]\!]. \tag{A.11}$$

Inversement, si $f \in \mathcal{L}^1$ est de classe C^n et si ses dérivées successives $\partial^q f$ ($\equiv f^{(q)}$) sont intégrables pour $q \in [\![0, n]\!]$, ainsi on a

$$\mathcal{F}[\partial^q f] = (\pm i\gamma\, \mathrm{id}_{\mathbb{R}})^q\, \mathcal{F}[f]\ (: x \mapsto (\pm i\gamma x)^q \tilde{f}) \quad q \in [\![0, n]\!]. \tag{A.12}$$

On retiendra notamment que :

$$\mathcal{F}[\partial f] = \pm i\gamma\, \mathrm{id}_{\mathbb{R}}\, \mathcal{F}[f]\ (: x \mapsto \pm i\gamma x \tilde{f}) \quad et \quad \mathcal{F}[\mp i\gamma\, \mathrm{id}_{\mathbb{R}}\, f] = \partial \mathcal{F}[f] \tag{A.13}$$

Démonstration. Pour tous $x \in \mathbb{R}$, la fonction $k \mapsto f(x)\, e^{\mp i\gamma k x}$ est de classe C^∞, de dérivée q-ième bornén en module par $|(\gamma x)^q\, f(x)|$, qui est intégrable. On applique alors le théorème de dérivation sous le signe somme, qui nous donne

$$\partial \mathcal{F}[f] = \alpha \int_{\mathbb{R}} \partial_k (f(x)\, e^{\mp i\gamma k x}) = \alpha \int_{\mathbb{R}} \mp i\gamma x\, f(x)\, e^{\mp i\gamma k x} \tag{A.14}$$

puis par récurrence immédiate, la première formule.

La transformée de Fourier de la dérivée d'une fonction peut être calculée par intégration par parties. Considérons une fonction f suffisamment régulière telle que f et ses dérivées tendent vers zéro à l'infini. La transformée de Fourier de $\partial_x f$ est donnée par :

$$\mathcal{F}[\partial_x f](k) = \alpha \int_{\mathbb{R}} \partial_x f(x)\, e^{\mp i\gamma k x}\, dx. \tag{A.15}$$

3. Cette notation est purement formelle : lorsqu'elle est appliquée à un scalaire (c'est-à-dire à une valeur numérique indépendante de la variable), la dérivée est identiquement nulle.

En intégrant par parties, on obtient :

$$\int_{\mathbb{R}} \partial_x f(x)\, e^{\mp i\gamma k x}\, dx = \left[f(x)\, e^{\mp i\gamma k x}\right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{\mathbb{R}} f(x)\, \partial_x \left(e^{\mp i\gamma k x}\right) dx. \tag{A.16}$$

Le terme de bord s'annule car f tend vers zéro à l'infini. La dérivée de l'exponentielle donne :

$$\partial_x \left(e^{\mp i\gamma k x}\right) = \mp i\gamma k\, e^{\mp i\gamma k x}. \tag{A.17}$$

Ainsi,

$$\mathcal{F}[\partial_x f](k) = \alpha\,(\pm i\gamma k) \int_{\mathbb{R}} f(x)\, e^{\mp i\gamma k x}\, dx = \pm i\gamma k\, \mathcal{F}[f](k). \tag{A.18}$$

Ce qui montre la deuxième formule pour $q = 1$. On peut, par récurrence sur q, généraliser cela aux dérivées d'ordre supérieur

$$\mathcal{F}[\partial_x^q f](k) = (\pm i\gamma k)^q\, \mathcal{F}[f](k), \tag{A.19}$$

et de conclure.

□

a.ii.3. Représentations : variables conjuguées et relations de commutation

a.ii.3.-i Variables conjuguées (Opérateur de multiplication et opérateur de dérivation) **et transformée de Fourier.** On note l'opérateur de multiplication $\hat{\boldsymbol{M}}_\varphi$ tel que

$$f \overset{\hat{\boldsymbol{M}}_\varphi}{\longmapsto} (x \mapsto \varphi(x) f(x))\,, \tag{A.20}$$

en particulier $\hat{\boldsymbol{M}}_{\mathrm{id}_\mathbb{R}}$ est tel que

$$f \overset{\hat{\boldsymbol{M}}_{\mathrm{id}_\mathbb{R}}}{\longmapsto} \left(\hat{\mathbf{id}}_\mathbb{R} f : x \mapsto x f(x)\right), \tag{A.21}$$

nous intéresse. Et Rappelons-nous de l'opérateur dérivation $\hat{\boldsymbol{\partial}}$:

$$f \overset{\hat{\partial}}{\longmapsto} (\partial f : x \mapsto \partial_x f(x) = f'(x))\,. \tag{A.22}$$

Ce dernier théorème s'écrit sous forme opérationnelle de la manière suivante :

$$\mp i\gamma\, \hat{\mathcal{F}}\, \hat{\boldsymbol{M}}_{\mathrm{id}_\mathbb{R}}\, \hat{\mathcal{F}}^{-1} = \hat{\boldsymbol{\partial}} \quad \text{et} \quad \hat{\mathcal{F}}\, \hat{\boldsymbol{\partial}}\, \hat{\mathcal{F}}^{-1} = \pm i\gamma\, \hat{\boldsymbol{M}}_{\mathrm{id}_\mathbb{R}}. \tag{A.23}$$

L'opérateur de transformée de Fourier $\hat{\mathcal{F}}$ permet le passage d'une représentation à sa représentation conjuguée. En particulier, la représentation conjuguée de l'opérateur

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}} \;\equiv\; \mp \frac{i}{\gamma}\, \hat{\boldsymbol{\partial}} \tag{A.24}$$

est donnée par l'opérateur $\hat{\boldsymbol{M}}_{\mathrm{id}_\mathbb{R}}$, et réciproquement, la représentation conjuguée de l'opérateur $\hat{\boldsymbol{M}}_{\mathrm{id}_\mathbb{R}}$ est $-\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}$, car

$$\hat{\mathcal{F}}\, \hat{\boldsymbol{M}}_{\mathrm{id}_\mathbb{R}}\, \hat{\mathcal{F}}^{-1} = -\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}} \quad \text{et} \quad \hat{\mathcal{F}}\, \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}\, \hat{\mathcal{F}}^{-1} = \hat{\boldsymbol{M}}_{\mathrm{id}_\mathbb{R}}, \tag{A.25}$$

et inversement

$$\hat{\mathcal{F}}^{-1}\, \hat{\boldsymbol{M}}_{\mathrm{id}_\mathbb{R}}\, \hat{\mathcal{F}} = \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}} \quad \text{et} \quad \hat{\mathcal{F}}^{-1}\, \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}\, \hat{\mathcal{F}} = -\hat{\boldsymbol{M}}_{\mathrm{id}_\mathbb{R}}. \tag{A.26}$$

a.ii.3.-ii Relations de commutation des variables conjuguées. De plus, comme $\partial(yf(y)) - y\,\partial(f(y)) = f(y)$ on en déduit l'égalité opérationnelle

$$\hat{\boldsymbol{\partial}}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}} - \hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}}\hat{\boldsymbol{\partial}} = \hat{\mathbf{id}}_{\mathcal{L}^1(\mathbb{R})}. \tag{A.27}$$

En utilisant les crochets de Lie (commutateur), cela s'écrit

$$[\hat{\boldsymbol{\partial}}, \hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}}] \;\equiv\; \hat{\mathbf{id}}_{\mathcal{L}^1(\mathbb{R})}. \tag{A.28}$$

Ou encore, en termes de l'opérateur $\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}$ on obtient

$$[\hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}}, \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}] \;\equiv\; \pm\frac{i}{\gamma}\,\hat{\mathbf{id}}_{\mathcal{L}^1(\mathbb{R})}. \tag{A.29}$$

a.ii.4. Représentations quantiques : position et impulsion ; et normalisations

a.ii.4.-i Choix de conventions. Si on fixe les noms des variables «x» et «k» tel que la transformée de Fourier permet de passer d'une fonction de «x» à une fonction de «k». Donc dans l'équation (A.25), on a des opérations agissant sur des fonctions en représentation «k» et l'équation (A.26) pour des fonctions en représentation «x». Alors dans l'équation (A.25), $\hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}}$ et $\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}$ s'identifient à :

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}} \;\longrightarrow\; \hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}} \quad \text{tel que} \quad (\hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}}f)(k) = k f(k), \tag{A.30}$$

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}} \;\longrightarrow\; \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_k \;\equiv\; \mp\frac{i}{\gamma}\,\hat{\boldsymbol{\partial}}_k \tag{A.31}$$

et dans l'équation (A.26), $\hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}}$ et $\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}$ s'identifient à :

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}} \;\longrightarrow\; \hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}} \quad \text{tel que} \quad (\hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}}f)(x) = x f(x), \tag{A.32}$$

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}} \;\longrightarrow\; \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_x \;\equiv\; \mp\frac{i}{\gamma}\,\hat{\boldsymbol{\partial}}_x. \tag{A.33}$$

En injectant dans (A.25) et (A.26) en se rappelant que ici on a la convention que la transformée de Fourier permet de passer de la représentation «x» à la représention «k» :

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1} = -\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_k, & \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_k\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1} = \hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}}, \\ \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}} = \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_x \quad \text{et} & \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_x\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1} = \hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}}. \end{cases}, \tag{A.34}$$

et en appliquant $\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}$ à gauche et $\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1}$ à droite des dernières équations (équation (A.26)), on obtient :

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1} = -\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_k, & \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_k\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1} = \hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}}, \\ \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_x\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1} = \hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}} \quad \text{et} & \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\,(-\hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}})\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1} = \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_x. \end{cases} \tag{A.35}$$

Donc

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}} = \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_x & \text{dans la représentation «}x\text{»}, \\ \hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}} = -\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_k. & \text{dans la représentation «}k\text{»} \end{cases} \tag{A.36}$$

a.ii.4.-ii Position et Impulsion. En particulier, si l'on impose les conventions $\gamma \equiv \hbar^{-1}$, $\pm \equiv +$ (et $\mp \equiv -$), et si l'on fixe les variables «x» et «p», correspondant en physique, respectivement, aux représentations de la position et de l'impulsion, et si $\mathcal{F}[x \mapsto f(x)](p)$, alors on reconnaît les opérateurs de position $\hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}}$ et d'impulsion $\hat{\boldsymbol{\mathcal{P}}}$ de la mécanique quantique :

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{\mathcal{P}}} = -i\hbar\,\hat{\boldsymbol{\partial}}_x & \text{dans la représentation «}x\text{»}, \\ \hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}} = +i\hbar\,\hat{\boldsymbol{\partial}}_p & \text{dans la représentation «}p\text{»} \end{cases} \tag{A.37}$$

et leur commutateur est

$$[\hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}}, \hat{\boldsymbol{\mathcal{P}}}] \;\equiv\; i\hbar\,\hat{\mathbf{id}}_{\mathcal{L}^1(\mathbb{R})}. \tag{A.38}$$

a.ii.4.-iii Normalisations : variables conjuguées adimensionnées. On réécrit les variables à l'aide d'un paramètre d'échelle η tel que

$$x = \eta\, x_*, \qquad k = \frac{1}{\gamma\eta}\, k_*, \tag{A.39}$$

de telle sorte que x_* et k_* soient sans dimension physique. Avec ces variables, la transformée de Fourier et la transformée de Fourier inverse s'écrivent

$$\mathcal{F}_*[f](k_*) = \alpha_* \int_{\mathbb{R}} dx_*\, f(x_*)\, e^{\mp i x_* k_*}, \tag{A.40}$$

$$\mathcal{F}_*^{-1}[f](x_*) = \beta_* \int_{\mathbb{R}} dk_*\, f(k_*)\, e^{\pm i x_* k_*}, \tag{A.41}$$

avec

$$\alpha_* = \eta\,\alpha, \qquad \beta_* = \frac{1}{\gamma\eta}\,\beta, \qquad 2\pi\,\alpha_*\beta_* = 1. \tag{A.42}$$

Et

$$\text{si} \quad f(x) = f_*(x_*) \quad \text{alors} \quad \mathcal{F}[f] = \mathcal{F}_*[f_*] \quad \text{et} \quad \text{si} \quad f(k) = f_*(k_*) \quad \text{alors} \quad \mathcal{F}^{-1}[f] = \mathcal{F}_*^{-1}[f_*]. \tag{A.43}$$

Ainsi, le paramètre γ disparaît explicitement des expressions. Dans ce manuscrit, nous avons nommé les variables «x» et «k» pour des raisons pédagogiques et afin de faire apparaître les opérateurs usuels de la mécanique quantique. Cependant, pour la définition abstraite de la transformée de Fourier, ces variables sont muettes.[4]

Et en remarquant que $\gamma\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}} = \mp i\hat{\boldsymbol{\partial}}$, il vient que :

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\,\hat{\boldsymbol{X}}_*\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1} = \pm i\hat{\boldsymbol{\partial}}_{k_*}, & \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\,\gamma\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_{k_*}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1} = \hat{\boldsymbol{X}}_*, \\ \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}}_*\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}} = \mp i\hat{\boldsymbol{\partial}}_{x_*} \quad \text{et} \quad \hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1}\,\gamma\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_{x_*}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1} = \hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}}_*. \end{cases} \tag{A.47}$$

a.iii. Interprétation géométrique : rotation symplectique

a.iii.1. Espace des phases et structures symplectiques

L'espace des phases d'un système à un degré de liberté est décrit par les coordonnées canoniques (x, p) de l'espace $\mathbb{R}^2$. Cet espace est naturellement muni d'une **structure symplectique** définie par la forme bilinéaire antisymétrique $\omega = dx \wedge dp$. Dans ce formalisme, les transformations canoniques sont les difféomorphismes qui préservent cette forme ω, préservant ainsi le volume dans l'espace des phases et les relations de commutation fondamentales $[\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{p}}] = i\hbar$.

Dans ce contexte, la **Transformée de Fourier** $\mathcal{F}$ n'est pas seulement un outil analytique, mais s'interprète géométriquement comme une **rotation d'angle** $\pi/2$ dans cet espace des phases. En effet, l'action de $\mathcal{F}$ réalise la permutation des variables conjuguées :

$$x \xrightarrow{\mathcal{F}} p \quad \text{et} \quad p \xrightarrow{\mathcal{F}} -x \tag{A.48}$$

4. D'un point de vue purement mathématique, il serait possible — et parfois plus lisible — d'écrire les expressions sans indice «*», sans attacher d'importance particulière à l'échange des notations x et k. Ce choix ne sera toutefois pas retenu ici.

À partir de ce point, la transformée de Fourier s'écrit

$$\mathcal{F}[f](k) = \alpha \int_{\mathbb{R}} dx\, f(x)\, e^{\mp i x k}, \tag{A.44}$$

$$\mathcal{F}^{-1}[f](x) = \beta \int_{\mathbb{R}} dk\, f(k)\, e^{\pm i x k}, \tag{A.45}$$

avec la condition de normalisation

$$2\pi\,\alpha\beta = 1, \tag{A.46}$$

où x et k sont désormais des variables sans dimension physique.

Cette rotation appartient au groupe métaplectique $Mp(2,\mathbb{R})$, qui est le revêtement à deux feuillets du groupe symplectique $Sp(2,\mathbb{R})$. L'opérateur de Fourier peut être vu comme l'opérateur d'évolution unitaire $U(t) = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{\boldsymbol{H}}}$ associé à l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique $\hat{\boldsymbol{H}} = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{x}}^2 + \hat{\boldsymbol{p}}^2)$ pour un temps de propagation $t = \pi/2$.

Cette vision géométrique unifie la transformation des opérateurs d'échelle $\hat{\boldsymbol{a}}$ et $\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger$ (qui subissent une rotation de phase complexe $e^{\mp i\pi/2}$) et la préservation de la structure des états de Hermite-Gauss, qui apparaissent comme les modes propres invariants par rotation de cet espace des phases.

a.iii.2. Transformée de Fourier comme rotation canonique

La transformée de Fourier permet l'échange

$$(\hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}}, \hat{\mathcal{D}}) \longmapsto (-\hat{\mathcal{D}}, \hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}}). \tag{A.49}$$

Ces relations s'écrivent sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}} \\ \hat{\mathcal{D}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\hat{\mathcal{D}} \\ \hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}} \end{pmatrix}. \tag{A.50}$$

Or on peut écrire

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = R(\pi/2), \tag{A.51}$$

où $R(\theta)$ désigne une matrice de rotation 2×2, d'angle θ définie par

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}. \tag{A.52}$$

Ainsi, la transformée de Fourier réalise une rotation d'angle $\theta \equiv \frac{\pi}{2}$ dans l'espace des représentations.

a.iii.3. Valeurs et vecteur propre de la transformée de Fourier

a.iii.3.-i Rotation. Plus généralement, les rotations s'écrivent sous la forme

$$R(\theta) = \exp(\theta J), \qquad \theta \in \mathbb{R}, \tag{A.53}$$

où $J = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, car J est une matrice antisymétrique génératrice des rotations planes[5] :

$$R(\theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\theta^n}{n!} J^n = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n\theta^{2n}}{(2n)!} I_2 + \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n\theta^{2n+1}}{(2n+1)!} J = \cos(\theta) I_2 + \sin(\theta) J \tag{A.54}$$

[6] car en effet $J^{2n} = (-1)^n I_2$ et $J^{2n+1} = (-1)^n J$.

a.iii.3.-ii Les matrices de Pauli et l'espace des matrices hermitiennes. L'ensemble des matrices de Pauli, que l'on notera $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, avec $\sigma_0 = I_2$ et $\sigma_1 = \sigma_x, \sigma_2 = \sigma_y, \sigma_3 = \sigma_z$, forme une base de l'espace vectoriel des matrices hermitiennes 2×2. Ainsi, toute matrice hermitienne H peut s'écrire comme une combinaison linéaire réelle :

$$H = n_0\sigma_0 + n_1\sigma_1 + n_2\sigma_2 + n_3\sigma_3, \quad (n_0, n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{R}^4. \tag{A.55}$$

Les matrices σ_μ sont données explicitement par :

$$\sigma_0 = I_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{A.56}$$

Cette représentation est particulièrement utile car elle relie les propriétés algébriques des matrices hermitiennes aux structures géométriques de $\mathbb{R}^3$ via les matrices de Pauli $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$.

5. Souvenir de classes préparatoires : voir par exemple l'exercice 5 (« Exponentielle d'une matrice antisymétrique »), p. 266 de [Gou08a].

6. La décomposition exponentielle $R(\theta) = \exp(\theta J) = \cos(\theta)\, I_2 + \sin(\theta)\, J$ reflète un mécanisme général reliant rotations et générateurs infinitésimaux. En mécanique quantique, toute rotation d'angle θ autour d'un axe unitaire $\boldsymbol{n} \in \mathbb{R}^3$ est représentée dans l'espace des spineurs par l'opérateur unitaire $U(\boldsymbol{n}, \theta) = \exp\big(-\frac{i\theta}{2}\, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\big)$, où $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ désigne les matrices de Pauli. En utilisant l'identité $(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = I$, on obtient la forme fermée $U(\boldsymbol{n}, \theta) = \cos(\frac{\theta}{2})\, I - i\sin(\frac{\theta}{2})\, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$. Cette représentation réalise le morphisme doublement couvrant $\mathrm{SU}(2) \to \mathrm{SO}(3)$, caractérisé notamment par $U(\boldsymbol{n}, 2\pi) = -I$.

a.iii.3.-iii Matrices unitaires et rotations $SU(2)$. Toute matrice unitaire U peut s'écrire sous la forme

$$U = e^{iH}, \tag{A.57}$$

où H est hermitienne. Plus généralement, on peut écrire

$$H = n_0\,\sigma_0 + \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \tag{A.58}$$

avec $n_0 \in \mathbb{R}$ et $\boldsymbol{n} \in \mathbb{R}^3$ et $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$.

Dans ce cas, on obtient :

$$U \;=\; e^{in_0\sigma_0}\, e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \;= e^{in_0}\, e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}, \tag{A.59}$$

puisque σ_0 commute avec toutes les matrices.

Pour un $\boldsymbol{n}$ quelconque, l'identité

$$(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = I, \quad \hat{\boldsymbol{n}} = \frac{\boldsymbol{n}}{|\boldsymbol{n}|} \tag{A.60}$$

permet de calculer la forme fermée :

$$e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \;=\; \cos(|\boldsymbol{n}|)\, I + i\sin(|\boldsymbol{n}|)\,\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}. \tag{A.61}$$

Ainsi, pour un H quelconque :

$$U \;=\; e^{in_0}\Big[\cos(|\boldsymbol{n}|)\, I + i\sin(|\boldsymbol{n}|)\,\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\Big]. \tag{A.62}$$

Cette expression généralise la rotation SU(2) classique $U(\boldsymbol{n}, \theta)$ à un vecteur $\boldsymbol{n}$ quelconque et inclut un facteur global de phase e^{in_0} provenant de la composante proportionnelle à σ_0.[7][8][9]

a.iii.3.-iv Diagonalisation de transformations de Fourier. Considérons la forme matricielle de la transformation de Fourier. Dans l'estpace des phases engendrées par $(\hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}}, \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}})$ on peut l'écrire sous la forme exponentielle :

$$F = e^{\theta J}, \quad J = -i\sigma_2, \tag{A.69}$$

avec $\theta \in \mathbb{R}$. Cette forme est utile pour exploiter la structure SU(2) et les rotations générées par les matrices de Pauli.

7.

Matrices unitaires et rotations SU(2) Toute matrice unitaire U peut s'écrire sous la forme

$$U = e^{iH}, \tag{A.63}$$

où H est hermitienne. En particulier, pour H traceless, on obtient une rotation élémentaire dans SU(2) :

$$U(\boldsymbol{n}, \theta) = \exp\Big(-\frac{i\theta}{2}\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\Big), \tag{A.64}$$

où $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ désigne les matrices de Pauli et $\boldsymbol{n}$ est un vecteur unitaire définissant l'axe de rotation.

En utilisant l'identité

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = I, \tag{A.65}$$

on obtient la forme fermée :

$$U(\boldsymbol{n}, \theta) = \cos\Big(\frac{\theta}{2}\Big)I - i\sin\Big(\frac{\theta}{2}\Big)\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}. \tag{A.66}$$

Pour être précis, si l'on écrit $\boldsymbol{n} = \eta\,\boldsymbol{n}_*$ avec $\boldsymbol{n}_*$ unitaire, cette formule reste valide et η se retrouve dans l'angle effectif de rotation.

8. La matrice $(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$, avec $\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z)$ unitaire et $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, s'écrit explicitement sous forme 2×2 :

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} = n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z = \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix}. \tag{A.67}$$

Cette forme permet de visualiser facilement les composantes de $\boldsymbol{n}$ dans la matrice de Pauli et sert de base pour l'exponentielle $U = e^{i\theta(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})}$.

9. La forme matricielle explicite de l'exponentielle $U = e^{i\theta(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})}$, avec $\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z)$ unitaire et $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, s'écrit :

$$U = \cos\theta\, I + i\sin\theta\,(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = \begin{pmatrix} \cos\theta + i\sin\theta\, n_z & i\sin\theta(n_x - in_y) \\ i\sin\theta(n_x + in_y) & \cos\theta - i\sin\theta\, n_z \end{pmatrix}. \tag{A.68}$$

Cette représentation permet de visualiser directement l'exponentielle comme une rotation dans l'espace SU(2).

Objectif. Nous souhaitons diagonaliser F via une transformation unitaire U :

$$UFU^\dagger \text{ (diagonale)}. \tag{A.70}$$

Réécriture générale de F. On peut écrire :

$$F = e^{\theta J} = e^{\theta(-i\sigma_2)} = e^{-i\theta\sigma_2} = \cos\theta\, I - i\sin\theta\,\sigma_2. \tag{A.71}$$

Conjugaison par U. Pour un vecteur $\boldsymbol{n} = |\boldsymbol{n}|\hat{\boldsymbol{n}}$ (avec $\hat{\boldsymbol{n}}$ unitaire) et $U = e^{in_0}e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}$, on a :

$$\begin{aligned} UFU^\dagger &= e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}(\cos\theta I - i\sin\theta\,\sigma_2)e^{-i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} && \text{(A.72)}\\ &= \cos\theta I - i\sin\theta\,(U\sigma_2U^\dagger). && \text{(A.73)}\end{aligned}$$

Ainsi, $UFU^\dagger$ est diagonale si et seulement si $U\sigma_2U^\dagger$ est diagonale.

Conjugaison des matrices de Pauli. On sait que pour un vecteur unitaire $\boldsymbol{n}$ et un vecteur $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^3$:

$$U(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})U^\dagger = (R_{\hat{\boldsymbol{n}}}(2|\boldsymbol{n}|)\,\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{\sigma}, \tag{A.74}$$

où $U = ein_0e^{i|\boldsymbol{n}|\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}}$ et $R_{\boldsymbol{n}}(2|\boldsymbol{n}|)$ est la rotation 3D autour de l'axe $\boldsymbol{n}$ d'angle 2ϕ [10].

Dans notre cas :

$$U\sigma_2U^\dagger = (R_{\hat{\boldsymbol{n}}}(2|n|)\,\hat{e}_y)\cdot\boldsymbol{\sigma}. \tag{A.79}$$

Condition pour être diagonale. Une matrice $x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z$ est diagonale si et seulement si $x = y = 0$. Il faut donc que :

$$R_{\hat{\boldsymbol{n}}}(2|n|)\,\hat{e}_y \propto \hat{e}_z. \tag{A.80}$$

Donc il faut que

$$U\sigma_2U^\dagger \propto \sigma_3. \tag{A.81}$$

pour que $UFU^\dagger$ soit diagonale.

Solution connue. Une solution connue est :

$$\begin{aligned} n_0 &= \mp\frac{\pi}{4}, && \text{(A.82)}\\ \boldsymbol{n} &= \pm\frac{1}{\sqrt{3}}(\pm1, \mp1, \pm1), && \text{(A.83)}\\ |\boldsymbol{n}| &= \frac{\pi}{3}. && \text{(A.84)}\end{aligned}$$

Alors la matrice de passage correspondent est :

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & i\\ 1 & -i\end{pmatrix} \tag{A.85}$$

[11] et en effet $U\sigma_zU^\dagger = -\sigma_z$ ainsi :

$$UFU^\dagger = i\sigma. \tag{A.91}$$

10. La démonstration de la conjugaison des matrices de Pauli repose sur l'identité $(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = I$ et la formule trigonométrique de l'exponentielle : $U = e^{i\phi\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \cos\phi\, I + i\sin\phi\,(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$. En développant

$$U(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})U^\dagger = (\cos\phi I + i\sin\phi\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\cos\phi I - i\sin\phi\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}), \tag{A.75}$$

et en utilisant les identités des matrices de Pauli

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{a})I + i(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{\sigma}, \quad [\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}] = 2i(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{\sigma}, \tag{A.76}$$

on obtient

$$U(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})U^\dagger = \cos(2\phi)\,(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}) + \sin(2\phi)\,(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{\sigma} + 2\sin^2\phi\,(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}), \tag{A.77}$$

ce qui correspond exactement à la rotation de Rodrigues pour le vecteur $\boldsymbol{a}$ autour de $\boldsymbol{n}$:

$$R_{\boldsymbol{n}}(2\phi)\,\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}\cos(2\phi) + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{a})\sin(2\phi) + \boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{a})(1-\cos(2\phi)). \tag{A.78}$$

Ainsi, la conjugaison par U dans SU(2) se traduit par une rotation classique 3D du vecteur $\boldsymbol{a}$.

11.

a.iii.3.-v Valeurs et fonctions propres.

Passage aux opérateurs création et annihilation Puisque U est sans dimension, on prend des variables conjuguées adimentionnés :

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}} = \frac{1}{\eta}\hat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{\mathrm{id}_{\mathbb{R}}}, \quad \hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}} = \eta\gamma\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}, \tag{A.92}$$

avec η un paramètre d'échelle, ainsi

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & i\\ 1 & -i\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{\mathcal{X}}}\\ \hat{\boldsymbol{\mathcal{K}}}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{a}}\\ \hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\end{pmatrix} \tag{A.93}$$

avec $\hat{\boldsymbol{a}}$ l'opérateur «annihilation» et $\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger$ l'opérateur «création».

Et on a

$$\begin{array}{rclcrcl}\hat{\mathcal{F}}\,\hat{\boldsymbol{a}}\,\hat{\mathcal{F}}^{-1} &=& -i\hat{\boldsymbol{a}}, & & \hat{\mathcal{F}}\,\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\,\hat{\mathcal{F}}^{-1} &=& i\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger,\\ \hat{\mathcal{F}}^{-1}\,\hat{\boldsymbol{a}}\,\hat{\mathcal{F}} &=& i\hat{\boldsymbol{a}} & \text{et} & \hat{\mathcal{F}}^{-1}\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\,\hat{\mathcal{F}} &=& -i\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\end{array}. \tag{A.94}$$

Opérateur nombre. On introduit l'opérateur

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{N}}} = \hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\hat{\boldsymbol{a}}. \tag{A.95}$$

qui est hermitien et vérifie

$$\hat{\mathcal{F}}\,\hat{\boldsymbol{\mathcal{N}}}\,\hat{\mathcal{F}}^{-1} = \hat{\mathcal{F}}\,\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\,\hat{\mathcal{F}}^{-1}\hat{\mathcal{F}}\,\hat{\boldsymbol{a}}\,\hat{\mathcal{F}}^{-1} = i\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger(-i\hat{\boldsymbol{a}}) = \hat{\boldsymbol{\mathcal{N}}}. \tag{A.96}$$

Donc

On se place ici à l'espace $\mathcal{L}^2$ définie plus bas [12].

Valeurs propres de U Contrairement à une rotation pure, les valeurs propres de cette matrice spécifique U se calculent via le polynôme caractéristique $\det(U-\lambda I)=0$. Les valeurs propres sont :

$$\lambda_\pm = \frac{(1-i)\pm\sqrt{(1-i)^2-4(-i)}}{2} = \frac{(1-i)\pm\sqrt{2i}}{2} \tag{A.86}$$

Elles sont de la forme $e^{i\phi}$, car U est unitaire.

Lien avec la matrice qui diagonalise σ_y Les vecteurs propres de la matrice de Pauli $\sigma_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$ sont :

$$v_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}, \quad v_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix} \tag{A.87}$$

La matrice de passage P qui diagonalise σ_y (telle que $P^\dagger\sigma_y P = \sigma_z$) est construite en plaçant ces vecteurs en colonnes :

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ i & -i\end{pmatrix} \tag{A.88}$$

Comparaison avec U On remarque que notre matrice U est la *transposée* de la matrice de passage P (ou sa version conjuguée par rapport à certains éléments) :

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & i\\ 1 & -i\end{pmatrix} \quad \text{alors que} \quad P = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ i & -i\end{pmatrix} \tag{A.89}$$

En physique quantique, cette matrice U permet de passer de la base des états liés à l'impulsion et la position aux opérateurs d'échelle (création/annihilation). Elle réalise la transformation :

$$U^\dagger\sigma_y U = \sigma_x \tag{A.90}$$

C'est une rotation de $\pi/2$ autour d'un axe spécifique dans l'espace de Bloch.

12. Sur un espace de mesure finie (ex : un intervalle $[a,b]$)Si $\mu(X)<\infty$, alors les fonctions de carré sommable sont aussi sommables.Relation : $\mathcal{L}^2(X)\subset\mathcal{L}^1(X)$Démonstration rapide :D'après l'inégalité de Cauchy-Schwarz appliquée à $|f|\cdot 1$:

$$\int_X |f|\,d\mu \le \sqrt{\int_X |f|^2\,d\mu}\cdot\sqrt{\int_X 1^2\,d\mu}$$

Lemme a..7 (Les valeur propre de $\hat{\boldsymbol{N}}$ sont dans $\mathbb{R}_+$). *Supposons que λ est une valeur propre de $\hat{\boldsymbol{N}}$ associé à la fonction propre ψ,*

$$\hat{\boldsymbol{N}}\psi = \lambda\psi, \quad \lambda \geq 0, \tag{A.97}$$

Démonstration. $\hat{\boldsymbol{N}}$ est hermitien et [CDL73a], et $\|\hat{\boldsymbol{a}}\psi\|_2^2 = \int \overline{\psi}\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\hat{\boldsymbol{a}}\psi = \int \overline{\psi}\hat{\boldsymbol{N}}\psi = \lambda\|\psi\|_2^2$. □

Pour ne pas fais pleine d'intégrale dans les démonstrations, je note les fonctions ψ avec le «ket», $|\psi\rangle$ et donc se restreint à l'espace $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ définie plus bas.

Lemme a..8 (Propriétés de $\hat{\boldsymbol{a}}\,|\varphi_\lambda\rangle$). *Soit $|\varphi_\lambda\rangle$ un vecteur propre (non nul) de $\hat{\boldsymbol{N}}$, de valeur propre λ.*

i) Si $\lambda = 0$, alors $\hat{\boldsymbol{a}}\,|\varphi_{\lambda=0}\rangle$ est nulle.

ii) Si $\lambda > 0$, le ket $\hat{\boldsymbol{a}}\,|\varphi_\lambda\rangle$ est un vecteur propre non nul de $\hat{\boldsymbol{N}}$, de valeur propre $\lambda - 1$.

Démonstration. i) $\|\hat{\boldsymbol{a}}\varphi_n\|_2^2 = \langle\varphi_n|\,\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\hat{\boldsymbol{a}}\,|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|\,\hat{\boldsymbol{N}}\,|\varphi_n\rangle = \lambda\,\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = \lambda\|\varphi_n\|_2^2 = 0$.

ii) $\|\hat{\boldsymbol{a}}\varphi_n\|_2^2 = \lambda\|\varphi_n\|_2^2 > 0$ et $\hat{\boldsymbol{N}}\hat{\boldsymbol{a}}\,|\varphi_\lambda\rangle = \hat{\boldsymbol{a}}(\hat{\boldsymbol{N}} - \hat{\mathbf{1}})\,|\varphi_\lambda\rangle = (\lambda - 1)\hat{\boldsymbol{a}}\,|\varphi_\lambda\rangle$ car $[\hat{\boldsymbol{N}}, \hat{\boldsymbol{a}}] = -\hat{\boldsymbol{a}}$.

□

Lemme a..9 (Propriétés de $\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\,|\varphi_\lambda\rangle$). *Soit $|\varphi_\lambda\rangle$ un vecteur propre (non nul) de $\hat{\boldsymbol{N}}$, de valeur propre λ.*

i) $\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\,|\varphi_{\lambda=0}\rangle$ est toujours non nul.

ii) $\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\,|\varphi_\lambda\rangle$ est un vecteur propre de $\hat{\boldsymbol{N}}$, de valeur propre $\lambda + 1$.

Démonstration.

i) On sait que $\lambda \geq 0$ et $[\hat{\boldsymbol{a}}, \hat{\boldsymbol{a}}^\dagger] = \hat{\mathbf{1}}$ donc $\|\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\varphi_n\|_2^2 = \langle\varphi_n|\,\hat{\boldsymbol{a}}\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\,|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|\,(\hat{\boldsymbol{N}}+\hat{\mathbf{1}})\,|\varphi_n\rangle = (\lambda+1)\|\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\varphi_n\|_2^2$

ii) $\hat{\boldsymbol{N}}\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\,|\varphi_\lambda\rangle = \hat{\boldsymbol{a}}^\dagger(\hat{\boldsymbol{N}} + \hat{\mathbf{1}})\,|\varphi_\lambda\rangle = (\lambda + 1)\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\,|\varphi_\lambda\rangle$ car $[\hat{\boldsymbol{N}}, \hat{\boldsymbol{a}}^\dagger] = \hat{\boldsymbol{a}^\dagger}$.

□

Lemme a..10 (Les valeurs propres n de $\hat{\boldsymbol{N}}$ sont entiers).

Démonstration. Soit λ non entier tel que $n < \lambda < n + 1$ avec $n \in \mathbb{N}$

$$\hat{\boldsymbol{N}}\hat{\boldsymbol{a}}^p\,|\varphi_\lambda\rangle = \hat{\boldsymbol{a}}^p(\hat{\boldsymbol{N}} - p\hat{\mathbf{1}})\,|\varphi_\lambda\rangle = (\lambda - p)\hat{\boldsymbol{a}}^p\,|\varphi_\lambda\rangle\,, \tag{A.98}$$

avec p un entier. Si $p = n$ alors $(\lambda - n) > 0$ et par récurrence sur n on montre que $\hat{\boldsymbol{a}}^n\,|\varphi_\lambda\rangle$ est non nul. De plus en appliquant $\hat{\boldsymbol{a}}$ sur $\hat{\boldsymbol{a}}^n\,|\varphi_\lambda\rangle$ on montre que $\hat{\boldsymbol{a}}^{n+1}\,|\varphi_\lambda\rangle$ et non nul. Or $\hat{\boldsymbol{a}}^{n+1}\,|\varphi_\lambda\rangle$ est vecteur propre de $\hat{\boldsymbol{N}}$ de valeur propre $(\lambda - n - 1) < 0$, absurde ! □

Lien entre l'opérateur nombre et la Transformée de Fourier En mécanique quantique, les fonctions propres de l'oscillateur harmonique unidimensionnel sont données en fonction :

$$\xi^{-1/2}\varphi_n(y/\xi), \tag{A.99}$$

avec

$$y \mapsto \varphi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} H_n\,(y)\,e^{-\frac{1}{2}y^2} \tag{A.100}$$

Si $\int |f|^2 < \infty$ et $\mu(X) < \infty$, alors $\int |f| < \infty$.2. Sur un espace de mesure infinie (ex : $\mathbb{R}$)Sur $\mathbb{R}$, il n'y a aucune inclusion entre les deux espaces.$f \in \mathcal{L}^2$ mais $f \notin \mathcal{L}^1$:La fonction $f(x) = \frac{1}{\sqrt{x^2+1}}$ n'est pas intégrable sur $\mathbb{R}$ (décroissance trop lente), mais son carré l'est.$f \in \mathcal{L}^1$ mais $f \notin \mathcal{L}^2$:La fonction $f(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$ sur $]0, 1]$ (et 0 ailleurs) est intégrable, mais son carré $1/x$ diverge en zéro.3. Cas des suites (ℓ^p)Pour les suites, la logique est inversée car la mesure de comptage sur un point est $1 \geq 1$.Relation : $\ell^1 \subset \ell^2$Si une série $\sum |x_n|$ converge, alors ses termes tendent vers 0. À partir d'un certain rang, $|x_n| < 1$, donc $|x_n|^2 < |x_n|$. La convergence de la série des carrés est alors garantie.

Espace	Inclusion	Condition / Commentaire
Mesure finie	$\mathcal{L}^2 \subset \mathcal{L}^1$	Toujours vrai (ex : intervalle $[a, b]$). Découle de l'inégalité de Cauchy-Schwarz.
Mesure infinie	$\mathcal{L}^1 \cap \mathcal{L}^2$	Intersection non vide, mais aucune inclusion mutuelle (ex : sur $\mathbb{R}$).
Suites	$\ell^1 \subset \ell^2$	Toujours vrai. Si $\sum \lvert x_n\rvert$ converge, alors $\sum \lvert x_n\rvert^2$ converge aussi.

où pour l'oscillateur harmonique pour la représentation position $\xi = \eta = \sqrt{1/(m\omega\gamma)} \underset{\gamma=\hbar^{-1}}{=} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ et pour la présentation impulsion $\xi = 1/(\gamma\eta) = \sqrt{(m\omega/\gamma} \underset{\gamma=\hbar^{-1}}{=} \sqrt{\hbar m\omega}$ et $H_n(y)$ sont les **polynômes d'Hermite**, définis par la formule de Rodrigues :

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \tag{A.101}$$

Ces fonctions $|\varphi_n\rangle$ sont les états propres de l'opérateur nombre $\hat{\boldsymbol{N}} = \hat{\boldsymbol{a}}^\dagger \hat{\boldsymbol{a}}$ associés aux valeurs propres n. La relation de commutation entre la transformée de Fourier et $\hat{\boldsymbol{N}}$ se déduit des transformations des opérateurs d'échelle :

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\hat{\boldsymbol{N}}\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1} = (\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1})(\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\hat{\boldsymbol{a}}\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1}) = (i\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger)(-i\hat{\boldsymbol{a}}) = \hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\hat{\boldsymbol{a}} = \hat{\boldsymbol{N}} \tag{A.102}$$

Ainsi, $[\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}, \hat{\boldsymbol{N}}] = 0$. En mécanique quantique, deux opérateurs qui commutent partagent une base commune de vecteurs propres. Par conséquent, tout état propre $|\varphi_n\rangle$ de $\hat{\boldsymbol{N}}$ est nécessairement un état propre de $\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}$.

Soit $|\varphi_n\rangle$ tel que $\hat{\boldsymbol{N}}|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$. L'état fondamental $|\varphi_0\rangle$ est défini par $\hat{\boldsymbol{a}}|\varphi_0\rangle = 0$. En appliquant la transformée de Fourier :

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\hat{\boldsymbol{a}}\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}|\varphi_0\rangle) = 0 \implies (-i\hat{\boldsymbol{a}})(\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}|\varphi_0\rangle) = 0 \tag{A.103}$$

Ceci implique que $\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}|\varphi_0\rangle$ est proportionnel à l'unique état annulé par $\hat{\boldsymbol{a}}$, donc $\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}|\varphi_0\rangle = \lambda_0|\varphi_0\rangle$. Pour la normalisation standard de la transformée de Fourier physique, $\lambda_0 = \alpha\sqrt{2\pi}$. Pour un état excité quelconque, on utilise l'opérateur de création :

$$|\varphi_n\rangle = \frac{(\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|\varphi_0\rangle\,, \tag{A.104}$$

[13]

L'action de la transformée de Fourier donne alors :

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}|\varphi_n\rangle = \frac{(\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}^{-1})^n}{\sqrt{n!}}\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}|\varphi_0\rangle = \frac{(i\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\lambda_0|\varphi_0\rangle = i^n\lambda_0|\varphi_n\rangle \tag{A.105}$$

[14] **Résultat :** Les fonctions de Hermite-Gauss sont des points fixes de la Transformée de Fourier à un facteur de phase près : $\hat{\boldsymbol{\mathcal{F}}}|\varphi_n\rangle = \lambda_0 i^n|\varphi_n\rangle$.

Jusqu'ici, nous avons travaillé sur l'espace $\mathcal{L}^1$. Nous allons maintenant nous intéresser à l'espace des fonctions de carré intégrable, $\mathcal{L}^2$, afin d'introduire naturellement la structure hilbertienne.

a.iv. Passage à l'espace $\mathcal{L}^2$ et unitarité

a.iv.1. Espace de Schwartz $\mathcal{S}$ et stabilité

On commence par s'intéresser à l'ensemble des fonctions à **décroissance rapide**, que l'on note $\mathcal{S}$ [App19 ; Mou14].

Définition a..11 (Espace $\mathcal{S}$). On appelle **espace de Schwartz**, et l'on note $\mathcal{S}(\mathbb{R},\mathbb{K})$ ou $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ ou par abus $\mathcal{S}$, l'ensemble des fonctions de classe C^∞ qui sont à **décroissance rapide**, ainsi que toutes leurs dérivées. En particulier sur $\mathbb{R}$

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) \;\equiv\; \left\{ f \in C^\infty(\mathbb{R}) \;\middle|\; \forall (a,b) \in \mathbb{N}^2,\ \|x \mapsto x^a \partial_x^b f(x)\|_\infty < +\infty \right\}. \tag{A.106}$$

Un des grands intérêts de l'espace de Schwartz est qu'il est stable par transformation de Fourier. De plus, cette transformation y est continue :

13. Par récurrence, on montre que l'action répétée de l'opérateur de création $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(y - \frac{d}{dy})$ sur l'état fondamental permet d'exprimer les états excités via les polynômes d'Hermite : $|\varphi_n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|\varphi_0\rangle = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(y) e^{-y^2/2}$.

14. En utilisant l'intégrale gaussienne générale $\int_{\mathbb{R}} e^{-ax^2+bx}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}$ pour $\Re(a) > 0$, on vérifie aisément que pour $a = 1$ et $b = 0$, la norme $\|\varphi_0\|_2^2 = \pi^{-1/2}\int_{\mathbb{R}} e^{-x^2}dx = \pi^{-1/2}\sqrt{\pi} = 1$.

Théorème a..12 (Continuité de $\mathcal{F}$ sur $\mathcal{S}$). *La transformée de Fourier est un opérateur linéaire et continu de $\mathcal{S}$ dans $\mathcal{S}$.*

Terminons le tour des propriétés importantes de la transformée de Fourier sur l'espace $\mathcal{S}$ en regardant ce qu'il advient de la formule d'inversion. On sait que si $f \in \mathcal{S}$, alors elle admet une transformée de Fourier $\tilde{f} \in \mathcal{S}$ et, puisque $\tilde{f}$ est intégrable et continue, on aura bien la relation $\mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[f]] = f$. Ainsi, la transformée de Fourier inverse est bien définie. On a même un peu plus que cela :

Théorème a..13 (La transformation de Fourier inverse dans $\mathcal{S}$). *La transformation de Fourier est une application linéaire bijective et bi-continue, c'est-à-dire continue, ainsi que son inverse, de $\mathcal{S}$ sur $\mathcal{S}$. Son inverse est bien $\mathcal{F}^{-1}[\bullet]$.*

a.iv.2. Extension distributionnelle : distributions tempérées

On fait un petit rappel sur la théorie des distributions. On commence par définir les fonction-test.

Définition a..14 (Fonction-test). On appelle **espace-test**, que l'on note $\mathcal{T}(\mathbb{R}, \mathbb{K})$ ou $\mathcal{T}(\mathbb{R})$ ou $\mathcal{T}$. L'espace vectoriel des fonctions de $\mathbb{R}$ de classe C^∞, à support borné. On appelle **fonction-test** toute fonction $\varphi \in \mathcal{T}$.

On définit la distribution de la manière suivante

Définition a..15 (Distribution). On appelle **distribution** toute fonctionnelle linéaire et continue sur $\mathcal{T}$. L'espace vectoriel des distributions (qui est donc le **dual topologique de $\mathcal{T}$**) est appelé **espace des distributions** et noté $\mathcal{T}^*$.

Si $\phi \in \mathcal{T}^*$ est une distribution et si $\varphi \in \mathcal{T}$ est une fonction-test, la valeur de ϕ en φ est noté $\langle \phi, \varphi \rangle$.

Les distributions peuvent être vues comme une généralisation des fonctions au sens où, si f est une fonction, on peut définir une forme linéaire par

$$\varphi \longmapsto \int_{\mathbb{R}} \varphi f. \tag{A.107}$$

Plus précisément, les distributions généralisent les *fonctions localement sommables* pour lesquelles l'intégrale précédente est bien définie.

Toute fonction localement sommable définit alors une distribution grâce au théorème suivant :

Théorème a..16 (Distrubutions régulières). *À toute fonction. f localement sommable, on peut associer une distribution, également noté f, définie par :*

$$\langle f, \varphi \rangle \doteq \int_{\mathbb{R}} f(x)\, \varphi(x)\, dx \qquad \forall\, \varphi \in \mathcal{T}.$$

Une telle distribution est appelée **distribution régulière** *associée à la fonction localement sommable f.*

En utilisant la théorie de la distribution, on peut étendre la transformée de Fourier à l'espace des distributions tempérées $\mathcal{S}^*(\mathbb{R})$ qui est le dual de l'espace de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R})$. La transformée de Fourier est une application linéaire bijective de $\mathcal{S}^*(\mathbb{R})$ dans lui-même.

Définition a..17. La **transformée de Fourier d'une distribution $\boldsymbol{\phi}$** est définie par son action sur les fonctions φ à support borné et de calsse C^∞ :

$$\langle \mathcal{F}[\phi], \varphi \rangle \doteq \langle \phi, \mathcal{F}[\varphi] \rangle. \tag{A.108}$$

Par exemple on définit en particulier la distribution de Dirac $\delta \in \mathcal{S}^*(\mathbb{R})$ par :

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}), \quad \langle \delta, f \rangle = f(0). \tag{A.109}$$

Donc on a

$$\forall k \in \mathbb{R}: \quad \int \delta(x)\, e^{\mp i\gamma k x} dx = e^{\mp i\gamma 0 x}\,, \tag{A.110}$$

ainsi

$$\mathcal{F}^{-1}[\delta](x) = x \mapsto \beta, \tag{A.111}$$

ainsi

$$\mathcal{F}[x \mapsto \beta](k) = k \mapsto \delta(k), \tag{A.112}$$

soit

$$\alpha\beta \int e^{\mp i\gamma kx} dx = \delta(k), \tag{A.113}$$

en conséquence avec $\gamma = 2\pi\alpha\beta$ on a

$$\frac{\gamma}{2\pi} \int e^{\mp i\gamma kx} dx = \delta(k), \tag{A.114}$$

Ainsi avec un choix de convention, on retrouve la formule usuelle de la transformée de Fourier de la distribution de Dirac :

$$\int_{\mathbb{R}} e^{\mp iyx} dx = 2\pi\delta(y). \tag{A.115}$$

Théorème a..18 (Transformée de Fourier de δ).

$$\mathcal{F}[\delta] = x \mapsto \alpha, \qquad \delta = \mathcal{F}[x \mapsto \beta], \tag{A.116}$$
$$\mathcal{F}^{-1}[\delta] = x \mapsto \beta, \qquad \delta = \mathcal{F}^{-1}[x \mapsto \alpha]. \tag{A.117}$$

Démonstration.

$$\langle \tilde{1}, \varphi \rangle \doteq \langle 1, \tilde{\varphi} \rangle = \int_{\mathbb{R}} \tilde{\varphi}(x)\, dx = \beta^{-1}\varphi(0) = \beta^{-1}\langle \delta, \varphi \rangle, \tag{A.118}$$

$$\langle \tilde{\delta}, \varphi \rangle \doteq \langle \delta, \tilde{\varphi} \rangle = \tilde{\varphi}(0) = \alpha \int_{\mathbb{R}} \phi(x)\, dx = \alpha\langle 1, \varphi \rangle. \tag{A.119}$$

On a donc la première ligne du théorème. Comme $\delta \in \mathcal{S}$ alors la $\mathcal{F}^{-1}$ est définie et $f = \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[f]] = \mathcal{F}[\mathcal{F}^{-1}[f]]$. On peut ainsi conclure. □

a.iv.3. Produit scalaire, norme et unitarité sur $\mathcal{L}^2$

Avec ce que l'on a vu avec $\mathcal{L}^1$ et $\mathcal{L}^\infty$, il est naturel de définir $\mathcal{L}^2$ de la manière suivante :

Définition a..19 (Espace $\mathcal{L}^2$). On note $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathbb{K})$ ou $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ ou $\mathcal{L}^2$, l'espace vectoriel des fonctions à carré sommables, définies « à une égalité presque partout près », muni de la norme 2, $\| \bullet \|_2$:

$$\|f\|_2 \doteq \sqrt{\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2\, dx}. \tag{A.120}$$

On peut écrire cette norme 2 de la manière suivante :

$$\| \bullet \|_2 \colon \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \ni f \colon \|f\|_2 = \sqrt{\langle f, f \rangle_{\mathcal{L}^2}}\,, \tag{A.121}$$

où le produit scalaire, noté $\langle \bullet, \bullet \rangle_{\mathcal{L}^2}$ est tel que :

$$\langle \bullet, \bullet \rangle_{\mathcal{L}^2} \colon (L^2(\mathbb{R}))^2 \ni (f, g) \colon \mapsto \langle f, g \rangle_{\mathcal{L}^2} = \int_{\mathbb{R}} \overline{f}(x)\, g(x)\, dx\,, \tag{A.122}$$

ou $\overline{f}$ est le complexe conjugué de f.

a.iv.4. Dual de $\mathcal{L}^2$ et Théorème de Plancherel et Isométrie unitaire

a.iv.4.-i Dual hilbertien et dual topologique de $\mathcal{L}^2$. L'espace dual de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R},\mathbb{K})$ est l'ensemble des formes linéaires continues de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R},\mathbb{K})$ dans $\mathbb{K}$, noté $(\mathcal{L}^2(\mathbb{R},\mathbb{K}))^*$. Par le théorème de Riesz, on a l'isomorphisme suivant :

$$(\mathcal{L}^2(\mathbb{R}))^* \cong \mathcal{L}^2(\mathbb{R}). \tag{A.123}$$

avec l'application dans $(\mathcal{L}^2(\mathbb{R},\mathbb{K}))^*$:

$$\forall f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R},\mathbb{K}): \quad \mathcal{L}^2(\mathbb{R},\mathbb{K}) \ni g \overset{\phi_f}{\mapsto} \langle f,g\rangle_{\mathcal{L}^2}. \tag{A.124}$$

Proposition a..20. *Le dual de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, $\mathcal{L}^{2^*}(\mathbb{R})$ est isométriquement isomorphe à $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.* [15]

Pour définir la transformée de Fourier sur l'espace $\mathcal{L}^2$ des fonctions à carré sommable, on va utiliser les résultats précédents sur la transformée de Fourier dans $\mathcal{S}$, ainsi qu'un lemme de densité :

Lemme a..21 (Densité de $\mathcal{S}$ dans $\mathcal{L}^2$). *L'espace $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ est un sous-espace vectoriel dense de l'espace $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.*

On utilise ce lemme, ainsi que le fait que l'espace $\mathcal{L}^2$ est complet, pour montrer que la transformée de Fourier définie sur $\mathcal{S}$ se prolonge de manière unique en un opérateur linéaire continu sur $\mathcal{L}^2$ (La démonstration assez technique est dans [App19]). La structure hilbertienne apparaît alors naturellement.

a.iv.4.-ii Théorème de Plancherel et Transformée de Fourier comme isométrie unitaire. On se retrouve ainsi avec un opérateur « transformation e Fourier » défini pour toute fonction $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ et qui vérifie le théorème suivant :

Théorème de Plancherel.

Théorème a..22 (Parseval-Plancherel). *La transformation de Fourier $\mathcal{F}[\bullet]$ est une isométrie sur $\mathcal{L}^2$: si f et g sont deux fonctions de carré sommable, alors $\tilde{f}$ et $\tilde{g}$ le sont également, et on a*

$$|\alpha|\langle f,g\rangle_{\mathcal{L}^2} = \pm|\beta|\langle\tilde{f},\tilde{g}\rangle_{\mathcal{L}^2} \quad et \quad |\alpha|\|f\|_2^2 = \pm|\beta|\|\tilde{f}\|_2^2, \tag{A.125}$$

avec comme condition :

$$\arg(\alpha)+\arg(\beta) \in \pi\mathbb{Z}. \tag{A.126}$$

Démonstration. Soit le couple $(f,g) \in \mathcal{L}_2(\mathbb{R},\mathbb{K})^2$, le produit scalaire

$$\langle\mathcal{F}[f],\mathcal{F}[g]\rangle_{\mathcal{L}^2} = \int \overline{\mathcal{F}[f]}(k)\mathcal{F}[g](k)dk, \tag{A.127}$$

avec la définition de la transformer de Fourier, on a :

$$\langle\mathcal{F}[f],\mathcal{F}[g]\rangle_{\mathcal{L}^2} = \int dk\,\overline{\alpha}\int dx\,\overline{f}(x)e^{\pm i\gamma kx}\int dx'\,g(x)e^{\pm i\gamma kx'} = |\alpha|^2\int dx\,\overline{f}(x)\int dx' g(x')\underbrace{\int dk e^{\pm i\gamma(x-x')k}}_{\frac{2\pi}{\gamma}\delta(x-x')} \tag{A.128}$$

Donc, on a l'égalité

$$\langle\mathcal{F}[f],\mathcal{F}[g]\rangle_{\mathcal{L}^2} = \frac{\overline{\alpha}}{\beta}\langle f,g\rangle_{\mathcal{L}^2}. \tag{A.129}$$

On peut remarquer que si on part de $\langle f,g\rangle$ on arrive à l'égalité

$$\langle f,g\rangle_{\mathcal{L}^2} = \frac{\overline{\beta}}{\alpha}\langle\mathcal{F}[f],\mathcal{F}[g]\rangle_{\mathcal{L}^2}, \tag{A.130}$$

15. Le dual de $\mathcal{L}^p(\mathbb{R})$, est isométriquement isomorphe à $\mathcal{L}^q(\mathbb{R})$ avec $p^{-1}+q^{-1}$ (cf le théorème 5.2.3 du cours [Bab21])

soit

$$\langle f, g\rangle_{\mathcal{L}^2} = \frac{\overline{\beta}}{\alpha}\frac{\overline{\alpha}}{\beta}\langle f, g\rangle_{\mathcal{L}^2}. \tag{A.131}$$

Ainsi pour que cette dernière formule reste cohérente, il faut et il suffit que

$$\arg(\alpha) + \arg(\beta) \in \pi\mathbb{Z}. \tag{A.132}$$

CQFD □

Transformée de Fourier comme isométrie unitaire.

Théorème a..23 (Inversion dans $\mathcal{L}^2$). *Pour tout $f \in \mathcal{L}^2$, on a*

$$\mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[f]] \;=\; \mathcal{F}[\mathcal{F}^{-1}[f]] \;=\; f \quad \textit{presque partout} \tag{A.133}$$

La transformée de Fourier inverse sur $\mathcal{L}^2$ est donc bien $\mathcal{F}^{-1}[\bullet]$.

Proposition a..24. *Si $(\alpha, \beta) \in \mathbb{C}^*$ et $\beta = \overline{\alpha}$ (*i.e. $|\alpha| = |\beta|$ *et* $\arg(\alpha) + \arg(\beta) \in 2\pi\mathbb{Z}$*) alors l'opération transformée de Fourier est unitaire. Soit*

$$\overline{\mathcal{F}} \;=\; \mathcal{F}^{-1} \quad \textit{et} \quad \overline{\mathcal{F}}[\mathcal{F}[\bullet]] = \mathcal{F}[\overline{\mathcal{F}}[\bullet]] = \mathrm{id}_{\mathcal{L}^2}. \tag{A.134}$$

À normalisation près, la transformée de Fourier est l'unique opérateur unitaire sur $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ qui échange (à un facteur près) la dérivation et la multiplication par la variable. Cela justifie a posteriori pourquoi elle est incontournable en mécanique quantique.

a.v. Espace de Hilbert $\mathscr{H}$ séparable et exemples canoniques

On commence par quelque définitions d'espaces utiles :

a.v.1. Exemples fondamentaux ℓ^2, $\mathcal{L}^2([0, a])$ et $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ isomorphes

Définition a..25 (Espace de Hilbert $\mathscr{H}$). Un **espace de Hilbert** est une est un préhilbertien $\mathscr{H}$ qui est mini de sa norme hermitienne est complet.

Définition a..26 (Système total, base hilbertienne). Soit $(e_n)_{n\in \mathrm{I}}$ une famille de vecteurs d'un espace de Hilbert $\mathscr{H}$ indexée par in ensemble I, dénombrable ou non. La famille $(e_i)_{i\in \mathrm{I}}$ est appelée **système total** si l'espace qu'elle engendre est dense dans $\mathscr{H}$, c'est-à-dire

$$\overline{\mathrm{Vect}\{e_n; n \in \mathrm{I}\}} \;=\; \mathscr{H}, \tag{A.135}$$

où ici pour un espace A, $\overline{A}$ est son adhérant. ◊ On dit que la famille $(e_i)_{i\in \mathrm{I}}$ est une **base hilbertienne** si c'est une famille orthonormée dans $\mathscr{H}$. ◊ Un espace de Hilbert $\mathscr{H}$ possédant une base hilbertienne dénombrable est dit **séparable**. C'est le cas de la plupart des espaces de Hilbert qui intéressent le physicien.

Voici quelque exemples espace de Hilbert :

Définition a..27 (Espace ℓ^2). On appelle **espace** $\ell^2(\mathbb{N})$ noté ℓ^2, l'ensemble des suites $(a_n)_{n\in\mathbb{N}}$ à valeur dans $\mathbb{C}$, telles que la suite $\sum |a_n|^2$ converge.

Théorème a..28. *L'espace ℓ^2 est un espace de Hilbert lorsqu'il est muni du produit hermitien*

$$\langle a, b\rangle_{\ell^2} \quad \doteq \quad \sum_{n\in\mathbb{N}} \overline{a_n}\, b_n. \tag{A.136}$$

Remarque a..29. Puisque $\mathbb{N}$ est $\mathbb{Z}$ sont équipotents, ℓ^2 est également l'espace des familles $(a_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ de carré sommable.

Définition a..30 (Espace $\mathcal{L}^2([0,a])$)**.** Soit $a \in \mathbb{R}_+^*$. On appelle espace $\mathcal{L}^2([0,a])$ l'espace des fonctions de $[0,a]$ dans $\mathbb{C}$ de carré sommable (définie à une égalité presque partout près), muni du produit scalaire hermitien et de la norme

$$\langle f,g\rangle_{\mathcal{L}^2([0,a])} \doteq \int_0^a \overline{f(x)}g(x)\,dx, \quad \text{et} \quad \|f\|_2 \doteq \left(\int_0^a |f(x)|^2\,dx\right)^{1/2}. \tag{A.137}$$

Définition a..31 (**Espace $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$**)**.** On appelle **espace** $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ l'espace des fonctions de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{C}$ de carré sommable (définies à une égalité presque près), munie de la norme

$$\|f\|_2 \doteq \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2\,dx\right)^{1/2}. \tag{A.138}$$

Un théorème fondamental de Riesz-Fischer nous apprend que $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ est un espace de Hilbert séparable. Les espaces des Hilbert ℓ^2, $\mathcal{L}^2([0,a])$ et $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ sont isomorphes.

Remarque a..32 (**Formalisme en mécanique quantique**). Bien que les bases hilbertiennes possèdent de très nombreux avantages, il sera aussi intéressant de munir l'espace $\mathcal{L}^2$ d'une «base» non hilbertienne, formée de distributions, comme la famille (non dénombrable) $(\delta_x)_{x\in\mathbb{R}}$, que le physicien en quantiques notent $(|x\rangle)_{x\in\mathbb{R}}$, ou bien la famille $(x \mapsto e^{\mp 2i\pi px})_{p\in\mathbb{R}}$ notée $(|p\rangle)_{p\in\mathbb{R}}$ (bien remarquer que ni $|x\rangle$ ni $|p\rangle$ ne sont éléments de $\mathcal{L}^2$). Au lien de représenter une fonction $f \in \mathcal{L}^2$ par une somme discrète, elle est représentée par une somme «continue», c'est-à-dire une intégrale. Ce point de vue manque de rigueur tant qu'on ne définit pas proprement les bases «au sens des distributions ». En revanche, la représentation par la transformée de Fourier n'est rien d'autre (avec un language différent) que l'écriture d'une fonction «dans la base $(x \mapsto e^{\mp 2i\pi px})_{p\in\mathbb{R}}$ ».

Avant de définir la «Transformée de Fourier sur $\mathcal{L}^2([0,a])$», nous avons besoins des propriétés du peigne de Dirac.

a.v.2. Discrétisation, périodisation et peigne de Dirac

La distribution «peigne de Dirac»est

$$\mathrm{III}_T(x) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \delta(x-Tn). \tag{A.139}$$

On peut alors montrer — et c'est un résultat fondamental — que :

Théorème a..33. *Le peigne de Dirac est une distribution tempérée. Il admet donc une transformée de Fourier au sens des distributions ; sa transformation de Fourier est un peigne de Dirac :*

$$\mathrm{III}_1 \overset{\mathcal{F}}{\longmapsto} \mathrm{III}_1 \tag{A.140}$$

Si on utilise la définition de la transformer de Fourier de l'équation (A.1) *avec* $\alpha = \beta = 1$ *et* $\gamma = 2\pi$.

On peut écrire cette formule différemment. En effet, puisque III_1 *est la somme de distribution de Dirac, en utilisant le fait que pour la définiton detransformée de Fourier* (A.1)

$$\mathcal{F}[x \mapsto f(x+a)](x) = \left(x \mapsto e^{\pm i\gamma xa}\mathcal{F}[f](x)\right), \tag{A.141}$$

$$\tag{A.142}$$

on peut écrire que

$$\mathcal{F}[\mathrm{III}_1] = \mathcal{F}\left[\sum_{n\in\mathbb{Z}}\delta_n\right](x) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{2i\pi nx}. \tag{A.143}$$

On obtient donc l'identité de Poisson :

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{2i\pi nx} = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \delta(x-n). \tag{A.144}$$

Si on reste sur la définition (A.1) et en utilisant le fait que

Théorème a..34 (Changement de variable dans δ). *Soit f une fonction ne possédant que des zéros isolés ; notons $Z(f) = \{y \in \mathbb{R} | f(y) = 0\}$ l'ensemble de ces zéros. On suppose que la dérivée f' de f ne s'annule en aucun des point de $Z(f)$. Alors*

$$\delta(f(x)) = \sum_{y \in Z(f)} \frac{1}{|f'(y)|} \delta(x - y), \tag{A.145}$$

ainsi on peut réécrire la transformée de Fourier de III_T et l'identité de Poisson comme :

$$\widetilde{\mathrm{III}}_T(x) = \frac{2\pi\alpha}{\gamma T} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \delta\left(x - \frac{2\pi m}{\gamma T}\right) = \frac{1}{\beta T} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta\left(x - \frac{n}{\beta T}\right) = \frac{1}{\beta T} \mathrm{III}_{1/T}(x), \tag{A.146}$$

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\gamma x n T} = \frac{2\pi}{\gamma T} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \delta\left(k - \frac{2\pi m}{\gamma T}\right) \tag{A.147}$$

Et si on note $\star$ le produit de convolution et $\cdot$ la multiplication de fonction :

Théorème a..35 ($\mathcal{F}$: $(\mathcal{S}(\mathbb{R}), +, \cdot) \longrightarrow (\mathcal{S}(\mathbb{R}), +, \star)$). *L'apllication transformée de Fourier est linéaire et pour $(f, g) \in \mathcal{S}(\mathbb{R})^2$:*

$$\alpha\mathcal{F}[f * g] = \mathcal{F}[f] \cdot \mathcal{F}[g] \qquad \mathcal{F}[f \cdot g] = \beta\mathcal{F}[f] \star \mathcal{F}[g], \tag{A.148}$$

$$\beta\mathcal{F}^{-1}[f * g] = \mathcal{F}^{-1}[f] \cdot \mathcal{F}^{-1}[g] \qquad \mathcal{F}^{-1}[f \cdot g] = \alpha\mathcal{F}^{-1}[f] \star \mathcal{F}^{-1}[g]. \tag{A.149}$$

Donc $\mathcal{F}$ et $\mathcal{F}^{-1}$ sont des morphismes d'algèbre. Soit les diagrammes :

$$\begin{array}{ccc} (\mathcal{S}(\mathbb{R}), \star) & \xrightarrow{\mathcal{F}} & (\mathcal{S}(\mathbb{R}), \cdot) \\ {\scriptstyle \cdot g}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle \cdot \mathcal{F}(g)} \\ (\mathcal{S}(\mathbb{R}), \star) & \xrightarrow{\mathcal{F}} & (\mathcal{S}(\mathbb{R}), \cdot) \end{array} \qquad \begin{array}{ccc} (\mathcal{S}(\mathbb{R}), \cdot) & \xrightarrow{\mathcal{F}^{-1}} & (\mathcal{S}(\mathbb{R}), \star) \\ {\scriptstyle \star g}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle \star \mathcal{F}(g)} \\ (\mathcal{S}(\mathbb{R}), \cdot) & \xrightarrow{\mathcal{F}^{-1}} & (\mathcal{S}(\mathbb{R}), \star) \end{array} \tag{A.150}$$

Démonstration. □

Et plus généralement,

Théorème a..36 (Formule sommatoire de Poisson). *Soit f une fonction continue admettant une transformée de Fourier. Lorsque ces sommes ont un sens, on a*

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} f(x - nT) = \frac{1}{T} \sum_{n \in \mathbb{Z}} f\left(\frac{n}{T}\right) e^{i\gamma n x / T}. \tag{A.151}$$

Démonstration. On a

$$\langle \delta_a f, \varphi \rangle = \delta_a f(a) \varphi(a) = \langle \delta_a f(a), \varphi \rangle., \tag{A.152}$$

ainsi

$$\delta_a f = \delta_a f(a) \tag{A.153}$$

et

$$\mathcal{F}[x \mapsto f(x\,a)] = \left(x \mapsto \frac{1}{a}\mathcal{F}[f](x/a)\right). \tag{A.154}$$

On a

$$f \star \left(x \mapsto \frac{1}{T} \mathrm{III}_1(x/T)\right) = \left(x \mapsto \sum_{n \in \mathbb{Z}} f(x - nT)\right). \tag{A.155}$$

Et la transformée de Fourier de $f \star \left(x \mapsto \frac{1}{T}\,\mathrm{III}_1(x/T)\right)$ s'écrit :

$$\alpha\mathcal{F}\left[f \star \left(x \mapsto \frac{1}{T}\,\mathrm{III}_1(x/T)\right)\right] = \tilde{f} \cdot \left(x \mapsto \widetilde{\mathrm{III}}_1(Tx)\right) = \left(x \mapsto \frac{1}{\beta}\sum_{n\in\mathbb{Z}} f\left(\frac{n}{T}\right)\delta(Tx-n)\right) \tag{A.156}$$

et la transformée de Fourier inverse est

$$f \star \left(x \mapsto \frac{1}{T}\,\mathrm{III}_1(x/T)\right) = \left(x \mapsto \frac{1}{T}\sum_{n\in\mathbb{Z}} f\left(\frac{n}{T}\right) e^{i\gamma n x/T}\right), \tag{A.157}$$

et o peut conclure. □

a.v.3. Séries de Fourier comme transformée de Fourier discrète sur $\mathcal{L}^2([0,a])$

Soit $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ et $a \in \mathbb{R}_+^*$ pour définir la fonction f sur le tore $\mathbb{T}_a = \frac{\mathbb{R}}{a\mathbb{Z}}$ tel que :

$$f\colon \mathbb{T}_a = \frac{\mathbb{R}}{a\in\mathbb{Z}} \ni x \mapsto \sum_{n\in\mathbb{Z}} g(x+na). \tag{A.158}$$

Sa transformée de Fourier s'écrit :

$$\mathcal{F}[f](x) = \left(\sum_{a\in\mathbb{Z}} e^{i\gamma x n a}\right)\mathcal{F}[g](x) = \frac{2\pi}{\gamma a}\left(\sum_{a\in\mathbb{Z}}\delta\left(x-k_n\right)\right)\mathcal{F}[\,g](x) = \frac{2\pi}{\gamma a}\sum_{a\in\mathbb{Z}}\mathcal{F}[g](k_n)\delta\left(x-k_n\right) \tag{A.159}$$

avec $k_n = \frac{2\pi n}{\gamma a}$. Donc si on applique la transformée de Fourier inverse, il vient que (en échangent intégrale et somme) :

$$f(x) = \beta\int \mathcal{F}[f](k)e^{\pm i\gamma k x}dk = \frac{1}{\alpha}\sum_{a\in\mathbb{Z}}\mathcal{F}[g](k_n)e^{\pm i\gamma k_n x}, \tag{A.160}$$

or

$$\mathcal{F}[g](x) = \alpha\int_0^a f(x)e^{\mp i\gamma k x}dx. \tag{A.161}$$

Donc, on reconnait les séries de Fourier ;

$$f(x) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} c_n(f)e^{\pm 2i\pi n x/a}, \qquad c_n(f) = \frac{1}{a}\int_0^a f(x)e^{\mp i\gamma k_n x}\,dx. \tag{A.162}$$

Théorème a..37 (Théorème de Riesz-Fisher : de $\mathcal{L}^2$ à ℓ^2 et retour). *La représentation en série de Fourier permet d'exhiber un isomorphisme entre l'espace $\mathcal{L}^2([0,a])$ et l'espace ℓ^2 :*

- *À chaque fonction de carré sommable, on peut associer une suite $(c_n)_{n\in\mathbb{Z}} \in \ell^2$, la suite de ses coefficients de Fourier.*
- *Réciproquement, si l'on se donne une suite $(c_n)_{n\in\mathbb{Z}} \in \ell^2$, alors la série trigonométrique $\sum c_n e^{inx}$ converge (au sens de la moyenne quadratique) vers une fonction de carré intégrable dont $(c_n)_n$ sont les coefficients de Fourier.*

16

Les changements de représentation associés aux séries de Fourier, à la périodisation et à la transformée de Fourier s'interprètent comme des isomorphismes unitaires entre espaces de Hilbert.

Les isomorphismes unitaires reliant les espaces de Hilbert $\ell^2(\mathbb{N})$, $\mathcal{L}^2([0,a])$ et $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ peuvent être représentés de manière synthétique par le diagramme commutatif suivant :

16. Cet énoncé constitue le **théorème de Riesz-Fischer**, 1907 (qui stipule également que l'espace $\mathcal{L}^2$, et plus généralement les espaces $\mathcal{L}^p$, sont complets).
Frédéric (Frygies) Riesz (1889-1956) qualifiait la représentation en série de Fourier de « billet permanent aller-retour entre deux espaces à une infinité de dimension » [Kah01, p. 93].

$$\begin{array}{ccc} \ell^2(\mathbb{Z}) & \xrightarrow{\textbf{Séries de Fourier}} & L^2([0,a]) \\ \Big\downarrow \textbf{Peigne de Dirac} & & \Big\downarrow \textbf{Périodisation} \\ L^2(\mathbb{R}) & \xrightarrow{\textbf{Transformée de Fourier}} & L^2(\mathbb{R}) \end{array}$$

17

La transformée de Fourier ne change pas l'état quantique, mais uniquement sa représentation dans un espace de Hilbert isomorphe.

Lien explicite avec Stone–von Neumann : L'unicité (à équivalence unitaire près) des représentations irréductibles des relations de commutation canoniques éclaire le caractère universel de la transformée de Fourier

a.vi. Distributions, Bras et Kets

Dans cette sous-section, $\mathscr{H}$ est un espace de Hilbert séparable (c'est-à-dire admettant une base hilbertienne dénombrable).

a.vi.1. Kets $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$

Définition a..38 (Kets). Les vecteurs de l'espace $\mathscr{H}$ seront génériquement notés, en suivant Dirac, sous la forme $|\psi\rangle$. On les appellera **kets** de l'espace $\mathscr{H}$.

Une fonction à valeurs dans $\mathscr{H}$ sera notée $t \mapsto |\psi(t)\rangle$.

Un cas important d'espace de Hilbert est $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Une fonction $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ sera notée $|\psi\rangle$. Si, de plus, cette fonction dépend du temps, on notera $|\psi(t)\rangle$ la fonction $x \mapsto \psi(x,t)$.

Remarque a..39 (**Espaces utilisés en mécanique quantique**). Il est fréquent, dans le cadre de la mécanique quantique, de travailler avec *deux*, ou même *trois* espaces de Hilbert simultanément :

- un espace de Hilbert «abstrait» $\mathscr{H}$, dans lequel les vecteurs sont notés $|\psi\rangle$;
- l'espace $\mathcal{L}^2$, dans lequel les vecteurs sont notés ψ (c'est-à-dire la fonction $x \mapsto \psi(x)$) ; cet espace est noté pour plus de précision $\boldsymbol{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathrm{d}x)}$;
- l'espace $\mathcal{L}^2$, dans lequel les vecteurs seront notés $\Psi\colon p \mapsto \Psi(p)$; cet espace sera alors noté $\boldsymbol{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathrm{d}p)}$.

Les fonctions de carré sommable ψ correspondent au formalisme de la mécanique ondulatoire de Schrödinger, en **représentation position** pour l'espace $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}; \mathrm{d}x)$, et en **représentation impulsion** pour $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}; \mathrm{d}p)$. La fonction $p \mapsto \Psi(p)$ est la transformation de Fourier de la fonction $x \mapsto \psi(x)$. On sait que la transformation de Fourier établit une isométrie entre $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathrm{d}x)$ et $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mathrm{d}p)$, autrement dit un isomorphisme d'espace de Hilbert.

Lorsque l'on travaille à la fois avec l'espace abstrait $\mathscr{H}$ et l'espace $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, on peut expliciter cette différence, par exemple en notant «φ» la fonction de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ et $|\varphi\rangle$ le vecteur abstrait correspondant. Cependant, ici, nous ne marquerons pas la différence entre les deux. Dans le cas d'une particule confinée dans un intervalle $[0,a]$ (à cause d'un puits de potentiel infini, ou d'un espace a-périodique), l'espace utilisé est $\mathcal{L}^2([0,a])$ pour la représentation position, et ℓ^2 pour la représentation impulsion ; le passage de l'un a l'autre se fait alors au moyen des séries de Fourier.

Enfin, tout ce qui est traité ici dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ se généralise aisément à $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ ou $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$.

17.
$$\begin{array}{ccc} \ell^2(\mathbb{Z}) & \xrightarrow{\mathcal{F}_{\text{disc}}} & L^2([0,a]) \\ \Big\downarrow \mathcal{I}_{\text{disc}\to\text{cont}} & & \Big\downarrow \mathcal{P}_a \\ L^2(\mathbb{R}) & \xrightarrow{\mathcal{F}} & L^2(\mathbb{R}) \end{array}$$

On notera $\langle \bullet, \bullet \rangle_{\mathscr{H}}$ le produit scalaire de $\mathscr{H}$. Le carré de la norme d'un vecteur $|\psi\rangle$ est

$$\| |\psi\rangle \|^2_{\mathscr{H}} \doteq \langle |\psi\rangle , |\psi\rangle \rangle_{\mathscr{H}} . \tag{A.163}$$

a.vi.2. Bras $\langle\psi| \in \mathscr{H}^*$

Définition a..40 (Espace dual (topologique)). On note $\mathscr{H}^*$ et on appelle **dual topologique de** $\mathscr{H}^*$ l'espace des formes linéaires continues sur $\mathcal{H}$. On écrira souvent «dual» pour «dual topologique».

Définition a..41 (Bras). Les éléments de $\mathscr{H}^*$ sont appelés **bras** et notés généralement $\langle\varphi|$. Le résultat de l'application d'un bra $\langle\varphi|$ sur un ket $|\psi\rangle$ est noté $\langle\varphi|\psi\rangle$ qui est donc un **braket**[18].

D'une manière générale, si l'on choisit un ket $|\varphi\rangle \in \mathscr{H}$, on peut lui associer, *via* le produit scalaire, la forme linéaire

$$\omega_\varphi : \ |\psi\rangle \mapsto \langle |\varphi\rangle , |\psi\rangle \rangle_{\mathscr{H}} . \tag{A.164}$$

En utilisant le théorème suivant :

Théorème a..42. *Soient E et F deux espaces vectoriels normés. Soit $f \in \mathcal{L}(E,F)$. Alors f est continue si, et seulement si, il existe un réel $k > 0$ tel que $\|f(x)\|_F \leq \|x\|_E$ pour tous $x \in E$.*

Si $f \in \mathcal{L}(E,F)$ est continue, on pose

$$|||f||| = \sup_{\|x\|_E=1} \|f(x)\|_F = \sup_{x\in E\setminus\{0\}} \frac{\|f(x)\|_F}{\|x\|_E}, \tag{A.165}$$

que l'on appelle **norme linéaire de f**. *Ainsi, pour tous $x \in E$, on a :*

$$\|f(x)\|_F \leq |||f||| \cdot \|x\|_E. \tag{A.166}$$

L'application $f \mapsto |||f|||$ est une norme sur l'espace $\mathscr{L}_c(E,F)$ des applications linéaires continues, également appelée **norme subordonnée à $\| \bullet \|_E$ et $\| \bullet \|_F$**.

L'inégalité de Cauchy-Schwartz montre que la forme ω_φ est continue. Elle correspond donc à un bra, que l'on notera $\langle\varphi|$:

$$\langle\varphi|\psi\rangle \doteq \langle |\varphi\rangle , |\psi\rangle \rangle_{\mathscr{H}} . \tag{A.167}$$

En d'autres termes : **À tout ket $|\varphi\rangle \in \mathscr{H}$ on peut associer un bra $\langle\varphi| \in \mathscr{H}^*$.**

La réciproque est vraie, en vertu du théorème de Riesz :

Théorème a..43 (Représentation de Riez). *L'application $|\varphi\rangle \mapsto \langle\varphi|$ est un isomorphisme (semi-linéaire) de $\mathscr{H}$ sur $\mathscr{H}^*$. En particulier, pour toute forme linéaire continue $\langle\varphi|$, il existe un unique vecteur $|\varphi\rangle$ tel que*

$$\forall\, |\psi\rangle \in \mathscr{H} : \qquad \langle\varphi|\psi\rangle = \langle |\varphi\rangle , |\psi\rangle \rangle_{\mathscr{H}} . \tag{A.168}$$

On a donc une correspondance bijective entre bras et kets : **À tout bra $\langle\varphi| \in \mathscr{H}^*$ on peut associer un bra $|\varphi\rangle \in \mathscr{H}$.**

a.vi.3. États propres généralisés de la position : Bras $\langle x_0| \notin \mathscr{H}^*$.

On notera également sous la forme générique $\langle\psi|$ des **bras généralisés**, c'est-à-dire des formes linéaires qui ne sont pas forcément dans $\mathscr{H}^*$. Une telle forme peut par exemple n'être pas continue (c'est le cas de δ), ou bien encore n'être pas définie sur $\mathscr{H}$ tout entier (on demandera alors qu'elle soit tout de même définie sur un sous-espace *dense* de $\mathscr{H}$).

Un des exemples les plus importants est le suivant :

18. En anglais, *braket* désigne un crochet «crochet» $\langle\bullet\rangle$. Dirac ne s'est pas limité à un calembour en inventant les mots «bra» et «ket» : la notation est rapidement devenue indispensable à la quasi-totalité des physiciens. Dirac a également inventé les termes de *fermion* et *boson*, celui de c-nombre, «fonction » δ, et la notation pratique $\hbar \equiv h/2\pi$.

Définition a..44 (Le bra $\langle x_0|$). Si $x_0 \in \mathbb{R}$, on note $\langle x_0|$ la forme linéaire, *non continue*, définie sur l'ensemble des fonctions continues de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ par

$$\langle x_0|\psi\rangle \quad = \quad \psi(x_0). \tag{A.169}$$

Le bra $\langle x_0|$ est donc un autre nom de la distribution $\delta(x - x_0)$.

On peut tenter une approche plus large de la notion de bras généralisés. Pour cela, on considère une distribution tempérée T. Puisque $\mathscr{S}$ est un sous-espace (dense) de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, le dual $\mathscr{S}^*$ de $\mathscr{S}$ contient le dual de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, qui est $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ en vertu du théorème de Riesz [19]. On a donc la situation suivante :

$$\mathscr{S} \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \subset \mathscr{S}^*. \tag{A.170}$$

C'est ce que l'on appelle un **triplet de Gelfand**. On peut être tenté de définir le bra $\langle \mathrm{T}|$ par $\langle \mathrm{T}|\varphi\rangle = \langle \mathrm{T}, \varphi\rangle$; mais cette dernière expression est *linéaire* en T, au sens où $\langle \alpha\mathrm{T}, \varphi\rangle = \alpha\,\langle \mathrm{T}, \varphi\rangle$, alors que le crochet hermitien est, quant à lui, *semi-linéaire* à gauche. Pour remédier à cet inconvénient mineur, on va donc poser la définition suivante :

Définition a..45 (Bra généralisé). Soit T une distribution tempérée. On définit le **bra généralisé $\langle \mathbf{T}|$** par son action sur tout $|\varphi\rangle \in \mathscr{S}$:

$$\langle \mathrm{T}|\varphi\rangle \quad \doteq \quad \overline{\langle \mathrm{T}, \overline{\varphi}\rangle}. \tag{A.171}$$

Remarque a..46. On vérifie sans peine, si T_φ est une distribution régulière associée à la fonction $\varphi \in \mathscr{S}$, alors

$$\forall \psi \in \mathscr{H} : \qquad \langle \mathrm{T}_\varphi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi(x)}\psi(x)\,dx \tag{A.172}$$

ce qui est égal au produit scalaire hermitien $\langle\varphi|\varphi\rangle_{\mathscr{H}}$ ou $\langle\varphi|\varphi\rangle_{\mathcal{L}^2(\mathbb{R})}$ dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

a.vi.4. États propres généralisés de l'impulsion : Kets $\langle p| \notin \mathscr{H}$

Dans le cas où $\mathscr{H}$ est $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, il est possible d'associer, à *certains* bras généralisés, un ket généralisé correspondant. Si $\langle\psi|$ est une forme linéaire définie par une distribution régulière :

$$\langle\psi|\varphi\rangle \quad = \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}\varphi, \tag{A.173}$$

où ψ est une fonction localement sommable, on lui associe le **ket généralisé $|\psi\rangle$**, c'est-à-dire la fonction ψ. Celle-ci n'appartient pas nécessairement à $\mathcal{L}^2$ et n'est donc pas forcément un élément de $\mathscr{H}$. Tout ce que l'on demande, c'est que l'intégrale soit définie.

Définition a..47 (ket $|p\rangle$ et bra $\langle p|$)**.** Si p est réel, la fonction

$$\omega_p : x \mapsto \alpha e^{\pm i\gamma p x} \tag{A.174}$$

n'est pas de carré intégrable. Elle définit cependant une forme linéaire, non continue, sur $\mathcal{L}^1 \cap \mathcal{L}^2$:

$$\Omega_p : \begin{array}{ccc} \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) & \longrightarrow & \mathbb{C} \\ \varphi & \longmapsto & \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\omega_p(x)}\varphi(x)\,dx = \tilde{\varphi}(p) \end{array} \tag{A.175}$$

où $\tilde{\varphi}$ désigne la transformée de Fourier de φ, si $\alpha = (2\pi\hbar)^{-1/2}$ et $\gamma = \hbar^{-1}$, on est dans les conventions de la mécanique quantique. On note $\langle p| \equiv \langle\Omega_p|$ ce bra généralisé. Le ket correspondant à la fonction ω_p est noté $|p\rangle \equiv |\omega_p\rangle \notin \mathscr{H}$.

19. En fait, le dual de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ est isomorphe à $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, mais *via* cet isomorphisme, on peut identifier toute forme linéaire continue sur $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ à une fonction de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

Par ailleurs, la notation de distribution peut être vue comme la généralisation de celle de fonction. Ainsi, le bra généralisé $\langle p|$ agit non seulement sur $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, en associant à une fonction de carré intégrable la transformée de Fourier prise en p, mais peut être étendu aux distributions tempérées. Si $|\mathrm{T}\rangle$ est un ket formellement associé à une distribution tempérée $\mathrm{T} \in \mathscr{S}^*$, alors $\langle p|\mathrm{T}\rangle = \widetilde{\mathrm{T}}(\omega_p)$.

Théorème a..48. *Si $\alpha = \beta$ (, avec (α, β) de la définition de la transformée de Fourier de l'équation (A.1)) , alors la famille des kets $|p\rangle$ est orthonormée, au sens où, pour tous réels p et p', on a $\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$.*

Démonstration. On applique la distribution $\langle p|p'\rangle = \widetilde{\omega_p}(\omega_{p'})$, et on se souvient que la transformée de Fourier, au sens des distributions, de $\omega_{p'}$, est $\frac{\alpha}{\beta}\delta_{p'}$. □

La frontière entre «bras» et «kets» n'est pas si claire : une distribution est une forme linéaire, donc techniquement un bra généralisé. Cependant, en tant que généralisation de fonction, on peut — formellement — la noter ket. Ainsi, on définit le ket $|x_0\rangle$ associé à la « fonction généralisée » $\delta(x - x_0)$. Notamment, pour toute fonction $\varphi \in \mathscr{S}$, on a

$$\langle \varphi|x_0\rangle = \overline{\langle x_0|\varphi\rangle} = \overline{\varphi(x_0)}. \tag{A.176}$$

Enfin, les kets $|x\rangle$ vérifient la relation d'orthonormalité :

$$\langle x|x_0\rangle = \delta(x - x_0) = \delta_x(x_0), \tag{A.177}$$

valable au sens des distributions tempérées — c'est-à-dire qui n'a de sens qu'appliquée à une fonction de l'espace de Schwartz.

a.vi.5. «$\mathrm{Id} = \sum_n |\varphi_n\rangle \langle\varphi_n|$»

Soi $(\varphi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ une base hilbertienne orthonormée de $\mathscr{H}$. On sait que cette famille est caractérisée par le fait que

$$\forall x \in \mathscr{H} : \quad x = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \varphi_n, x\rangle_{\mathscr{H}}\, \varphi_n. \tag{A.178}$$

Cette équation s'écrit, dans les notations de Dirac :

$$\forall\, |\psi\rangle \in \mathscr{H} : \quad |\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \varphi_n|\psi\rangle_{\mathscr{H}}\, |\varphi_n\rangle \tag{A.179}$$

ou encore, en notant le scalaire $\langle\varphi_n|\psi\rangle$ *après* le vecteur $|\varphi_n\rangle$:

$$\forall\, |\psi\rangle \in \mathscr{H} : \quad |\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle\, \langle \varphi_n|\psi\rangle_{\mathscr{H}}\,. \tag{A.180}$$

De manière formelle, l'opérateur $\sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle \langle\varphi_n|$ est donc l'identité de $\mathscr{H}$. Les physiciens appellent cette dernière propriété une **relation de fermeture**.

De manière mnémotechnique, on retiendra donc :

Théorème a..49 (Relation de fermeture). *la famille $(\varphi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une hilbertienne de $\mathscr{H}$ si et seulement si*

$$\mathrm{Id} = \sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle \langle\varphi_n|\,. \tag{A.181}$$

Cette écriture permet aisément de retrouver une autre caractéristique des bases himbertiennes : l'égalité de Parseval. En effet, pour tout $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$, on a

$$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi| \left(\sum_{n=0}^{\infty} |\varphi_n\rangle \langle\varphi_n| \right) |\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\psi|\varphi_n\rangle \langle\varphi_n|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2. \tag{A.182}$$

a.vi.6. Bases généralisées

On généralise également la notion de base de l'espace $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, en l'étendant aux distributions, vus comme généralisation de fonctions. On considère une famille $(\mathrm{T}_\lambda)_{\lambda\in\lambda}$ de distributions tempérées, indexée par un indice discret ou continu [20] variant sur λ. La première idée, pour généraliser la notion de base hilbertienne est de demander que

$$\mathrm{Id} = \int_\Lambda |\mathrm{T}_\lambda\rangle\langle\mathrm{T}_\lambda|\, d\lambda, \quad \text{c'est-à-dire} \quad |\varphi\rangle \int_\Lambda |\mathrm{T}_\lambda\rangle\langle\mathrm{T}_\lambda|\varphi\rangle\, d\lambda, \tag{A.183}$$

où la notation $\int d\lambda$ peut représenter une intégrale, une somme, ou un mélange des deux. Encore faut-il définir proprement l'intégrale de droite : on n'intègre pas des quantités numériques, mais des vecteurs en dimension infinie.

Il est plus simple de considérer une autre caractérisation des bases hilbertiennes : la formule de Parseval, qui ne se fera intervenir que des scalaires.

Définition a..50 (Base généralisée). On dit que la famille $(\mathrm{T}_\lambda)_{\lambda\in\Lambda}$ est une **base généralisée**, où un **système orthonormé total**, si et seulement si :

$$\forall\, |\varphi\rangle \in \mathscr{S}: \quad \|\varphi\|_2^2 = \langle\varphi|\varphi\rangle = \int_\Lambda |\langle\mathrm{T}_\lambda|\varphi\rangle|^2\, d\lambda. \tag{A.184}$$

La famille $(\mathrm{T}_\lambda)_{\lambda\in\Lambda}$ est appelée **système total** (ou **complet**) si, pour tout $\varphi \in \mathrm{S}$:

$$(\forall\lambda\in\Lambda:\ \langle\mathrm{T}_\lambda,\varphi\rangle = 0) \Longleftrightarrow (\varphi = 0)\,. \tag{A.185}$$

Comme dans le cas des bases hilbertiennes, une base généralisée est un système total. Cependant, la normalisation,d'une telle famille (dont les éléments ne. sont a *priori* pas dans $\mathcal{L}^2$) est délicate.

On notera qu'une base généralisée n'est en général *pas* une base hilbertienne de $\mathcal{L}^2$, puisque toutes les bases hilbertiennes sont dénombrables.

Théorème a..51 (La base $\{\langle x| ; x\in\mathbb{R}\}$). *On note $\langle x| \equiv \langle\delta_x|$ le bra généralisé associé à la distribution δ_x. Alors la famille $\{\langle x| ; x\in\mathbb{R}\}$ de distributions forme une base généralisée de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.*

Démonstration. $\forall\varphi\in\mathscr{S}:\ \|\varphi\|_2^2 = \int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(x)|^2dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|\langle x|\varphi\rangle|^2dx.$ □

Théorème a..52 (La base $\{\langle p| ; p\in\mathbb{R}\}$). *On note $\langle p| \equiv \langle\Omega_p|$ le bra généralisé défini par la distribution régulière Ω_p associée à la fonction*

$$\omega_p : x \mapsto \alpha e^{\pm i\gamma p x}. \tag{A.186}$$

Alors la famille $\{\langle p| ; p\in\mathbb{R}\}$ forme une base généralisée de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

Démonstration. Soit $\varphi\in\mathscr{S}$. Alors $\langle p|\varphi\rangle = \tilde\varphi(p)$; l'égalité de Parseval-Plancherel, qui traduit le fait que la transformée de Fourier est une isométrie de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ (pour $\alpha = \overline{\beta}$), s'écrit

$$\|\varphi\|_2^2 = \|\tilde\varphi\|_2^2 = \int_{-\infty}^{+\infty}|\tilde\varphi(p)|^2dp = \int_{-\infty}^{+\infty}|\langle p|\varphi\rangle|^2dp. \tag{A.187}$$

□

Enfin, on peut montrer que la relation de fermeture est encore valable pour les bases généralisées $\{\langle x| ; x\in\mathbb{R}\}$ et $\{\langle p| ; p\in\mathbb{R}\}$. En effet, si $(\varphi,\psi)\in(\mathcal{L}^2(\mathbb{R}))^2$, alors la relation $\langle\varphi|\psi\rangle = \int\langle\varphi|p\rangle\langle p|\psi\rangle\ dp$ est vrais (c'est encore l'égalité de Parseval-Pancherel). De même, on a

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\varphi(x)}\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\langle x|\varphi\rangle}\langle x|\psi\rangle\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\langle\varphi|x\rangle\langle x|\psi\rangle\, dx. \tag{A.188}$$

De manière pratique, on écrira donc :

20. le choix de l'indice continu n'est pas indifférent. Les bases généralisées sont utiles pour «diagonaliser» des opérateurs auto-adjoints qui admettent, en plus de valeurs propres, un *spectre continue*.

Théorème a..53 (Relation de fermeture généralisé).

$$\mathrm{Id} = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| \, dx \qquad \text{et} \qquad \mathrm{Id} = \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \langle p| \, dp \tag{A.189}$$

Remarque a..54. On peut ainsi écrire formellement des égalités du type

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x|\varphi\rangle \, dx \qquad \textit{c'est-à-dire} \qquad \varphi(\cdot) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_x(\cdot)\varphi(x)dx. \tag{A.190}$$

Cette égalité a un sens si l'on prend la valeur en un point y ; on obtient en effet la formule vraie :

$$\varphi(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x)\delta_x(y)dx. \tag{A.191}$$

La grande force des notations de Dirac est de permettre d'écrire, de manière intuitive, une grande quantité de formules justes. Par exemple, écrire

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \langle p|\varphi\rangle \, dp \tag{A.192}$$

revient en dire que, pour tout $x \in \mathbb{R}$,

$$\varphi(x) = \langle x|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|p\rangle \langle p|\varphi\rangle \, dp = \beta \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}(p)e^{\pm i\gamma px}dp, \tag{A.193}$$

ce qui n'est rien d'autre que la formule de la transformation de Fourier inverse (pour $\beta = \overline{\alpha}$).

b. États propres de Bethe pour le modèle de Lieb-Liniger

b.i. Pour une particule libre : première quantification

b.i.1. Équation spectrale en espace de Fourier

b.i.1.-i Résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps.

Ker de l'équation de Schrödinger dépendant du temps. En résolvant l'équation de Schrödinger, on arrive à la recherche du Ker de

$$\frac{i}{\gamma}\hat{\boldsymbol{\partial}}_t - \frac{1}{2m}\left(\mp\frac{i}{\gamma}\hat{\boldsymbol{\partial}}_x\right)^2. \tag{A.194}$$

En utilisant la transformée de Fourier

$$\mathcal{F}[\partial\psi] = (k \mapsto -\gamma^2 k^2 \tilde{\psi}(k)), \tag{A.195}$$

donc, dans la représentation «k» , on cherche $tilde\psi$ tel que

$$\partial_t\tilde{\psi} + i\gamma\frac{k^2}{2m}\tilde{\psi} = 0, \tag{A.196}$$

ce qui donne

$$\tilde{\psi}(k;t) = \tilde{\psi}(k;0)e^{-ii\gamma\frac{k^2}{2m}t}. \tag{A.197}$$

Et si on revient à la représentation «x», avec la transformée de Fourier inverse

$$\psi(x;t) \quad = \quad \beta \int \tilde{\psi}(k;0) e^{\pm i\gamma kx} e^{-ii\gamma \frac{k^2}{2m} t}\, dk. \tag{A.198}$$

Or $\tilde{\psi}(k;0)$ s'écrit avec la transformée de Fourier :

$$\psi(x;0) \quad = \quad \alpha \int \tilde{\psi}(x;0) e^{\mp i\gamma kx}\, dx. \tag{A.199}$$

Ainsi on a

$$\psi(x;t) \quad = \quad \beta \int \left(\alpha \int \tilde{\psi}(x;0) e^{\mp i\gamma kx}\, dx \right) e^{\pm i\gamma kx} e^{-ii\gamma \frac{k^2}{2m} t}\, dk, \tag{A.200}$$

$$= \quad \int \underbrace{\left(\alpha\beta \int e^{\pm ik(x-x')} e^{-i\gamma \frac{k^2}{2m} t}\, dk \right)}_{K(x-x';t)} \psi(x;0)\, dx', \tag{A.201}$$

$$= \quad \int K(x-x';t)\psi(x;0)\, dx', \tag{A.202}$$

avec le propagateur

$$K(x;t) = \alpha\beta \int e^{\pm ikx} e^{-i\gamma \frac{k^2}{2m} t}\, dk \tag{A.203}$$

or en utilisant la convention $\gamma = 2\pi\alpha\beta$ et l'integrale de Gauss $\int e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{(b^2/(4a))}$ avec $(a,b) \in \mathbb{C}^2$ et $\Re(a) > 0$, il vient que le propagateur s'écrit :

$$K(x;t) = \sqrt{\frac{m\gamma}{it2\pi}} e^{i\gamma \frac{m}{2t} x^2}, quad(t \neq 0) \tag{A.204}$$

Évolution unitaire et propagateur Soit $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert complexe et

$$H(t) : D(H) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H} \tag{A.205}$$

une famille d'opérateurs auto-adjoints, définis sur un domaine dense $D(H)$ indépendant du temps. On cherche un *propagateur unitaire*

$$U(t,s) : \mathcal{H} \to \mathcal{H} \tag{A.206}$$

tel que

$$\begin{cases} \partial_t U(t,s) = -i\gamma H(t)\, U(t,s), \\ U(s,s) = \mathbf{1}. \end{cases} \tag{A.207}$$

Le propagateur $U(t,s)$ décrit l'évolution quantique entre les instants s et t.

Série de Dyson (construction formelle)
On définit formellement le propagateur par l'exponentielle chronologique

$$U(t,s) = \mathcal{T} \exp\left(-i\gamma \int_s^t H(\tau)\, d\tau \right), \tag{A.208}$$

où $\mathcal{T}$ désigne l'opérateur d'ordonnancement temporel.
Son développement explicite est donné par la série de Dyson

$$U(t,s) = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} (-i\gamma)^n \int_s^t d\tau_1 \int_s^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_s^{\tau_{n-1}} d\tau_n H(\tau_1) \cdots H(\tau_n). \tag{A.209}$$

Sous des hypothèses standards de régularité (au sens de Kato), cette série converge fortement et définit un opérateur borné sur $\mathcal{H}$.

Solution du problème de Cauchy

Pour toute condition initiale $\psi_0 \in \mathcal{H}$, la solution de l'équation d'évolution

$$\partial_t \psi(t) = -i\gamma H(t)\psi(t), \qquad \psi(t_0) = \psi_0, \tag{A.210}$$

est donnée par

$$\psi(t) = U(t, t_0)\psi_0. \tag{A.211}$$

Unitarité du propagateur

Proposition b..1. *Si $H(t)$ est auto-adjoint pour tout t, alors le propagateur $U(t, s)$ est unitaire :*

$$U(t, s)^\dagger U(t, s) = \mathbf{1}. \tag{A.212}$$

Démonstration. (esquisse) On dérive

$$\partial_t \Big(U(t, s)^\dagger U(t, s) \Big) = i\gamma U(t, s)^\dagger H(t) U(t, s) - i\gamma U(t, s)^\dagger H(t) U(t, s) = 0. \tag{A.213}$$

Comme $U(s, s) = \mathbf{1}$, on en déduit l'unitarité pour tout t.

□

Cas particulier : Hamiltoniens commutatifs

Si

$$[H(t), H(t')] = 0 \qquad \forall\, t, t', \tag{A.214}$$

l'ordonnancement temporel est inutile et le propagateur se réduit à

$$U(t, s) = \exp\left(-i\gamma \int_s^t H(\tau)\, d\tau \right). \tag{A.215}$$

Résumé structurel

L'équation d'évolution

$$\partial_t \psi = -i\gamma H(t)\psi \tag{A.216}$$

admet pour solution

$$\psi(t) = U(t, t_0)\psi_0, \tag{A.217}$$

où $U(t, s)$ est un opérateur unitaire, de générateur infinitésimal $-i\gamma H(t)$, construit via le théorème de Stone dans le cas indépendant du temps, ou par la théorie de Dyson–Kato dans le cas dépendant du temps.

b.i.1.-ii Définition des espaces et des bases. Pour traiter rigoureusement le cas de la particule libre, on distingue l'espace des états physiques (souvent restreint à $L^2(\mathbb{R})$) et l'espace élargi des "états généralisés" (les distributions tempérées $\mathcal{S}^*$).

Les kets de position et d'impulsion. On définit la base des kets de position $\{|x\rangle\}_{x\in\mathbb{R}}$ telle que :

- Orthogonalité : $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$
- Résolution de l'identité : $\int_{\mathbb{R}} dx\, |x\rangle\, \langle x| = \mathbb{I}$

Selon notre définition de la transformée de Fourier, on introduit les kets d'impulsion $\{|k\rangle\}_{k\in\mathbb{R}}$ par leur projection sur la base position :

$$\langle x|k\rangle = \alpha e^{\pm i\gamma k x}, \tag{A.218}$$

N.B. b..2. Le choix du signe dans l'exponentielle dépend du signe $\mp$ choisi dans notre définition de $\tilde{f}(k)$

Relation de base et transformée de Fourier. L'état $|\psi\rangle$ s'exprime dans les deux bases via :

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \quad \text{et} \quad \tilde{\psi}(k) = \langle k|\psi\rangle \tag{A.219}$$

En utilisant la résolution de l'identité, on retrouve notre définition :

$$\tilde{\psi}(k) = \int \langle k|x\rangle \langle x|\psi\rangle \, dx = \alpha \int e^{\mp i\gamma k x}\psi(x)dx. \tag{A.220}$$

b.i.1.-iii Fonctions propres stationnaires de l'équation de Schrödinger indépendant du temps. Quand on cherche les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger, on cherche les fonctions propres de

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}} \equiv \frac{1}{2m}\left(\mp\frac{i}{\gamma}\hat{\boldsymbol{\partial}}_x\right)^2, \tag{A.221}$$

à un facteur près, ce qui revient à chercher les valeurs et les fonctions propres de

$$\hat{\boldsymbol{\partial}}^2. \tag{A.222}$$

Dans la représentation «k» ? . Or $\hat{\boldsymbol{\partial}}^2$ est auto-adjoints dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ $\left(\langle\varphi, \hat{\boldsymbol{\partial}}^2\phi\rangle_{\mathcal{L}^2} = \langle\hat{\boldsymbol{\partial}}^2\varphi, \phi\rangle_{\mathcal{L}^2}\right)$[21]
Donc, on cherche $\lambda \in \mathbb{R}$, associer à une fonction propre φ tel qu'en faisant la transformée de Fourier

$$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \ni \hat{\boldsymbol{\partial}}^2\varphi = \lambda\varphi \xrightarrow{\hat{\mathcal{F}}} \left(k \mapsto -k^2\tilde{\varphi}(k)\right) = \lambda\tilde{\varphi}, \tag{A.223}$$

soit résoudre

$$k \longmapsto (k^2 + \lambda)\tilde{\varphi} = 0 \qquad \text{(équation de dans } \mathcal{L}^2 \text{ ou } \mathcal{S}^*\text{)}. \tag{A.224}$$

Sur $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ il y a deux possibilités :

i) $\tilde{\varphi} = 0$

ii) $(k \mapsto k^2 + \lambda) = 0$.

Sur $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, $\tilde{\varphi}$ ne peut être non nulle que sur l'ensemble $\{k \in \mathbb{R} \,|k^2 = -\lambda\}$.

Aucune solution non triviale dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Sur $\mathbb{R}$

i) l'ensemble $\{-k_0, +k_0\}$ est de mesure de Lebesgue nulle

ii) une fonction de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ qui est nulle presque partout est égale à zéro.

Dons si la fonction propre $\varphi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ alors le support de $\tilde{\varphi} \subset \{-\sqrt{-\lambda}, +\sqrt{-\lambda}\}$ donc $\tilde{\varphi} = 0$. Donc $\hat{\boldsymbol{\partial}}^2$ n'a aucune fonction propre sur $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

C'est la raison fonctionnelle profonde.

Comment obtenir malgré tout des « solutions propres » ? . Si l'on élargit l'espace de travail à $\mathcal{S}^*$ (distribution tempérée) alors, il existe des objets non nuls supportés sur un point : δ_{k_0} :

$$(\lambda + k^2)\delta_{k_0} = (\lambda + k_0^2)\delta_{k_0}. \tag{A.225}$$

Si $k_0 = \pm\sqrt{-\lambda}$ alors $(\lambda + k^2)\delta_{k_0} = 0$

21. Les opérateurs $\hat{\boldsymbol{X}}$: $f \mapsto (x \mapsto xf(x))$ et $i\hat{\boldsymbol{\partial}}$: $f \mapsto if'$ sont auto-adjoints dans $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ car

$$\langle\varphi, \hat{\boldsymbol{X}}\phi\rangle_{\mathcal{L}^2} = \int \varphi(x)x\phi(x)dx = \langle\hat{\boldsymbol{X}}\varphi, \phi\rangle_{\mathcal{L}^2} \quad \text{et} \quad \langle\varphi, i\hat{\boldsymbol{\partial}}\phi\rangle_{\mathcal{L}^2} = \int \overline{\varphi}(i\partial\phi) = -\int (\overline{i\partial\phi})\phi = \langle i\hat{\boldsymbol{\partial}}\varphi, \phi\rangle_{\mathcal{L}^2}$$

Pourquoi seulement des combinaisons de Dirac ?. Toute distribution T telle que

$$(\lambda + x^2)T = 0, \tag{A.226}$$

doit être supportés dans l'ensemble des zéros du polynôme

$$\lambda + x^2. \tag{A.227}$$

Or les zéros sont isolés ($\pm k_0$). Toutes distributions tempérées à support ponctuelle est une combinaison finie de

$$\delta^{(n)}(x \pm k_0). \tag{A.228}$$

Mais ici

$$(\lambda + x^2)\delta'(x \pm k_0) \neq 0, \tag{A.229}$$

donc seules les Dirac non dérivées survivent. Ainsi

$$\tilde{\varphi} \in \mathrm{Vect}\{\delta_{+k_0}, \delta_{-k_0}\}. \tag{A.230}$$

Et dans la représentation «x» ?. En utilisant les transformées de Fourier

$$\mathcal{F}^{-1}[\delta] = (x \mapsto \beta), \quad \mathcal{F}^{-1}[k \mapsto f(k+a)] = (x \mapsto e^{\pm i\gamma a x}\mathcal{F}^{-1}[f](x)), \tag{A.231}$$

il vient que les fonctions propres stationnaires, dans la représentation «x», sont tels que :

$$\varphi \in \mathrm{Vect}\{\varphi_{+k_0}, \varphi_{-k_0}\}, \quad \text{avec} \quad \varphi_k : x \mapsto \beta e^{\pm i\gamma k x}. \tag{A.232}$$

Or la définition de la distribution de Dirac et l'unitarité de la transformée de Fourier implique que

$$\int e^{\pm i\gamma(k-k')x}\, dx = \frac{2\pi}{\gamma}, \qquad \gamma = 2\pi|\beta|^2,\ \beta = \overline{\alpha}, \tag{A.233}$$

donc on a le produit scalaire :

$$|\varphi_k, \varphi_{k'}\rangle_{\mathcal{S}^*} = \delta(k - k'). \tag{A.234}$$

Donc $\{\varphi_{+k_0}, \varphi_{-k_0}\}$ forme une base orthonormée. De plus a une phase près ($\beta = \overline{\alpha}$), on a

$$\varphi_k(x) = \langle x|k\rangle, \tag{A.235}$$

Soit

$$\varphi \in \mathrm{Vect}\{|+k_0\rangle, |-k_0\rangle\}. \tag{A.236}$$

De plus φ_k est fonction propre de $\hat{\boldsymbol{\partial}}^2$ associé à $-k^2$.

Donc, on retiendra que $\boldsymbol{\varphi_k}$ **est fonction propre de** $\hat{\mathcal{H}} \equiv \frac{1}{2m}\left(\mp\frac{i}{\gamma}\hat{\partial}_x\right)^2$ **associé à** $\boldsymbol{\varepsilon(k) \equiv \frac{k^2}{\gamma^2 2m}}$.

Si $|k\rangle$ **tel que** $\hat{\mathcal{H}}|k\rangle = \varepsilon(k)|k\rangle$**. En projetant sur** $\langle k'|$ **:**

$$\langle k'|\hat{\mathcal{H}}|k\rangle = \varepsilon(k)\langle k'|k\rangle, \quad \text{où} \quad \tilde{\phi}_k(k') = \langle k'|k\rangle. \tag{A.237}$$

Transformation U et dégénérescence. Puisque l'énergie ne dépend que de k^2, l'espace propre est de dimension 2, engendré par $\{|k\rangle, |-k\rangle\}$. On peut définir une nouvelle base par une transformation unitaire U :

$$\begin{pmatrix}|k,+\rangle\\ |k,-\rangle\end{pmatrix} = U\begin{pmatrix}|+k\rangle\\ |-k\rangle\end{pmatrix}, \tag{A.238}$$

avec U unitaire. Donc U est de la forme

$$U = \begin{pmatrix}a & b\\ \mp\overline{b} & \pm\overline{a}\end{pmatrix} \tag{A.239}$$

avec $|a|^2 + |b|^2 = 1$ pour que U soit bien unitaire. Si $\pm \longrightarrow +$ on a $U \in SU(2)$. Généralement, on choisit U pour obtenir des états de parité définie (fonctions sinus et cosinus) :

- $|k,+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|k\rangle + |-k\rangle)$ (symétrique / Cosinus)
- $|k,-\rangle = \frac{1}{i\sqrt{2}}(|k\rangle - |-k\rangle)$ (antisymétrique / Sinus)

Attention au point $k = 0$: À $k = 0$, les vecteurs $|k\rangle$ et $|-k\rangle$ ne sont plus linéairement indépendants (ils fusionnent). La dimension de l'espace propre chute à 1, ce qui correspond physiquement à l'état fondamental de translation nulle. Dans le modèle de Lieb–Liniger, l'exclusion de Pauli "généralisée" (via la répulsion) fera que les k doivent être distincts.

Extension au cas périodique (L-périodique) : quantification. Quand on passe sur un cercle de circonférence L, l'espace de travail devient $\mathcal{L}^2([0, L])$.

Discrétisation du spectre

La condition de périodicité $\psi(x + L) = \psi(x)$ impose $\langle x + L|k\rangle = \langle x|k\rangle$, d'où :

$$e^{\pm i\gamma k(x+L)} = e^{\pm i\gamma kx} \implies \gamma kL = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}. \tag{A.240}$$

Les kets autorisés sont désormais discrets : $\{|k_n\rangle\}$ avec $k_n = \frac{2\pi n}{\gamma L}$.

De la Transformée à la Série de Fourier

La résolution de l'identité devient une somme :

$$\mathbb{I} = \sum_{n\in\mathbb{Z}} |k_n\rangle \langle k_n| . \tag{A.241}$$

La fonction d'onde se décompose en série de Fourier :

$$|\psi\rangle = \sum_n \tilde{c}_n |k_n\rangle \implies \psi(x) = \sum_n \tilde{c}_n \alpha e^{\pm i\gamma k_n x}. \tag{A.242}$$

Espace de travail
Ici, les kets $|k_n\rangle$ appartiennent à $L^2([0, L])$. On n'a plus besoin de sortir de l'espace de Hilbert pour définir les états propres, car le spectre de l'opérateur $\hat{\boldsymbol{\partial}}^2$ sur un domaine compact est purement ponctuel (discret).

Remarque sur la normalisation des états périodiques. Dans le cas périodique de période L, deux conventions équivalentes peuvent être utilisées pour définir le produit scalaire et la normalisation des états propres.

Choix A (normalisation du produit scalaire). On définit

$$\langle f \mid g\rangle_A = \frac{1}{L}\int_0^L \overline{f(x)}\, g(x)\, dx, \tag{A.243}$$

et les états propres

$$\langle x|k_n\rangle_A = e^{\pm i\gamma k_n x}, \qquad k_n = \frac{2\pi n}{\gamma L}. \tag{A.244}$$

On vérifie alors immédiatement que

$$\langle k_n \mid k_m\rangle_A = \delta_{nm}. \tag{A.245}$$

Choix B (normalisation des états). On définit le produit scalaire standard

$$\langle f \mid g\rangle_B = \int_0^L \overline{f(x)}\, g(x)\, dx, \tag{A.246}$$

et les états propres normalisés

$$\langle x|k_n\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{L}}\, e^{\pm i\gamma k_n x}, \qquad k_n = \frac{2\pi n}{\gamma L}. \tag{A.247}$$

Dans ce cas également,

$$\langle k_n \mid k_m\rangle_B = \delta_{nm}. \tag{A.248}$$

Les deux conventions sont reliées par une simple renormalisation

$$|k_n\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{L}}\,|k_n\rangle_A\,, \tag{A.249}$$

et conduisent à des résultats physiques strictement identiques. Dans la suite de ce manuscrit, nous adoptons le **choix B**, qui correspond à la convention usuelle de la mécanique quantique, où le produit scalaire est défini sans facteur de normalisation explicite.

États propres et produit scalaire des états périodiques. Ici pour rester cohérent avec les séries de Fourier (coefficients de Fourier)

$$c_n(f) = \frac{1}{L}\int_0^L f(x)e^{\mp i\gamma k_n x}\,dx., \qquad f(x) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} c_n(f)e^{\pm i\gamma k_n x}, \tag{A.250}$$

nous choisissons le choix A.

$$\langle \phi \mid \varphi\rangle = \frac{1}{L}\int_0^L \overline{\phi(x)}\,\varphi(x)\,dx, \tag{A.251}$$

et les états propres

$$\varphi_{k_n}(x) \equiv \langle x|k_n\rangle \equiv e^{\pm i\gamma k_n x}. \tag{A.252}$$

Soit, on réécrit

$$\tilde{\varphi}_{k_n}(k_n) \equiv \langle k_n|\varphi\rangle \ = c_n(\varphi) = \frac{1}{L}\int_0^L \langle k_n|x\rangle\langle x|\varphi\rangle\ dx, \quad \varphi_{k_n}(x) = \langle x|\varphi\rangle = \sum_{n\in\mathbb{Z}}\langle x|k_n\rangle\langle k_n|\varphi\rangle\,, \tag{A.253}$$

en encore

$$|\varphi\rangle \ = c_n(\varphi) = \frac{1}{L}\int_0^L |x\rangle\langle x|\varphi\rangle\ dx, \quad |\varphi\rangle = \sum_{n\in\mathbb{Z}}|k_n\rangle\langle k_n|\varphi\rangle\,. \tag{A.254}$$

Et on retiendra

$$|k_n\rangle \ = \frac{1}{L}\int_0^L |x\rangle\langle x|k_n\rangle\ dx, \quad |x\rangle = \sum_{Lk_n\in 2\pi Z}|k_n\rangle\langle k_n|\varphi\rangle\,. \tag{A.255}$$

Remarque b..3 (**Incoming/Outming wave**). Fans les cas où L infinie ou finie ($\varphi_k(x) \propto e^{\pm i\gamma kn}$), la structure $\{\varphi_{+k}, \varphi_{-k}\}$ correspond à la base hélicoïdale (helicity basis) utilisés pour l'équation de Schrödinger 1D libre, où encore à l base des modes entrant/ sortant («incoming/outming wave»).

b.ii. Pour N (inconue) de particule(s) : seconde quantification

Ici, on fait un récapitulatif de la sous-sous-section : «Seconde quantification» du chapitre I.

b.ii.1. Cadre fonctionnel et bases généralisées.

Les états propres de l'opérateur impulsion et de l'opérateur position n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert physique $\mathcal{L}^2([0,L])$, mais doivent être compris comme des *vecteurs généralisés* au sens de la théorie des distributions. Plus précisément, on se place dans le cadre d'un triplet de Gelfand

$$\mathcal{S}([0,L]) \subset \mathcal{L}^2([0,L]) \subset \mathcal{S}'([0,L]), \tag{A.256}$$

où $\mathcal{S}$ désigne un espace de fonctions tests adaptées aux conditions aux bords, et $\mathcal{S}'$ son dual topologique.

Dans ce cadre, les familles $\{|x\rangle\}_{x\in[0,L]}$ et $\{|k_n\rangle\}_{n\in\mathbb{Z}}$, avec

$$k_n = \frac{2\pi n}{L}, \tag{A.257}$$

forment des *bases orthonormées généralisées* au sens des distributions, vérifiant

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \qquad \langle k_n|k_m\rangle = \delta_{n,m}. \tag{A.258}$$

Les résolutions de l'identité correspondantes sont alors

$$\mathbb{I} = \frac{1}{L}\int_0^L dx\ |x\rangle\langle x| = \sum_{n\in\mathbb{Z}} |k_n\rangle\langle k_n|\,, \tag{A.259}$$

où les égalités sont comprises au sens faible sur $\mathcal{S}([0,L])$.

En particulier, les relations de changement de représentation s'écrivent

$$|k_n\rangle = \frac{1}{L}\int_0^L dx\ |x\rangle\langle x|k_n\rangle\,, \qquad |x\rangle = \sum_{n\in\mathbb{Z}} |k_n\rangle\langle k_n|x\rangle\,, \tag{A.260}$$

les coefficients $\langle x|k_n\rangle$ étant donnés par les ondes planes $\langle x|k_n\rangle = e^{\pm i\gamma k_n x}$.

b.ii.2. Limites de la première quantification.

Dans la première quantification, un système de N particules identiques est décrit par une fonction d'onde $\varphi(x_1,\dots,x_N)$, symétrique (bosons) ou antisymétrique (fermions) sous l'échange de deux coordonnées. Cette approche devient rapidement peu maniable lorsque N est grand, ou lorsque le nombre de particules n'est plus conservé, comme dans les systèmes ouverts ou en théorie des champs.

b.ii.3. Principe de la seconde quantification.

La seconde quantification fournit un cadre conceptuel et technique permettant de traiter de manière unifiée des systèmes à nombre variable de particules. L'objet fondamental n'est plus la fonction d'onde, mais un *vecteur d'état* appartenant à l'espace de Fock, construit comme une somme directe des espaces à N particules. Les degrés de liberté sont décrits par des opérateurs de création et d'annihilation, associés aux modes quantiques du système.

b.ii.4. Espace de Fock et opérateurs de création-annihilation.

L'espace de Fock bosonique est engendré à partir du vide $|\emptyset\rangle$, défini par

$$\forall k, \qquad \hat{\boldsymbol{a}}_k\,|\emptyset\rangle = 0, \qquad \langle\emptyset|\emptyset\rangle = 1. \tag{A.261}$$

L'opérateur $\hat{\boldsymbol{a}}_k^\dagger$ crée une particule dans le mode k, et les relations de commutation canoniques sont

$$[\hat{\boldsymbol{a}}_k, \hat{\boldsymbol{a}}_{k'}] = 0, \qquad [\hat{\boldsymbol{a}}_k, \hat{\boldsymbol{a}}_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}. \tag{A.262}$$

b.ii.4.-i États à nombre fixé de particules. Un état à N bosons dans les modes $\{k_1,\dots,k_N\}$ s'écrit

$$|\{k_1,\dots,k_N\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\,\hat{\boldsymbol{a}}_{k_1}^\dagger\cdots\hat{\boldsymbol{a}}_{k_N}^\dagger\,|\emptyset\rangle\,, \tag{A.263}$$

le facteur $1/\sqrt{N!}$ assurant la symétrisation correcte de l'état.

b.ii.5. Champs quantiques et représentation positionnelle.

Dans la représentation de position, on introduit le champ bosonique canonique $\hat{\mathbf{\Psi}}(x)$ et son adjoint $\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x)$, qui annihilent et créent respectivement une particule au point x. Ils satisfont les relations de commutation à temps égal

$$[\hat{\mathbf{\Psi}}(x), \hat{\mathbf{\Psi}}(y)] = 0, \qquad [\hat{\mathbf{\Psi}}(x), \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(y)] = \delta(x-y). \tag{A.264}$$

L'état localisé en x est donné par

$$|x\rangle = \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x)\,|\emptyset\rangle\,. \tag{A.265}$$

b.ii.5.-i Lien avec la description à N corps. Les opérateurs de champ permettent de reconstruire les états à N particules sous la forme

$$|\{x_1,\dots,x_N\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\,\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x_1)\cdots\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x_N)\,|\emptyset\rangle\,, \tag{A.266}$$

et de relier naturellement la seconde quantification à la fonction d'onde symétrisée de la première quantification.

b.ii.6. Lien spectral entre modes de moment et champs quantiques.

Dans le formalisme de la seconde quantification, les opérateurs de création et d'annihilation associés aux modes de moment constituent une base spectrale discrète, tandis que les opérateurs de champ fournissent une description locale en espace réel. Les deux descriptions sont reliées par une transformation de Fourier, comprise au sens distributionnel dans le cadre d'un espace de Hilbert riggé.

Plus précisément, les opérateurs de création satisfont

$$\hat{\boldsymbol{a}}_k^\dagger = \frac{1}{L}\int_0^L dx\,\varphi_k(x)\,\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x), \qquad \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x) = \sum_{Lk\in 2\pi\mathbb{Z}} \overline{\varphi_k(x)}\,\hat{\boldsymbol{a}}_k^\dagger, \tag{A.267}$$

où $\{\varphi_k\}$ désigne une famille complète d'ondes planes, solutions propres de l'opérateur impulsion sous conditions périodiques.

Ces relations expriment le fait que les opérateurs $\hat{\boldsymbol{a}}_k$ sont les composantes de Fourier du champ quantique $\hat{\mathbf{\Psi}}(x)$, et traduisent l'équivalence entre la description en modes de moment et la description locale en espace réel.

Un état à N bosons défini dans la base des modes de moment admet une représentation équivalente en termes d'opérateurs de champ :

$$|\{k_a\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\int dx_1\cdots dx_N\,\varphi_{\{k_a\}}(\{x_a\})\,\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x_1)\cdots\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x_N)\,|\emptyset\rangle\,. \tag{A.268}$$

La fonction d'onde $\varphi_{\{k_a\}}$ est entièrement symétrisée, reflétant l'indiscernabilité des bosons, et peut être exprimée soit comme somme sur le groupe symétrique $\hat{\boldsymbol{S}}_N$, soit, de manière équivalente, comme une amplitude de champ à N points :

$$\varphi_{\{k_a\}}(\{x_a\}) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\,\langle\emptyset|\,\hat{\mathbf{\Psi}}(x_1)\cdots\hat{\mathbf{\Psi}}(x_N)\,|\{k_a\}\rangle\,. \tag{A.269}$$

b.ii.7. Intérêt pour le modèle de Lieb–Liniger.

Ce formalisme est particulièrement adapté à l'étude des gaz de Bose unidimensionnels, et constitue le cadre naturel pour formuler le modèle de LL, dans lequel les interactions locales, la symétrie bosonique et la construction des états propres de BA s'expriment de manière compacte et transparente.

b.iii. Résumé synthétique — opérateurs à un et deux corps

Les opérateurs à plusieurs corps s'expriment naturellement dans le formalisme de la seconde quantification, où leur écriture devient indépendante du nombre de particules.

b.iii.1. Opérateur à un corps.

Un opérateur à une particule $\hat{f}$ se prolonge en un opérateur symétrique à N particules par sommation sur chaque degré de liberté individuel. Dans l'espace de Fock, il s'écrit :

$$\hat{F} = \sum_{\lambda,\nu} \langle \lambda | \hat{f} | \nu \rangle \ \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\nu. \tag{A.270}$$

L'opérateur $\hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\nu$ décrit la transition d'une particule du mode ν vers le mode λ ; pour $\lambda = \nu$, il correspond à l'opérateur nombre dans le mode λ.

Dans la représentation positionnelle, l'opérateur à un corps prend la forme bilinéaire :

$$\hat{F} = \frac{1}{L^2} \iint_0^L dx\, dy\ \hat{\Psi}^\dagger(x)\ \langle x | \hat{f} | y \rangle\ \hat{\Psi}(y). \tag{A.271}$$

b.iii.2. Opérateur à deux corps.

Les interactions entre paires de particules sont décrites par un opérateur symétrique à deux corps $\hat{v}$. Sa seconde quantification conduit à :

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \langle 1:\alpha, 2:\beta | \hat{v} | 1:\gamma, 2:\delta \rangle\ \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\delta \hat{a}_\gamma. \tag{A.272}$$

Cette écriture est particulièrement adaptée au traitement des interactions dans l'espace de Fock.

Dans la base continue des positions, on obtient :

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\frac{1}{L^4} \iiiint_0^L dx_1\, dx_2\, dx_1'\, dx_2'\ \langle x_1, x_2 | \hat{v} | x_1', x_2' \rangle\ \hat{\Psi}^\dagger(x_1)\hat{\Psi}^\dagger(x_2)\hat{\Psi}(x_2')\hat{\Psi}(x_1'). \tag{A.273}$$

b.iii.3. Hamiltonien de Lieb–Liniger.

Dans le modèle de (LL), les bosons unidimensionnels interagissent via une interaction de contact ponctuelle :

$$\langle x_1, x_2 | \hat{v} | x_1', x_2' \rangle = g\, \delta(x_1 - x_2)\, \delta(x_1 - x_1')\, \delta(x_2 - x_2'). \tag{A.274}$$

L'Hamiltonien s'écrit alors :

$$\hat{H} = \frac{1}{L^2} \int_0^L dx\ \hat{\Psi}^\dagger(x) \left(\frac{1}{2m} \left(\mp \frac{i}{\gamma} \hat{\partial}_x \right)^2 \right) \hat{\Psi}(x) + \frac{g}{2}\frac{1}{L^4} \int_0^L dx\ \hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x)\hat{\Psi}(x). \tag{A.275}$$

Le premier terme décrit l'énergie cinétique des bosons, tandis que le second correspond à une interaction locale agissant uniquement lorsque deux particules se trouvent au même point de l'espace. Ce caractère de contact rend le modèle exactement soluble par (BA) et en fait un paradigme fondamental des gaz quantiques unidimensionnels.

b.iv. États de Bethe et structure unitaire des collisions

Dans le modèle de Lieb–Liniger, chaque collision entre deux quasi-moments (k_i, k_j) est décrite par une transformation unitaire universelle, indépendante du reste du système. Cette propriété est à l'origine de l'intégrabilité du modèle.

À chaque collision, l'état subit un produit de matrice de $SU(2)$. Donc l'état (état de BA) est un produit de matrice S (format $SU(2)$).

b.iv.1. Réécritur de l'Hamiltonien de Lieb–Liniger en seconde quantification.

L'Hamiltonien du modèle (unités $2m = \hbar = 1$) :

$$\hat{\mathcal{H}} = \int_0^L dx \left[\hat{\partial}_x \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x)\hat{\partial}_x \hat{\mathbf{\Psi}}(x) + c\,\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x)\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x)\hat{\mathbf{\Psi}}(x)\hat{\mathbf{\Psi}}(x)\right], \tag{A.276}$$

Un état à N particules en représentation coordonnée s'écrit :

$$|\{k_a\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int dx_1 \cdots dx_N\, \varphi_{\{k_a\}}(\{x_a\})\, \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x_1)\cdots\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x_N)\,|\rangle\,. \tag{A.277}$$

b.iv.2. Formalisme Matriciel et Représentation de S_N

Dans cette section, nous montrons comment le modèle de Lieb–Liniger se reformule comme une dynamique de transport dans un espace de dimension $N!$, où l'interaction est encodée par des matrices d'échange unitaires satisfaisant l'équation de Yang–Baxter [KIB93 ; Rei22].

b.iv.2.-i Vérification pour $N = 2$: Matrice de mélange Pour deux particules, l'espace des fonctions propres pour une énergie E fixée est porté par les deux modes $\{e^{i(k_i x_i + k_j x_j)}, e^{i(k_j x_i + k_i x_j)}\}$. On définit le vecteur de base :

$$\mathbf{\Phi}_{ij}(x_i, x_j) = \begin{pmatrix} e^{i(k_i x_i + k_j x_j)} \\ e^{i(k_j x_i + k_i x_j)} \end{pmatrix}. \tag{A.278}$$

Dans le régime $x_i < x_j$, la fonction d'onde est donnée par $\varphi = {}^t\mathbf{A}^{(0)}\mathbf{\Phi}_{ij} = A_{ij}\Phi_i + A_{ji}\Phi_j$ avec le vecteur des amplitudes ${}^t\mathbf{A}^{(0)} = (A_{ij}, A_{ji})$. La condition de raccordement analytique (saut de la dérivée) impose la relation entre amplitudes :

$$A_{ji} = -S(k_i - k_j)A_{ij}, \quad \text{avec} \quad S(k) = \frac{1 + ik/c}{1 - ik/c}. \tag{A.279}$$

L'échange des coordonnées correspond à l'application de la matrice unitaire $U_{ij} = \mathrm{diag}(1, S(k_i - k_j))$. Cette matrice joue le rôle d'une rotation de phase dans l'espace de dimension 2, mélangeant les modes de quasi-moments.

b.iv.2.-ii Généralisation à N particules et vecteur de phase Pour N particules, on introduit un vecteur $\mathbf{\Phi} \in \mathbb{C}^{N!}$ indexé par les permutations $P \in S_N$:

$$\Phi_P(\mathbf{x}) = e^{i\sum_{j=1}^N k_{P_j} x_j}. \tag{A.280}$$

Chaque franchissement d'une frontière $x_i = x_{i+1}$ correspond à l'application d'une matrice unitaire d'échange $\hat{\boldsymbol{S}}_{i,i+1} \in \mathrm{End}(\mathbb{C}^{N!})$:

$$(\hat{\boldsymbol{S}}_{i,i+1})_{P,P'} = \hat{\boldsymbol{\delta}}_{P',\,P\circ(i,i+1)}\, S(k_{P_i}, k_{P_{i+1}}). \tag{A.281}$$

La relation entre amplitudes se réécrit :

$$A_{P\circ\tau_{ij}} = -S(k_{P_i} - k_{P_j})A_P, \tag{A.282}$$

où τ_{ij} est la transposition échangeant les indices i et j.

Ces matrices satisfont les relations de Yang–Baxter :

$$\hat{\boldsymbol{S}}_{i,i+1}\hat{\boldsymbol{S}}_{i+1,i+2}\hat{\boldsymbol{S}}_{i,i+1} = \hat{\boldsymbol{S}}_{i+1,i+2}\hat{\boldsymbol{S}}_{i,i+1}\hat{\boldsymbol{S}}_{i+1,i+2}, \tag{A.283}$$

garantissant la cohérence globale du recollement des collisions.

b.iv.2.-iii Écriture compacte de l'onde de Bethe L'onde de Bethe Ansatz totale est obtenue par la projection sur le vecteur symétriseur $\mathbf{1}^T = (1, \dots, 1)$:

$$\varphi(x_1, \dots, x_N) = \mathbf{1}^T \left[\prod_{x_i < x_{i+1}} \hat{\boldsymbol{S}}_{i,i+1} \right] \boldsymbol{\Phi}_0(x_1, \dots, x_N) \tag{A.284}$$

Cette écriture montre que le Bethe Ansatz n'est pas un simple "bricolage" par morceaux, mais une construction orbitale rigoureuse où la matrice $\hat{\boldsymbol{U}} = \prod_{x_i < x_{i+1}} \hat{\boldsymbol{S}}$ agit comme un opérateur de transport unitaire sur l'algèbre du groupe symétrique.

b.iv.3. Structure algébrique du Bethe Ansatz : Représentation régulière et opérateurs de Dunkl

Dans cette annexe, nous détaillons la construction de l'onde de Bethe Ansatz du modèle de Lieb–Liniger en tant qu'élément de l'algèbre de groupe $\mathbb{C}[S_N]$. Cette approche permet de transformer les conditions de raccordement analytiques en identités algébriques.

b.iv.3.-i L'espace de Hilbert permutationnel. On définit l'espace de Hilbert associé aux permutations de N particules, noté $\mathcal{H}_{\text{perm}} \equiv \mathbb{C}[S_N]$. Cet espace est muni de la base orthonormée $\{|P\rangle : P \in S_N\}$. On définit la représentation régulière gauche $\hat{\boldsymbol{L}}$ par :

$$\forall Q, P \in S_N, \quad \hat{\boldsymbol{L}}(Q)\,|P\rangle = |QP\rangle\,. \tag{A.285}$$

L'espace de configuration $\mathbb{R}^N$ est partitionné en $N!$ chambres de Weyl disjointes définies par :

$$\mathcal{Q}_P = \{(x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^N : x_{P_1} < x_{P_2} < \cdots < x_{P_N}\}. \tag{A.286}$$

b.iv.3.-ii Opérateurs de Dunkl et Intégrabilité. Pour inclure l'interaction de contact du modèle de Lieb–Liniger, on introduit les opérateurs de Dunkl $\mathcal{D}_i$. Pour une constante de couplage c, ils s'écrivent :

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_i = \hat{\boldsymbol{\partial}}_i - \frac{c}{2} \sum_{j \neq i} \operatorname{sgn}(x_i - x_j) \hat{\boldsymbol{L}}(\tau_{ij}), \tag{A.287}$$

où τ_{ij} est la transposition échangeant les indices i et j. Ces opérateurs satisfont la propriété cruciale de commutativité $[\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_i, \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_j] = 0$.

Lien avec le Hamiltonien. Le Hamiltonien de Lieb–Liniger émerge naturellement comme le Laplacien associé à ces dérivées covariantes. En considérant la restriction à l'espace des fonctions bosoniques (totalement symétriques), on montre que :

$$-\sum_{i=1}^{N} \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_i^2 \varphi_{\text{sym}} = \left(-\sum_{i=1}^{N} \hat{\boldsymbol{\partial}}_i^2 + 2c \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j) \right) \varphi_{\text{sym}}. \tag{A.288}$$

La distribution de Dirac $\delta(x)$ apparaît mathématiquement comme la dérivée de la fonction signe $\operatorname{sgn}(x)$ présente dans la définition de l'opérateur de Dunkl.

b.iv.3.-iii Construction de l'onde de Bethe. On cherche une fonction propre commune des $\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_i$ sous la forme d'un vecteur de $\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}_{\text{perm}}$. Soit $|\Phi_0(\mathbf{x})\rangle = e^{i \sum k_j x_j} |\text{id}\rangle$ l'état de référence dans la chambre fondamentale. L'onde de Bethe Ansatz complète s'écrit de manière compacte :

$$\varphi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{1} | \hat{\boldsymbol{U}}(\mathbf{x})\,|\Phi_0(\mathbf{x})\rangle\,, \tag{A.289}$$

où $\langle \mathbf{1}| = \sum_{P \in S_N} \langle P|$ assure la symétrisation bosonique et $\hat{\boldsymbol{U}}(\mathbf{x})$

$$\hat{\boldsymbol{U}} = \prod_{x_i < x_{i+1}} \hat{\boldsymbol{S}}, \tag{A.290}$$

est l'opérateur de transport défini par le produit ordonné des matrices de diffusion :

$$\hat{\boldsymbol{S}}_{ij} = -S(k_i - k_j) \hat{\boldsymbol{L}}(\tau_{ij}) + \big(1 + S(k_i - k_j)\big)\, \hat{\mathbf{1}}. \tag{A.291}$$

L'équivalence avec le Bethe Ansatz coordonné usuel est garantie par le fait que $\hat{\boldsymbol{S}}_{ij}$ réalise la condition de saut de la dérivée aux frontières des chambres de Weyl.

b.iv.3.-iv Vérification pour $N = 2$.

Le Laplacien de Dunkl Pour expliciter le mécanisme, considérons le cas de deux particules. Le Laplacien de Dunkl s'écrit :

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\mathrm{D}} = -(\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_1^2 + \hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_2^2). \tag{A.292}$$

En utilisant la propriété $\partial_x \mathrm{sgn}(x) = 2\delta(x)$, le carré de l'opérateur $\mathcal{D}_1$ agissant sur une fonction φ est :

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{D}}}_1^2 \varphi = \hat{\boldsymbol{\partial}}_1^2 \varphi - c\delta(\hat{\boldsymbol{x}}_1 - (\hat{\boldsymbol{x}}_2)\hat{\boldsymbol{L}}(\tau_{12})\varphi + \frac{c^2}{4}\varphi. \tag{A.293}$$

Pour un état bosonique $\varphi(x_1, x_2) = \varphi(x_2, x_1)$, l'action de $\hat{\boldsymbol{L}}(\tau_{12})$ est l'identité. En sommant les contributions de $i = 1, 2$, les termes de contact se cumulent pour donner le potentiel $2c\delta(x_1 - x_2)$, confirmant l'équivalence avec le modèle de Lieb–Liniger au premier ordre en c.

Vérification pour $N = 2$: Retour à la forme coordonnée Considérons le secteur $x_1 < x_2$. L'onde de Bethe Ansatz coordonnée est la projection de l'état symétrisé construit sur l'algèbre de groupe. En imposant la condition de saut de Lieb–Liniger à la frontière $x_1 = x_2$, le calcul des coefficients d'onde plane aboutit à :

$$\varphi(x_1, x_2) = e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} - S(k_1 - k_2) e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}. \tag{A.294}$$

On vérifie immédiatement les deux limites physiques :

- **Bosons libres** ($c \to 0$) : $S \to -1$, on retrouve l'onde plane symétrisée $\varphi = e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}$.
- **Limite de Tonks–Girardeau** ($c \to \infty$) : $S \to 1$, on retrouve le déterminant de Slater (pseudoféminisation) $\varphi = e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} - e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}$.

b.iv.3.-v La limite de Tonks-Girardeau ($c \to \infty$).

Le formalisme de l'algèbre de groupe est particulièrement puissant pour décrire la limite de couplage infini, dite limite de Tonks-Girardeau. Dans ce régime, la phase de diffusion tend vers une valeur universelle :

$$\lim_{c \to \infty} S(k_i - k_j) = 1. \tag{A.295}$$

L'opérateur de transport $\hat{\boldsymbol{U}}(\mathbf{x})$ se réduit alors à une signature de la permutation P associée à la chambre de Weyl Q_P :

$$\hat{\boldsymbol{U}}(\mathbf{x}) \, |\mathrm{id}\rangle = \epsilon(P) \, |P\rangle \quad \text{pour } \mathbf{x} \in Q_P. \tag{A.296}$$

L'onde de Bethe Ansatz prend alors la forme remarquable :

$$\varphi_{TG}(\mathbf{x}) = \left| \det_{1 \le a, j \le N} \left(e^{i k_a x_j} \right) \right|. \tag{A.297}$$

Cette structure montre que les bosons à forte répulsion miment le principe d'exclusion de Pauli : la probabilité de trouver deux particules au même point s'annule ($|\varphi|^2 \to 0$ quand $x_i \to x_j$), un phénomène de fermionisation parfaitement capturé par la structure de l'algèbre de groupe où $\hat{\boldsymbol{S}}_{ij}$ agit comme un générateur de parité.

b.iv.4. De l'Analyse Coordonnée à l'Analyse de Bethe Algébrique

Bien que le Bethe Ansatz coordonné permette de construire explicitement les fonctions d'onde, le calcul des observables et des normes nécessite une structure plus puissante : l'Analyse de Bethe Algébrique (Algebraic Bethe Ansatz (ABA)), qui repose sur la théorie de la matrice R et l'algèbre de Yang–Baxter.

b.iv.4.-i Structure algébrique et matrice de monodromie

Équation de Yang–Baxter et Intégrabilité La validité de la forme factorisée de l'opérateur de transport $\hat{\boldsymbol{U}}(\mathbf{x})$ repose sur l'équation de Yang–Baxter. Pour trois particules, elle s'énonce comme l'égalité des processus de diffusion $123 \to 321$ via deux séquences de collisions binaires distinctes :

$$\hat{\boldsymbol{S}}_{12}(k_{12})\hat{\boldsymbol{S}}_{13}(k_{13})\hat{\boldsymbol{S}}_{23}(k_{23}) = \hat{\boldsymbol{S}}_{23}(k_{23})\hat{\boldsymbol{S}}_{13}(k_{13})\hat{\boldsymbol{S}}_{12}(k_{12}), \tag{A.298}$$

où $k_{ij} = k_i - k_j$. Cette relation assure que les opérateurs de Dunkl commutent et que l'onde de Bethe est un vecteur propre bien défini de l'Hamiltonien, indépendamment de l'ordre dans lequel les particules interagissent.

la chaîne XXX Dans le cadre de l'ABA, on traite le modèle de Lieb–Liniger comme la limite continue d'un modèle de réseau (typiquement la chaîne XXX). On introduit une matrice de monodromie $T(\lambda)$ agissant sur un espace auxiliaire $\mathbb{C}^2$, encodant les relations de commutation globales :

$$T(\lambda) = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{A}}(\lambda) & \hat{\boldsymbol{B}}(\lambda) \\ \hat{\boldsymbol{C}}(\lambda) & \hat{\boldsymbol{D}}(\lambda) \end{pmatrix}, \tag{A.299}$$

où les opérateurs $\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\boldsymbol{B}}, \hat{\boldsymbol{C}}, \hat{\boldsymbol{D}}$ agissent sur l'espace de Fock du système. Ces opérateurs satisfont la relation fondamentale RLL (ou relation de Yang–Baxter) :

$$R(\lambda - \mu)\,(T(\lambda) \otimes T(\mu)) = (T(\mu) \otimes T(\lambda))\,R(\lambda - \mu). \tag{A.300}$$

L'opérateur $\hat{\boldsymbol{B}}(\lambda)$ joue un rôle central : il agit comme un opérateur de création de quasi-particules (ou "magnons" dans le langage des spins) de rapidité λ.

Les états propres de Bethe (non normalisés) sont générés par l'action successive de $B(\lambda)$ sur le vide de référence $|0\rangle$ (l'état sans particule) :

$$|\{k_a\}\rangle = \hat{\boldsymbol{B}}(k_1)\hat{\boldsymbol{B}}(k_2)\cdots\hat{\boldsymbol{B}}(k_N)\,|\rangle\,. \tag{A.301}$$

La correspondance avec la fonction d'onde coordonnée φ est donnée par la projection sur la base de position :

$$\varphi_{\{k\}}(x_1, \ldots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\,\langle|\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x_N)\,|\{k_a\}\rangle\,. \tag{A.302}$$

b.iv.4.-ii Équations de Bethe et Matrice de Gaudin Pour un système de taille L avec conditions périodiques, les rapidités $\{k_j\}$ ne sont plus libres mais contraintes par les équations de Bethe Ansatz. Sous leur forme logarithmique, elles s'écrivent :

$$Lk_j + \sum_{\ell \neq j} \theta(k_j - k_\ell) = 2\pi I_j, \quad I_j \in \mathbb{Z} + \frac{N-1}{2}, \tag{A.303}$$

où le déphasage à deux corps est $\theta(k) = 2\arctan(k/c)$. La "densité" d'états dans l'espace des rapidités est capturée par la matrice de Gaudin G, définie comme la Jacobienne du système :

$$G_{ab} = \frac{\partial}{\partial k_b}\left[Lk_a + \sum_{\ell \neq a} \theta(k_a - k_\ell)\right]. \tag{A.304}$$

Explicitement, en introduisant le noyau de collision $\Delta(k) = \frac{2c}{c^2+k^2}$, la matrice s'écrit :

$$G_{ab} = \delta_{ab}\left[L + \sum_{\ell \neq a} \Delta(k_a - k_\ell)\right] - (1 - \delta_{ab})\Delta(k_a - k_b). \tag{A.305}$$

b.iv.4.-iii Normes et Formule de Gaudin–Korepin Le calcul de la norme au sens de $L^2(\mathbb{R}^N)$ est un résultat profond dû à Gaudin et Korepin. Elle exprime que le volume occupé par l'état dans l'espace de Hilbert est proportionnel au déterminant de sa structure de phase :

$$\langle\{k_a\}|\{k_a\}\rangle = N! \prod_{a<b} \frac{(k_a - k_b)^2 + c^2}{(k_a - k_b)^2} \det G. \tag{A.306}$$

Le préfacteur provient de la normalisation spécifique des opérateurs $B(k)$ par rapport aux ondes planes. Cette formule est la pierre angulaire pour le calcul des fonctions de corrélation, car elle permet de normaliser les facteurs de forme $\langle\{k_a\}|\,\hat{\boldsymbol{O}}\,|\{k'_a\}\rangle$.

Remarque sur la limite de Tonks–Girardeau ($c \to \infty$) : Dans cette limite, le noyau $\Delta(k) \to 0$ et la matrice de Gaudin devient purement diagonale ($G_{ab} \to L\delta_{ab}$). La norme se réduit alors à celle d'un système de fermions libres, confirmant la validité du formalisme à travers tous les régimes de couplage.

La structure du Bethe Ansatz coordonné peut être interprétée comme une dynamique dans l'algèbre de groupe $\mathbb{C}[S_N]$, où les opérateurs de diffusion à deux corps réalisent une représentation déformée du groupe symétrique, conformément aux relations de Yang–Baxter [LL63 ; Tak99 ; Fra16 ; Yan67 ; Pol92 ; Che87].

À notre connaissance, l'écriture explicite du Bethe Ansatz sous la forme d'un produit d'opérateurs agissant dans $\mathbb{C}[S_N]$ n'est généralement pas présentée ainsi dans la littérature standard. Elle constitue néanmoins une reformulation naturelle et compacte des relations d'échange entre amplitudes issues du BA coordonné.

b.v. Formulation variationnelle unifiée des spectres de la RMT

Nous montrons que la théorie des matrices aléatoires gaussiennes et le modèle de Lieb–Liniger dans la limite de faible interaction se ramènent au *même problème variationnel* pour une densité spectrale continue.

b.v.1. Problème variationnel général

Soit $\rho(x) \geq 0$ une densité normalisée, supportée sur un intervalle compact $\mathcal{I} \subset \mathbb{R}$,

$$\int_{\mathcal{I}} \rho(x)\, dx = \mathcal{N}, \tag{A.307}$$

où $\mathcal{N}$ représente soit le nombre de degrés de liberté ($\mathcal{N} = 1$ en RMT normalisée), soit la densité linéique de particules ($\mathcal{N} = n = N/L$ pour Lieb–Liniger).

On considère la fonctionnelle d'énergie

$$\mathcal{F}[\rho] = \int_{\mathcal{I}} V(x)\, \rho(x)\, dx - \frac{1}{2} \int_{\mathcal{I}}\int_{\mathcal{I}} \rho(x)\rho(y)\, \log|x-y|\, dx\, dy. \tag{A.308}$$

Le premier terme décrit un *confinement externe*, le second une *répulsion logarithmique universelle*.

—

b.v.2. Cas des matrices aléatoires gaussiennes

b.v.2.-i Définition.

Définition b..4 (GOE(N)). Le Gaussian Orthogonal Ensemble (GOE) est l'ensemble des matrices aléatoires :

$$H \in \mathbb{R}^{N\times N} \quad \text{telles que} \quad {}^tH = H \tag{A.309}$$

muni d'une mesure de probabilité gaussienne invariante par conjugaison orthogonale :

$$H \;\mapsto\; OH^tO, \qquad O \in O(N) \quad \text{(orthogonale)}. \tag{A.310}$$

b.v.2.-ii Distribution des éléments matriciels.

Construction $M \in \mathrm{GOE}(N)$. Supposons $A_{ij} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ réels indépendants et

$$H = \frac{A + {}^tA}{\sqrt{2N}}. \tag{A.311}$$

- Pour $i \neq j$: Comme M_{ij} et M_{ji} sont indépendants,

$$M_{ij} + M_{ji} \sim \mathcal{N}(0, 2\sigma^2), \tag{A.312}$$

  donc les éléments hors-diagonale H_{ij} pour $i \neq j$ sont indépendants, gaussiens

$$H_{ij} \sim \mathcal{N}\left(0, \frac{\sigma^2}{n}\right). \tag{A.313}$$

- Pour $i = j$:

$$H_{ii} = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{2M_{ii}}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{2}{n}}\, M_{ii}, \tag{A.314}$$

  donc les éléments diagonaux H_{ii} sont indépendants, gaussiens

$$H_{ii} \sim \mathcal{N}\left(0, \frac{2\sigma^2}{n}\right). \tag{A.315}$$

Le facteur $1/\sqrt{N}$ est essentiel : il garantit une limite spectrale finie quand $N \to \infty$.

C'est exactement la structure du GOE.

Mesure gaussienne matricielle complète. La mesure s'écrit formellement

$$\mathbb{P}(H)\, dH = \frac{1}{Z_N} \exp\left(-\frac{N}{2\sigma^2} \operatorname{Tr}(H^2)\right) \prod_{i \leq j} dH_{ij} \tag{A.316}$$

avec

$$Z_N = \int \exp\left(-\frac{N}{2\sigma^2} \operatorname{Tr}(H^2)\right) \prod_{i \leq j} dH_{ij}, \quad \text{et} \quad \operatorname{Tr}(H^2) = \sum_{i,j} H_{ij}^2. \tag{A.317}$$

Pourquoi cette forme ?

- c'est l'unique mesure :
  - gaussienne
  - invariante par rotations orthogonales
- elle est l'analogue matriciel du potentiel quadratique $V(x) = x^2/(2\sigma^2)$.

Générateur fondamental. Ici $\langle \bullet \rangle$ désignent l'espérance statistique par rapport à la mesure du GOE :

$$\langle O(H) \rangle = \int O(H)\, \mathbb{P}(H)\, dH \tag{A.318}$$

Autrement dit : une **moyenne sur l'ensemble des réalisations aléatoires** de la matrice H.

Les valeurs propres $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$ sont adimensionnelles.
La densité spectrale moyenne est définie par

$$\rho(\lambda) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^{N} \delta(\lambda - \lambda_i) \right\rangle. \tag{A.319}$$

L'objet générateur fondamental est la *résolvante*

$$G(z) = \frac{1}{N} \left\langle \operatorname{Tr} \frac{1}{z - H} \right\rangle, \qquad z \in \mathbb{C} \backslash \mathbb{R}, \tag{A.320}$$

C'est le transformé de Stieltjes de la densité spectrale.

Comme

$$\frac{1}{z-H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{|i\rangle\langle i|}{z-\lambda_i} \tag{A.321}$$

on obtient

$$G(z) = \frac{1}{N}\left\langle \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{z-\lambda_i} \right\rangle = \int d\lambda\, \frac{\rho(\lambda)}{z-\lambda} \tag{A.322}$$

Pour tout réel x,

$$\frac{1}{x+i0^+} = \text{P.V.}\frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \tag{A.323}$$

En prenant $z = \lambda + i\varepsilon$,

$$\Im(G(\lambda + i0^+)) = -\pi\rho(\lambda). \tag{A.324}$$

Dont la discontinuité imaginaire donne la densité spectrale :

$$\rho(\lambda) = -\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0^+} \Im(G(\lambda+i\varepsilon)). \tag{A.325}$$

La résolvante est l'objet analytique fondamental, la densité est sa discontinuité.

Origine de l'énergie fonctionnelle. Lorsque l'on diagonalise H,

$$H = O\Lambda^t O, \qquad \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N) \tag{A.326}$$

la mesure induite sur les valeurs propres est

$$\mathbb{P}(\{\lambda_i\}) \propto \exp\Big(-\frac{N}{2\sigma^2}\sum_i \lambda_i^2 + \sum_{i\le j} \log|\lambda_i - \lambda_j| \Big) \tag{A.327}$$

Interprétation physique (gaz de Coulomb 1D)

- premier terme : **confinement harmonique**
- second terme : **répulsion logarithmique**

Dans le cas du GOE, les variables spectrales sont les valeurs propres $x = \lambda$, adimensionnelles, et

$$V_{\text{RMT}}(\lambda) = \frac{\lambda^2}{2\sigma^2}. \tag{A.328}$$

La fonctionnelle variationnelle s'écrit

$$\mathcal{F}_{\text{RMT}}[\rho] = \int d\lambda\, \rho(\lambda)\frac{\lambda^2}{2\sigma^2} - \frac{1}{2}\int d\lambda\, d\lambda'\, \rho(\lambda)\rho(\lambda')\log|\lambda-\lambda'|. \tag{A.329}$$

Équation de point col (condition d'optimalité). On minimise $\mathcal{F}_{\text{RMT}}[\rho]$ sous la contrainte (La condition d'Euler–Lagrange, obtenue par variation sous contrainte de normalisation, est)

$$\int \rho(\lambda)d\lambda = 1. \tag{A.330}$$

La variation fonctionnelle donne

$$\frac{\lambda^2}{2\sigma^2} - 2\int d\lambda'\rho(\lambda')\log|\lambda-\lambda'| = \text{cste}. \tag{A.331}$$

En dérivant par rapport à λ :

$$\text{P.V.}\int \frac{\rho(\lambda')}{\lambda-\lambda'}\,d\lambda' = \frac{\lambda}{\sigma^2}. \tag{A.332}$$

Cette équation **intégrale de Hilbert** admet pour solution unique la loi du **demi-cercle de Wigner**.

Résolution : loi du demi-cercle de Wigner. On cherche une solution supportée sur $[-2\sigma, 2\sigma]$.

La transformée de Hilbert de

$$\rho(\lambda) = \frac{1}{2\pi\sigma^2}\sqrt{4\sigma^2 - \lambda^2} \tag{A.333}$$

est (A.332).

information

Lecture conceptuelle.

- GOE = modèle universel de chaos quantique
- résolvante = Green fonction spectral
- énergie fonctionnelle = champ moyen Coulombien
- demi-cercle = distribution d'équilibre universelle

b.v.3. Cas des matrices aléatoires gaussiennes unitaires

b.v.3.-i Définition.

Définition b..5 (*GUE*(*N*)). Le Gaussian Unitary Ensemble (GUE) est l'ensemble des matrices aléatoires :

$$H \in \mathbb{C}^{N\times N} \quad \text{telles que} \quad H^\dagger = H \tag{A.334}$$

muni d'une mesure de probabilité gaussienne invariante par conjugaison unitaire :

$$H \;\mapsto\; UHU^\dagger, \qquad U \in U(N) \quad \text{(unitaire)}. \tag{A.335}$$

b.v.3.-ii Distribution des éléments matriciels. On considère une matrice aléatoire hermitienne $M \in \mathrm{GUE}(N)$.

Les coefficients indépendants sont distribués selon :

— pour $i < j$, $M_{ij} = X_{ij} + iY_{ij}$ avec $X_{ij}, Y_{ij} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2/2)$,

— pour $i = j$, $M_{ii} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$.

La mesure jointe sur l'espace des matrices hermitiennes s'écrit

$$\mathbb{P}(M)\, dM \;\propto\; \exp\!\left(-\frac{N}{2\sigma^2}\mathrm{Tr}M^2\right) dM. \tag{A.336}$$

b.v.3.-iii Formulation en termes de valeurs propres. Dans le cas du GUE, les variables spectrales sont les valeurs propres $x = \lambda$, adimensionnelles, et le potentiel de confinement est

$$V_{\mathrm{RMT}}(\lambda) = \frac{\lambda^2}{2\sigma^2}. \tag{A.337}$$

La fonctionnelle variationnelle associée à la densité spectrale $\rho(\lambda)$, normalisée par $\int \rho(\lambda)\, d\lambda = 1$, est

$$\mathcal{F}_{\mathrm{RMT}}[\rho] = \int d\lambda\, \rho(\lambda)\frac{\lambda^2}{2\sigma^2} - \int d\lambda\, d\lambda'\, \rho(\lambda)\rho(\lambda')\log|\lambda - \lambda'|. \tag{A.338}$$

On note l'absence du facteur $1/2$ devant le terme logarithmique, car la répulsion de niveau est ici de type $\beta = 2$.

b.v.3.-iv Équation d'Euler–Lagrange. La condition stationnaire, obtenue par variation sous contrainte de normalisation, donne l'équation intégrale singulière

$$\mathrm{P.V.}\int \frac{\rho(\lambda')}{\lambda - \lambda'}\, d\lambda' = \frac{\lambda}{\sigma^2}. \tag{A.339}$$

Cette équation de Hilbert admet une solution unique à support compact, donnée par la loi du demi-cercle de Wigner :

$$\rho(\lambda) = \frac{1}{2\pi\sigma^2}\sqrt{4\sigma^2 - \lambda^2}, \qquad |\lambda| \le 2\sigma. \tag{A.340}$$

b.v.4. Cas du gaz de Lieb–Liniger à faible couplage

Dans le modèle de Lieb–Liniger, les variables spectrales sont les rapidités $x = k$ (de dimension m^{-1}). Dans la limite de faible interaction $c \to 0^+$, l'équation intégrale de Bethe Ansatz se ramène à une équation variationnelle équivalente [22].

La fonctionnelle effective s'écrit

$$\mathcal{F}_{\mathrm{LL}}[\rho] = \int dk\, \rho(k) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{g_{\mathrm{eff}}}{2} \int dk\, dk'\, \rho(k)\rho(k') \log|k - k'| + O(c), \tag{A.342}$$

où $g_{\mathrm{eff}} \propto \hbar^2/(mn)$ encode l'effet cumulatif du déphasage de diffusion.

$\mathcal{F}_{\mathrm{LL}}[\rho]$ coïncide formellement avec l'énergie d'un gaz de Coulomb bidimensionnel (log-gaz). Cette structure est précisément celle qui gouverne les ensembles invariants unitaires de matrices aléatoires.

b.v.4.-i Correspondance avec l'ensemble unitaire gaussien (GUE). Dans ce cadre, la distribution jointe des quasi-moments prend la forme universelle

$$P(\{k_j\}) \propto \prod_{i<j} |k_i - k_j|^\beta \exp\left(-\sum_j V(k_j)\right), \qquad \beta = 2, \tag{A.343}$$

où $V(k) \sim k^2$ joue le rôle d'un potentiel de confinement effectif. La valeur $\beta = 2$ identifie sans ambiguïté la statistique des quasi-moments à celle de l'ensemble unitaire gaussien (GUE), caractérisée par une répulsion logarithmique des niveaux et des corrélations de type Wigner–Dyson.

La condition stationnaire

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{\mathrm{LL}}}{\delta \rho(k)} = \mu \tag{A.344}$$

conduit à

$$\mathrm{P.V.} \int \frac{\rho(k')}{k - k'}\, dk' = \alpha\, k, \qquad \alpha = \frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{n}, \tag{A.345}$$

qui est formellement identique à l'équation (A.332) à une renormalisation des constantes près.

b.v.4.-ii Dans la limite thermodynamique Dans la limite thermodynamique $N, L \to \infty$ à densité fixe $n = N/L$, les équations de Bethe Ansatz se transforment en une équation intégrale pour la densité de rapidités $\rho(k)$:

$$\rho(k) + \int_{-Q}^{Q} \frac{c}{\pi[(k - k')^2 + c^2]}\, \rho(k')\, dk' = \frac{1}{2\pi}, \tag{A.346}$$

où $c = \frac{mg}{\hbar^2}$ a la dimension d'un inverse de longueur.

Dans la limite de faible interaction $c \to 0^+$, le noyau devient singulier et l'équation se réduit à une équation de Hilbert :

$$\mathrm{P.V.} \int \frac{\rho(k')}{k - k'}\, dk' = \alpha\, k, \tag{A.347}$$

où le coefficient α dépend des paramètres physiques $(m, \hbar, n)$ mais conserve la même structure fonctionnelle.

Cette équation est strictement identique à celle obtenue pour la densité spectrale en théorie des matrices aléatoires. Sa solution normalisée est

$$\rho(k) = \frac{1}{\pi Q^2}\sqrt{Q^2 - k^2}, \qquad \int_{-Q}^{Q} \rho(k)\, dk = n, \tag{A.348}$$

avec Q jouant le rôle d'un paramètre de confinement effectif.

Le demi-cercle apparaît ainsi comme la solution universelle d'un gaz unidimensionnel soumis à une répulsion effective entre paramètres spectraux et à un confinement quadratique.

22.
$$\lim_{c\to 0^+} \left(\Phi(k) \equiv 2\arctan\left(\frac{k}{c}\right)\right) = \pi\,\mathrm{sgn}(k) - \frac{2c}{k} + O(c^3), \tag{A.341}$$
ce qui induit une interaction effective de type répulsion entre les quasi-moments, malgré le caractère faiblement interactif du gaz réel.

b.v.4.-iii Phrase clé (interprétation conceptuelle). Le demi-cercle de Wigner n'est pas une propriété spécifique des matrices aléatoires : c'est la distribution universelle d'équilibre de tout système spectral intégrable dans lequel des paramètres spectraux (valeurs propres ou rapidités) subissent une répulsion logarithmique effective et un confinement quadratique, la trace jouant dans chaque cas le rôle d'opérateur générateur des invariants du système.

b.v.5. Solution universelle et unicité

Le problème variationnel (A.308) avec un potentiel quadratique $V(x) = ax^2$ admet une solution unique supportée sur $[-R, R]$:

$$\rho(x) = \frac{2a}{\pi}\sqrt{R^2 - x^2}, \qquad R^2 = \frac{\mathcal{N}}{a}. \tag{A.349}$$

Cette solution minimise globalement la fonctionnelle et correspond à une distribution d'équilibre électrostatique en deux dimensions.

b.v.5.-i Principe d'universalité (énoncé formel). Tout système spectral dont la densité continue minimise une fonctionnelle composée (i) d'un confinement quadratique et (ii) d'une répulsion logarithmique paire appartient à la même classe d'universalité, indépendamment de l'origine microscopique des degrés de liberté.

Le demi-cercle de Wigner est la manifestation canonique de cette universalité.

b.v.5.-ii Matrice de Gaudin et fluctuations universelles. Cette correspondance est renforcée par l'analyse de la matrice de Gaudin, qui gouverne la norme des états de Bethe Ansatz et les fluctuations des rapidités. Dans le régime $c \to 0$, cette matrice s'identifie à la matrice de covariance des fluctuations des valeurs propres du GUE, établissant un lien direct entre intégrabilité quantique et matrices aléatoires [Gau83 ; For10].

b.v.5.-iii Fluctuations extrêmes et loi de Tracy–Widom. Dans la limite thermodynamique, les fluctuations des quasi-moments situés au bord du support spectral, et en particulier de la plus grande rapidité $k_{\max}$, sont gouvernées par la loi universelle de Tracy–Widom. Cette propriété, bien connue dans la théorie des matrices aléatoires, apparaît ici comme une signature universelle du régime faiblement interactif du modèle de Lieb–Liniger, reliant les statistiques extrêmes d'un système intégrable quantique à celles des valeurs propres de matrices hermitiennes de grande taille [DM06 ; SQ13].

b.v.5.-iv Discussion. Ainsi, bien que le régime $c \to 0$ corresponde physiquement à un gaz de bosons presque idéal, la structure corrélée des racines de Bethe Ansatz révèle une universalité de type matrices aléatoires. Cette correspondance illustre de manière remarquable comment l'intégrabilité quantique encode, même à interaction infinitésimale, des corrélations collectives gouvernées par les lois universelles de la RMT.

b.vi. Méthode de Scattering Inverse et hiérarchie d'invariants

Le modèle de Lieb–Liniger peut être appréhendé comme la version quantifiée de l'équation de Schrödinger non-linéaire (NLSE) unidimensionnelle. Dans la limite classique, cette équation est intégrable via la **Méthode de Scattering Inverse (IST)** [BDB23 ; ZS72], qui agit comme une généralisation non-linéaire de la transformée de Fourier.

b.vi.1. L'IST comme Transformée de Fourier non-linéaire

Pour une équation linéaire (comme l'équation de Schrödinger libre), la transformée de Fourier décompose une condition initiale $\Psi(x, 0)$ en modes normaux e^{ikx} qui évoluent indépendamment. Dans le cas du modèle NLSE avec interaction, l'IST suit un schéma analogue mais plus profond :

- **Problème Direct :** On associe au champ $\Psi(x)$ des données de scattering (coefficients de réflexion et valeurs propres discrètes) via l'analyse spectrale d'un opérateur de Lax.
- **Évolution :** Dans l'espace des données de scattering, l'évolution temporelle est triviale et linéaire, chaque mode évoluant avec sa propre phase.

- **Problème Inverse :** Le champ $\Psi(x,t)$ est reconstruit à partir des données évoluées via les équations intégrales de Gelfand-Levitan-Marchenko (GLM).

Cette décomposition en "modes de scattering" est l'analogue classique direct de la décomposition de l'état quantique en rapidités de Bethe Ansatz $\{k_j\}$.

b.vi.2. Invariants et charges conservées

L'intégrabilité du modèle se manifeste par l'existence d'une infinité de charges conservées en involution $\{Q_n\}_{n=1}^{\infty}$, telles que $[H, Q_n] = 0$. Ces charges relient la description locale (en espace réel) à la description globale (en espace des moments).

b.vi.2.-i Représentation en termes de densité de rapidités. Pour un état macroscopique caractérisé par une densité de rapidités $\rho(p)$, les valeurs moyennes des charges conservées par unité de longueur s'écrivent :

$$q_n = \frac{\langle Q_n \rangle}{L} = \int_{-\infty}^{+\infty} p^n \rho(p) dp. \tag{A.350}$$

Ici, q_1, q_2, q_3 correspondent respectivement à la densité de particules, d'impulsion et d'énergie.

b.vi.2.-ii Représentation fonctionnelle classique. Pour le champ classique $\Psi(x)$, ces mêmes charges s'expriment comme des fonctionnelles locales faisant intervenir des dérivées d'ordre croissant :

$$Q_1 = \int |\Psi|^2 dx \tag{A.351}$$

$$Q_2 = \frac{1}{2i} \int (\Psi^* \partial_x \Psi - \Psi \partial_x \Psi^*) dx \tag{A.352}$$

$$Q_3 = \int \left(|\partial_x \Psi|^2 + c|\Psi|^4 \right) dx \quad \text{(Hamiltonien NLSE)} \tag{A.353}$$

Cette hiérarchie d'invariants est le socle sur lequel repose la GHD : chaque charge Q_n suit une équation de continuité locale, permettant de décrire l'évolution de $\rho(p,x,t)$ à l'échelle hydrodynamique [KIB93 ; FT87].

b.vi.3. Du Bethe Ansatz à la limite classique

Le lien entre les deux descriptions est assuré par le fait que les équations de Bethe Ansatz, dans la limite de forte occupation (limite classique), se réduisent aux conditions de quantification des variables d'action-angle du système NLSE. Les rapidités p de la distribution $\rho(p)$ s'identifient alors au spectre continu de l'opérateur de Lax classique, unifiant ainsi la vision corpusculaire (Bethe Ansatz) et la vision ondulatoire (Fourier non-linéaire).

b.vi.4. Matrice de Lax, monodromie et structure spectrale en méthode de diffusion inverse

La méthode de diffusion inverse quantique (QISM) repose sur l'introduction d'un opérateur fondamental local, la *matrice de Lax* (ou opérateur de Lax local)

$$L_j(\lambda) \in \mathrm{End}\big(\mathbb{C}^2 \otimes \mathcal{H}_j\big), \tag{A.354}$$

qui agit matriciellement sur un espace auxiliaire $\mathbb{C}^2$ et opératoriellement sur l'espace de Hilbert local $\mathcal{H}_j$ du site j. La dépendance analytique en le paramètre spectral complexe λ encode l'intégrabilité du modèle.

b.vi.4.-i Exemple canonique. Pour la chaîne de spins XXX (spin 1/2), l'opérateur de Lax s'écrit

$$L_j(\lambda) = \lambda \mathbf{1} + i \mathcal{P}_{aj} = \begin{pmatrix} \lambda + iS_j^z & iS_j^- \\ iS_j^+ & \lambda - iS_j^z \end{pmatrix}, \tag{A.355}$$

où $\mathcal{P}_{aj}$ est l'opérateur de permutation entre l'espace auxiliaire a et le site j, et $S_j^{\pm}, S_j^z$ sont les opérateurs de spin locaux.

b.vi.4.-ii Relation fondamentale RLL. L'intégrabilité est garantie par l'équation d'entrelacement

$$R(\lambda-\mu)\big(L_j(\lambda)\otimes L_j(\mu)\big)=\big(L_j(\mu)\otimes L_j(\lambda)\big)R(\lambda-\mu), \tag{A.356}$$

où $R(\lambda)$ est la matrice R solution de l'équation de Yang–Baxter. Cette relation encode la diffusion factorisée à deux corps et est à l'origine de la commutativité des observables intégrables.

b.vi.4.-iii Matrice de monodromie. La matrice de monodromie est définie comme le produit ordonné des opérateurs de Lax locaux :

$$T(\lambda)=L_N(\lambda)\cdots L_1(\lambda)\in\mathrm{End}\big(\mathbb{C}^2\otimes\mathcal{H}\big),\qquad \mathcal{H}=\bigotimes_{j=1}^{N}\mathcal{H}_j. \tag{A.357}$$

Elle peut s'écrire sous forme matricielle dans l'espace auxiliaire :

$$T(\lambda)=\begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{A}}(\lambda) & \hat{\boldsymbol{B}}(\lambda)\\ \hat{\boldsymbol{C}}(\lambda) & \hat{\boldsymbol{D}}(\lambda)\end{pmatrix}, \tag{A.358}$$

où $\hat{\boldsymbol{A}},\hat{\boldsymbol{B}},\hat{\boldsymbol{C}},\hat{\boldsymbol{D}}$ sont des opérateurs agissant sur l'espace de Hilbert global $\mathcal{H}$.

b.vi.4.-iv Matrice de transfert. La matrice de transfert est définie comme la trace dans l'espace auxiliaire :

$$\tau(\lambda)=\mathrm{Tr}_a\,T(\lambda)=\hat{\boldsymbol{A}}(\lambda)+\hat{\boldsymbol{D}}(\lambda). \tag{A.359}$$

Grâce à l'équation RLL, elle vérifie la propriété fondamentale de commutativité

$$[\tau(\lambda),\tau(\mu)]=0,\qquad \forall\,\lambda,\mu\in\mathbb{C}, \tag{A.360}$$

ce qui assure l'existence d'une infinité de charges conservées en involution.

b.vi.4.-v Charges conservées. Dans la limite du grand paramètre spectral, le développement asymptotique de la matrice de transfert engendre les charges intégrables :

$$\log\tau(\lambda)=\sum_{n\geq 0}\frac{Q_n}{\lambda^n}. \tag{A.361}$$

Les premiers termes correspondent à des observables physiques fondamentales (impulsion, Hamiltonien), tandis que les Q_n supérieurs caractérisent l'intégrabilité complète du modèle.

b.vi.4.-vi Rapidités et structure analytique. Les valeurs propres de $\tau(\lambda)$ sont des fonctions méromorphes du paramètre spectral. Les *rapidités* $\{k_j\}$ apparaissent comme les zéros et pôles de ces valeurs propres :

$$\tau(\lambda)=a(\lambda)\prod_j\frac{\lambda-k_j+ic}{\lambda-k_j}+d(\lambda)\prod_j\frac{\lambda-k_j-ic}{\lambda-k_j}, \tag{A.362}$$

où c est la constante de couplage du modèle.

Ces paramètres k_j jouent le rôle de variables spectrales fondamentales, analogues aux valeurs propres d'un opérateur auto-adjoint.

b.vi.4.-vii Analogie spectrale. La structure analytique de la matrice de transfert est directement analogue à celle de la résolvante en théorie des matrices aléatoires :

Théorie des matrices	Méthode de diffusion inverse
Hamiltonien H	Monodromie $T(\lambda)$
Résolvante $G(z)$	Matrice de transfert $\tau(\lambda)$
Valeurs propres λ_i	Rapidités k_j
Discontinuité analytique	Zéros/pôles analytiques

Dans les deux cadres, l'information physique complète est contenue dans la structure analytique d'une fonction génératrice, et le spectre émerge comme l'ensemble de ses singularités.

Bibliographie

[LL63] Elliott H. Lieb et Werner Liniger. “Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State”. In : *Phys. Rev.* 130 (4 mai 1963), p. 1605-1616. doi : 10.1103/PhysRev.130.1605. url : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.1605.

[Yan67] C. N. Yang. “Some Exact Results for the Many-Body Problem in One Dimension with Repulsive Delta-Function Interaction”. In : *Physical Review Letters* 19 (1967), p. 1312-1315. doi : 10.1103/PhysRevLett.19.1312.

[ZS72] V. E. Zakharov et A. B. Shabat. “Exact Theory of Two-dimensional Self-focusing and One-dimensional Self-modulation of Waves in Nonlinear Media”. In : *Soviet Physics JETP* 34 (1972), p. 62-69.

[CDL73a] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu et Franck Laloë. *Mécanique quantique. Tome I*. Enseignement des sciences. Paris : Hermann, 1973. isbn : 9782705660741.

[CDL73b] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu et Franck Laloë. *Mécanique quantique. Tome II*. Enseignement des sciences. Paris : Hermann, 1973. isbn : 9782705661212.

[Gau83] Michel Gaudin. *La fonction d’onde de Bethe*. Masson, 1983.

[Che87] Ivan Cherednik. “A New Interpretation of Gelfand–Tzetlin Bases”. In : *Duke Mathematical Journal* 54.2 (1987), p. 563-577.

[FT87] Ludwig D. Faddeev et Leon A. Takhtajan. *Hamiltonian Methods in the Theory of Solitons*. Berlin : Springer-Verlag, 1987.

[Pol92] Alexios P. Polychronakos. “Exchange Operator Formalism for Integrable Systems of Particles”. In : *Physical Review Letters* 69 (1992), p. 703-705. doi : 10.1103/PhysRevLett.69.703.

[KIB93] V. Korepin, A. Izergin et N. Bogoliubov. “Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions”. In : *Journal of Soviet Mathematics* 31 (fév. 1993). doi : 10.1007/BF02107233.

[Tak99] Minoru Takahashi. *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*. Cambridge University Press, 1999. isbn : 9780521551434.

[Kah01] Jean-Pierre Kahane. *Nécessité et pièges des définitions mathématiques*. Voir en particulier p. 93 : Qu’es-ce que l’Univer ? Paris : Odile Jacob, 2001.

[DM06] David S. Dean et Satya N. Majumdar. “Large Deviations of Extreme Eigenvalues of Random Matrices”. In : *Physical Review Letters* 97 (2006), p. 160201. doi : 10.1103/PhysRevLett.97.160201.

[Gou08a] Xavier Gourdon. *Les maths en tête. Algèbre – 2ème édition*. 2e éd. Paris : Ellipse, 2008.

[Gou08b] Xavier Gourdon. *Les maths en tête. Analyse – 2ème édition*. 2e éd. Paris : Ellipse, 2008.

[For10] Peter J. Forrester. *Log-Gases and Random Matrices*. Princeton University Press, 2010. doi : 10.1515/9781400835416.

[SQ13] G. Schehr et J. Quastel. “The Tracy-Widom distribution and its applications”. In : *ArXiv preprint arXiv :1304.1321* (2013). Revue sur l’universalité de Tracy-Widom dans les systèmes intégrables.

[Mou14] Ayman Moussa. *Rappels de Cours – Distributions tempérées*. https://www.ljll.fr/moussa/pdf/enseignements/rappel_cours_distrib_temp.pdf. Notes de cours. 2014.

[Fra16] Fabio Franchini. *An Introduction to Integrable Techniques for One-Dimensional Quantum Systems*. T. 940. Sept. 2016. isbn : 9783319484860. doi : 10.1007/978-3-319-48487-7.

[App19] Walter Appel. *Mathématiques pour la physique et les physiciens ! 5ème édition revue, corrigée et (encore) augmentée*. 5e éd. Paris : Éditions H & K, 2019. isbn : 978-2-35141-339-5.

[Har20] M. Hare. *Abrégé de mécanique quantique à l’usage de la préparation à l’agrégation de physique*. http://ressources.agreg.phys.ens.fr/static/Cours-TD/Hare/Cours2020.pdf. Notes de cours et TD. 2020.

[Bab21] Jean-François BABADJIAN. *Chapitre 5 – Dualité dans les espaces de Lebesgue*. https://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~jean-francois.babadjian/files/Analyse-M1/Chapitre5.pdf. Notes de cours, Master 1 Analyse. 2021.

[Gér21] Christian GÉRARD. *Notes de cours sur la transformation de Fourier*. https://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~christian.gerard/meca/notes-fourier.pdf. Master de Mécanique, notes de cours. 2021.

[Mar21] François De MARÇAY. *Transformation de Fourier*. https://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~joel.merker/Enseignement/Analyse-de-Fourier/transformee-de-Fourier.pdf. Cours de mathématiques appliquées, analyse de Fourier. 2021.

[Rei22] Tomas REIS. "On the Resurgence of Renormalons in Integrable Theories". Disponible aussi sur arXiv :2209.15386. Thèse N° 5676. Université de Genève, Faculté des Sciences, Section de Mathématiques, 2022. URL : https://arxiv.org/pdf/2209.15386.

[BDB23] Yasser BEZZAZ, Léa DUBOIS et Isabelle BOUCHOULE. *Rapidity distribution within the defocusing non-linear Schrödinger equation model*. 2023. arXiv : 2301.11098 [cond-mat.quant-gas]. URL : https://arxiv.org/abs/2301.11098.

[Leb24] Gilles LEBORGNE. *Introduction à la théorie des Distributions*. Notes de cours de l'ISIMA, Deuxième année. http://www.isima.fr/leborgne. Nov. 2024. URL : https://perso.isima.fr/leborgne/IsimathDistributions/distrib.pdf.

Annexe B

Action de $\hat{P}$ et $\hat{H}$ sur $|\{\theta_a\}\rangle$

Sommaire

a. Action de $\hat{P}$ sur $|\{\theta_a\}\rangle$ 203
a.i. Utilisation de la définition de $\hat{P}$ intégrée par parties 203
a.ii. Application à l'état à N particules 203
b. Action de $\hat{H}$ sur $|\{\theta_a\}\rangle$ 204
b.i. Réecriture de l'hamiltonien 204
b.ii. Application à l'état à N particules 204

L'état $|\{\theta_a\}\rangle$ s'écrit :

$$|\{\theta_a\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int dx_1 \cdots dx_N \varphi_{\{\theta_a\}}(\{x_a\}) \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x_1) \cdots \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x_N) |\emptyset\rangle . \tag{B.1}$$

a. Action de $\hat{P}$ sur $|\{\theta_a\}\rangle$

a.i. Utilisation de la définition de $\hat{P}$ intégrée par parties

Cela peut être expliqué en utilisant l'opérateur du moment $\hat{\boldsymbol{P}}$ (I.30) comme exemple. Tout d'abord, nous intégrons (I.30) par parties pour représenter $\hat{\boldsymbol{P}}$ sous la forme (avec $\hbar = m = 1$) :

$$\hat{\boldsymbol{P}} = i \int \left[\hat{\boldsymbol{\partial}}_x \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x) \right] \hat{\mathbf{\Psi}}(x) dx \tag{B.2}$$

a.ii. Application à l'état à N particules

On fais agir $\hat{\boldsymbol{P}}$ de (B.2) sur l'état $|\{\theta_a\}\rangle$ de (B.1) :

$$\hat{\boldsymbol{P}} |\{\theta_a\}\rangle = \frac{i}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N z \, \varphi_{\{\theta_a\}}(\{x_a\}) \left[\hat{\boldsymbol{\partial}}_x \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(x) \right] \tag{B.3}$$

$$\times \sum_{k=1}^{N} \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(z_1) \cdots [\hat{\mathbf{\Psi}}(x), \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(z_k)] \cdots \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle \tag{B.4}$$

En utilisant les règles de commutation (I.17) il vient que

$$\hat{\boldsymbol{P}} |\{\theta_a\}\rangle = \frac{i}{\sqrt{N!}} \int d^N z \, \varphi_{\{\theta_a\}}(\{x_a\}) \tag{B.5}$$

$$\times \sum_{k=1}^{N} \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(z_1) \cdots \left[\hat{\boldsymbol{\partial}}_{z_k} \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(z_k) \right] \cdots \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(z_N) |\emptyset\rangle. \tag{B.6}$$

Nous intégrons maintenant par parties par rapport à z_k pour obtenir

$$\hat{\boldsymbol{P}}\,|\{\theta_a\}\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{N!}}\int d^N z\left\{-i\sum_{k=1}^{N}\hat{\boldsymbol{\partial}}_{z_k}\varphi_{\{\theta_a\}}(\{x_a\})\right\}\times\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)|\emptyset\rangle. \tag{B.7}$$

b. Action de $\hat{H}$ sur $|\{\theta_a\}\rangle$

b.i. Réecriture de l'hamiltonien

L'hamiltonien (I.39) se réécrit avec $\hbar = 2m = 1$ et $c = g/2$:

$$\hat{\boldsymbol{H}} \;=\; \int dx\left[-\left[\hat{\boldsymbol{\partial}}_x^2\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x)\right]\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)+c\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\right]. \tag{B.8}$$

b.ii. Application à l'état à N particules

On fais agir $\hat{\boldsymbol{H}}$ définie en (B.8) sur l'état $|\{\theta_a\}\rangle$ de (B.1) :

$$\hat{\boldsymbol{H}}\,|\{\theta_a\}\rangle \;=\; -\frac{1}{\sqrt{N!}}\int dx\int d^N z\,\varphi_{\{\theta_a\}}(\{x_a\})\left[\hat{\boldsymbol{\partial}}_x^2\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x)\right]\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)|\emptyset\rangle \tag{B.9}$$

$$+\frac{c}{\sqrt{N!}}\int dx\int d^N z\,\varphi_{\{\theta_a\}}(\{x_a\})\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)|\emptyset\rangle \tag{B.10}$$

Les règles de commutations (I.17) impliquent que

$$\begin{aligned}\left[\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x),\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)\right] &= \textstyle\sum_{i=0}^{N}\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\delta}}(x-z_i)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)\\ \left[\hat{\boldsymbol{\partial}}_x\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(x),\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z)\right] &= 0\end{aligned} \tag{B.11}$$

En utilisant ces dernier règles de commutations et la définition d'état de Fock (I.16) , la premiers partie de l'application de l'hamiltonien sur l'état $|\{\theta_a\}\rangle$, (B.10) de simplifie en

$$-\frac{1}{\sqrt{N!}}\int d^N z\,\varphi_{\{\theta_a\}}(\{x_a\})\sum_{i=1}^{N}\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\left[\hat{\boldsymbol{\partial}}_{z_i}^2\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_i)\right]\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)|0\rangle \tag{B.12}$$

Et en faisant deux integration par partie selon la variable z_i , cette premier partie devient

$$-\frac{1}{\sqrt{N!}}\int d^N z\sum_{i=1}^{N}\hat{\boldsymbol{\partial}}_{z_i}^2\,\varphi_{\{\theta_a\}}(\{x_a\})\,\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)|0\rangle \tag{B.13}$$

Pour la seconde partie , en remarquant que les règles de commutations (I.17) impliquent que

$$\left[\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x),\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z)\right] \;=\; 2\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\hat{\boldsymbol{\delta}}(x-z) \tag{B.14}$$

et en remplaçant $\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)$ par $\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)$ dans (B.11) il vient que

$$\left[\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x),\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)\right] \;=\; 2\sum_{i=0}^{N}\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\hat{\boldsymbol{\delta}}(x-z_i)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N) \tag{B.15}$$

et en injectant (B.11), (B.15) devient

$$\left[\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x),\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)\right] \;=\; \begin{cases} 2\displaystyle\sum_{i=0}^{N}\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\delta}}(x-z_i)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)\hat{\boldsymbol{\Psi}}(x)\\ +\\ 2\displaystyle\sum_{i=0}^{N}\sum_{j=i+1}^{N}\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdots\hat{\boldsymbol{\delta}}(x-z_i)\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_{i+1})\cdots\hat{\boldsymbol{\delta}}(x-z_j)\cdots\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)\end{cases} \tag{B.16}$$

En utilisant la régle de comutation (B.16) et la définition de l'état de Fock (I.16) , la seconde partie de (B.10) devient

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\int d^N z\; 2c \sum_{1\le i<j\le N} \hat{\boldsymbol{\delta}}(z_i - z_j)\, \varphi_{\{\theta_a\}}(\{x_a\})\, \hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdot\cdots\cdot\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)|\emptyset\rangle \tag{B.17}$$

en utilisant (B.13) et (B.17) , (B.13) devient

$$\hat{\boldsymbol{H}}\,|\{\theta_a\}\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{N!}}\int d^N z\, \left[\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}_N\, \varphi_{\{\theta_a\}}(\{x_a\})\right]\; \hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_1)\cdot\cdots\cdot\hat{\boldsymbol{\Psi}}^\dagger(z_N)|\emptyset\rangle \tag{B.18}$$

avec

$$\hat{\boldsymbol{\mathcal{H}}}_N \;=\; -\sum_{i=1}^{N} \hat{\boldsymbol{\partial}}^2_{z_i} + 2c \sum_{1\le i<j\le N} \hat{\boldsymbol{\delta}}(z_i - z_j) \tag{B.19}$$

Annexe C

Réduction GHD $\longrightarrow$ transport d'Euler lorsque le *dressing* est l'identité

Sommaire

a. Point de départ : équation GHD. **207**
b. Hypothèse "sans interactions" : $^{\mathrm{dr}} = \mathrm{Id}$. **207**
c. Hiérarchie des moments (charges nues). **207**
d. Trois premiers moments ("masse", "momentum", "énergie"). **208**
e. Lien (et limite) avec les équations d'Euler classiques. **208**
f. Encadré : fermeture et équations d'Euler fermées. **209**

a. Point de départ : équation GHD.

L'équation GHD s'écrit, pour la distribution de rapidité $\rho(x,\theta,t)$,

$$\partial_t \rho + \partial_x\big(v^{\mathrm{eff}}\rho\big) + \partial_\theta\big(a^{\mathrm{eff}}\rho\big) = 0. \tag{C.1}$$

Les vitesses/accélérations *effectives* sont obtenues par habillage.

b. Hypothèse "sans interactions" : $^{\mathrm{dr}} = \mathrm{Id}$.

Si l'opérateur d'habillage est l'identité (*no dressing*),

$$v = 2\pi\rho, \qquad v^{\mathrm{eff}}(\theta) \;\to\; \partial_\theta h(x,\theta), \qquad a^{\mathrm{eff}}(\theta) \;\to\; -\partial_x h(x,\theta),$$

où $h(x,\theta)$ est l'hamiltonien *nu* (par exemple $h = \varepsilon(\theta) + V(x)$). L'équation (C.1) devient alors une équation de transport collisionless (type Vlasov) :

$$\partial_t \rho + \partial_x\big(\partial_\theta h\,\rho\big) - \partial_\theta\big(\partial_x h\,\rho\big) = 0. \tag{C.2}$$

c. Hiérarchie des moments (charges nues).

Pour toute fonction test $f(\theta)$, définissons

$$q_{[f]}(x,t) = \int d\theta\, f(\theta)\,\rho(x,\theta,t), \qquad j_{[f]}(x,t) = \int d\theta\, f(\theta)\,\partial_\theta h\,\rho(x,\theta,t).$$

En multipliant (C.2) par $f(\theta)$ et en intégrant en θ, on obtient

$$\partial_t q_{[f]} + \partial_x j_{[f]} \;=\; -\int d\theta\, f'(\theta)\,\partial_x h\,\rho \;=\; -\,\partial_x V(x)\int d\theta\, f'(\theta)\,\rho, \tag{C.3}$$

où la dernière égalité vaut si $h(\theta,x) = \varepsilon(\theta) + V(x)$.

d. Trois premiers moments ("masse", "momentum", "énergie").

En choisissant $f(\theta) = 1,\ \theta,\ \theta^2/2$, on obtient respectivement :

$$\text{(Continuité)} \qquad \partial_t n + \partial_x(nu) = 0, \qquad n \equiv q_{[1]}, \quad nu \equiv j_{[1]}, \tag{C.4}$$

$$\text{(Quantité de mouvement)} \qquad \partial_t(nu) + \partial_x\big(q_{[\theta^2]}\big) = -\,n\,\partial_x V, \qquad q_{[\theta^2]} = \int d\theta\,\theta^2\rho, \tag{C.5}$$

$$\text{(Énergie cinétique)} \qquad \partial_t q_{[\theta^2/2]} + \partial_x\big(j_{[\theta^2/2]}\big) = -\,(\partial_x V)\,q_{[\theta]}, \quad j_{[\theta^2/2]} = \int d\theta\,\tfrac{\theta^2}{2}\,\partial_\theta h\,\rho. \tag{C.6}$$

Remarque : pour $h = \frac{\theta^2}{2} + V(x)$, on a $\partial_\theta h = \theta$, d'où $j_{[\theta^2/2]} = \int d\theta\,\frac{\theta^2}{2}\,\theta\,\rho$.

e. Lien (et limite) avec les équations d'Euler classiques.

Les équations (C.4)–(C.6) ont la structure des lois de conservation d'Euler (masse, quantité de mouvement, énergie). Cependant, **le système n'est pas fermé en l'état** : par exemple, $\partial_t(nu)$ fait intervenir $q_{[\theta^2]}$, qui requiert une relation de fermeture (*équation d'état*) pour être exprimé en fonction de n et u (p. ex. hypothèse de *local Maxwell–Boltzmann* menant à une pression $\mathcal{P}$).

Conclusion. Lorsque $^{\mathrm{dr}} = \mathrm{Id}$, la GHD se réduit à une cinétique collisionless dont les moments reproduisent *formellement* les équations d'Euler. La véritable différence entre hydrodynamique classique et GHD complète réside donc dans le *dressing* : dès que $^{\mathrm{dr}} \neq \mathrm{Id}$, les vitesses et charges deviennent *effectives* et la dynamique s'écarte des lois d'Euler classiques.

f. Encadré : fermeture et équations d'Euler fermées.

Pour obtenir un système d'équations d'Euler *fermées* à partir de la hiérarchie (C.4)–(C.6), il faut fournir une *relation de fermeture* (ou *équation d'état*) reliant les moments d'ordre supérieur aux variables hydrodynamiques de base (n, u).
Un choix simple et classique, valable pour une cinétique collisionless de type Vlasov (système *classique*), est d'hypothétiser une *distribution locale thermique* (Maxwellienne) :

$$\rho(x,\theta,t) \;=\; n(x,t)\,\frac{1}{\sqrt{2\pi T_{\rm loc}(x,t)}}\,\exp\Big(-\frac{(\theta-u(x,t))^2}{2T_{\rm loc}(x,t)}\Big),$$

où $T_{\rm loc}(x,t)$ est la température locale (unités choisies telles que $k_B = 1$). Sous cette hypothèse on obtient les moments

$$q_{[\theta]} = nu, \qquad q_{[\theta^2]} = n\big(u^2 + T_{\rm loc}\big).$$

On définit alors la pression cinétique comme la partie convective soustraite au second moment :

$$\mathcal{P} \;=\; q_{[\theta^2]} - \frac{q_{[\theta]}^2}{n} \;=\; n\,T_{\rm loc}.$$

Dans le cas d'un gaz classique 1D idéal la contribution interne par particule vaut $e_{\rm int} = \frac{1}{2}T_{\rm loc}$ (pour $k_B = 1$).
En remplaçant ces expressions dans (C.4)–(C.6) on obtient des équations d'Euler *fermées* avec les sources dues au potentiel externe :

$$\begin{aligned}
&\partial_t n + \partial_x(nu) = 0,\\
&\partial_t(nu) + \partial_x(nu^2 + \mathcal{P}) = -\,n\,\partial_x V,\\
&\partial_t E + \partial_x\big(u(E+\mathcal{P})\big) = -\,nu\,\partial_x V,
\end{aligned}$$

où l'énergie volumique totale s'écrit

$$E(x,t) \;=\; \tfrac{1}{2}nu^2 \;+\; nV \;+\; ne_{\rm int},$$

et le terme $-nu\,\partial_x V$ à droite de l'équation d'énergie représente le travail du champ externe (force × vitesse).

Forme vectorielle compacte. En posant l'état vectoriel $U = (n,\ nu,\ E)^\top$ et le flux $F(U) = (nu,\ nu^2+\mathcal{P},\ u(E+\mathcal{P}))^\top$, les équations s'écrivent

$$\partial_t U + \partial_x F(U) = S(U),$$

où la source $S(U)$ regroupe les termes dus au potentiel externe, par exemple

$$S(U) = \big(0,\ -n\partial_x V,\ -nu\,\partial_x V\big)^\top.$$

Remarque importante. L'hypothèse d'une Maxwellienne locale est une approximation *classique* de fermeture : elle est justifiée pour des gaz classiques proches d'un équilibre local. Pour des gaz quantiques (par exemple le modèle de Lieb–Liniger), la distribution locale d'équilibre n'est pas une Maxwell–Boltzmann mais plutôt un état thermique quantique (Gibbs) ou, dans le cas d'un système intégrable, un état GGE local ; de plus les effets d'interaction et le *dressing* modifient les relations entre moments. Par conséquent, dans le contexte de la GHD complète, la fermeture ne résulte pas automatiquement d'une hypothèse simple de type Maxwell–Boltzmann : il faut soit adopter une hypothèse adaptée (p.ex. fermeture empirique, développement en moments), soit utiliser le formalisme du dressing/du TBA pour exprimer exactement les relations entre moments et vitesses effectives.

Annexe D

Dérivation alternative des fluctuations de ρ

Sommaire

a. Réécriture de l'entropie de Yang–Yang **211**
b. Différentielle de l'action effective **212**
c. Fluctuations **212**
c.i. Fluctuations des facteurs d'occupation 212
c.ii. Opérateur d'habillage 212
c.iii. Fluctuations des distributions de rapidité 213
Bibliographie **213**

Dans cette annexe, nous proposons une seconde dérivation des fluctuations de la densité de rapidités ρ, différente de celle présentée au chapitre IV. Cette approche m'a été suggérée par Jérôme Dubail (Centre européen de sciences quantiques (CESQ)). Elle présente l'intérêt de passer directement par les fluctuations du facteur d'occupation ν, et constitue également une bonne occasion de manipuler les dérivées de l'opérateur *d'habillage*.

a. Réécriture de l'entropie de Yang–Yang

L'entropie de Yang–Yang s'écrit

$$\mathcal{S}_{YY} = \int d\theta \Big(\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)\Big)(\theta). \tag{D.1}$$

En introduisant le facteur d'occupation

$$\nu = \frac{\rho}{\rho_s}, \tag{D.2}$$

l'intégrande peut se réécrire sous la forme

$$\mathcal{S}_{YY} = \int d\theta \, s(\nu(\theta)) \, \rho_s(\theta), \tag{D.3}$$

où la fonction d'entropie locale est donnée par

$$s(\nu) = -\nu \ln \nu - (1 - \nu) \ln(1 - \nu). \tag{D.4}$$

b. Différentielle de l'action effective

On définit l'action effective comme

$$\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}, \tag{D.5}$$

où $\mathcal{W}$ est l'énergie généralisée,

$$\mathcal{W} = \int d\theta\, w(\theta)\, \rho(\theta). \tag{D.6}$$

Sa différentielle est donnée par

$$\delta(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}) = \int d\theta \left(\delta\nu\, s'(\nu)\, \rho_s + s(\nu)\, \delta\rho_s - w\, \delta\rho\right)(\theta). \tag{D.7}$$

En remarquant que

$$\delta\nu\, \rho_s = \delta\rho - \nu\, \delta\rho_s, \tag{D.8}$$

on réécrit (D.7) sous la forme

$$\delta(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}) = \int d\theta \left(\{s'(\nu) - w\}\delta\rho + \{s(\nu) - \nu\, s'(\nu)\}\delta\rho_s\right)(\theta). \tag{D.9}$$

On obtient alors la différentielle seconde :

$$\delta^2(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}) = \int d\theta \left(\delta\nu\, s''(\nu)\, \delta\rho - \nu\, \delta\nu\, s''(\nu)\, \delta\rho_s\right)(\theta). \tag{D.10}$$

En utilisant (D.8), on simplifie pour obtenir

$$\delta^2(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}) = \int d\theta \left((\delta\nu)^2\, s''(\nu)\, \rho_s\right)(\theta), \tag{D.11}$$

avec

$$s''(\nu) = -\frac{1}{\nu(1-\nu)}. \tag{D.12}$$

c. Fluctuations

c.i. Fluctuations des facteurs d'occupation

Les fluctuations du facteur d'occupation s'écrivent

$$\langle \delta\nu(\theta')\, \delta\nu(\theta)\rangle_w = -\left[L\frac{\delta^2(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})}{\delta\nu\, \delta\nu}\right]^{-1}(\theta, \theta'). \tag{D.13}$$

En injectant (D.11), il vient

$$\langle \delta\nu(\theta')\, \delta\nu(\theta)\rangle_w = -s''(\nu(\theta))\, \rho_s(\theta)\, \delta(\theta - \theta'), \tag{D.14}$$

qui est purement diagonale.

c.ii. Opérateur d'habillage

On rappelle la définition de l'opérateur d'habillage :

$$f^{\mathrm{dr}}_{[\nu]} = f + \frac{\Delta}{2\pi} \star (\nu\, f^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}). \tag{D.15}$$

En remarquant que

$$C(\theta, \lambda) = \left[\frac{\Delta(\lambda - \cdot)}{2\pi}\right]^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}(\theta), \tag{D.16}$$

qui est symétrique, on peut réécrire [DS17]

$$f^{\mathrm{dr}}_{[\nu]}(\theta) = \int d\lambda\, f(\lambda) \left(\delta(\theta - \lambda) + \nu(\lambda)\, C(\theta, \lambda)\right). \tag{D.17}$$

c.iii. Fluctuations des distributions de rapidité

On a vu que

$$2\pi\,\rho_s(\theta) \quad = \quad 1^{\rm dr}_{[\nu]}(\theta) = \int d\lambda \Big(\delta(\theta-\lambda) + \nu(\theta)\,C(\theta,\lambda)\Big), \tag{D.18}$$

d'où

$$2\pi\,\delta\rho_s(\theta) \quad = \quad \int d\lambda\, C(\theta,\lambda)\,\rho_s(\lambda)\,\delta\nu(\lambda). \tag{D.19}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}
\delta\rho(\theta) &= \rho_s(\theta)\delta\nu(\theta) + \nu(\theta)\delta\rho_s(\theta) && \text{(D.20)}\\
&= \int d\lambda\,\delta(\theta-\lambda)\rho_s(\lambda)\,\delta\nu(\lambda) + \int d\lambda\,\nu(\theta)\,C(\theta,\lambda)\,\rho_s(\lambda)\,\delta\nu(\lambda), && \text{(D.21)}\\
&= \int d\lambda \Big(\delta(\theta-\lambda) + \nu(\theta)\,C(\theta,\lambda)\Big)\rho_s(\lambda)\,\delta\nu(\lambda). && \text{(D.22)}
\end{aligned}$$

En réinjectant (D.11) et (D.22) dans la définition

$$\langle\delta\rho(\theta')\,\delta\rho(\theta)\rangle_w \quad = \quad -\left[L\frac{\delta^2(\mathcal{S}_{YY}-\mathcal{W})}{\delta\rho\,\delta\rho}\right]^{-1}(\theta,\theta'), \tag{D.23}$$

on obtient finalement

$$\begin{aligned}
\langle\delta\rho(\theta')\,\delta\rho(\theta)\rangle_w &= -\frac{1}{L}\int d\lambda\,\frac{\Big(\delta(\theta-\lambda)+\nu(\theta)\,C(\theta,\lambda)\Big)\Big(\delta(\theta'-\lambda)+\nu(\theta')\,C(\theta',\lambda)\Big)}{s''(\nu(\lambda))}\,\rho_s(\lambda) && \text{(D.24)}\\
&= \frac{1}{L}\,\mathcal{D}^{-1}(\theta,\theta') + \frac{1}{L}\,\mathcal{B}(\theta,\theta'), && \text{(D.25)}
\end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}^{-1}(\theta,\theta') &= \big(\rho_s(\theta)\,\nu(\theta)\,(1-\nu(\theta))\big)\,\delta(\theta-\theta'), && \text{(D.26)}\\
\mathcal{B}(\theta,\theta') &= \Big[\nu(\theta')\,\rho_s(\theta)\,\nu(\theta)(1-\nu(\theta)) + \nu(\theta)\,\rho_s(\theta')\,\nu(\theta')(1-\nu(\theta'))\Big]\,C(\theta,\theta') && \text{(D.27)}\\
&\quad +\nu(\theta)\,\nu(\theta')\int d\lambda\,\rho_s(\lambda)\,\nu(\lambda)\,(1-\nu(\lambda))\,C(\theta,\lambda)\,C(\theta',\lambda). && \text{(D.28)}
\end{aligned}$$

Cette expression coïncide numériquement avec le résultat obtenu en (IV.60).

Bibliographie

[DS17] Benjamin DOYON et Herbert SPOHN. "Drude Weight for the Lieb-Liniger Bose Gas". In : *SciPost Physics* 3.6 (déc. 2017). ISSN : 2542-4653. DOI : 10.21468/scipostphys.3.6.039. URL : http://dx.doi.org/10.21468/SciPostPhys.3.6.039.

Annexe E

Propriétés des facteurs d'homothétie

Sommaire

a. **Loi de puissance des facteurs homothétiques** **215**
b. **Équivalence entre $f(\lambda)$ et $\mu(n)$** **215**

a. Loi de puissance des facteurs homothétiques

Théorème a..1 (Loi de puissance)**.** *Si le facteur $f(\lambda)$ est bien défini indépendamment de $n > 0$ (ce qui est le cas pour les solutions homothétiques), alors f est une loi de puissance.*

Démonstration. Posons $g(n) = \mu'(n) > 0$ ou < 0 (*i.e.* μ strictement monotone). La définition de f équivaut à l'existence d'une fonction $\chi(\lambda) = 1/f(\lambda)$ telle que

$$g(\lambda n) = \chi(\lambda)\, g(n) \qquad (\forall\, \lambda, n > 0).$$

En prenant $n = 1$, on a $\chi(\lambda) = g(\lambda)/g(1)$. Donc, pour tous $a, b > 0$,

$$\chi(ab) = \frac{g(ab)}{g(1)} = \frac{\chi(a)\, g(b)}{g(1)} = g(a)\, g(b),$$

c'est-à-dire que χ est *multiplicative*. Sous une hypothèse physique très faible (continuité, mesurabilité ou simple localement bornée), toute fonction multiplicative sur $\mathbb{R}_+^*$ est de la forme

$$\chi(\lambda) = \lambda^{\alpha-1} \quad \Rightarrow \quad f(\lambda) = \lambda^{1-\alpha}.$$

□

b. Équivalence entre $f(\lambda)$ et $\mu(n)$

Théorème b..1. *Les expressions*

$$f(\lambda) = \lambda^{1-\alpha} \quad \textit{et} \quad \mu(n) \propto n^{\alpha}$$

sont équivalentes.

Démonstration. 1. 1. Si $\mu(n) = C\, n^{\alpha}$ avec $C \neq 0$:
Alors $\mu'(n) = C\alpha\, n^{\alpha-1}$. Par conséquent,

$$f(\lambda) = \frac{C\alpha\, n^{\alpha-1}}{C\alpha\, (\lambda n)^{\alpha-1}} = \lambda^{1-\alpha}.$$

2. Réciproque : si $f(\lambda) = \lambda^{1-\alpha}$ pour tout $\lambda > 0$ et $n > 0$: Posons $g(n) = \mu'(n)$. L'hypothèse s'écrit

$$\frac{g(n)}{g(\lambda n)} = \lambda^{1-\alpha} \quad \Longleftrightarrow \quad g(\lambda n) = \lambda^{\alpha-1} g(n),$$

pour tout $n > 0$ et tout $\lambda > 0$.
Fixons $n_0 > 0$ et définissons $\varphi(\lambda) \equiv g(\lambda n_0)$. La relation ci-dessus donne

$$\varphi(\lambda) = \lambda^{\alpha-1}\, \varphi(1),$$

donc $\varphi(\lambda) = C_1 \lambda^{\alpha-1}$ avec $C_1 = g(n_0)$. En remplaçant $\lambda = x/n_0$, on obtient pour tout $x > 0$

$$g(x) = C_1\, x^{\alpha-1}.$$

Ainsi, $g(n) = \mu'(n) = C\, n^{\alpha-1}$ avec C constant. En intégrant (si $\alpha \neq 0$), on a

$$\mu(n) \propto n^{\alpha}.$$

Pour $\alpha = 0$, $\mu'(n) = C\, n^{-1}$ et $\mu(n) = C \ln n + \text{const}$.

□

Remarque b..2. La démonstration utilise la propriété fonctionnelle multiplicative $g(\lambda n) = \lambda^{\alpha-1} g(n)$. Sous une hypothèse faible de continuité (ou dérivabilité) en n, cette équation force la forme de puissance $g(n) \propto n^{\alpha-1}$. Sans régularité, des solutions pathologiques peuvent exister mais ne sont pas physiquement pertinentes dans le contexte thermodynamique.

Annexe F

Polarisabilité dynamique et potentiel dipolaire optique

Sommaire

a. Polarisabilité scalaire, vectorielle et tensorielle dans les états fins 218
b. Interprétation physique 218
c. Cas des atomes alcalins (ex. Rubidium) 219
Bibliographie 219

Cette annexe constitue une réécriture et une adaptation pédagogique de l'article [LSR13] que j'ai étudié pour la mise en place du piégeage dipolaire.

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

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

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

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

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 $\hbar\omega_{g\to e} = \hbar\omega_e - \hbar\omega_g$ la différence d'énergie angulaire entre états $|e\rangle$ et $|g\rangle$, on obtient :

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

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 :

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

avec

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

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 :

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

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

a. 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.

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

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

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

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 :

$$V^{EE}_{nJ} \quad = \quad -\frac{1}{4}|\mathcal{E}|^2\left[\alpha^s_{nJ} - i\,\alpha^v_{nJ}\,\frac{(\vec{\boldsymbol{u}}^*\times\vec{\boldsymbol{u}})\cdot\vec{\boldsymbol{J}}}{2J}+\alpha^T_{nJ}\,\frac{3[(\vec{\boldsymbol{u}}^*\cdot\vec{\boldsymbol{J}})(\vec{\boldsymbol{u}}\cdot\vec{\boldsymbol{J}})+(\vec{\boldsymbol{u}}\cdot\vec{\boldsymbol{J}})(\vec{\boldsymbol{u}}^*\cdot\vec{\boldsymbol{J}})]-2\vec{\boldsymbol{J}}^2}{2J(2J-1)}\right].$$

Les coefficients $\alpha^s_{nJ}, \alpha^v_{nJ}, \alpha^T_{nJ}$ sont reliés aux polarisabilités réduites par :

$$\alpha^s_{nJ} \;=\; \frac{1}{\sqrt{3(2J+1)}}\,\alpha^{(0)}_{nJ}, \quad \alpha^v_{nJ} \;=\; -\sqrt{\frac{2J}{(J+1)(2J+1)}}\,\alpha^{(1)}_{nJ}, \quad \alpha^T_{nJ} \;=\; -\sqrt{\frac{2J(2J-1)}{3(J+1)(2J+1)(2J+3)}}\,\alpha^{(2)}_{nJ}.$$

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 $(\vec{\boldsymbol{u}}^*\times\vec{\boldsymbol{u}})\cdot\vec{\boldsymbol{J}}$, et la contribution tensorielle ($K = 2$) dépend de la quadratique $(\vec{\boldsymbol{u}}\cdot\vec{\boldsymbol{J}})^2$. 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.

b. Interprétation physique

- **Terme scalaire** :α^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)** : α^v agit comme un champ magnétique fictif (optical Zeeman effect) le long de $\vec{\boldsymbol{B}}_{\text{fict}} \propto i(\vec{\boldsymbol{E}}^*\times\vec{\boldsymbol{E}})$. En effet, l'opérateur $i(\vec{\boldsymbol{u}}^*\times\vec{\boldsymbol{u}})\cdot\vec{\boldsymbol{J}}$ se comporte comme $\vec{\boldsymbol{J}}\cdot\vec{\boldsymbol{B}}_{\text{fict}}$. Ainsi la polarisation circulaire du champ ($i[\vec{\boldsymbol{u}}^*\times\vec{\boldsymbol{u}}] \neq 0$) donne un décalage dependendant de l'orientation de $\vec{\boldsymbol{J}}$ (analogue à un effet Zeeman), alors que pour une lumière linéaire ($\vec{\boldsymbol{u}}$ 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 $\mu_B g_J\,(\vec{\boldsymbol{J}}\cdot\vec{\boldsymbol{B}}_{\text{fict}})$
- **Terme tensoriel** : α^T introduit une anisotropie du potentiel selon l'orientation du moment angulaire par rapport à la polarisation du champ. Mathématiquement, le facteur $\frac{3[(\vec{\boldsymbol{u}}^*\cdot\vec{\boldsymbol{J}})(\vec{\boldsymbol{u}}\cdot\vec{\boldsymbol{J}})+(\vec{\boldsymbol{u}}\cdot\vec{\boldsymbol{J}})(\vec{\boldsymbol{u}}^*\cdot\vec{\boldsymbol{J}})]-2\vec{\boldsymbol{J}}^2}{2J(2J-1)}$ 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).

c. 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 α^s demeure. (à enlever)Quand on intègre l'hyperfine (moment nucléaire I de ^{87}Rb est 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 $\vec{\boldsymbol{J}}$ par $\vec{\boldsymbol{F}}$, 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 α 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.

Bibliographie

[LSR13] Fam LE KIEN, Philipp SCHNEEWEISS et Arno RAUSCHENBEUTEL. "Dynamical polarizability of atoms in arbitrary light fields : general theory and application to cesium". In : *The European Physical Journal D* 67.5 (mai 2013). ISSN : 1434-6079. DOI : 10.1140/epjd/e2013-30729-x. URL : http://dx.doi.org/10.1140/epjd/e2013-30729-x.

Annexe G

Pourquoi le terme tensoriel disparaît pour $J = \frac{1}{2}$

Le terme tensoriel du potentiel dipolaire s'exprime formellement comme la composante d'ordre 2 d'une combinaison de produits d'opérateurs angulaires $\{J_i J_j\}$. On peut le voir comme un tenseur sphérique de rang $k = 2$, noté $T^{(2)}$. Deux arguments simples montrent que cette contribution est nulle pour un état à $J = \frac{1}{2}$.

Argument par règles de sélection (Wigner–Eckart). Le théorème de Wigner–Eckart et les règles de couplage angulaire imposent des contraintes sur les éléments de matrice réduits d'un tenseur sphérique $T^{(k)}$. En particulier, pour des états $|J, m\rangle$, l'élément de matrice réduit $\langle J \| T^{(k)} \| J \rangle$ peut être non nul seulement si la condition triangulaire est satisfaite :

$$|J - J| \leq k \leq J + J \quad \Longrightarrow \quad 0 \leq k \leq 2J.$$

Autrement dit, le rang k du tenseur ne peut dépasser $2J$. Pour $J = \frac{1}{2}$ on a $2J = 1$: les tenseurs de rang $k \geq 2$ (dont $k = 2$) sont donc interdits — leur élément de matrice réduit s'annule. Par conséquent tous les composantes du tenseur d'ordre 2 ont des éléments de matrice nuls entre états de $J = \frac{1}{2}$, et le terme tensoriel ne contribue pas.

Intuition physique. Le terme tensoriel représente une interaction quadrupolaire : il mesure l'anisotropie de la distribution de charge (ou de la densité électronique) de rang 2 (quadrupôle) et la façon dont cette anisotropie couple à la polarisation de la lumière. Un système ayant un moment cinétique minimal $J = \frac{1}{2}$ ne peut porter qu'un dipôle (rang 1) mais pas de quadrupôle indépendant ; il est donc incapable de présenter une réponse tensorielle.

Justification par calcul élémentaire (esquisse). Pour rendre cela plus concret, on peut écrire les produits symétrisés d'opérateurs de spin pour $J = \frac{1}{2}$ en termes des matrices de Pauli σ_i :

$$J_i = \tfrac{\hbar}{2}\sigma_i, \qquad J_i J_j = \frac{\hbar^2}{4}\sigma_i \sigma_j.$$

Or les matrices de Pauli satisfont $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$, si bien que toute combinaison symétrique et sans trace construite à partir de $\sigma_i \sigma_j$ se réduit à une combinaison de l'identité et d'opérateurs de rang 1 (proportionnels à σ_k). Il n'existe donc pas de composante indépendante de rang 2 dans l'algèbre des opérateurs sur l'espace à deux dimensions. En particulier, la combinaison traceless/ quadrupolaire

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

s'annule (ou se réduit à une combinaison triviale proportionnelle à l'identité) lorsqu'elle est restreinte à l'espace $J = \frac{1}{2}$. Ceci confirme algébriquement l'argument angulaire précédent.

Remarque sur la forme normale de la fraction. La formule souvent écrite

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

est valable pour $J \geq 1$. Pour $J = \frac{1}{2}$ le dénominateur $2J(2J-1)$ s'annule formellement ; ceci indique simplement que l'écriture fractionnaire n'est pas définie là où le terme tensoriel n'a pas de sens physique. Le bon énoncé est : « pour $J < 1$ (en particulier $J = \frac{1}{2}$), la composante tensorielle est identiquement nulle ».

Conclusion. Pour les atomes alcalins dans leur état fondamental (configuration $nS_{1/2}$, donc $J = \frac{1}{2}$), la contribution tensorielle du potentiel dipolaire est strictement nulle. On conserve alors uniquement les termes scalaire et, éventuellement, vectoriel (ce dernier ne dépendant que de la polarisation elliptique/circulaire).

Bibliographie générale

[Rie60] Bernhard Riemann. “über die Fortpflanzung ebener Luftwellen von endlicher Schwingungsweite”. In : *Abhandlungen der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften in Göttingen* 8 (1860), p. 43-66. URL : http://eudml.org/doc/135717.

[Eis48] L. Eisenbud. “The formal properties of nuclear collisions”. Thèse de doct. Princeton U., 1948.

[Wig55] Eugene P. Wigner. “Lower Limit for the Energy Derivative of the Scattering Phase Shift”. In : *Phys. Rev.* 98 (1 avr. 1955), p. 145-147. DOI : 10.1103/PhysRev.98.145. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.98.145.

[Gir60] M. Girardeau. “Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension”. In : *Journal of Mathematical Physics* 1.6 (nov. 1960), p. 516-523. ISSN : 0022-2488. DOI : 10.1063/1.1703687. eprint : https://pubs.aip.org/aip/jmp/article-pdf/1/6/516/19055341/516_1_online.pdf. URL : https://doi.org/10.1063/1.1703687.

[Gau61] Michel Gaudin. “Sur la loi limite de l’espacement des valeurs propres d’une matrice aléatoire”. In : *Nuclear Physics* 25 (1961). Travail séminal de Gaudin liant ses travaux sur Bethe et les matrices aléatoires., p. 447-458.

[Lie63] Elliott H. Lieb. “Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. II. The Excitation Spectrum”. In : *Phys. Rev.* 130 (4 mai 1963), p. 1616-1624. DOI : 10.1103/PhysRev.130.1616. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.1616.

[LL63] Elliott H. Lieb et Werner Liniger. “Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State”. In : *Phys. Rev.* 130 (4 mai 1963), p. 1605-1616. DOI : 10.1103/PhysRev.130.1605. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.1605.

[Yan67] C. N. Yang. “Some Exact Results for the Many-Body Problem in One Dimension with Repulsive Delta-Function Interaction”. In : *Physical Review Letters* 19 (1967), p. 1312-1315. DOI : 10.1103/PhysRevLett.19.1312.

[YY69] C. N. Yang et C. P. Yang. “Thermodynamics of a One-Dimensional System of Bosons with Repulsive Delta-Function Interaction”. In : *Journal of Mathematical Physics* 10.7 (juill. 1969), p. 1115-1122. ISSN : 0022-2488. DOI : 10.1063/1.1664947. eprint : https://pubs.aip.org/aip/jmp/article-pdf/10/7/1115/19101094/1115_1_online.pdf. URL : https://doi.org/10.1063/1.1664947.

[ZS72] V. E. Zakharov et A. B. Shabat. “Exact Theory of Two-dimensional Self-focusing and One-dimensional Self-modulation of Waves in Nonlinear Media”. In : *Soviet Physics JETP* 34 (1972), p. 62-69.

[CDL73a] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu et Franck Laloë. *Mécanique quantique. Tome I*. Enseignement des sciences. Paris : Hermann, 1973. ISBN : 9782705660741.

[CDL73b] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu et Franck Laloë. *Mécanique quantique. Tome II*. Enseignement des sciences. Paris : Hermann, 1973. ISBN : 9782705661212.

[Per76] J. Percus. “Equilibrium state of a classical fluid of hard rods in an external field”. In : *Journal of Statistical Physics* 15 (1976), p. 505-511.

[ZZ79] Alexander B ZAMOLODCHIKOV et Alexey B ZAMOLODCHIKOV. “Factorized S-matrices in two dimensions as the exact solutions of certain relativistic quantum field theory models”. In : *Annals of Physics* 120.2 (1979), p. 253-291. ISSN : 0003-4916. DOI : https://doi.org/10.1016/0003-4916(79)90391-9. URL : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491679903919.

[IT80] Masakatsu ISHIKAWA et Hajime TAKAYAMA. “Solitons in a One-Dimensional Bose System with the Repulsive Delta-Function Interaction”. In : *Journal of the Physical Society of Japan* 49 (1980), p. 1242-1246. URL : https://api.semanticscholar.org/CorpusID:122386591.

[Spi80] Edward A. SPIEGEL. “Fluid dynamical form of the linear and nonlinear Schrödinger equations”. In : *Physica D : Nonlinear Phenomena* 1 (1980), p. 236-240. URL : https://api.semanticscholar.org/CorpusID:121071034.

[AS81] M. J. ABLOWITZ et H. SEGUR. *Solitons and the Inverse Scattering Transform*. SIAM, 1981.

[Fey82] Richard P. FEYNMAN. “Simulating physics with computers”. In : *International Journal of Theoretical Physics* 21.6-7 (juin 1982), p. 467-488. DOI : 10.1007/BF02650179.

[BDS83] C. BOLDRIGHINI, R. L. DOBRUSHIN et Y. M. SUKHOV. “One-dimensional hard rod caricature of hydrodynamics”. In : *Journal of Statistical Physics* 31 (1983), p. 577-616.

[Gau83] Michel GAUDIN. *La fonction d’onde de Bethe*. Masson, 1983.

[Che87] Ivan CHEREDNIK. “A New Interpretation of Gelfand–Tzetlin Bases”. In : *Duke Mathematical Journal* 54.2 (1987), p. 563-577.

[FT87] Ludwig D. FADDEEV et Leon A. TAKHTAJAN. *Hamiltonian Methods in the Theory of Solitons*. Berlin : Springer-Verlag, 1987.

[CDG88] Claude COHEN-TANNOUDJI, Jacques DUPONT-ROC et Gilbert GRYNBERG. *Processus d’interaction entre photons et atomes*. Savoirs actuels. InterEditions / Éditions du CNRS, 1988.

[Pol92] Alexios P. POLYCHRONAKOS. “Exchange Operator Formalism for Integrable Systems of Particles”. In : *Physical Review Letters* 69 (1992), p. 703-705. DOI : 10.1103/PhysRevLett.69.703.

[KIB93] V. KOREPIN, A. IZERGIN et N. BOGOLIUBOV. “Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions”. In : *Journal of Soviet Mathematics* 31 (fév. 1993). DOI : 10.1007/BF02107233.

[KBI93] V. E. KOREPIN, N. M. BOGOLIUBOV et A. G. IZERGIN. *Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions*. Cambridge University Press, 1993.

[KSS96] Yu. KAGAN, E. L. SURKOV et G. V. SHLYAPNIKOV. “Evolution of a Bose-condensed gas under variations of the confining potential”. In : *Phys. Rev. A* 54 (3 sept. 1996), R1753-R1756. DOI : 10.1103/PhysRevA.54.R1753. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.54.R1753.

[For+98] J. FORTAGH et al. “Miniaturized Wire Trap for Neutral Atoms”. In : *Phys. Rev. Lett.* 81 (24 déc. 1998), p. 5310-5313. DOI : 10.1103/PhysRevLett.81.5310. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.5310.

[Str98] S. STRINGARI. “Dynamics of Bose-Einstein condensed gases in highly deformed traps”. In : *Phys. Rev. A* 58 (3 sept. 1998), p. 2385-2388. DOI : 10.1103/PhysRevA.58.2385. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.58.2385.

[DCS99] Johannes DENSCHLAG, Donatella CASSETTARI et Jörg SCHMIEDMAYER. “Guiding Neutral Atoms with a Wire”. In : *Phys. Rev. Lett.* 82 (10 mars 1999), p. 2014-2017. DOI : 10.1103/PhysRevLett.82.2014. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.82.2014.

[GWO99] Rudolf GRIMM, Matthias WEIDEMÜLLER et Yurii B. OVCHINNIKOV. *Optical dipole traps for neutral atoms*. 1999. arXiv : physics/9902072 [physics.atom-ph]. URL : https://arxiv.org/abs/physics/9902072.

[RHH99] J. REICHEL, W. HÄNSEL et T. W. HÄNSCH. “Atomic Micromanipulation with Magnetic Surface Traps”. In : *Phys. Rev. Lett.* 83 (17 oct. 1999), p. 3398-3401. DOI : 10.1103/PhysRevLett.83.3398. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.83.3398.

[Tak99] Minoru TAKAHASHI. *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*. Cambridge University Press, 1999. ISBN : 9780521551434.

[Fol+00] Ron FOLMAN et al. "Controlling Cold Atoms using Nanofabricated Surfaces : Atom Chips". In : *Phys. Rev. Lett.* 84 (20 mai 2000), p. 4749-4752. DOI : 10.1103/PhysRevLett.84.4749. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.84.4749.

[Hän+01] Wolfgang HÄNSEL et al. "Bose–Einstein Condensation on a Microelectronic Chip". In : *Nature* 413 (nov. 2001), p. 498-501. DOI : 10.1038/35097032.

[Kah01] Jean-Pierre KAHANE. *Nécessité et pièges des définitions mathématiques*. Voir en particulier p. 93 : Qu'es-ce que l'Univer ? Paris : Odile Jacob, 2001.

[Ott+01] H. OTT et al. "Bose-Einstein Condensation in a Surface Microtrap". In : *Phys. Rev. Lett.* 87 (23 nov. 2001), p. 230401. DOI : 10.1103/PhysRevLett.87.230401. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.87.230401.

[Sch01] Nicolas SCHLOSSER. "Étude et réalisation de micro-pièges dipolaires optiques pour atomes neutres". Thèse de doctorat. Université Paris XI, 2001. URL : http://tel.ccsd.cnrs.fr/documents/archives0/00/00/11/95/index_fr.html.

[Kra+02] S KRAFT et al. "Anomalous longitudinal magnetic field near the surface of copper conductors". In : *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* 35.21 (oct. 2002), p. L469. DOI : 10.1088/0953-4075/35/21/102. URL : https://dx.doi.org/10.1088/0953-4075/35/21/102.

[Ste02] D. A. STECK. *Rubidium 87 D Line Data*. http://george.ph.utexas.edu/~dsteck/alkalidata/rubidium87numbers.pdf. Revision 1.6. 2002.

[Aus03] Christine AUSSIBAL. "Réalisation d'un condensat de Bose-Einstein sur une microstructure". Thèse de doct. Université Paris Sud - Paris XI, nov. 2003. URL : https://pastel.hal.science/tel-00004429.

[BBT03] Olivier BABELON, Denis BERNARD et Michel TALON. *Introduction to Classical Integrable Systems*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics. Online publication date : August 2009. Cambridge, UK : Cambridge University Press, 2003. ISBN : 9780511535024. DOI : https://doi.org/10.1017/CBO9780511535024.

[FLC03] J. N. FUCHS, X. LEYRONAS et R. COMBESCOT. "Hydrodynamic modes of a one-dimensional trapped Bose gas". In : *Phys. Rev. A* 68 (4 oct. 2003), p. 043610. DOI : 10.1103/PhysRevA.68.043610. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.68.043610.

[Mor+03] Henning MORITZ et al. "Exciting Collective Oscillations in a Trapped 1D Gas". In : *Phys. Rev. Lett.* 91 (25 déc. 2003), p. 250402. DOI : 10.1103/PhysRevLett.91.250402. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.250402.

[Est+04] J. ESTÈVE et al. "Role of wire imperfections in micromagnetic traps for atoms". In : *Phys. Rev. A* 70 (4 oct. 2004), p. 043629. DOI : 10.1103/PhysRevA.70.043629. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.70.043629.

[KWW04] Toshiya KINOSHITA, Trevor WENGER et David S. WEISS. "Observation of a one-dimensional Tonks-Girardeau gas". In : *Science* 305.5687 (2004), p. 1125-1128. DOI : 10.1126/science.1100700. URL : https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1100700.

[Meh04] Madan Lal MEHTA. "Random Matrices". In : (2004). La bible de la théorie des matrices aléatoires.

[Par+04] Belén PAREDES et al. "Tonks-Girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice". In : *Nature* 429.6989 (2004), p. 277-281. DOI : 10.1038/nature02530. URL : https://hal.science/hal-00002239.

[Tol+04] B. Laburthe TOLRA et al. "Observation of Reduced Three-Body Recombination in a Correlated 1D Degenerate Bose Gas". In : *Phys. Rev. Lett.* 92 (19 mai 2004), p. 190401. DOI : 10.1103/PhysRevLett.92.190401. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.190401.

[BI05] Immanuel BLOCH et IMMANUEL. "Ultracold quantum gases in optical lattices". In : *Nature Physics* 1 (oct. 2005), p. 23-30. DOI : 10.1038/nphys138.

[Mor+05] Henning MORITZ et al. “Confinement induced molecules in a 1D Fermi gas”. In : *Phys. Rev. Lett.* 94 (juin 2005), p. 210401. DOI : 10.1103/PhysRevLett.94.210401. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.210401.

[Sch+05] T. SCHUMM et al. “Matter-wave interferometry in a double well on an atom chip”. In : *Nature Phys.* 1.1 (2005), p. 57-62. DOI : 10.1038/nphys125.

[BS06] D. M. BRINK et C. V. SUKUMAR. “Majorana spin-flip transitions in a magnetic trap”. In : *Phys. Rev. A* 74 (3 sept. 2006), p. 035401. DOI : 10.1103/PhysRevA.74.035401. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.74.035401.

[Dar06] Benoît DARQUIÉ. “Manipulation d’atomes dans des pièges dipolaires microscopiques et émission contrôlée de photons par un atome unique”. Submitted on 14 Feb 2006. Thèse de doctorat. Physique Atomique [physics.atom-ph], 2006. URL : https://pastel.hal.science/tel-00011604v1.

[DM06] David S. DEAN et Satya N. MAJUMDAR. “Large Deviations of Extreme Eigenvalues of Random Matrices”. In : *Physical Review Letters* 97 (2006), p. 160201. DOI : 10.1103/PhysRevLett.97.160201.

[GLM06] Vittorio GIOVANNETTI, Seth LLOYD et Lorenzo MACCONE. “Quantum Metrology”. In : *Phys. Rev. Lett.* 96 (1 jan. 2006), p. 010401. DOI : 10.1103/PhysRevLett.96.010401. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.010401.

[KWW06] Toshiya KINOSHITA, Trevor WENGER et David WEISS. “A quantum Newton’s cradle”. In : *Nature* 440 (mai 2006), p. 900-3. DOI : 10.1038/nature04693.

[Tre+06] J.-B. TREBBIA et al. “Experimental Evidence for the Breakdown of a Hartree-Fock Approach in a Weakly Interacting Bose Gas”. In : *Phys. Rev. Lett.* 97 (25 déc. 2006), p. 250403. DOI : 10.1103/PhysRevLett.97.250403. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.250403.

[Rig+07] Marcos RIGOL et al. “Relaxation in a completely integrable many-body quantum system : an ab initio study of the dynamics of the highly excited states of 1D lattice hard-core bosons”. In : *Physical review letters* 98.5 (2007), p. 050405.

[Tre+07] J.-B. TREBBIA et al. “Roughness Suppression via Rapid Current Modulation on an Atom Chip”. In : *Phys. Rev. Lett.* 98 (26 juin 2007), p. 263201. DOI : 10.1103/PhysRevLett.98.263201. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.263201.

[Ame+08] A. H. van AMERONGEN et al. “Yang-Yang thermodynamics on an atom chip”. In : *Phys. Rev. Lett.* 100 (mars 2008), p. 090402. DOI : 10.1103/PhysRevLett.100.090402. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.090402.

[BDZ08] Immanuel BLOCH, Jean DALIBARD et Wilhelm ZWERGER. “Many-body physics with ultracold gases”. In : *Rev. Mod. Phys.* 80 (3 juill. 2008), p. 885-964. DOI : 10.1103/RevModPhys.80.885. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.885.

[Gou08a] Xavier GOURDON. *les maths en tête Analyse*. 2e éd. ? ? ? : ellipses, 2008.

[Gou08b] Xavier GOURDON. *Les maths en tête. Algèbre – 2ème édition*. 2e éd. Paris : Ellipse, 2008.

[Gou08c] Xavier GOURDON. *Les maths en tête. Analyse – 2ème édition*. 2e éd. Paris : Ellipse, 2008.

[Cou09] Jean-François COULOMBEL. “Equations hyperboliques non-linéaires”. DEA. Lecture. Université de Lille 1, France, sept. 2009. URL : https://cel.hal.science/cel-00616496.

[Hal+09] Elmar HALLER et al. “Realization of an excited, strongly correlated quantum gas phase”. In : *Science* 325.5945 (sept. 2009), p. 1224-1227. ISSN : 1095-9203. DOI : 10.1126/science.1175850. URL : http://dx.doi.org/10.1126/science.1175850.

[For10a] P. J. FORRESTER. “Log-gases and Random Matrices”. In : *Princeton University Press* (2010). Lien formel entre les gaz de particules unidimensionnels et les matrices aléatoires.

[For10b] Peter J. FORRESTER. *Log-Gases and Random Matrices*. Princeton University Press, 2010. DOI : 10.1515/9781400835416.

[Lia+10] Yean-an LIAO et al. “Spin-imbalance in a one-dimensional Fermi gas”. In : *Nature* 467.7315 (sept. 2010), p. 567-569. ISSN : 1476-4687. DOI : 10.1038/nature09393. URL : http://dx.doi.org/10.1038/nature09393.

[NC10] Michael A. NIELSEN et Isaac L. CHUANG. *Quantum Computation and Quantum Information : 10th Anniversary Edition*. Cambridge : Cambridge University Press, 2010. ISBN : 9781107002173.

[BDW11] Isabelle BOUCHOULE, N. J. van DRUTEN et C. I. WESTBROOK. "Atom Chips and One-Dimensional Bose Gases". In : *Atom Chips*. John Wiley et Sons, Ltd, 2011. Chap. 11, p. 331-363. ISBN : 9783527633357. DOI : 10.1002/9783527633357.ch11. URL : https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9783527633357.ch11.

[CCR11] Amy C. CASSIDY, Charles W. CLARK et Marcos RIGOL. "Generalized Thermalization in an Integrable Lattice System". In : *Phys. Rev. Lett.* 106 (14 avr. 2011), p. 140405. DOI : 10.1103/PhysRevLett.106.140405. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.140405.

[CM11] Jean-Sébastien CAUX et Jorn MOSSEL. "Remarks on the notion of quantum integrability". In : *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* 2011.02 (fév. 2011), P02023. DOI : 10.1088/1742-5468/2011/02/P02023. URL : https://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2011/02/P02023.

[Jac+11] Thibaut JACQMIN et al. "Sub-Poissonian fluctuations in a 1D Bose gas : From the quantum quasi-condensate to the strongly interacting regime". In : *Phys. Rev. Lett.* 106 (juin 2011), p. 230405. DOI : 10.1103/PhysRevLett.106.230405. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.230405.

[CK12] Jean-Sébastien CAUX et Robert M. KONIK. "Constructing the Generalized Gibbs Ensemble after a Quantum Quench". In : *Phys. Rev. Lett.* 109 (17 oct. 2012), p. 175301. DOI : 10.1103/PhysRevLett.109.175301. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.175301.

[GC12] Michel GAUDIN et J.S. CAUX. "The Bethe Wavefunction". In : *The Bethe Wavefunction* (jan. 2012), p. 1-322. DOI : 10.1017/CBO9781107053885.

[Jac12] Thibaut JACQMIN. "Mesures de corrélations dans un gaz de bosons unidimensionnel sur puce". 2012PA112261. Thèse de doct. 2012. URL : http://www.theses.fr/2012PA112261/document.

[Bre13] Alberto BRESSAN. "Hyperbolic Conservation Laws An Illustrated Tutorial". In : *Lecture Notes in Mathematics* 2062 (jan. 2013). DOI : 10.1007/978-3-642-32160-3-2.

[GBL13] Xi-Wen GUAN, Murray T. BATCHELOR et Chaohong LEE. "Fermi gases in one dimension : From Bethe ansatz to experiments". In : *Rev. Mod. Phys.* 85 (nov. 2013), p. 1633-1691. DOI : 10.1103/RevModPhys.85.1633. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.85.1633.

[LSR13] Fam LE KIEN, Philipp SCHNEEWEISS et Arno RAUSCHENBEUTEL. "Dynamical polarizability of atoms in arbitrary light fields : general theory and application to cesium". In : *The European Physical Journal D* 67.5 (mai 2013). ISSN : 1434-6079. DOI : 10.1140/epjd/e2013-30729-x. URL : http://dx.doi.org/10.1140/epjd/e2013-30729-x.

[SQ13] G. SCHEHR et J. QUASTEL. "The Tracy-Widom distribution and its applications". In : *ArXiv preprint arXiv :1304.1321* (2013). Revue sur l'universalité de Tracy-Widom dans les systèmes intégrables.

[BEL14] L. BONNES, F. H. L. ESSLER et A. M. LÄUCHLI. "Light-cone dynamics after quantum quenches in spin chains". In : *Physical Review B* 90.1 (2014), p. 014309. DOI : 10.1103/PhysRevB.90.014309. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.014309.

[Fan14] Yiyuan Bess FANG. "Equilibrium and Nonequilibrium Behaviours of 1D Bose Gases". 2014IOTA0005. Thèse de doct. 2014. URL : http://www.theses.fr/2014IOTA0005/document.

[GA14] Garry GOLDSTEIN et Natan ANDREI. *Equilibration and Generalized GGE in the Lieb Liniger gas*. 2014. arXiv : 1309.3471 [cond-mat.quant-gas]. URL : https://arxiv.org/abs/1309.3471.

[Mou14] Ayman MOUSSA. *Rappels de Cours – Distributions tempérées*. https://www.ljll.fr/moussa/pdf/enseignements/rappel_cours_distrib_temp.pdf. Notes de cours. 2014.

[Pag+14] Guido PAGANO et al. "A one-dimensional liquid of fermions with tunable spin". In : *Nature Physics* 10.3 (fév. 2014), p. 198-201. ISSN : 1745-2481. DOI : 10.1038/nphys2878. URL : http://dx.doi.org/10.1038/nphys2878.

[Kar+15] Tomasz KARPIUK et al. "Correspondence between dark solitons and the type II excitations of the Lieb-Liniger model". In : *Phys. Rev. A* 91 (1 jan. 2015), p. 013621. DOI : 10.1103/PhysRevA.91.013621. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.91.013621.

[Wou15] B. M. WOUTERS. "The quench action approach to out-of-equilibrium quantum integrable models". PhD thesis. Institute for Theoretical Physics Amsterdam (ITFA), oct. 2015. URL : https://hdl.handle.net/11245/1.486244.

[Ber+16] B. BERTINI et al. "Transport in out-of-equilibrium XXZ chains : Exact profiles of charges and currents". In : *Physical Review Letters* 117.20 (2016), p. 207201. DOI : 10.1103/PhysRevLett.117.207201.

[CDY16] O. A. CASTRO-ALVAREDO, B. DOYON et T. YOSHIMURA. "Emergent hydrodynamics in integrable quantum systems out of equilibrium". In : *Physical Review X* 6.4 (2016), p. 041065. DOI : 10.1103/PhysRevX.6.041065.

[Fra16] Fabio FRANCHINI. *An Introduction to Integrable Techniques for One-Dimensional Quantum Systems*. T. 940. Sept. 2016. ISBN : 9783319484860. DOI : 10.1007/978-3-319-48487-7.

[Joh16] Aisling JOHNSON. "One-dimensional Bose Gases on an Atom Chip : Correlations in Momentum Space and Theoretical Investigation of Loss-induced Cooling." 2016SACLO013. Thèse de doct. 2016. URL : http://www.theses.fr/2016SACLO013/document.

[NBI16] E. J. NANDANI, N. M. BOGOLIUBOV et A. G. IZERGIN. "Determinant representations of the correlation functions for the Rydberg gas". In : *Journal of Mathematical Sciences* (2016). Discute les limites matricielles des modèles de type Bethe.

[NP16] Jacopo De NARDIS et Miłosz PANFIL. "Exact correlations in the Lieb-Liniger model and detailed balance out-of-equilibrium". In : *SciPost Phys.* 1 (2016), p. 015. DOI : 10.21468/SciPostPhys.1.2.015. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.1.2.015.

[PS16] Lev PITAEVSKII et Sandro STRINGARI. *Bose-Einstein Condensation and Superfluidity*. Oxford University Press, jan. 2016. ISBN : 9780198758884. DOI : 10.1093/acprof:oso/9780198758884.001.0001. URL : https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780198758884.001.0001.

[CDL17] Claude COHEN-TANNOUDJI, Bernard DIU et Franck LALOË. *Mécanique quantique. Tome III : Fermions, bosons, photons, corrélations et intrication*. Savoirs actuels. Paris/Les Ulis : EDP Sciences, 2017. ISBN : 9782759821143.

[DS17] Benjamin DOYON et Herbert SPOHN. "Drude Weight for the Lieb-Liniger Bose Gas". In : *SciPost Physics* 3.6 (déc. 2017). ISSN : 2542-4653. DOI : 10.21468/scipostphys.3.6.039. URL : http://dx.doi.org/10.21468/SciPostPhys.3.6.039.

[DY17] Benjamin DOYON et Takato YOSHIMURA. "A note on generalized hydrodynamics : inhomogeneous fields and other concepts". In : *SciPost Phys.* 2 (2017), p. 014. DOI : 10.21468/SciPostPhys.2.2.014. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.2.2.014.

[Doy+17] Benjamin DOYON et al. "Large-Scale Description of Interacting One-Dimensional Bose Gases : Generalized Hydrodynamics Supersedes Conventional Hydrodynamics". In : *Phys. Rev. Lett.* 119 (19 nov. 2017), p. 195301. DOI : 10.1103/PhysRevLett.119.195301. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.195301.

[Fra17] Fabio FRANCHINI. *An Introduction to Integrable Techniques for One-Dimensional Quantum Systems*. T. 940. Lecture Notes in Physics. Springer, 2017. DOI : 10.1007/978-3-319-48487-7.

[Nar+17a] Jacopo De NARDIS et al. "Probing non-thermal density fluctuations in the one-dimensional Bose gas". In : *SciPost Phys.* 3 (2017), p. 023. DOI : 10.21468/SciPostPhys.3.3.023. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.3.3.023.

[Nar+17b] Jacopo De NARDIS et al. “Probing non-thermal density fluctuations in the one-dimensional Bose gas”. In : *SciPost Phys.* 3 (2017), p. 023. DOI : 10.21468/SciPostPhys.3.3.023. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.3.3.023.

[DBD18] Jacopo DE NARDIS, Denis BERNARD et Benjamin DOYON. “Hydrodynamic Diffusion in Integrable Systems”. In : *Phys. Rev. Lett.* 121 (16 oct. 2018), p. 160603. DOI : 10.1103/PhysRevLett.121.160603. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.160603.

[PK18] T. PALMAI et R. M. KONIK. “Quasilocal charges and the generalized Gibbs ensemble in the Lieb-Liniger model”. In : *Phys. Rev. E* 98 (5 nov. 2018), p. 052126. DOI : 10.1103/PhysRevE.98.052126. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.98.052126.

[App19] Walter APPEL. *Mathématiques pour la physique et les physiciens ! 5ème édition revue, corrigée et (encore) augmentée*. 5e éd. Paris : Éditions H & K, 2019. ISBN : 978-2-35141-339-5.

[BAC19] Alvise BASTIANELLO, Vincenzo ALBA et Jean-Sébastien CAUX. “Generalized Hydrodynamics with Space-Time Inhomogeneous Interactions”. In : *Phys. Rev. Lett.* 123 (sept. 2019), p. 130602. DOI : 10.1103/PhysRevLett.123.130602. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.123.130602.

[BD19] Alvise BASTIANELLO et Andrea DE LUCA. “Integrability-Protected Adiabatic Reversibility in Quantum Spin Chains”. In : *Phys. Rev. Lett.* 122 (juin 2019), p. 240606. DOI : 10.1103/PhysRevLett.122.240606. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.122.240606.

[Cau+19] Jean-Sébastien CAUX et al. “Hydrodynamics of the interacting Bose gas in the Quantum Newton Cradle setup”. In : *SciPost Phys.* 6 (2019), p. 070. DOI : 10.21468/SciPostPhys.6.6.070. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.6.6.070.

[NBD19] Jacopo De NARDIS, Denis BERNARD et Benjamin DOYON. “Diffusion in generalized hydrodynamics and quasiparticle scattering”. In : *SciPost Phys.* 6 (2019), p. 049. DOI : 10.21468/SciPostPhys.6.4.049. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.6.4.049.

[Sch+19] M. SCHEMMER et al. “Generalized Hydrodynamics on an Atom Chip”. In : *Phys. Rev. Lett.* 122 (9 mars 2019), p. 090601. DOI : 10.1103/PhysRevLett.122.090601. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.122.090601.

[Sch19] Maximilian SCHEMMER. “Out-of-equilibrium dynamics in 1D Bose gases”. 2019SACLO002. Thèse de doct. 2019. URL : http://www.theses.fr/2019SACLO002/document.

[BDD20] Isabelle BOUCHOULE, Benjamin DOYON et Jerome DUBAIL. “The effect of atom losses on the distribution of rapidities in the one-dimensional Bose gas”. In : *SciPost Phys.* 9 (2020), p. 044. DOI : 10.21468/SciPostPhys.9.4.044. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.9.4.044.

[Doy20a] Benjamin DOYON. “Lecture notes on Generalised Hydrodynamics”. In : *SciPost Phys. Lect. Notes* (2020), p. 18. DOI : 10.21468/SciPostPhysLectNotes.18. URL : https://scipost.org/10.21468/SciPostPhysLectNotes.18.

[Doy20b] Benjamin DOYON. “Lecture notes on Generalised Hydrodynamics”. In : *SciPost Physics Lecture Notes* 18 (2020), p. 1-138. DOI : 10.21468/SciPostPhysLectNotes.18. URL : https://scipost.org/SciPostPhysLectNotes.18.

[Har20] M. HARE. *Abrégé de mécanique quantique à l’usage de la préparation à l’agrégation de physique*. http://ressources.agreg.phys.ens.fr/static/Cours-TD/Hare/Cours2020.pdf. Notes de cours et TD. 2020.

[Bab21] Jean-François BABADJIAN. *Chapitre 5 – Dualité dans les espaces de Lebesgue*. https://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~jean-francois.babadjian/files/Analyse-M1/Chapitre5.pdf. Notes de cours, Master 1 Analyse. 2021.

[Gér21] Christian GÉRARD. *Notes de cours sur la transformation de Fourier*. https://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~christian.gerard/meca/notes-fourier.pdf. Master de Mécanique, notes de cours. 2021.

[Mar21] François De MARÇAY. *Transformation de Fourier*. https://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~joel.merker/Enseignement/Analyse-de-Fourier/transformee-de-Fourier.pdf. Cours de mathématiques appliquées, analyse de Fourier. 2021.

[BCD22] Thibault BONNEMAIN, Vincent CAUDRELIER et Benjamin DOYON. "Hamiltonian formulation and aspects of integrability of generalised hydrodynamics". In : *Communications in Mathematical Physics* 391.3 (2022), p. 1485-1540. DOI : 10.1007/s00220-021-04228-z. URL : https://arxiv.org/pdf/2406.04924.

[BD22] Isabelle BOUCHOULE et Jérôme DUBAIL. "Generalized hydrodynamics in the one-dimensional Bose gas : theory and experiments". In : *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* 2022.1 (jan. 2022), p. 014003. DOI : 10.1088/1742-5468/ac3659. URL : https://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/ac3659.

[Rei22] Tomas REIS. "On the Resurgence of Renormalons in Integrable Theories". Disponible aussi sur arXiv :2209.15386. Thèse N° 5676. Université de Genève, Faculté des Sciences, Section de Mathématiques, 2022. URL : https://arxiv.org/pdf/2209.15386.

[BDB23] Yasser BEZZAZ, Léa DUBOIS et Isabelle BOUCHOULE. *Rapidity distribution within the defocusing non-linear Schrödinger equation model*. 2023. arXiv : 2301.11098 [cond-mat.quant-gas]. URL : https://arxiv.org/abs/2301.11098.

[Ess23] Fabian H.L. ESSLER. "A short introduction to Generalized Hydrodynamics". In : *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* 631 (2023). Lecture Notes of the 15th International Summer School of Fundamental Problems in Statistical Physics, p. 127572. ISSN : 0378-4371. DOI : https://doi.org/10.1016/j.physa.2022.127572. URL : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437122003971.

[KK23] Matthew L KERR et Karen V KHERUNTSYAN. "The theory of generalised hydrodynamics for the one-dimensional Bose gas". In : *AAPPS Bulletin* 33.1 (2023), p. 25.

[Dub+24] L. DUBOIS et al. "Probing the Local Rapidity Distribution of a One-Dimensional Bose Gas". In : *Phys. Rev. Lett.* 133 (11 sept. 2024), p. 113402. DOI : 10.1103/PhysRevLett.133.113402. URL : https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.133.113402.

[Dub24] Léa DUBOIS. "Dynamique hors d'équilibre d'un gaz de Bosons unidimensionnel étudiée via la mesure spatialement résolue de la distribution des quasiparticules". 2024UPASP066. Thèse de doct. 2024. URL : http://www.theses.fr/2024UPASP066/document.

[Hüb+24] Friedrich HÜBNER et al. *Diffusive hydrodynamics from long-range correlations*. 2024. arXiv : 2408.04502 [cond-mat.stat-mech]. URL : https://arxiv.org/abs/2408.04502.

[Leb24] Gilles LEBORGNE. *Introduction à la théorie des Distributions*. Notes de cours de l'ISIMA, Deuxième année. http://www.isima.fr/leborgne. Nov. 2024. URL : https://perso.isima.fr/leborgne/IsimathDistributions/distrib.pdf.

[Dub25] Jérôme DUBAIL. *Solitons et ondes de matière (4)*. Cours / séminaire en ligne. Collège de France. 2025. URL : https://www.youtube.com/watch?v=t53C5hoXiw4 (visité le 28/03/2025).

[Dub+25] L. DUBOIS et al. "Experimental Investigation of a Bipartite Quench in a 1D Bose gas". Laboratoire Charles Fabry, Institut d'Optique, CNRS, Université Paris-Saclay ; CESQ and ISIS (UMR 7006), University of Strasbourg and CNRS. Mai 2025. URL : https://arxiv.org/pdf/2505.05839.

[Whend] Nicolas WHEELER. *Classical Field Theory : Chapter 5 — Calculus of Functionals*. PDF lecture notes. Available online at : https ://www.reed.edu/physics/faculty/wheeler/documents/Classical Physical Field Theory/Class Notes/Field Theory Chapter 5.pdf, accessed on 2025-12-09. n.d.