



HAL
open science

Approche géométrique de la limite semi-classique par les états cohérents et mécanique quantique sur le tore

Frédéric Faure

► **To cite this version:**

Frédéric Faure. Approche géométrique de la limite semi-classique par les états cohérents et mécanique quantique sur le tore. Physique mathématique [math-ph]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1993. Français. NNT: . tel-00383065

HAL Id: tel-00383065

<https://theses.hal.science/tel-00383065>

Submitted on 11 May 2009

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.

THESE

présentée par

Frédéric FAURE

POUR OBTENIR LE TITRE DE DOCTEUR
DE L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER - GRENOBLE I
(Arrêtés ministériels du 5 juillet 1984 et du 30 mars 1992)

SPECIALITE : Physique Théorique.

APPROCHE GEOMETRIQUE DE LA LIMITE SEMI-CLASSIQUE
PAR LES ETATS COHERENTS
ET MECANIQUE QUANTIQUE SUR LE TORE

DATE DE SOUTENANCE : **2 Novembre 1993**

COMPOSITION DU JURY :

R. Maynard	Président
R. Arvieu	Directeur de thèse
O. Bohigas	Rapporteur
A. Voros	Rapporteur
P. Leboeuf	
Y. Colin de Verdière	

à ma soeur Marie-Hélène

Je remercie M. Robert Arvieu, mon directeur de thèse, pour m'avoir encouragé et soutenu durant ces trois années à l'I.S.N.

Je suis très reconnaissant envers M. Roger Maynard pour avoir accepté de présider le jury.

MM. André Voros et Oriol Bohigas ont aimablement accepté d'être rapporteurs. Je les remercie sincèrement pour s'être intéressé à mon travail, et pour leurs remarques et leurs conseils enrichissants.

Je remercie particulièrement M. Patricio Leboeuf pour m'avoir fait part de ses travaux de recherche lors de mes visites à l'I.P.N. d'Orsay. Cette collaboration a été pour moi un apport considérable. J'ai aussi beaucoup apprécié ses qualités pédagogiques et sa grande sympathie.

Je suis également très reconnaissant envers M. Yves Colin de Verdière pour avoir eu avec lui des discussions très enrichissantes et agréables.

Je remercie tous les membres de l'I.S.N. et son directeur M. Bernard Vignon, pour leur accueil.

J'ai eu beaucoup de plaisir à cotoyer l'ensemble du groupe de physique théorique. Je remercie en particulier Abdelhamid Amghar et Olivier Méplan pour toute l'amitié et les nombreuses aides qu'ils m'ont apporté.

Je remercie les membres du service informatique et Mme Claudine Tur de la bibliothèque pour leur disponibilité et aimabilité constantes.

Je suis très reconnaissant envers Walter Mampe qui m'a beaucoup encouragé à m'orienter et à persévérer dans la physique, lors de mes études.

Finalement, je remercie du fond du coeur Sonia et toute ma famille pour leur affection.

Tables des Matières

0.1	Introduction.	4
I	Approche géométrique de la limite classique par les états cohérents	9
1	La dynamique dans l'espace des états quantiques	13
1.1	Généralités sur l'espace des états quantiques	13
1.2	Vitesse de l'évolution quantique	19
1.3	Projection de l'évolution quantique sur une sous variété complexe.	20
2	Les états cohérents standard	27
2.1	Présentation et définition.	28
2.2	Projection de l'évolution et limite classique	32
3	Les états cohérents déformés.	37
3.1	Projection de l'évolution quantique et équations du mouvement.	38
3.2	Interprétation classique de la déformation du paquet d'onde.	42
4	Quantification d'une trajectoire périodique dans l'espace des états.	45
5	Illustration : évolution d'états cohérents dans le modèle de Harper.	53
II	Mécanique quantique sur le tore	61
6	Modèle physique d'électrons dans un plan	65
6.1	Electrons dans un plan soumis à un potentiel périodique et à un champ magnétique.	66
6.2	Expression de la conductivité par la formule de Kubo	72

7	Modèle périodique à un degré de liberté.	75
7.1	Mécanique classique intégrable sur le tore.	75
7.2	Le tore en mécanique quantique	79
8	Les états cohérents, représentation de Husimi sur le tore	89
8.1	Les états cohérents du tore	90
8.2	Phénomènes d'interférences dans la construction d'un état cohérent du tore.	93
8.3	Représentation de Bargmann et de Husimi	95
9	Etats stationnaires d'une dynamique intégrable.	101
9.1	Etat stationnaire associé à une trajectoire contractible	102
9.2	Etat stationnaires associés à une trajectoire non-contractible	106
9.3	Phénomène de résonance entre deux quasi-modes	112
10	Indice de Chern pour caractériser la topologie des bandes d'énergie.	117
10.1	Introduction	117
10.2	L'indice de Chern par une intégrale de Courbure.	121
10.3	L'indice de Chern et les zéros de la distribution de Husimi	123
10.4	Propriété globale des indices de Chern	130
10.5	Indice de Chern et dégénérescence entre niveaux.	131
10.6	Etude de l'indice de Chern pour une famille de matrices 2×2 , et variation générique de l'indice de Chern.	134
10.7	Interprétation de l'indice de Chern en physique du solide	139
11	L'indice de Chern dans des modèles intégrables	143
11.1	Modèle de Harper à séparatrice unique	144
11.2	Résonance entre deux trajectoires contractibles	149
11.3	Résonance entre trois trajectoires contractibles.	164
12	Dynamique chaotique et indices de Chern.	169
12.1	Dynamique chaotique sur le tore générée par un Hamiltonien dépendant du temps.	170
12.2	Distribution de Husimi des états quasi-stationnaires	174
12.3	Modèle de "Harper pulsé".	176
12.4	Un modèle sans symétrie.	186
12.5	Présence de dégénérescences dans le cas chaotique.	188

13 Conclusion et perspectives ...	191
A Définitions et quelques propriétés des états cohérents déformés.	195
A.1 Propriétés algébriques.	195
A.2 Géométrie des états cohérents déformés.	205
A.3 Calcul de l'angle de projection	213
B Propriétés d'une dynamique classique intégrable sur le tore.	217
C Remarque sur le réseau dual.	223
D Etats de base de position et d'impulsion	225
E Eléments de matrice d'un Hamiltonien indépendant du temps.	229
F Structure géométrique de la famille des états cohérents du tore.	231

0.1 Introduction.

Cette thèse est consacrée à des problèmes liés à l'étude de la limite semi-classique en mécanique quantique.

L'intérêt de l'étude de la limite semi-classique ($\hbar \rightarrow 0$) est d'obtenir un point de vue particulier de la dynamique quantique, souvent moins complexe, et par ce biais de comprendre certains phénomènes quantiques.

Dans une première partie, sera présentée une approche géométrique de la limite semi-classique, par les états cohérents. La deuxième partie est consacrée à la caractérisation topologique de la fonction d'onde d'électrons dans un plan en présence d'un champ magnétique extérieur. Nous nous intéresserons particulièrement à la recherche d'une correspondance entre cette caractérisation et la nature de la dynamique classique.

La description des correspondances entre les lois d'évolution quantiques et les lois d'évolution classiques, pour des systèmes à peu de degrés de liberté (mais supérieur à un), reste un problème ouvert jusqu'à présent, particulièrement lorsque la dynamique classique présente du chaos et de l'effet tunnel.

Très tôt, les règles de quantification E.B.K. (Einstein-Brillouin-Keller) et la théorie W.K.B. (Wentzel-Kramers-Brillouin) ont permis de comprendre ces correspondances dans le cas où la limite classique est intégrable. Depuis environ vingt ans, des études principalement à l'aide de la formule de Gutzwiller ou d'observations statistiques du spectre, éclairent le cas contraire, où la dynamique classique est chaotique ou mixte [1].

La correspondance précise entre la mécanique quantique et la mécanique classique a d'abord été formulée au travers du principe de correspondance, où il convient de substituer les observables classiques par des opérateurs. Ce principe a ensuite été englobé dans le principe variationnel dépendant du temps, qui est une méthode d'approximation beaucoup utilisée pour des problèmes à plusieurs corps [2]. Le principe variationnel permet de décrire la dynamique quantique par des équations de mouvement classiques, obtenues par extrémalisation d'une fonction action sur une famille choisie d'états. Il est par exemple utilisé pour décrire les mouvements collectifs de vibration et de rotation du noyau nucléaire. Lorsqu'il est appliqué aux états cohérents (qui sont des paquets d'ondes gaussiens localisés dans l'espace de phase (q, p)), ce principe donne exactement la formulation Hamiltonienne de la mécanique classique.

Les états cohérents sont des états quantiques qui conviennent donc assez naturellement pour envisager la correspondance quantique-classique. Ils sont à ce titre largement étudiés

et utilisés dans beaucoup de domaines de la physique où intervient la mécanique quantique (en optique quantique, en physique atomique et moléculaire, en théorie des champs...). Les équations de Hamilton décrivent ainsi le déplacement d'un état cohérent dans l'espace de phase. Pour aller au-delà de cette description, K. Hepp [3] a établi que les fluctuations quantiques apparaissant lors de l'évolution d'un état cohérent, sont décrites au premier ordre en \hbar par l'Hamiltonien classique, linéarisé au voisinage de la trajectoire. Des généralisations pour plusieurs dimensions et pour des Hamiltoniens dépendant du temps, ont ensuite suivi. Citons notamment les résultats de G.A. Hagedorn [4] qui décrivent ces fluctuations à des ordres plus élevés en \hbar .

Des progrès récents ont été effectués par E.J. Heller pour utiliser ces descriptions semi-classiques dans le cas d'une dynamique chaotique. Il a en particulier estimé et discuté l'étalement des paquets d'ondes autour des orbites périodiques instables [5].

R.G. Littlejohn [6] et M. Combesure [7] ont ensuite utilisé les états cohérents "déformés", "squeezed states", pour décrire cet étalement. Les états cohérents "comprimés" ou "déformés" ont d'abord été introduits et étudiés dans le domaine de l'optique quantique. Ils permettent de réduire l'incertitude selon une observable choisie, sans toutefois contredire le principe d'incertitude de Heisenberg [8]. Ils ont de ce fait une application potentielle principalement pour les communications optiques et pour la détection d'ondes gravitationnelles.

Dans la première partie, nous allons tout d'abord donner une formulation géométrique qui est équivalente au principe variationnel dépendant du temps. Cette formulation consiste à concevoir la dynamique classique comme une projection orthogonale de la dynamique quantique sur une famille d'états donnée. Dans cette interprétation géométrique de l'approximation classique, l'angle α de la projection, que nous évaluerons, renseigne sur la validité de l'approximation. Nous appliquerons cette description aux états cohérents standard et aux états cohérents déformés, puis nous illustrerons les résultats obtenus à l'aide du modèle de Harper.

Dans la deuxième partie, les modèles auxquels nous nous intéresserons sont du type du modèle de Harper et sont une formulation de la mécanique quantique sur le tore en tant qu'espace de phase. Ce type de modèle trouve ses applications essentiellement en physique du solide, et notamment pour l'effet Hall quantique.

En 1980, K. von Klitzing et al. [9] ont montré le résultat remarquable concernant la quantification de la conductivité de Hall σ_{xy} pour des électrons "bi-dimensionnels". Dans les

années qui suivirent, plusieurs explications de cet effet furent proposées. En particulier, en utilisant un modèle à électrons indépendants dans un potentiel cristallin doublement périodique, $V(x, y)$, et soumis à un champ magnétique transverse, Thouless et al. [10] ont démontré que σ_{xy} est quantifiée par multiples entiers de e^2/h dès que le niveau de Fermi est dans un "gap" du spectre. Le mérite de leur explication est qu'elle est de nature topologique, puisque ils ont relié la formule moyennée de Kubo pour la conductivité, à l'indice de Chern, qui est invariant sous des perturbations.

Pour des forts champs magnétiques, le couplage entre les différents niveaux de Landau peut-être négligé (c'est l'approximation du plus bas niveau de Landau) et le mouvement de l'électron est décrit par un Hamiltonien effectif $H(q, p)$ périodique en position comme en impulsion. Par exemple, si $V(x, y) = \cos(2\pi x) + \alpha \cos(2\pi y)$, alors l'Hamiltonien effectif est $H(q, p) = \cos(2\pi q) + \alpha \cos(2\pi p)$ (Hamiltonien de Harper). En travaillant dans cette approximation, Arovav et al. [11] ont donné une interprétation des valeurs de la conductivité de Hall en terme des propriétés de localisation des états stationnaires. Puisque le système est périodique à la fois en q et p , il apparait que dans le processus de quantification, deux paramètres quantiques (θ_1, θ_2) peuvent être introduits, reliés à la périodicité de la fonction d'onde sous les translations d'une cellule élémentaire. En accord avec l'interprétation de la localisation de D.J. Thouless [12], ils ont trouvé que les états conducteurs sont très sensibles aux changements des conditions aux limites.

D'un point de vue dynamique, dans le niveau de Landau le plus bas, le mouvement est intégrable, puisqu'il a un degré de liberté et que l'énergie est conservée. Pour des champs magnétiques moins élevés, on s'attend à ce que le mouvement de l'électron soit chaotique. G. Petschl et T. Geisel ont récemment étudié le spectre du modèle de Harper dans ce régime [13]. Une manière effective d'introduire le chaos dans la dynamique de l'électron et de garder en même temps un espace de phase doublement périodique, est de considérer des applications stroboscopiques au lieu d'Hamiltoniens indépendants du temps (le modèle de Harper pulsé). L'application peut être considérée comme une section de Poincaré, de la dynamique générale d'un électron ayant lieu dans un espace de phase quadri-dimensionnel. Ce modèle peut aussi simplement correspondre à un potentiel extérieur $V(x, y)$ dépendant du temps. Dans la référence [14], P. Leboeuf et al. ont montré que les indices de Chern peuvent être adaptés à ces applications, pour étudier la structure des états propres du propagateur dans le régime chaotique, ou encore pour étudier la transition qui apparait lorsque la dynamique classique associée est intégrable puis progressivement chaotique.

Cette relation directe avec la physique du solide est une première motivation pour l'étude de la mécanique quantique sur le tore. Une autre motivation de portée plus générale,

discutée par P. Leboeuf et A. Voros [15] est que la quantification d'applications chaotiques offre l'opportunité d'analyser la mécanique quantique d'un mouvement classique chaotique, en minimisant les complexités mathématiques. En effet, pour une dynamique Hamiltonienne modélisant un système physique lié et à peu de degrés de libertés, l'étude classique peut se faire au moyen de l'application de Poincaré. Cette application (à temps discret) agit sur une surface compacte incluse dans la couche d'énergie, et représente les intersections successives d'une trajectoire avec cette surface. Une application sur le tore peut donc être vue comme la version simplifiée d'une application de Poincaré.

Le but de la deuxième partie est d'étudier le comportement des valeurs propres et des états stationnaires de systèmes classiquement intégrables ou chaotiques, pour des changements des conditions de périodicité (θ_1, θ_2) . On combinera principalement deux objets différents : l'indice de Chern et les distributions de Husimi. L'indice de Chern caractérise la sensibilité des états stationnaires aux changements des conditions de périodicité. Un état stationnaire ayant une faible dépendance (pas de sensibilité) a un indice de Chern nul ; autrement dit, lorsque l'indice de Chern est différent de zéro, la fonction d'onde est délocalisée. Il a été observé que dans un régime fortement chaotique, beaucoup de fonctions d'ondes ont un indice de Chern non nul [14].

D'un autre côté, la distribution de Husimi, qui fournit une représentation dans l'espace de phase des états quantiques, complète l'information apportée par l'indice de Chern. Tout d'abord parce qu'on peut souvent la comparer à des distributions classiques sur l'espace de phase, et aussi parce qu'elle permet une visualisation directe dans l'espace de phase des modifications induites sur un état stationnaire par le changement des conditions de périodicité.

Un autre aspect intéressant de l'indice de Chern qui sera mis en valeur dans cette partie, est son lien avec les dégénérescences entre niveaux : pour un problème dépendant d'un paramètre, la variation de l'indice de Chern est liée à la présence d'une dégénérescence . L'intérêt de l'indice de Chern dans l'étude des dégénérescences entre niveaux d'énergies est apparu avec l'introduction de la phase de Berry [16]. Or connaître la présence de dégénérescences est un problème important en physique [17]. L'approximation de Born-Oppenheimer qui sépare des variables "classiques" de variables quantiques dans un problème physique cesse d'être valable justement au voisinage d'une dégénérescence . De même, le transport adiabatique est affecté par la présence d'une dégénérescence . Par conséquent, dans ce modèle d'électrons dans un plan cristallin, l'interprétation de Thouless de la formule de Kubo en terme de transport adiabatique est à revoir au voisinage d'une dégénérescence [18].

L'objet principal de la deuxième partie va être d'étudier l'apparition possible de dégénérescences dans le spectre d'un Hamiltonien sur le tore, d'un point de vue semi-classique. Dans cette optique, l'organisation des chapitres va être la suivante :

Nous rappellerons tout d'abord le modèle de physique du solide qui amène naturellement au formalisme de la mécanique quantique sur le tore. Les états cohérents du tore ainsi que la représentation de Husimi seront ensuite présentés puis discutés.

Après avoir introduit l'indice de Chern, nous préciserons sa caractérisation au moyen des zéros de la distribution de Husimi. Nous donnerons ensuite une interprétation physique de l'indice de Chern en terme de quantification de la vitesse de dérive du paquet d'onde électronique dans le plan, lorsqu'un faible champ électrique est appliqué. Cette interprétation est équivalente à celle obtenue par la formule de Kubo mais est plus intuitive. Le paragraphe suivant sera consacré à l'étude de systèmes intégrables, en mettant en valeur l'apparition possible de dégénérescences en rapport avec un phénomène de résonance entre trajectoires. Des systèmes présentant une transition progressive vers le chaos seront finalement étudiés et discutés en dernière partie. Nous soulignerons le contraste qu'il y a entre le régime régulier et le régime chaotique concernant l'apparition de dégénérescences.

Partie I

Approche géométrique de la limite classique par les états cohérents

Dans cette partie, nous allons nous attacher principalement à la description géométrique de l'évolution quantique. Nous rappellerons tout d'abord les structures géométriques associées à l'espace des états quantiques (l'espace projectif), ainsi que les résultats obtenus par J. Anandan et Y. Aharonov sur la vitesse de l'évolution quantique [19]. Cela nous permettra de formuler le principe variationnel dépendant du temps comme étant une projection de l'évolution quantique effectuée dans l'espace projectif sur une famille d'états particulière. Nous évaluerons en particulier l'angle de la projection qui nous fournira un critère sur la validité de l'approximation classique effectuée.

Nous appliquerons ensuite cette formulation aux états cohérents standard et aux états cohérents déformés. Nous trouverons alors que l'angle de projection est respectivement de l'ordre de $\sqrt{\hbar}$ et \hbar , en accord avec les résultats de G.A. Hagedorn [4]. Ce résultat permet d'interpréter l'existence de la limite classique comme le fait que les trajectoires quantiques deviennent tangentes à la surface des états cohérents dans la limite $\hbar \rightarrow 0$. Nous dégagerons au passage une particularité de la déformation elliptique que subit la distribution de Husimi d'un état cohérent lors de son évolution (dans l'espace de phase). Cette déformation est plus faible (d'une puissance 1/2) que celle subit par la distribution de Liouville.

Le chapitre 4 présente essentiellement les résultats de R.G. Littlejohn sur la règle de quantification d'une trajectoire périodique, en terme de phase de Berry, mais dans l'aspect géométrique développé dans cette partie. Nous utiliserons ces résultats pour la quantification de trajectoires non contractibles sur le tore au paragraphe 9.2 de la deuxième partie. Finalement, nous illustrerons ces différents résultats par des calculs numériques. Ils concerneront l'évolution d'états cohérents pour des temps courts sur le modèle de Harper.

Chapitre 1

La dynamique dans l'espace des états quantiques

1.1 Généralités sur l'espace des états quantiques

Dans ce paragraphe, nous allons examiner la structure géométrique et quelques propriétés de l'espace projectif d'un espace de Hilbert, aussi appelé espace des états quantiques. Ces notions nous seront utiles dans les paragraphes suivants. Les définitions précises peuvent se trouver dans la référence [20].

a) Définitions

Nous noterons dans la suite $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ un vecteur de l'espace de Hilbert et $|\Psi\rangle_n = \frac{|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle^{1/2}}$ le vecteur normalisé. Cette notation sera utilisée tout au long de cette partie.

On définit que deux vecteurs non nuls sont équivalents : $|\Psi\rangle \sim |\Phi\rangle$ si ils sont proportionnels : $|\Psi\rangle = \lambda|\Phi\rangle, \lambda \in \mathbb{C}$. Ils sont alors représentés par un état quantique, ou point de l'espace projectif, noté $[\Psi] = [\Phi]$ (leur classe d'équivalence). Par définition, l'ensemble des états quantiques forme l'espace projectif de \mathcal{H} : $\mathcal{P} = P(\mathcal{H})$.

Si l'espace de Hilbert \mathcal{H} est de dimension complexe finie n , alors l'espace projectif est de dimension complexe $n - 1$.

L'intérêt de considérer cet espace en mécanique quantique, vient tout d'abord du fait que le résultat de la mesure d'une observable \hat{A} sur un vecteur $|\Psi\rangle$ est $\frac{\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$, et ne dépend donc pas du vecteur dans la classe d'équivalence. Ensuite l'équation de Schrödinger est linéaire, si bien qu'elle définit une dynamique dans l'espace des états.

Dans la suite, les appellations de "vecteur quantique" et "état quantique" ne seront pas

toujours respectées : les "vecteurs quantiques" seront souvent appelés "états quantiques". L'espace projectif $P(\mathcal{H})$ n'est pas un espace vectoriel, mais il hérite de structures induites par le produit hermitien $\langle \Psi | \Phi \rangle$ sur \mathcal{H} . De cette façon, il y a sur l'espace projectif une structure complexe, une métrique hermitienne (une métrique riemannienne et une forme symplectique), et une structure d'espace fibré en droites avec la connexion de Berry [20, 21].

b) La métrique hermitienne

La distance d entre deux états $[\Psi]$ et $[\Phi]$ représentés par les vecteurs $|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$, est donnée par :

$$\cos^2(d) = |\langle \Psi | \Phi \rangle|^2, \quad 0 \leq d \leq \frac{\pi}{2} \quad (1.1)$$

Cette expression de d diffère à un facteur près de celle que l'on trouve dans [22].

Cette distance peut-être définie comme la distance minimale au sens de la norme dans l'espace de Hilbert, entre les vecteurs normalisés appartenant aux états de $|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$. Voir [21], appendice 3.

On remarque que l'espace des états est de diamètre fini, bien que pouvant être de dimension très grande. La distance maximale est $d = \frac{\pi}{2}$ atteinte entre deux états orthogonaux. Le sens physique de cette distance peut être que deux états orthogonaux sont indépendants en ce sens qu'ils peuvent évoluer de façons différentes. Au contraire, deux états voisins, $d(\Psi, \Phi) \ll 1$, auront une évolution quasiment identique au cours du temps, du fait que l'opérateur d'évolution conserve la distance.

Cette distance nous sera donc bien utile lorsque l'on fera une approximation d'un état par un autre, afin de savoir si l'on prend bien en compte toutes les corrélations.

On déduit de (1.1) l'expression de la métrique, distance infinitésimale entre $[\Psi]$ et $[\Psi + d\Psi]$ voisins :

$$ds^2 = d^2([\Psi], [\Psi + d\Psi]) = 1 - |\langle \Psi | \Psi + d\Psi \rangle|^2 \quad (1.2)$$

appelée métrique de Fubiny-Study.

L'espace projectif hérite aussi d'une structure symplectique Ω , c'est à dire d'une forme bilinéaire antisymétrique fermée. Cela fait de l'espace projectif une variété de Kähler.

Dans un système de coordonnées complexes (base de l'espace tangent complexifié), la métrique (1.2) peut s'écrire :

$$g = \frac{1}{2}g_{\mu\nu}dz^\mu \otimes dz^\nu + \frac{1}{2}g_{\bar{\mu}\bar{\nu}}d\bar{z}^\mu \otimes d\bar{z}^\nu \equiv g_{z\bar{z}}dzd\bar{z} \quad (1.3)$$

La forme symplectique (ou forme de Kähler) s'écrit alors :

$$\Omega = ig_{\mu\bar{\nu}}dz^\mu \wedge d\bar{z}^\nu \quad (1.4)$$

Et localement $g_{\mu\bar{\nu}}$ peut s'écrire :

$$g_{\mu\bar{\nu}} = \partial_\mu \partial_{\bar{\nu}} \mathcal{K} \quad (1.5)$$

La fonction \mathcal{K} est appelée potentiel de Kähler. On la verra apparaître au paragraphe suivant.

Par exemple, l'espace projectif de $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, qui est l'espace de Hilbert pour un spin 1/2, est P^1 , isométrique à la sphère S^2 de rayon 1/2. Deux états sont orthogonaux si ils sont antipodaux, de distance $\pi/2$.

Remarque : Etant donné deux vecteurs voisins, $|\Psi\rangle$ et $|\Psi + d\Psi\rangle = |\Psi\rangle + |d\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, non nécessairement normalisés, $\| |d\Psi\rangle \| = \langle d\Psi | d\Psi \rangle^{1/2} \ll 1$, on obtient que la distance entre les états $[\Psi]$ et $[\Psi + d\Psi]$ est aussi :

$$ds^2 = \left(\frac{\langle d\Psi | d\Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - \frac{|\langle \Psi | d\Psi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \right) dt^2 \quad (1.6)$$

On trouve cette expression par exemple dans [21], appendice 3.

c) Connexion de Berry

A un état quantique donné $[\Psi]$, est associé la famille de vecteurs colinéaires entre eux, correspondant à cet état. Cette famille \mathcal{F}_Ψ , isomorphe au plan \mathbb{C} , est appelée la fibre en $[\Psi]$, ou aussi la raie. L'ensemble des fibres $\mathcal{F} = \cup_{\Psi \in \mathcal{P}} \mathcal{F}_\Psi$, forme un espace fibré vectoriel holomorphe en droites complexes sur \mathcal{P} , noté $\mathcal{F} \rightarrow \mathcal{P}$. Il s'agit en fait d'une "décomposition" de l'espace des vecteurs quantiques en regroupant dans une fibre, les vecteurs colinéaires entre eux. Cette décomposition s'avère être particulièrement judicieuse pour aborder la dynamique quantique.

Pour un état $[\Psi]$, l'ensemble \mathcal{U}_Ψ des vecteurs de norme un (sous ensemble de \mathcal{F}_Ψ) est isomorphe au groupe $U(1)$ (homéomorphe au cercle S^1). L'ensemble des fibres \mathcal{U}_Ψ forme un espace fibré principal sur \mathcal{P} , de groupe caractéristique $U(1)$, et noté $\mathcal{U} \rightarrow \mathcal{P}$. [20]. Cet espace fibré possède une connexion induite par le produit hermitien sur \mathcal{H} , qui est appelée connexion de Berry [16, 23] en physique (et connexion de Chern en mathématiques). Comme présenté par J. Aharonov et Y. Anadan [24], cette connexion peut s'exprimer en terme de transport parallèle, de la façon suivante :

Considérons un chemin dans l'espace projectif : $[\Psi(t)] \in \mathcal{P}$, $t \in \mathbb{R}$.

A chaque état $[\Psi(t)]$, $t \in \mathbb{R}$, on associe arbitrairement un vecteur normalisé $|\Psi(t)\rangle_n \in \mathcal{U}_{\Psi(t)}$. Ce chemin continu $|\Psi(t)\rangle_n$ est appelé un relèvement de $[\Psi(t)]$. Un autre relèvement pourrait être :

$$|\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n = e^{if(t)} |\Psi(t)\rangle_n \quad (1.7)$$

où $f(t)$ est une fonction continue quelconque. Infinitésimalement, on a les recouvrements :

$$\begin{cases} {}_n\langle \Psi(t) | \Psi(t+dt) \rangle_n = 1 + {}_n\langle \Psi(t) | \partial_t \Psi(t) \rangle_n dt + o(dt) \\ {}_n\langle \widetilde{\Psi}(t) | \Psi(t+dt) \rangle_n = 1 + {}_n\langle \widetilde{\Psi}(t) | \partial_t \widetilde{\Psi}(t) \rangle_n dt + o(dt) \\ \qquad \qquad \qquad = 1 + {}_n\langle \Psi(t) | \partial_t \Psi(t) \rangle_n dt + i\partial_t f(t)dt + o(dt) \end{cases} \quad (1.8)$$

Le relèvement horizontal est défini par la condition que localement le recouvrement est maximal entre les vecteurs.

Ainsi $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n$ est un relèvement horizontal du chemin $[\Psi(t)]$ passant par $|\Psi(0)\rangle_n$, si :

$$\begin{cases} {}_n\langle \widetilde{\Psi}(t) | \Psi(t+dt) \rangle_n = 1 + o(dt) \\ |\widetilde{\Psi}(0)\rangle_n = |\Psi(0)\rangle_n \end{cases} \quad (1.9)$$

Ce choix est possible et unique car ${}_n\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle_n = 1$, donc ${}_n\langle \Psi(t) | \partial_t \Psi(t) \rangle_n \in i\mathbb{R}$. De plus ce relèvement ne dépend pas du paramétrage du chemin, c'est une notion géométrique. D'après (1.8), il suffit de choisir :

$$\begin{cases} \partial_t f(t) = i \langle \Psi | \partial_t \Psi \rangle \\ f(0) = 0 \end{cases} \quad (1.10)$$

Ainsi, l'expression du relèvement horizontal $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n$ à partir du relèvement arbitraire $|\Psi(t)\rangle_n$ est :

$$|\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n = e^{-\int_0^t \mathcal{A}} |\Psi(t)\rangle_n \quad (1.11)$$

avec

$$\mathcal{A} = {}_n\langle \Psi | d\Psi \rangle_n \in i\mathbb{R} = \mathcal{U}(1) \quad (1.12)$$

qui est appelé la connexion de Berry.

Remarque : par rapport à un autre relèvement $|\Psi'(t)\rangle = e^{if'(t)} |\Psi(t)\rangle$, on obtient avec (1.8), que la connexion de Berry est :

$$\mathcal{A}' = \mathcal{A} + idf' \quad (1.13)$$

Bien que le transport parallèle soit une structure intrinsèque dans les fibres, en pratique, il est exprimé de cette façon, par rapport à un relèvement que l'on a choisi. Si l'on se

donne sur un domaine ouvert V de \mathcal{P} , un relèvement continu $|\Psi(p)\rangle_n, p \in V$, (aussi appelé une section locale du fibré \mathcal{U}), alors \mathcal{A} est une un-forme sur V .

Dans le langage des théories de jauge, $U(1)$ est le groupe de jauge, la jauge est fixée par le choix de $|\Psi(t)\rangle_n$, \mathcal{A} est le potentiel de jauge, et (1.13) est une transformation de jauge.

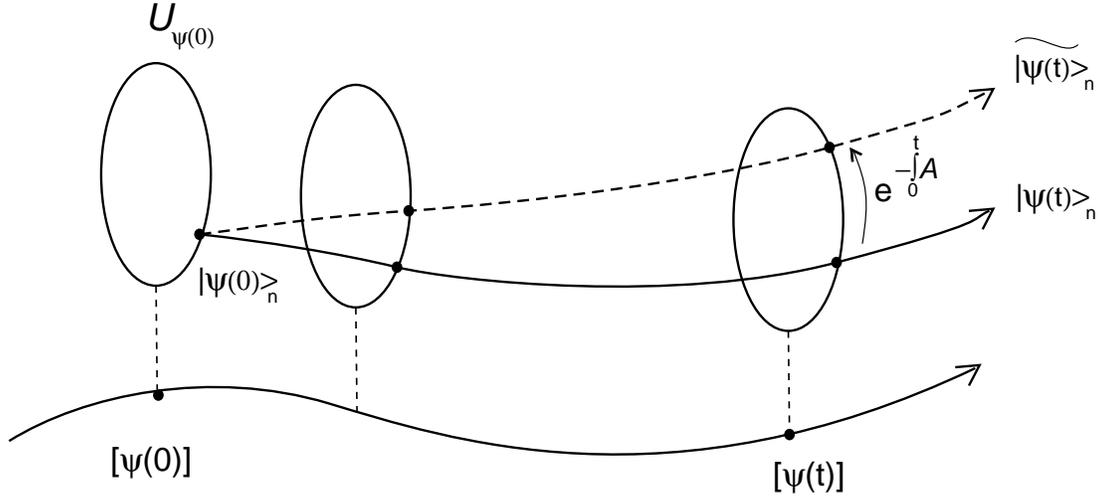


Figure 1.1: Le Transport parallèle : à la base de la figure, $[\Psi(t)]$ représente un chemin parmi les états de l'espace projectif. A chaque état, est associé un ensemble de vecteurs quantiques qui diffèrent entre eux par une phase, et qui forment une "fibre", ici représentée par un cercle. Etant donné un vecteur quantique initial $|\Psi(0)\rangle_n$ dans la fibre de $[\Psi(0)]$, le transport parallèle correspond à une façon privilégiée de passer d'une fibre à une autre, et cela définit un chemin ("le plus court") noté $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n$. Ce chemin est défini relativement à un chemin arbitraire $|\Psi(t)\rangle_n$ que l'on s'est donné et qui sert de repère (ici en trait plein). L'écart est caractérisé par la phase relative $e^{-\int_0^t \mathcal{A}}$.

Suite au transport parallèle, arrive naturellement la notion d'holonomie. En effet, si l'on considère un chemin $[\Psi(t)]$ périodique sur l'espace projectif \mathcal{P} , $[\Psi(0)] = [\Psi(T)]$, et que l'on choisisse $|\widetilde{\Psi}(0)\rangle_n \in \mathcal{U}_{\Psi(0)}$, alors par transport parallèle le long de $[\Psi(t)]$, et au bout d'une période, $|\widetilde{\Psi}(T)\rangle_n$ s'exprime comme :

$$|\widetilde{\Psi}(T)\rangle_n = e^{i\phi} |\widetilde{\Psi}(0)\rangle_n \quad (1.14)$$

avec $\phi \in [0, 2\pi]$. On vérifie que ϕ ne dépend ni du choix de $|\widetilde{\Psi}(0)\rangle_n$, ni du choix de l'origine $[\Psi(0)]$ sur le chemin. ϕ est appelée *la phase de Berry* du chemin. Cette phase a d'abord été considérée pour des transports adiabatiques d'états stationnaires par M.V.

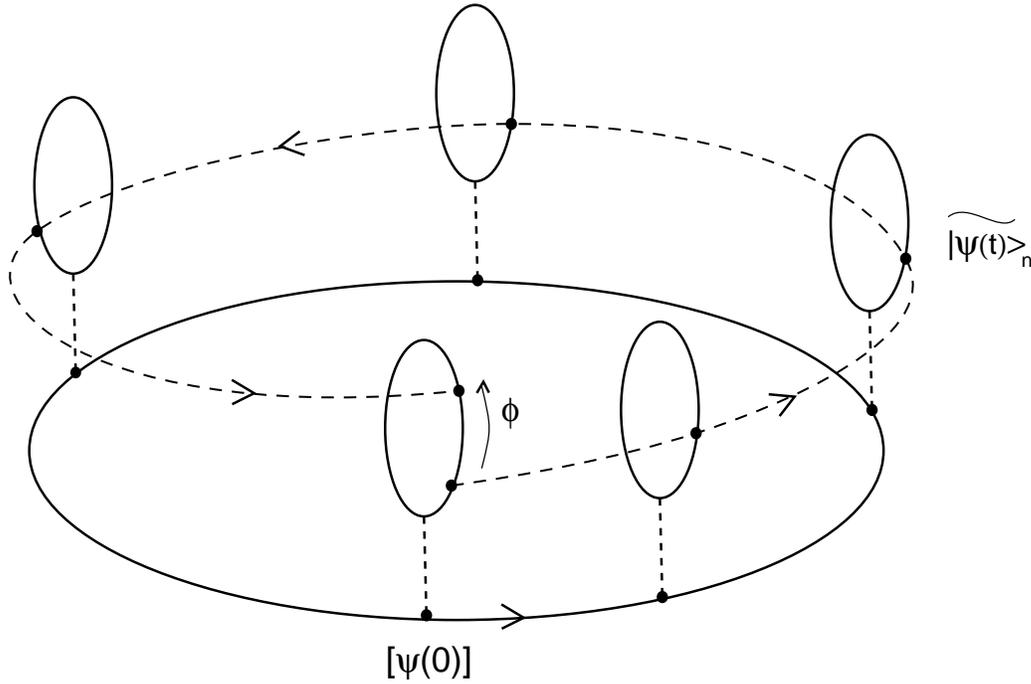


Figure 1.2: Holonomie, phase de Berry : si l' état $[\Psi(t)]$ décrit un chemin périodique dans l'espace projectif, la phase de Berry ϕ , est le déphasage obtenu après une période de transport parallèle d'un vecteur initial.

D'après (1.11), si $|\Psi(t)\rangle$ est un relèvement périodique (i.e. $|\Psi(0)\rangle_n = |\Psi(T)\rangle_n$), alors $\phi = i \int_0^T \mathcal{A} \quad [2\pi]$.

Nous allons voir que le calcul de l'holonomie peut se faire sans référence à une section particulière, au moyen de la courbure de Berry :

$$\mathcal{F} = d\mathcal{A} = {}_n\langle d\Psi | \wedge | d\Psi \rangle_n \quad (1.15)$$

Si l'on se donne une surface \mathcal{S} dans l'espace projectif \mathcal{P} ayant la trajectoire $\Gamma = [\Psi(t)]_t$ comme bord, et que l'on choisisse un relèvement continu $|\Psi(t)\rangle_n$ au dessus de \mathcal{S} , alors, d'après le théorème de Stokes,

$$\phi \equiv i \oint_{\Gamma} \mathcal{A} = i \iint_{\mathcal{S}} \mathcal{F} \quad [2\pi] \quad (1.16)$$

Et contrairement à \mathcal{A} , la deux-forme $\mathcal{F} = {}_n\langle d\Psi | \wedge | d\Psi \rangle_n$ à valeur dans $i\mathbb{R}$, est indépendante du choix du relèvement $|\Psi\rangle_n$; comme on peut le vérifier avec (1.13).

Il faut aussi noter l'identité entre la deux-forme de courbure et la deux forme symplectique

(réelle) :

$$\mathcal{F} = i\Omega \quad (1.17)$$

La phase et la courbure de Berry nous seront aussi utiles dans la deuxième partie pour le calcul de l'indice de Chern d'une famille d'états stationnaires.

Au paragraphe 3, la forme symplectique Ω servira à formuler les équations de Hamilton classiques déduites de la dynamique quantique.

Remarque : Pour l'espace projectif $P^1 = P(\mathbb{C}^2) \cong S^2$, la phase de Berry d'un chemin fermé est l'angle solide du chemin vu du centre de la sphère S^2 [16].

1.2 Vitesse de l'évolution quantique

Dans ce paragraphe, nous allons considérer de manière géométrique la dynamique quantique dans l'espace projectif, selon une formulation établie par J. Anandan et Y Aharonov [19].

Supposons donné un Hamiltonien \hat{H} , opérateur hermitique de l'espace de Hilbert \mathcal{H} . Il génère une dynamique dans \mathcal{H} . Un vecteur $|\Psi(0)\rangle$ évolue selon la trajectoire $|\Psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$, déterminée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \quad (1.18)$$

soit par intégration :

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle = \hat{U}_t|\Psi(0)\rangle \quad (1.19)$$

Cette dynamique dans l'espace de Hilbert induit par projection une dynamique dans l'espace projectif \mathcal{P} , notée $[\Psi(t)]$, bien définie.

L'opérateur d'évolution $\hat{U}_t = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}$ étant unitaire, on déduit que le produit scalaire ${}_n\langle\Psi(t)|\Phi(t)\rangle_n$ est conservé au cours du temps, et d'après (1.1), l'évolution dans \mathcal{P} conserve les distances. C'est une isométrie.

Calculons la vitesse v de l'état $[\Psi(t)]$ sur sa trajectoire. On a :

$$|\Psi(t)\rangle_n = \left(1 - i\frac{\hat{H}t}{\hbar} - \frac{1}{2}\frac{\hat{H}^2t^2}{\hbar^2}\right)|\Psi(0)\rangle_n + o(t^2) \quad (1.20)$$

donc d'après (1.2) :

$$\begin{aligned} ds^2 &= d^2[\Psi(0), \Psi(t)] = (1 - |{}_n\langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle_n|^2) \\ &= t^2\frac{\Delta E^2}{\hbar^2} + o(t^2) \end{aligned} \quad (1.21)$$

et donc :

$$v = \frac{\Delta E}{\hbar} \quad (1.22)$$

avec :

$$\Delta E^2 = {}_n\langle\Psi|\hat{H}^2|\Psi\rangle_n - {}_n\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle_n^2 \quad (1.23)$$

qui est l'incertitude en énergie de l'état, constante le long de la trajectoire.

En particulier, les points fixes sont les états stationnaires pour lesquels $\Delta E = 0$. Les états stationnaires et leur énergie (le spectre) caractérisent la dynamique (1.19) du fait que celle-ci soit linéaire. Il est donc intéressant de les connaître, ou d'avoir des estimations. Une approche possible est de construire des états quantiques ayant une incertitude en énergie ΔE aussi petite que possible.

Notons la remarque de J. Anandan et al. qui est que (1.22) fournit l'interprétation suivante de l'incertitude de Heisenberg temps-énergie : pour qu'un état $|\Psi(0)\rangle_n$ évolue vers un état $|\Psi(t)\rangle_n$ qui lui soit presque orthogonal, il faut que $d(\Psi(0), \Psi(t)) \sim 1$ et d'après (1.22), un temps $t \geq \frac{d}{v} \sim \frac{\hbar}{\Delta E}$. Donc $t\Delta E \geq \hbar$.

1.3 Projection de l'évolution quantique sur une sous variété complexe.

La dynamique quantique que nous venons de considérer se passe dans tout l'espace projectif, qui est de dimension très grande. La plupart des méthodes d'approximation en physique nucléaire, physique atomique ou moléculaire, consistent à considérer que lors de son évolution, un état quantique reste dans une famille particulière d'états \mathcal{S} , de dimension beaucoup plus faible. Cette famille est souvent appelée famille de fonctions d'essai. Ce peut être les déterminants de Slater à particules (ou quasi-particules) indépendantes, ou encore une famille d'états cohérents pour décrire des mouvements collectifs. Le choix de cette famille dépend bien sûr de la dynamique que l'on considère au travers du Hamiltonien \hat{H} qui la gouverne. La méthode d'approximation s'effectue généralement au moyen du principe variationnel dépendant du temps, et fournit des équations de mouvement dans la surface \mathcal{S} , en terme de mouvement classique dans un espace de phase généralisé (voir [2], chap. 9).

Dans ce paragraphe, nous verrons que la méthode d'approximation par le principe variationnel peut se concevoir de façon géométrique : les équations de mouvement résultantes s'obtiennent en projetant orthogonalement sur la famille \mathcal{S} (incluse dans l'espace projectif), en chaque point de celle-ci, le champ de vecteur vitesse quantique. Voir la figure 1.3.

Nous verrons que le champ de vecteur obtenu engendre un flot hamiltonien, qui peut donc être considéré comme la meilleure approximation de la dynamique quantique par une dynamique restreinte à cette surface au sens de la distance (1.1). L'erreur commise par cette approximation peut-être évaluée à partir de l'angle de projection que nous calculerons. Il est à noter qu'il n'est pas encore question de limite classique, $\hbar \rightarrow 0$. Le paramètre \hbar est fixé. La limite classique apparaîtra en fait lorsque l'on s'apercevra que les états cohérents constituent une surface particulière, pour laquelle l'angle tend vers 0 pour $\hbar \rightarrow 0$.

Cette formulation est valable plus généralement si l'on effectue la projection sur une famille d'états quantiques formant une sous variété complexe de l'espace projectif. Cela nous permettra d'appliquer ces résultats à la famille des états cohérents standard, puis à la famille plus large des états cohérents déformés (ou "comprimés" ou squeezed-states). Du fait de sa généralité, cette formulation peut être appliquée aux autres types d'états cohérents [25], ou encore aux déterminants de Slater, pour des problèmes à N corps (de la même façon que le principe variationnel), ou encore à des produits tensoriels de ces différents états cohérents pour étudier le couplage spin-orbite par exemple.

Par rapport au principe variationnel, l'intérêt de cette formulation est son caractère géométrique, illustré sur les figures 1.3, 1.4, et l'obtention d'une expression de l'angle α de projection, qui permet de valider ou non l'approximation effectuée.

a) Sous variété complexe de l'espace projectif

Soit $|z\rangle$, $z \in \mathbb{C}$ une famille de vecteurs, ayant une dépendance holomorphe en z . On note $\mathcal{S} = \{|z\rangle, z \in \mathbb{C}\}$ la surface dans l'espace projectif formée par ces états quantiques, qui constitue donc la famille de fonctions d'essai.

Inversement, étant donnée \mathcal{S} une surface complexe de l'espace projectif, il existe une section (locale) holomorphe du fibré en droite, que nous notons $|z\rangle$, $z \in \mathbb{C}$.

(Le vecteur $|z\rangle$ n'est pas normalisé en général). $z \in \mathbb{C}$ paramétrise donc la surface \mathcal{S} . Etablissons l'expression de la métrique sur la surface \mathcal{S} . Pour deux états voisins $[z]$ et $[z + dz]$, on a :

$$d^2([z], [z + dz]) = 1 - |\langle z | z + dz \rangle|^2 \quad (1.24)$$

un calcul basé sur le développement limité de $|z + dz\rangle = \frac{|z + dz\rangle}{\langle z + dz | z + dz \rangle^{1/2}}$, aboutit à :

$$d^2([z], [z + dz]) = (\partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z | z \rangle) dz d\bar{z} \quad (1.25)$$

ce qui donne l'expression de la métrique (1.3). Donc :

$$g_{z\bar{z}} = \partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z|z \rangle \quad (1.26)$$

Comme défini par (1.5), la fonction $\mathcal{K} = \ln \langle z|z \rangle$ est le potentiel de Kähler relatif aux coordonnées (z, \bar{z}) .

La forme symplectique (1.4) est :

$$\Omega = i(\partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z|z \rangle) dz \wedge d\bar{z} \quad (1.27)$$

La un-forme \mathcal{A} (1.19) caractérisant la connexion de Berry par rapport aux vecteurs $|z \rangle$ est :

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \langle z| dz |z \rangle \\ &= \frac{1}{2} \partial_z \ln \langle z|z \rangle dz - \frac{1}{2} \partial_{\bar{z}} \ln \langle z|z \rangle d\bar{z} \end{aligned} \quad (1.28)$$

Si bien que la courbure de Berry (1.15) est :

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = d\mathcal{A} &= -\partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z|z \rangle (dz \wedge d\bar{z}) \\ &= i\Omega \end{aligned} \quad (1.29)$$

conformément à (1.17).

Pour une famille d'états de dimension n , les expressions sont similaires.

b) équations du mouvement

Soit $[z]$, un point de la surface \mathcal{S} . La trajectoire quantique passant par ce point est déterminée par l'équation de Schrödinger (1.19) :

$$|\Psi(t)\rangle_n = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} |z\rangle_n \quad (1.30)$$

pour $t = 0$, $|\Psi(0)\rangle_n = |z\rangle_n$. La trajectoire $[\Psi(t)]$ peut sortir de la surface \mathcal{S} . Appelons \vec{v} le vecteur vitesse de la trajectoire $[\Psi(t)]$ en $t = 0$. On cherche l'expression de la projection orthogonale de ce vecteur sur le plan tangent à la surface \mathcal{S} . (Cette projection orthogonale V se fait dans l'espace tangent en $[z]$ qui est un espace euclidien). On notera $(\dot{z}, \dot{\bar{z}})$ les coordonnées du vecteur projeté V (dans la base naturelle de l'espace tangent complexifié). Voir la figure (1.3).

On a vu, avec (1.22), que : $v = \|\vec{v}\| = \frac{\Delta E}{\hbar}$.

D'après (1.25), la distance entre deux états voisins de la surface est :

$$d^2([z], [z + dz]) = (\partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z|z \rangle) dz d\bar{z} \quad (1.31)$$

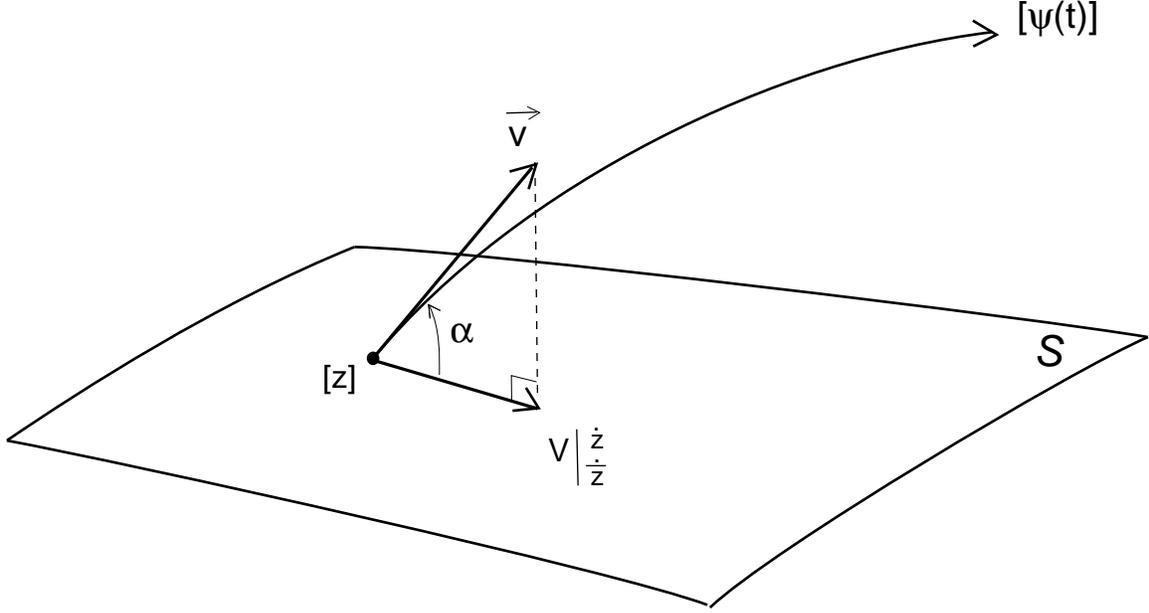


Figure 1.3: *Projection orthogonale de la vitesse d'évolution quantique sur la surface des états \mathcal{S} , dans l'espace projectif.*

Notons

$$\mathcal{H}(z, \bar{z}) = \frac{\langle z | \hat{H} | z \rangle}{\langle z | z \rangle} = {}_n \langle z | \hat{H} | z \rangle_n \quad (1.32)$$

qui est une fonction définie sur \mathcal{S} . Alors toujours par un développement limité, on montre que :

$$\begin{aligned} d^2 &= d([\Psi(t)], [z + dz])^2 \\ &= t^2 \Delta E^2 + (\partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z | z \rangle) dz d\bar{z} - it dz (\partial_z \mathcal{H}) + it d\bar{z} (\partial_{\bar{z}} \mathcal{H}) + o(t^2, |dz|^2, |tdz|) \end{aligned} \quad (1.33)$$

On pose $dz = \dot{z}t$, et on minimise la distance (1.33) par rapport à $(\dot{z}, \dot{\bar{z}})$ en imposant : $\partial_{\dot{z}} d^2 = \partial_{\dot{\bar{z}}} d^2 = 0$.

Cela donne la coordonnée complexe du vecteur projeté \dot{z} :

$$\dot{z} (\partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z | z \rangle) = -i \frac{\partial_z \mathcal{H}}{\hbar} \quad (1.34)$$

(et l'équation complexe conjuguée, faisant que V est bien un vecteur réel).

En faisant cette opération de projection pour tous les points $[z]$ de la surface \mathcal{S} , on obtient un champ de vecteur sur \mathcal{S} exprimé par ses coordonnées $(\dot{z}, \dot{\bar{z}})$. Voir la figure 1.4.

Le champs de vecteur vitesse obtenu sur la surface est un champ Hamiltonien, de fonction de Hamilton (1.32). L'expression géométrique des équations de mouvement est

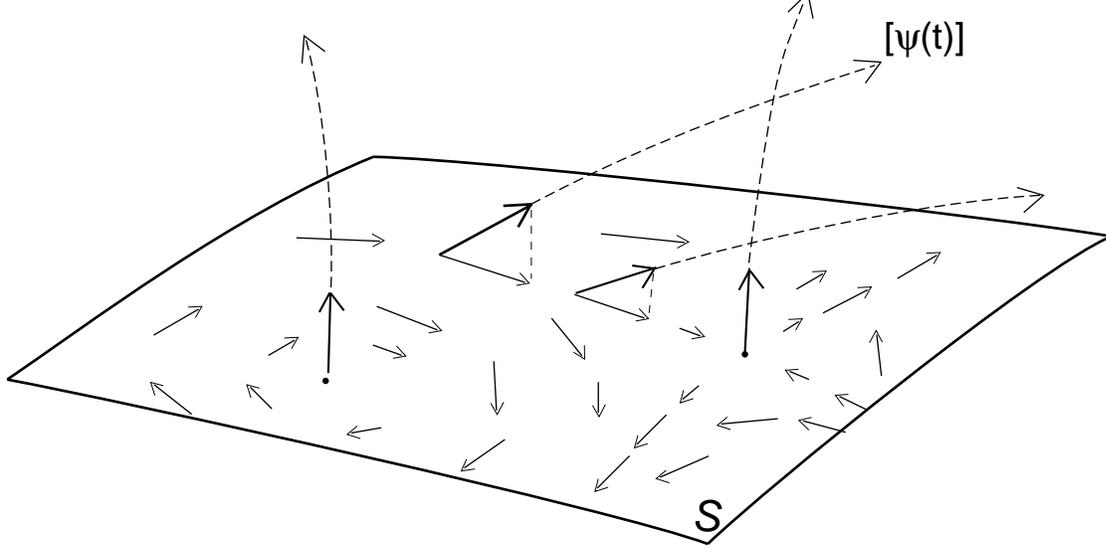


Figure 1.4: *Champ de vecteur hamiltonien sur \mathcal{S} .*

d'après (1.34,1.4) :

$$2\Omega(V, \cdot) = \frac{1}{\hbar} d\mathcal{H}(\cdot) \quad (1.35)$$

Ces équations Hamiltoniennes de mouvement sont celles que l'on obtient aussi par le principe variationnel appliqué à la famille d'états \mathcal{S} [2] (ce qui est naturel). Le principe de projection orthogonal et le principe variationnel dépendant du temps sont donc équivalents. L'intérêt de la formulation ici est son aspect géométrique.

La norme de V est donnée d'après (1.25) et (1.34) par :

$$V^2 = (\partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z|z \rangle) \dot{z} \dot{\bar{z}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{|\partial_z \mathcal{H}|^2}{(\partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z|z \rangle)} \quad (1.36)$$

et l'angle de projection α par :

$$\cos^2(\alpha) = \frac{V^2}{v^2} = \frac{|\partial_z \mathcal{H}|^2}{\Delta E^2 (\partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z|z \rangle)} \quad (1.37)$$

à condition que $v \neq 0$. Dans le cas où $v = 0$, on a $\alpha = \frac{\pi}{2}$, c'est à dire que lorsque la dynamique quantique est orthogonale à la surface, cela correspond à un point fixe du flot Hamiltonien sur \mathcal{S} , voir figure 1.4.

Notons que la projection de la dynamique sur une famille d'états $|z_1, z_2, \dots, z_n \rangle$, $z_i \in \mathbb{C}$, de dimension complexe n , donne des résultats analogues. Au paragraphe 4, nous travaillerons avec une famille de dimension deux. Il est alors utile d'exprimer la forme symplectique dans un système de coordonnées où elle est diagonale. Ce système existe d'après le théorème de Darboux [21].

Pour un Hamiltonien dépendant du temps, $H(t)$, les calculs de projection donnent un résultat identique à (1.34),(1.35), où cette fois-ci la fonction de Hamilton (1.32) dépend du temps.

Nous appliquerons ces formules de projection sur la famille des états cohérents, puis sur la famille des états cohérents déformés aux chapitres 2 et 3. La particularité ainsi que l'intérêt de ces familles d'états est que l'angle de projection α est respectivement de l'ordre de $\sqrt{\hbar}$ et \hbar .

La dynamique quantique devient donc tangente à la surface dans la limite classique $\hbar \rightarrow 0$.

Une propriété de cette famille d'états cohérents est que curieusement, du fait qu'ils forment une famille surcomplète, l'opérateur \hat{H} est déterminé par la connaissance de la fonction $\mathcal{H}(z, \bar{z})$ [8]. Autrement dit, la projection ne fait pas perdre d'information sur la dynamique (mais cela est formel et lié à l'existence d'un prolongement analytique).

Chapitre 2

Les états cohérents standard

Nous allons poursuivre l'étude de l'approximation de la dynamique quantique par une dynamique Hamiltonienne obtenue par projection orthogonale sur une famille d'états donnés. Afin d'obtenir une limite classique, nous allons considérer dans ce chapitre la famille des états cohérents standard du plan.

Ces états cohérents peuvent généralement être construits dans les problèmes habituels de mécanique quantique, traitant un système de particules dans l'espace, soumises à un potentiel. Ils apparaissent aussi en seconde quantification, dans le cas d'un champ bosonique, et sont ainsi beaucoup utilisés en physique nucléaire ou encore en optique pour étudier le champ de photons [8].

Mais le concept d'états cohérents est assez général, et est associé à la représentation linéaire unitaire de groupes de Lie [26]. Pour les états cohérents standard, il s'agit du groupe de Weyl \mathcal{W} . Les états cohérents touchent ainsi un large éventail de domaines en physique [27], et ont des propriétés particulièrement bien adaptées pour envisager la limite classique; cela est bien connu depuis Heisenberg qui pensait par là lever le paradoxe de la réduction du paquet d'onde.

Dans une première partie, la définition et les propriétés essentielles des états cohérents sont rapidement présentées. Le fait essentiel est que la famille des états cohérents standard est paramétrisée par les variables de position et d'impulsion (q, p) , voir (2.8), et que l'on obtient une expression holomorphe (2.15).

Ensuite, le calcul de projection est effectué, le flot Hamiltonien obtenu correspond aux équations habituelles de la mécanique classique (2.46), et l'angle de projection α est évalué par (2.42), et ensuite commenté. On trouve que cet angle est de l'ordre de $\sqrt{\hbar}$, en accord avec le résultat établi par G.A. Hagedorn [4]. Le fait que cet angle tende vers zéro pour $\hbar \rightarrow 0$, et donc que les trajectoires quantiques deviennent tangentes à la surface des

états cohérents, permet de construire des états quantiques ayant une faible incertitude en énergie, à la façon de E.J. Heller, c'est à dire en superposant des états cohérents le long de la trajectoire. L'incertitude en énergie est alors de l'ordre de \hbar . Nous en parlons au chapitre 4.

2.1 Présentation et définition.

Nous allons rappeler la définition et les propriétés générales des états cohérents du plan (ou standard), en reprenant les notations de A. Perelomov [26]. Pour simplifier, nous considérerons dans ce qui suit les états cohérents pour un degré de liberté. L'extension à plusieurs degrés de liberté peut se faire en général sans difficulté. Nous indiquerons les points où cette extension est moins évidente.

Pour un système à un degré de liberté, les opérateurs de position \hat{q} et d'impulsion \hat{p} vérifient :

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \quad (2.1)$$

Il est commode de considérer les opérateurs de création a^+ et d'annihilation a :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{q} + i\hat{p}), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{q} - i\hat{p}) \quad (2.2)$$

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a + a^+), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a^+ - a) \quad (2.3)$$

qui vérifient :

$$[a, a^+] = 1 \quad (2.4)$$

$(a, a^+, 1)$ ou $(\hat{q}, \hat{p}, 1)$ sont des bases de l'algèbre de Weyl \mathcal{W}_1 , et génèrent le groupe de Weyl W_1 . Une représentation unitaire irréductible du groupe de Weyl W_1 est obtenue au moyen des opérateurs $T(g)$ agissant sur l'espace de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. :

$$T(g) = \exp(is1)D(z), \quad s \in \mathbb{R}, z \in \mathbb{Z}, g \in W_1. \quad (2.5)$$

avec $D(z) = \exp(za^+ - \bar{z}a)$.

Nous rappelons que l'action des opérateurs \hat{q} , et \hat{p} est définie par :

$$\hat{q}\Psi(x) = x\Psi(x), \quad \hat{p}\Psi(x) = -\frac{i}{\hbar}\partial_x\Psi(x), \quad \Psi \in \mathcal{H} \quad (2.6)$$

Pour les calculs, les formules de commutation suivantes sont utiles. Elles peuvent être obtenues au moyen d'une représentation matricielle fidèle de l'algèbre \mathcal{W}_1 par des matrices

3×3 [8], ou à l'aide de la formule $e^A e^B = e^{\frac{i}{2}[A,B]} e^{A+B}$, vraie pour deux opérateurs A, B vérifiant : $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$.

$$\begin{aligned}
D(z) &= e^{za^+ - \bar{z}a} \\
&= e^{-\frac{|z|^2}{2}} e^{za^+} e^{-\bar{z}a} \\
&= e^{\frac{|z|^2}{2}} e^{-\bar{z}a} e^{za^+} \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}(p\hat{q} - q\hat{p})} \\
&= e^{-\frac{i}{2\hbar}qp} e^{\frac{ip\hat{q}}{\hbar}} e^{\frac{-iq\hat{p}}{\hbar}}
\end{aligned} \tag{2.7}$$

avec :

$$z = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(q + ip). \tag{2.8}$$

Si bien que $D(z)$ est un opérateur de translation dans l'espace de phase, de la quantité (q, p) . On en déduit la loi de multiplication qui montre que le groupe est non commutatif. Pour $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$,

$$\begin{aligned}
D(\alpha)D(\beta) &= e^{iIm(\alpha\bar{\beta})} D(\alpha + \beta) \\
&= e^{2iIm(\alpha\bar{\beta})} D(\beta)D(\alpha)
\end{aligned} \tag{2.9}$$

L'espace de Hilbert qui est l'espace de représentation, est engendré par les vecteurs $|n \rangle$, $n \in \mathbb{N}$, (qui sont les états propres de l'oscillateur harmonique $\hat{H}_0 = \hbar(a^+ a + \frac{1}{2}) = \hat{q}^2 + \hat{p}^2$) :

$$\begin{aligned}
a|0\rangle_n &= 0 \\
|n\rangle_n &= \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{+n} |0\rangle \\
1 &= \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle_n \langle n|
\end{aligned} \tag{2.10}$$

L'action simple de a sur l'état $|0\rangle_n$ fait que dans les calculs avec les états cohérents, les manipulations algébriques consistent à commuter les opérateurs pour placer les opérateurs a à droite des opérateurs a^+ .

Par définition, les *états cohérents* sont les états quantiques obtenus en faisant agir les éléments $T(g)$ du groupe W_1 sur le vecteur $|0\rangle$. Le sous groupe d'isotropie de cette action est $H = \{\exp(is1), s \in \mathbb{R}\}$ qui laisse l'état $[|0\rangle]$ invariant. Les états cohérents standard forment donc une surface à deux dimensions réelles de l'espace projectif, paramétrisée par $z \in \mathbb{C}$, et dont les vecteurs unitaires représentants sont :

$$|z\rangle_n = D(z)|0\rangle_n, \quad z \in \mathbb{C}. \tag{2.11}$$

Dans la suite, nous appellerons \mathcal{S}_0 la surface dans l'espace projectif constituée par les états cohérents standard; (elle sera identifiée dans la limite $\hbar \rightarrow 0$ à l'espace de phase classique). La fonction d'onde d'un état cohérent standard (ou représentation position "x") est :

$$\begin{aligned}\Psi(x) = \langle x|z\rangle_n &= \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[\frac{i}{\hbar}px\right] \exp\left[-\frac{(x-q)^2}{2\hbar}\right] \exp\left[-i\frac{qp}{2\hbar}\right] \\ &= \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{2\hbar}} e^{zx} \sqrt{\frac{2}{\hbar}} e^{-\frac{1}{2}(z^2 + z\bar{z})}\end{aligned}\quad (2.12)$$

Le module est donc une gaussienne de largeur $\sim \sqrt{\hbar}$ centrée en $x = q$. Sa transformée de Fourier (ou représentation impulsion "p") est :

$$\tilde{\Psi}(y) = \langle y|z\rangle_n = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}qy\right] \exp\left[-\frac{(y-p)^2}{2\hbar}\right] \exp\left[-i\frac{qp}{2\hbar}\right] \quad (2.13)$$

dont le module est une gaussienne de largeur $\sim \sqrt{\hbar}$ centrée en $y = p$. On note aussi les états cohérents par $|q, p\rangle_n = |z\rangle_n$. L'état cohérent $|qp\rangle_n$ a donc des incertitudes en position et impulsion minimales : $\Delta q = \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \rightarrow 0$ pour $\hbar \rightarrow 0$, et a pour valeurs moyennes : $q = \langle qp|\hat{q}|qp\rangle$, $p = \langle qp|\hat{p}|qp\rangle$. Il est donc naturellement associé au point de l'espace de phase classique (q, p) . C'est cette propriété particulière d'être des états localisés en position et impulsion à la limite $\hbar \rightarrow 0$ qui constitue l'intérêt des états cohérents dans l'approche semi-classique et qui fait aussi qu'on les surnomme états quasi-classiques [25].

Nous notons aussi $(\mathcal{Z}, \bar{\mathcal{Z}})$ le système de coordonnées complexes classiques :

$$\mathcal{Z} = z\sqrt{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) \quad (2.14)$$

Les coordonnées (q, p) ou $(\mathcal{Z}, \bar{\mathcal{Z}})$ sont adaptées pour traiter la dynamique classique sur \mathcal{S}_0 mais les variables (z, \bar{z}) restent à l'échelle de la distance quantique (2.20).

L'action particulière de a sur l'état $|0\rangle$, voir (2.10), fait que l'on obtient une représentation holomorphe des états cohérents (section holomorphe de $\mathcal{F} \rightarrow \mathcal{S}_0$) à partir de (2.7) et (2.11) :

$$|z\rangle = e^{za^+}|0\rangle_n \quad (2.15)$$

Ces vecteurs $|z\rangle$ ne sont pas normalisés, et :

$$|z\rangle_n = \frac{|z\rangle}{\langle z|z\rangle^{1/2}} \quad (2.16)$$

avec $\langle z|z\rangle = e^{z\bar{z}} = e^{\frac{\mathcal{Z}\bar{\mathcal{Z}}}{\hbar}}$.

$$a|z\rangle_n = z|z\rangle_n \quad (2.17)$$

Les états cohérents du plan sont invariants sous l'action de l'opérateur de translation $D(z)$:

$$D(z')|z\rangle = e^{-\bar{z}'z - \frac{|z'|^2}{2}}|z' + z\rangle \quad (2.18)$$

$$D(z')|z\rangle_n = e^{i\text{Im}(z'\bar{z})}|z' + z\rangle_n \quad (2.19)$$

D'après (1.26) et (1.4), la forme symplectique Ω et la métrique riemannienne g sur \mathcal{S}_0 sont :

$$g_{z\bar{z}} = \partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z|z\rangle = 1 \quad (2.20)$$

$$\Omega = idz \wedge d\bar{z} = \frac{1}{\hbar} dq \wedge dp \quad (2.21)$$

$$g = |dz|^2 = \frac{1}{2\hbar}(dq^2 + dp^2)$$

La surface \mathcal{S}_0 est donc isométrique au plan $z \in \mathbb{C}$.

D'après (1.28) et (1.29), la connexion de Berry est caractérisée par :

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \frac{1}{2}\bar{z}dz - \frac{1}{2}z d\bar{z} \\ &= \frac{i}{2\hbar}(qdp - pdq) \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\mathcal{F} = d\mathcal{A} = i\Omega = -dz \wedge d\bar{z} = \frac{i}{\hbar}(dq \wedge dp)$$

On remarque que $\frac{\hbar}{i} \oint_{\Gamma} \mathcal{A}$ s'identifie à l'action classique S d'une trajectoire Γ .

Une relation importante est la relation de fermeture qui est une conséquence du lemme de Schur combiné au fait que W_1 agit de façon irréductible dans \mathcal{H} :

$$1 = \int d\mu(z) |z\rangle_n \langle z| \quad (2.23)$$

avec : $d\mu(z) = \frac{1}{2\pi}\Omega$. Cette relation de fermeture exprime que les états cohérents forment une famille génératrice surcomplète de l'espace de Hilbert. Cela permet de définir *les représentations de Bargmann et de Husimi* qui caractérisent un état $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, et qui sont :

$$\begin{aligned} \Psi(z) &= \langle z|\Psi\rangle \\ \mathcal{H}_{\Psi}(z) &= |\langle z|\Psi\rangle|^2 \end{aligned} \quad (2.24)$$

Nous reviendrons longuement sur ces représentations dans la partie 2. Remarquons que d'après (1.1), la distribution de Husimi correspond à la distance entre l'état $[\Psi]$ et un

état cohérent standard $|z\rangle$, "point de l'espace de phase". $\mathcal{H}_\Psi(z) = \cos^2(d(\Psi, z))$.

Bien qu'ils forment une base surcomplète, les états cohérents sont intéressants car ils deviennent orthogonaux à la limite $\hbar \rightarrow 0$:

$$|{}_n\langle \mathcal{Z}' | \mathcal{Z} \rangle_n|^2 = e^{-\frac{|\mathcal{Z}' - \mathcal{Z}|^2}{\hbar}} (\rightarrow 0 \text{ si } \mathcal{Z} \neq \mathcal{Z}') \quad (2.25)$$

En particulier la distribution de Husimi d'un état cohérent $[q_0, p_0]$ est :

$$\mathcal{H}_{q_0, p_0}(q, p) = \mathcal{N} e^{-\frac{1}{2\hbar}((q-q_0)^2 + (p-p_0)^2)} \quad (2.26)$$

C'est donc une gaussienne circulaire, de centre (q_0, p_0) et de largeur $\sim \sqrt{\hbar}$. Voir la figure 8.1.

Soit un domaine \mathcal{D} de l'espace de phase classique \mathcal{S} (fixe dans les variables (q, p)). On considère l'opérateur de projection sur les états cohérents de ce domaine :

$$P_{\mathcal{D}} = \int_{\mathcal{D}} d\mu(z) |z\rangle_n \langle z| \quad (2.27)$$

Alors moyennant quelques hypothèses concernant la régularité du domaine \mathcal{D} , R. Omnes et al. [28] ont montré que dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, $P_{\mathcal{D}}$ est approximativement le projecteur sur un espace de dimension $N = \mathcal{N}_{\mathcal{D}} + o(\hbar^{-1})$, avec :

$$\mathcal{N}_{\mathcal{D}} = \int_{\mathcal{D}} d\mu(z) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathcal{D}} dq dp = \frac{\text{Aire}(\mathcal{D})}{2\pi\hbar} \quad (2.28)$$

Par exemple, si \mathcal{D} est le cercle de centre 0, et de surface S (en variables (q, p)), $P_{\mathcal{D}}$ est approximativement le projecteur sur l'espace de dimension $n+1$ engendré par les vecteurs $(|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n\rangle)$, avec $n = \text{int}(S/(2\pi\hbar))$.

2.2 Projection de l'évolution et limite classique

Supposons donné un Hamiltonien \hat{H} , qui définit une évolution des états quantiques par l'équation de Schrödinger (1.19). Par projection sur la surface des états cohérents \mathcal{S}_0 , on obtient une dynamique Hamiltonienne, dont la fonction de Hamilton est (1.32) :

$$\mathcal{H}_N(z, \bar{z}) = {}_n\langle z | \hat{H} | z \rangle_n = {}_n\langle qp | \hat{H} | qp \rangle_n \quad (2.29)$$

Cette fonction $\mathcal{H}_N(z)$ est aussi appelée le symbole normal de \hat{H} [8]. Les équations de mouvement sont d'après (1.34) :

$$\partial_t z = -\frac{i}{\hbar} \partial_{\bar{z}} \mathcal{H}_N(z) \quad (2.30)$$

ou en variables réelles (q, p) (2.8) :

$$\begin{cases} \partial_t q = \partial_q \mathcal{H}_N(q, p) \\ \partial_t p = -\partial_q \mathcal{H}_N(q, p) \end{cases} \quad (2.31)$$

Afin de pouvoir parler de limite classique pour la dynamique, nous supposons dans la suite que pour $\hbar \rightarrow 0$, l'Hamiltonien (2.29), en variables (q, p) , admet un développement limité de la forme :

$$\mathcal{H}_N(q, p) = \mathcal{H}_{N_0}(q, p) + \hbar \mathcal{H}_{N_1}(q, p) + \hbar^2 \mathcal{H}_{N_2}(q, p) + \dots \quad (2.32)$$

$\mathcal{H}_{N_0}(q, p)$ est appelé le symbole classique de \hat{H} , et aussi noté $\mathcal{H}_{cl}(q, p)$.

Sur un temps fixé T , l'état $[z]$ parcourt une "longueur classique" de trajectoire :

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^T \sqrt{\partial_t q^2 + \partial_t p^2} dt \\ &= \sqrt{\hbar} \int_{z_0}^{z(T)} |dz| \end{aligned} \quad (2.33)$$

Ainsi la longueur de la trajectoire mesurée avec la "métrique quantique" (2.20) est $d = L/\sqrt{\hbar}$. On parlera de cette façon dans la suite, de distance classique L et de distance quantique d .

Calcul de l'angle de projection

Nous allons maintenant calculer l'angle α de la projection. Pour cela, il faut évaluer l'incertitude en énergie ΔE d'un état cohérent $|z\rangle_n$, en commençant tout d'abord par l'état $|0\rangle_n$. D'après (2.10) et (2.15), on a :

$$\partial_z^n |z\rangle = a^{+n} |z\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{H}^2 | 0 \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle 0 | \hat{H} | n \rangle \langle n | \hat{H} | 0 \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} |\langle 0 | \hat{H} a^{+n} | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} |\partial_z^n \langle z | \hat{H} | z \rangle|_{z=0}^2 \end{aligned} \quad (2.34)$$

or on vérifie par récurrence que :

$$\forall n, \partial_z^n \langle z | \hat{H} | z \rangle_{/z=0} = \partial_z^n \langle z | \hat{H} | z \rangle_n_{/z=0} \quad (2.35)$$

donc :

$$\langle 0 | \hat{H}^2 | 0 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} |\partial_z^n \langle z | \hat{H} | z \rangle_n|_{z=0}^2 \quad (2.36)$$

on applique cette relation à l'opérateur $H' = D^+(z')\hat{H}D(z')$, et en notant $|z''\rangle_n = D(z')|z\rangle_n$, il vient :

$$\begin{aligned}\partial_z^n {}_n\langle z|\hat{H}'|z\rangle_n /_{z=0} &= \partial_z^n {}_n\langle z|D^+(z')\hat{H}D(z')|z\rangle_n /_{z=0} \\ \partial_z^n {}_n\langle z|\hat{H}'|z\rangle_n /_{z=0} &= \partial_z^n {}_n\langle z|D^+(z')\hat{H}D(z')|z\rangle_n /_{z=0} \\ &= \partial_z^n {}_n\langle z+z'|z+z'\rangle_n /_{z=0} \\ &= \partial_{z''}^n {}_n\langle z''|\hat{H}|z''\rangle_n /_{z''=z'}\end{aligned}\quad (2.37)$$

Et donc :

$${}_n\langle z|\hat{H}^2|z\rangle_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} |\partial_{z'}^n {}_n\langle z'|\hat{H}|z'\rangle_n|^2_{z'=z} \quad (2.38)$$

qui s'appelle la formule de Moyal [6].

En utilisant les variables classiques $(\mathcal{Z}, \bar{\mathcal{Z}})$ (2.14), on déduit que :

$${}_n\langle \mathcal{Z}|\hat{H}^2|\mathcal{Z}\rangle_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hbar^n}{n!} |\partial_{\mathcal{Z}'}^n {}_n\langle \mathcal{Z}'|\hat{H}|\mathcal{Z}'\rangle_n|^2_{\mathcal{Z}'=\mathcal{Z}} \quad (2.39)$$

donc :

$$\Delta E^2 = {}_n\langle \mathcal{Z}|\hat{H}^2|\mathcal{Z}\rangle_n - ({}_n\langle \mathcal{Z}|\hat{H}|\mathcal{Z}\rangle_n)^2 = \hbar |\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_N|^2 + \frac{\hbar^2}{2!} |\partial_{\mathcal{Z}}^2 \mathcal{H}_N|^2 + \dots \quad (2.40)$$

Et avec (1.37) :

$$\begin{aligned}\cos^2(\alpha) &= \frac{\hbar |\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_N|^2}{\left(\hbar |\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_N|^2 + \frac{\hbar^2}{2!} |\partial_{\mathcal{Z}}^2 \mathcal{H}_N|^2 + \dots\right)} \\ &= 1 - \frac{\hbar}{2!} \frac{|\partial_{\mathcal{Z}}^2 \mathcal{H}_N|^2}{|\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_N|^2} + o(\hbar)\end{aligned}\quad (2.41)$$

ou encore :

$$\alpha = \arctan\left\{\left(\sum_{n \geq 2} \frac{\hbar^{n-1}}{n!} \frac{|\partial_{\mathcal{Z}}^n \mathcal{H}_N|^2}{|\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_N|^2}\right)^{1/2}\right\}$$

donc :

$$\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \frac{|\partial_{\mathcal{Z}}^2 \mathcal{H}_{cl}|}{|\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_{cl}|} + o(\hbar^{1/2}) \quad (2.42)$$

(Ceci est non valable pour les points fixes où $\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_{cl} = 0$).

$|\partial_t \mathcal{Z}| = |\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_{cl}|$ est la vitesse dans l'espace de phase. Aux points fixes pour lesquels $\partial_t \mathcal{Z} = \partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H} = 0$, l'expression (2.42) de l'angle diverge. La raison est que la trajectoire exacte devient orthogonale à la surface près de ces points, comme le montre la figure (1.4), et l'angle tends vers $\frac{\pi}{2}$.

$|\partial_{\mathcal{Z}}^2 \mathcal{H}_{cl}|$, terme du hessien de \mathcal{H}_{cl} , est relié à la divergence locale des trajectoires.

L'angle $\alpha \rightarrow 0$ pour $\hbar \rightarrow 0$, donc la trajectoire quantique exacte d'un état cohérent devient tangente à la surface \mathcal{S}_0 . Ainsi les équations de mouvement classiques (2.31) peuvent être

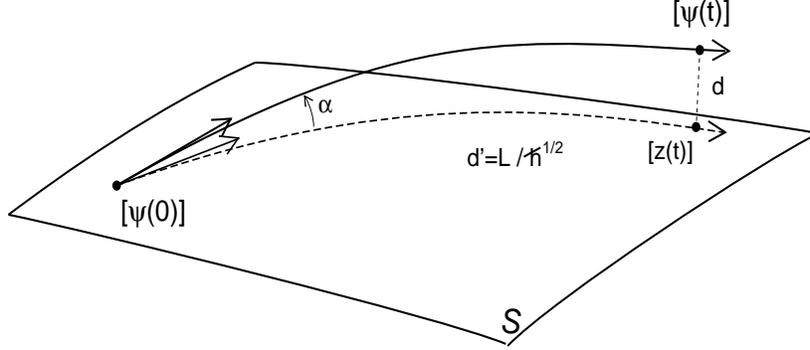


Figure 2.1: Trajectoire quantique exacte $[\Psi(t)]$ et trajectoire classique approchée $[z(t)]$.

considérées comme une approximation de la dynamique quantique pour les temps courts. Une approximation qui s'améliore avec $\hbar \rightarrow 0$. Voir la figure (2.1).

Afin d'évaluer cette approximation, il nous faut estimer la distance qu'il y a entre l'état exact $[\Psi(t)]$ et l'état cohérent $[z(t)]$ ayant suivi la trajectoire classique passant par $[z(0)] = [\Psi(0)]$, après un temps t fixé. En raisonnant sur le triangle $(\Psi(0), z(t), \Psi(t))$, on déduit que :

$$d(\Psi(t), z(t)) \sim \tan(\alpha) d(\Psi(0), z(t)) \quad (2.43)$$

Si L est la distance classique entre $\Psi(0)$ et $z(t)$ (2.33),

$$L = \sqrt{\hbar} d(\Psi(0), z(t)) \quad (2.44)$$

on a :

$$d(\Psi(t), z(t)) \sim C\sqrt{\hbar}(L/\sqrt{\hbar}) \sim CL. \quad (2.45)$$

Où C est une constante. Cette approximation grossière montre que la distance entre l'état exact $\Psi(t)$ et son approximation par un état cohérent $z(t)$, ne tend pas vers zéro lorsque $\hbar \rightarrow 0$.

Au chapitre suivant, l'introduction des états déformés permettra de réduire l'angle à l'ordre $\sim \hbar$. Cela nous fera comprendre que l'écart est ici dû à la non prise en compte de l'étalement du paquet d'onde, phénomène bien connu.

Pour un problème à plusieurs degrés de liberté, les formules ci dessus sont similaires. On obtient que l'angle est toujours de l'ordre $\sim \sqrt{\hbar}$.

Si l'on ne considère que le premier terme du développement (2.32) pour écrire les équations de mouvement (2.31), l'erreur $\Delta q \sim \Delta p \sim \hbar$ ajoutée à (2.45) équivaut d'après (2.20) à une distance inférieure à l'erreur déjà commise en projetant.

En conclusion de ce paragraphe, les équations de mouvement classiques, indépendantes de \hbar , sont :

$$\begin{cases} \partial_t q = \partial_p \mathcal{H}_{cl}(q, p) \\ \partial_t p = -\partial_q \mathcal{H}_{cl}(q, p) \end{cases} \quad (2.46)$$

et permettent d'approcher l'évolution quantique d'un état cohérent, avec une erreur exprimée par un angle (2.42), $\alpha \sim \sqrt{\hbar}$.

Remarque : Une première estimation sur les états stationnaires que nous permet de faire les états cohérents, est la suivante : d'après (2.40), l'incertitude en énergie d'un état cohérent est $\Delta E \sim \sqrt{\hbar} |\partial_z \mathcal{H}|$. ($\rightarrow 0$ pour $\hbar \rightarrow 0$). Donc inversement, un état stationnaire d'énergie E se décompose principalement sur des états cohérents d'énergie moyenne $(E \pm \delta E)$, avec $\delta E \sim \sqrt{\hbar}$. Cela signifie que la distribution de Husimi (2.24) d'un état stationnaire est localisée sur la couche d'énergie classique E , avec une largeur $|\delta \mathcal{Z}| \sim \delta E / |\partial_z \mathcal{H}_{cl}| \sim \sqrt{\hbar}$.

Si on appelle $\mathcal{D}_E = \{(q, p) / \mathcal{H}(q, p) \leq E\}$ le domaine de l'espace de phase d'énergie inférieure à E , de surface $\mathcal{Aire}(\mathcal{D}_E)$, alors \mathcal{P}_E est approximativement le projecteur (2.27) sur les états stationnaires $|\Psi_n\rangle$ d'énergie E_n inférieure à E , qui par ailleurs forme un espace de dimension $\sim \mathcal{N}_{D_E} = \frac{\mathcal{Aire}(\mathcal{D}_E)}{2\pi\hbar}$. De ce raisonnement formulé non rigoureusement, on retrouve la formule de Weyl :

$$\text{cardinal} \{|\Psi_n\rangle \text{ t.q. } E_n \leq E\} = \frac{1}{2\pi\hbar} \mathcal{Aire}(\mathcal{D}_E) + o(\hbar^{-1}) \quad (2.47)$$

Chapitre 3

Les états cohérents déformés.

Nous allons considérer les états cohérents déformés ("squeezed coherent states"), ce qui va permettre de réduire l'angle de projection d'un ordre de grandeur et ainsi d'améliorer l'approximation précédente.

L'évolution des paquets d'ondes gaussiens a été beaucoup étudiée, notamment par Hepp [3], Littlejohn [6] et A.J. Heller [5].

La définition des états cohérents déformés et quelques propriétés utiles sont rappelées et développées dans l'appendice A.

Les états cohérents déformés forment une famille d'états quantiques de dimension réelle $2N + N(N + 1)$ pour un problème à N degrés de liberté, et contiennent entre autres les états cohérents standard. Un état cohérent déformé est un paquet d'onde gaussien, et $2N$ variables paramétrisent sa position et $N(N + 1)$ variables sa déformation elliptique.

Pour simplifier l'exposé, nous ne traitons que le cas à un degré de liberté. Le centre du paquet d'onde gaussien est paramétré par $z \equiv (q, p)$, et sa déformation par $R \in \mathbb{C}$ (A.15). Les états cohérents déformés ont beaucoup été utilisés en optique sous le nom d'états cohérents "comprimés" mais aussi en physique nucléaire pour étudier des systèmes de plusieurs particules, dans le formalisme de la transformation de Bogolubov pour les bosons [2].

La déformation elliptique est obtenue par l'action d'un élément du groupe symplectique (ou groupe des transformations canoniques linéaires, autre que les translations). Cela est résumé sur les premières figures de l'appendice A.

L'équation (A.39) donne l'expression d'un état cohérent déformé en fonction de sa déformation R et de sa position z dans l'espace de phase. Mais pour les manipulations algébriques et l'application du formalisme du chapitre 1.3, l'expression holomorphe (A.41) est utile.

Au paragraphe suivant nous obtenons les équations de "mouvement classique" d'évolution (3.5) et (3.6), d'un état cohérent déformé, par projection de l'évolution quantique exacte. L'angle de projection α_D sera ensuite calculé (3.7) et discuté.

Finalement, nous vérifierons que les équations de mouvement obtenues sont identiques à celles obtenues par linéarisation du flot Hamiltonien au voisinage de la trajectoire classique (3.13). Ces équations constituent ce qui s'appelle l'approximation linéaire dans l'étalement du paquet d'onde [5]. Il ressortira néanmoins que la rotation d'un vecteur tangent classique décrite par la variable θ (3.13), figure A.1, est absente de la description de l'évolution de l'état cohérent déformé (3.6).

De cette comparaison, il apparaîtra de plus une différence entre la déformation d'une distribution de Husimi et celle d'une distribution de Liouville. La dernière étant plus déformée que la première par une puissance deux, voir (A.58), et les figures A.4, A.5. Cette différence sera expliquée dans l'appendice A et ne semble avoir été mentionnée à notre connaissance dans [29], page 1454 et [30] page 65.

3.1 Projection de l'évolution quantique et équations du mouvement.

Nous allons à nouveau considérer les équations du mouvement de Hamilton obtenues par "projection orthogonale" des vecteurs vitesse d'évolution quantique, en suivant la démarche du paragraphe 2. Mais cette fois ci, cette projection se fait sur la famille des états cohérents déformés, paramétrisés par les variables $(z, R) \in \mathbb{C}^2$.

La fonction de Hamilton définie sur cette famille est d'après (1.32), et la notation (A.80) :

$$\mathcal{H}_D(R, z) = {}_n\langle z, R | \hat{H} | z, R \rangle_n \quad (3.1)$$

Les équations de mouvement sont alors d'après (1.35), et en utilisant (A.47), ainsi que la variable "classique" $\mathcal{Z} = z\sqrt{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip)$ (2.14) :

$$\begin{cases} \partial_t \mathcal{Z} = -i\partial_{\bar{\mathcal{Z}}} \mathcal{H}_D \\ \partial_t R = -\frac{2i\gamma^2}{\hbar} \partial_{\bar{R}} \mathcal{H}_D \end{cases} \quad (3.2)$$

Ces équations écrites ici à \hbar fixé, décrivent donc le mouvement du centre d'un état cohérent déformé $\mathcal{Z}(t)$, ainsi que sa déformation elliptique $R(t)$.

Dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, nous montrons dans l'appendice A que la fonction de Hamilton

admet le développement suivant :

$$\mathcal{H}_D(R, \mathcal{Z}) = \mathcal{H}_{cl}(\mathcal{Z}) + \hbar \mathcal{H}_{qu}(R, \mathcal{Z}) + o(\hbar) \quad (3.3)$$

avec :

$$\mathcal{H}_{qu}(R, \mathcal{Z}) = \frac{1}{\Upsilon} \left(\frac{R}{2} \partial_{\mathcal{Z}}^2 \mathcal{H}_{cl} + \frac{\bar{R}}{2} \partial_{\bar{\mathcal{Z}}}^2 \mathcal{H}_{cl} + R\bar{R} \partial_{\mathcal{Z}} \partial_{\bar{\mathcal{Z}}} \mathcal{H}_{cl} \right) + \mathcal{H}_{N_1}(\mathcal{Z}) \quad (3.4)$$

et $\Upsilon = 1 - R\bar{R}$.

Les équations de mouvement (3.2) tendent donc vers le système indépendant de \hbar :

$$\begin{cases} \partial_t \mathcal{Z} = -i \partial_{\bar{\mathcal{Z}}} \mathcal{H}_{cl} + O(\hbar) \\ \partial_t R = -2i \Upsilon^2 \partial_{\bar{R}} \mathcal{H}_{qu} + O(\hbar) \end{cases} \quad (3.5)$$

et au premier ordre en \hbar , on retrouve les équations de Hamilton 2.46. Ces équations de mouvement peuvent se réécrire à l'aide de (3.4) :

$$\begin{cases} \partial_t \mathcal{Z} = -i \partial_{\bar{\mathcal{Z}}} \mathcal{H}_{cl} \\ \partial_t R = -i [\partial_{\bar{\mathcal{Z}}}^2 \mathcal{H}_{cl} + 2R \partial_{\mathcal{Z}} \partial_{\bar{\mathcal{Z}}} \mathcal{H}_{cl} + R^2 \partial_{\mathcal{Z}}^2 \mathcal{H}_{cl}] \\ \quad = -i [\partial_{\bar{\mathcal{Z}}} + R \partial_{\mathcal{Z}}]^2 \mathcal{H}_{cl} \end{cases} \quad (3.6)$$

Elles ne font intervenir que le symbole classique. On remarque aussi que la première équation est l'équation de mouvement habituelle d'un point dans l'espace de phase $\mathcal{Z} \equiv (q, p)$, et n'est pas couplée au paramètre de déformation $R(t)$ (qui lui par contre est couplé à la variable \mathcal{Z} d'après la deuxième équation).

Calcul de l'angle de projection α_D .

Le calcul de l'angle de projection α_D est effectué dans l'appendice A. On obtient que pour $\hbar \rightarrow 0$, l'angle est :

$$\alpha_D = \hbar \left(\frac{|\partial_{\mathcal{Z}} + \bar{R} \partial_{\bar{\mathcal{Z}}}|^3 \mathcal{H}_{cl}(\mathcal{Z})|^2}{\Upsilon^2 6 [R(\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_{cl})^2 + \bar{R}(\partial_{\bar{\mathcal{Z}}} \mathcal{H}_{cl})^2 + (1 + R\bar{R}) |\partial_{\bar{\mathcal{Z}}} \mathcal{H}_{cl}|^2]} \right)^{1/2} + o(\hbar) \quad (3.7)$$

Par rapport aux états cohérents standard (2.42), le fait de tenir compte de l'étalement de l'état cohérent par la variable R , fait donc gagner un demi ordre de grandeur dans la dépendance en \hbar . On s'aperçoit de plus avec (A.95), que l'angle est nul pour les Hamiltoniens quadratiques. Cela signifie dans ce cas que lors de l'évolution, un état cohérent déformé reste un état cohérent déformé, soit encore que les équations de mouvement (3.2) sont exactes, résultat bien connu [8].

L'expression (3.7) de l'angle α_D diverge pour les points fixes de la dynamique classique sur l'espace de phase (q, p) , où $\partial_{\mathcal{Z}}\mathcal{H}_{cl} = 0$. En ces points particuliers, on a alors :

$$\alpha_D = \sqrt{\hbar} \left(\frac{|(\partial_{\mathcal{Z}} + \bar{R}\partial_{\bar{\mathcal{Z}}})^3 \mathcal{H}_{cl}(\mathcal{Z})|^2}{\frac{3}{4}\Upsilon|(\partial_{\bar{z}} + R\partial_z)^2 \mathcal{H}_{cl}|^2} \right)^{1/2} + o(\sqrt{\hbar})$$

Cette nouvelle expression diverge à nouveau si $\partial_R\mathcal{H}_{qu} = 0$, c'est à dire pour les points fixes des équations (3.5). Nous allons voir qu'il s'agit en fait des points fixes stables de la dynamique sur l'espace de phase (q, p) . Autrement dit, en effectuant la projection sur la variété des états cohérents déformés (figure 1.4), les singularités apparaissent pour les points fixes stables de la dynamique classique (et alors $\alpha_D \sim \frac{\pi}{2}$).

Nous allons évaluer la validité de l'approximation de la dynamique exacte par les équations de mouvement (3.2), en considérant un état cohérent initial $[\Psi(0)] = [|R_0, \mathcal{Z}_0 \rangle]$, et en estimant la distance qui sépare l'état $[\Psi(t)]$, (résultat de l'évolution quantique après un temps fini t), de l'état cohérent $[|R(t), \mathcal{Z}(t) \rangle]$, obtenu en intégrant les équations de mouvement (3.2), sur le même intervalle de temps. Voir figure (2.1).

D'après la limite (3.5), le terme entre accolades de (3.7) est borné, et l'angle α_D est donc uniformément de l'ordre $\alpha_D \sim \hbar$. La distance entre $[\Psi(0)]$ et $[R(t), z(t)]$ est de l'ordre de $d' \sim \frac{L}{\sqrt{\hbar}}$ (2.44) et donc la distance recherchée est :

$$d = d([\Psi(t)], [R(t), r(t)]) \sim \hbar \left(\frac{L}{\sqrt{\hbar}} \right) \sim \sqrt{\hbar} \quad (3.8)$$

On voit donc que cette distance tend vers zéro à la limite classique ($\hbar \rightarrow 0$); ce qui n'était pas le cas avec les états cohérents standard (2.45). Ce dernier raisonnement est intuitif mais peu rigoureux. Il faut surtout montrer que le flot quantique ne diverge pas hors de la surface. Cela tient au fait que le flot quantique est une isométrie, comme le montre la démonstration suivante :

Justification de 3.8 :

La propriété que l'angle entre la surface S et le flot $[\Psi(t)]$ au point z est α , s'exprime par :

$$d_l = \tan(\alpha_z)l + o(l), \text{ pour } l \rightarrow 0$$

où d_l est la distance entre $[\Psi(t)]$ et $z(t)$. Voir figure 3.1.

donc :

$$\exists l_z \text{ tel que } \forall l < l_z, d_l < 2 \tan(\alpha_z)l \quad (3.9)$$

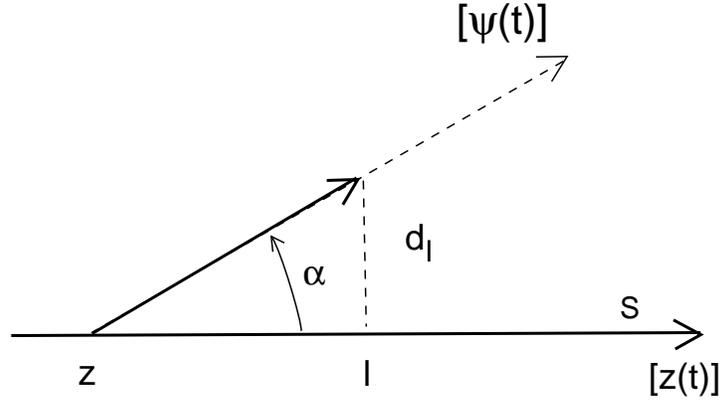


Figure 3.1:

On suppose que l_z est minoré sur la surface S (au moins sur un domaine qui nous intéresse)

:

$$\exists l_0 \text{ t.q. } \forall z \ l_0 < l_z$$

Par ailleurs, pour \hbar fixé assez petit, on peut trouver une majoration uniforme de α_z d'après (3.7) :

$$\exists \alpha = O(\hbar) \text{ t.q. } \forall z \ \alpha_z < \alpha$$

La majoration (3.9) n'est valable que sur une petite longueur l_0 , mais peut s'étendre sur une plus grande longueur d' , en découpant cette longueur en segments de longueur l_0 , et en utilisant la propriété que le flot est une isométrie, comme schématisé sur la figure (3.2).

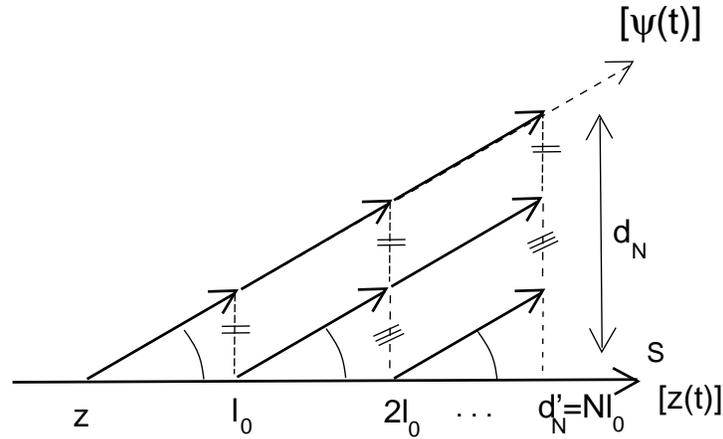


Figure 3.2:

$$d'_N = Nl_0, \quad N \in \mathbb{N}$$

Par récurrence sur N , on déduit que la distance d_N entre l'état exact $\Psi(t)$ et la trajectoire intégrée $(R(t), z(t))$ sur S est majorée :

$$d_N < N 2 \tan(\alpha) l_0$$

En prenant $N = \text{int} \left(\frac{1}{\sqrt{\alpha}} \frac{1}{l_0} \right)$, on obtient : $d_N < 2 \frac{\tan(\alpha)}{\sqrt{\alpha}}$. Ainsi, dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, on a $\alpha = O(\hbar)$, donc $d = d_N = O(\sqrt{\hbar})$. c.q.f.d.

Comme l'erreur d'approximation correspond à une distance $d \sim \sqrt{\hbar}$, on peut aussi commettre une erreur sur les variables \mathcal{Z} et R de l'ordre de $\delta\mathcal{Z} \sim \hbar$ et $\delta R \sim \sqrt{\hbar}$, sans que l'approximation ne devienne plus mauvaise. Les équations de mouvement indépendantes de \hbar (3.5) conviennent donc.

Remarquons finalement, que à \hbar fixé, l'angle α_D diverge pour $|R| \rightarrow 1$ (à cause du terme $1/\Upsilon^2$ dans (3.7)), c'est à dire pour des états cohérents déformé prenant une taille macroscopique, puisqu'alors, l'approximation linéaire n'est plus valable.

3.2 Interprétation classique de la déformation du paquet d'onde.

Les équations de mouvement (3.6) décrivent le mouvement du paquet d'onde déformé, le mouvement de son centre $\mathcal{Z}(t)$, et de sa déformation elliptique $R(t)$. Dans ce paragraphe, nous allons vérifier la propriété connue [6, 5], qui est que l'évolution de sa déformation $R(t)$ peut s'interpréter classiquement en terme de linéarisation des trajectoires voisines à $\mathcal{Z}(t)$. Plus précisément, $R(t)$ est l'évolution des paramètres d'une ellipse, évoluant avec l'équation de Liouville, dans l'approximation linéaire.

On travaille dans le système de coordonnées canoniques (q, p) , de l'espace de phase. Considérons une trajectoire $\mathcal{Z}'(t) \equiv (q'(t), p'(t))$ voisine de la trajectoire $\mathcal{Z}(t) \equiv (q(t), p(t))$.

On note :

$$\begin{cases} q'(t) = q(t) + \delta q(t) \\ p'(t) = p(t) + \delta p(t) \end{cases} \quad (3.10)$$

L'équation de mouvement de $(\delta q(t), \delta p(t))$ est dans l'approximation linéaire :

$$\begin{aligned} \partial_t(\delta q(t)) &= \partial_p \mathcal{H}_{cl}(q', p') - \partial_p \mathcal{H}_{cl}(q, p) \\ &= \partial_p \partial_q \mathcal{H}_{cl}(q, p) \delta q(t) + \partial_p^2 \mathcal{H}_{cl}(q, p) \delta p(t) \\ \partial_t(\delta p(t)) &= -\partial_q^2 \mathcal{H}_{cl}(q, p) \delta q(t) - \partial_q \partial_p \mathcal{H}_{cl}(q, p) \delta p(t) \end{aligned} \quad (3.11)$$

On déduit donc que l'équation de mouvement d'un vecteur $v(t) = (v_q(t), v_p(t))$ tangent à l'espace de phase en $(q(t), p(t))$, est :

$$\begin{aligned} \partial_t \begin{pmatrix} v_q \\ v_p \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \partial_q \partial_p \mathcal{H} & \partial_p^2 \mathcal{H} \\ -\partial_q^2 \mathcal{H} & -\partial_p \partial_q \mathcal{H} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_q \\ v_p \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_q^2 \mathcal{H} & \partial_q \partial_p \mathcal{H} \\ \partial_q \partial_p \mathcal{H} & \partial_p^2 \mathcal{H} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_q \\ v_p \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.12)$$

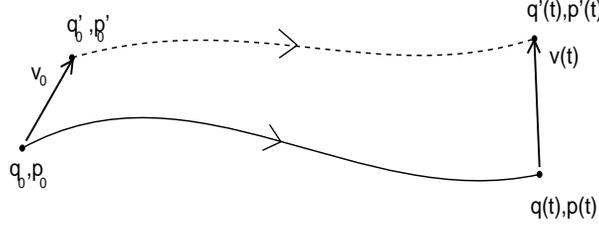


Figure 3.3: *Evolution d'un vecteur tangent.*

La matrice 2×2 génératrice de cette évolution est aussi un générateur du groupe symplectique. (car d'après (A.10), les éléments proches de l'identité s'écrivent : $S(\epsilon) = 1 + \epsilon JK$, où K est une matrice symétrique). Et donc le vecteur $v(t)$ est obtenu comme l'image du vecteur $v(0)$ par une application symplectique (relativement au système de coordonnées canoniques (q, p)). Voir la figure 3.3.

Considérons maintenant deux vecteurs tangents $(v_{1,0}, v_{2,0})$ en (q_0, p_0) , formant une base, et obtenus comme l'image des vecteurs de base (e_q, e_p) par une transformation symplectique M^{-1} . Voir la figure A.2. Nous avons vu que ces deux vecteurs $(v_{1,0}, v_{2,0})$ sont caractérisés par la matrice symplectique M , ou encore par le couple $(R_0, \theta_0) \in D_1 \times [0, 2\pi]$. Le nombre complexe R_0 caractérise l'ellipse de rayon π inscrite dans le parallélogramme (et tangente au milieu des cotés), défini par les vecteurs $(v_{1,0}, v_{2,0})$, et θ_0 indique la position de ces vecteurs sur l'ellipse.

Ces deux vecteurs (v_1, v_2) sont sujets aux équations de mouvement (3.12). Par les relations (A.23), on déduit les équations de mouvement pour la matrice symplectique M , en coordonnées (U, V) puis en coordonnées (R, θ) par (A.19). On obtient :

$$\begin{cases} \partial_t R = -i[\partial_{\bar{z}}^2 \mathcal{H}_{cl} + 2R \partial_z \partial_{\bar{z}} \mathcal{H}_{cl} + R^2 \partial_z^2 \mathcal{H}_{cl}] \\ \partial_t \theta = \frac{R}{2} \partial_z^2 \mathcal{H}_{cl} + \partial_z \partial_{\bar{z}} \mathcal{H}_{cl} + \frac{\bar{R}}{2} \partial_{\bar{z}}^2 \mathcal{H}_{cl} \end{cases} \quad (3.13)$$

La première équation est identique à l'équation de mouvement (3.6) qui était obtenue par approximation de l'évolution quantique. Elle décrit ici l'évolution d'une ellipse sous

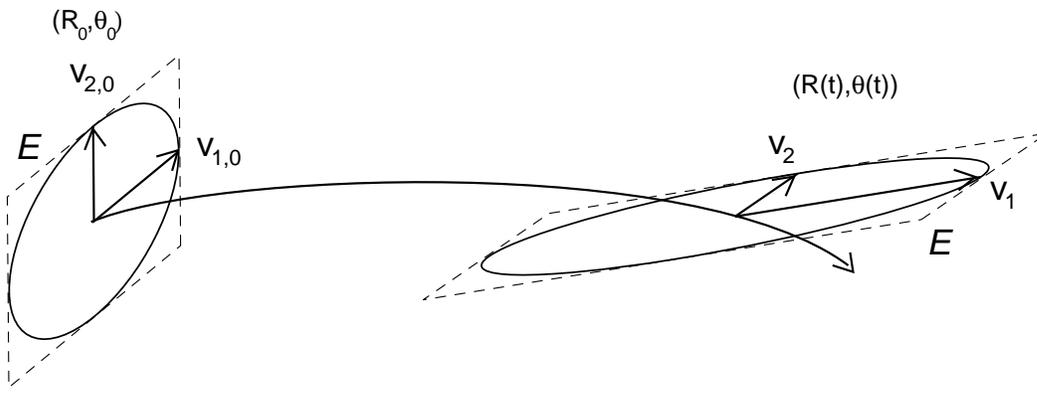


Figure 3.4: Evolution d'un couple de vecteurs tangents $(v_1, v_2)(t)$ caractérisés par les paramètres $(R(t), \theta(t))$. Précisément, $R(t)$ caractérise l'ellipse engendrée et $\theta(t)$ est l'angle qui précise la position des vecteurs dans cette ellipse. Cette ellipse notée \mathcal{E} est plus excentrique que les lignes de niveau de la distribution de Husimi notées \mathcal{E}_h .

l'équation de Liouville linéarisée. La deuxième équation décrit la rotation $\theta(t)$ de l'ellipse sur elle-même, et elle n'apparaît pas dans les équations de mouvement obtenues par projection (3.5), pour la bonne raison que θ n'est pas un paramètre servant à caractériser un état cohérent déformé. Si l'on se reporte aux paragraphes 3.1.c-d, on s'aperçoit que ce paramètre a disparu lors de l'action du groupe métaplectique sur l'état $|0\rangle$, (A.26). On pourrait penser que ce paramètre se retrouve dans la phase de l'état cohérent. Cela est vrai à un degré de liberté comme ici, mais faux pour $N(> 1)$ degrés de liberté car la phase est isomorphe au groupe $U(1)$ et le sous groupe d'isotropie est lui $U(N)$ de dimension plus grande.

En conclusion de ce paragraphe, l'évolution des états cohérents déformés, est entièrement déterminée, au premier ordre, par l'évolution classique sur l'espace de phase. La distribution de Husimi d'un état cohérent est une gaussienne elliptique (fig. A.4). Son centre $\mathcal{Z}(t)$ suit l'équation de Hamilton (3.6), quant aux paramètres de l'ellipse \mathcal{E}_h de la distribution, nous avons vu qu'elle diffère des paramètres de l'ellipse \mathcal{E} , par une puissance de deux. (A.58). La distribution de Husimi ne vérifie donc pas l'équation d'évolution de Liouville à l'ordre \hbar . Cela est lié au fait que la distribution de Husimi n'est pas invariante par transformation symplectique (A.76). K. Takahashi a montré qu'il y avait une meilleure correspondance entre l'évolution de la distribution de Husimi et l'évolution de Liouville convoluée par des gaussiennes ("coarse-grained mechanics") [31].

Chapitre 4

Quantification d'une trajectoire périodique dans l'espace des états.

Une fois les équations de mouvement classique obtenues, se pose naturellement le problème de quantification, qui consiste à rechercher le spectre de l'Hamiltonien (niveaux d'énergies et états stationnaires) à partir des trajectoires classiques. Cette opération se fait généralement à l'aide de l'approximation de la phase stationnaire dans l'intégrale de chemin (voir chap. 11 [2]), ou par la méthode semi-classique W.K.B. La première méthode montre que les trajectoires périodiques classiques et leur action classique sont les ingrédients de base dans ces formules de quantification. La deuxième méthode aboutit à la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld ou E.B.K. qui met en jeu des variétés Lagrangiennes invariantes sélectionnées par leur action.

Par ailleurs J. Heller a présenté une méthode d'évaluation d'états stationnaires, en superposant des fonctions d'ondes gaussiennes le long d'une trajectoire classique périodique [32], ce qui pour la première fois a soulevé la question liées aux cicatrices ("scars") dans la structure des fonctions d'ondes stationnaires.

R.G. Littlejohn [6] a utilisé de cette façon les états cohérents déformés, et a montré comment la règle de quantification E.B.K. se déduit d'un argument simple en terme de phase de Berry : si un paquet d'onde évolue sur une trajectoire périodique stable, s'il revient identique à lui-même au bout d'une période, et si la phase de Berry de cette trajectoire est nulle (modulo 2π), alors l'énergie de la trajectoire classique est une valeur du spectre quantique (à l'ordre \hbar près). Y. Tsue [33] a obtenu les mêmes résultats à l'aide du principe variationnel. Dans ce paragraphe, nous allons établir le principe de base de la construction de J. Heller et de R.G. Littlejohn, qui associe un état stationnaire à une trajectoire quantique périodique $|\Psi(t)\rangle$, (périodique dans l'espace projectif $[\Psi(T)] = [\Psi(0)]$), dont

la phase de Berry est nulle.

Remarque : En décomposant un état de cette trajectoire sur les états stationnaires, on s'aperçoit que les énergies propres le composant sont réparties en niveaux réguliers distants de $\frac{2\pi\hbar}{T}$. Donc génériquement, de telles trajectoires sont obtenues simplement par combinaison linéaire de deux états stationnaires. (Sauf pour l'oscillateur harmonique où les niveaux sont régulièrement espacés. C'est aussi approximativement le cas pour le spectre de modèles dont la limite classique est intégrable, ou pour une famille de trajectoires périodiques stables d'après la règle de quantification EBK. Les trajectoires périodiques existent toujours par famille dépendant au moins d'un paramètre, [34]).

Nous appliquerons tout de même cette construction pour "quantifier" des trajectoires périodiques du flot Hamiltonien situées sur la surface de projection. Cela permettra d'approcher un état stationnaire dans la limite où l'angle α tend vers 0 et suffisamment vite. Car dans ce cas, au voisinage de la trajectoire projetée ("classique") périodique, il y a une trajectoire quantique exacte "presque" périodique.

Soit $|\Psi(0)\rangle_n$, un vecteur normalisé de la raie de $[\Psi(0)]$. D'après l'équation de Schrödinger (1.18), on déduit que :

$${}_n\langle\Psi(t)|\partial_t\Psi(t)\rangle_n = -\frac{i}{\hbar} {}_n\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle_n = -\frac{i}{\hbar} E_\Psi \quad (4.1)$$

avec E_Ψ l'énergie moyenne de l'état $|\Psi\rangle$, constante sur la trajectoire qui correspond à la phase "dynamique" :

$$E_\Psi = {}_n\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle_n \quad (4.2)$$

D'après la condition (1.16), le chemin $|\Psi(t)\rangle_n$ ne suit pas la connexion de Berry si $E_\Psi \neq 0$, mais d'après (1.18), on peut considérer :

$$|\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n = e^{i\frac{E_\Psi t}{\hbar}} |\Psi(t)\rangle_n = e^{i\frac{E_\Psi t}{\hbar}} \hat{U}_t |\Psi(0)\rangle_n \quad (4.3)$$

qui est un transport parallèle de $|\Psi(0)\rangle_n$.

Dans le cas où la phase de Berry de la trajectoire est nulle, on a d'après (1.14) :

$$|\widetilde{\Psi}(T)\rangle_n = |\widetilde{\Psi}(0)\rangle_n \quad (4.4)$$

et donc $|\widetilde{\Psi}(t+T)\rangle_n = |\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n$, $\forall t$.

Considérons alors le vecteur (non normalisé) :

$$|e\rangle = \int_0^T |\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n dt \quad (4.5)$$

En appliquant l'opérateur d'évolution $U_\tau = e^{-i\frac{E\Psi\tau}{\hbar}}$ à ce vecteur, on obtient :

$$U_\tau |\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n = e^{-i\frac{E\Psi\tau}{\hbar}} |\widetilde{\Psi}(t+\tau)\rangle_n \quad (4.6)$$

et :

$$\begin{aligned} U_\tau |e\rangle &= e^{-i\frac{E\Psi\tau}{\hbar}} \int_0^T |\widetilde{\Psi}(t+\tau)\rangle_n dt \\ &= e^{-i\frac{E\Psi\tau}{\hbar}} |e\rangle \end{aligned} \quad (4.7)$$

$|e\rangle$ est donc un état stationnaire d'énergie E_Ψ , qui est l'énergie moyenne des états de la trajectoire.

Intuitivement, $|e\rangle$ est un état stationnaire car en évoluant, chaque état $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n$ devient l'état voisin $e^{-i\frac{E\Psi\tau}{\hbar}} |\widetilde{\Psi}(t+\tau)\rangle_n$, et la superposition de ces états (4.5), le long de la trajectoire est globalement invariante (grâce aussi à la condition nécessaire de raccordement (4.4)).

L'intérêt de suivre le transport parallèle dans la construction de l'état $|e\rangle$ est en fait double : d'une part cela donne une formulation géométrique à cette construction, et d'autre part dans le cadre de l'application aux états cohérents, cela permet d'avoir une construction locale optimale. Les vecteurs qui contribuent à l'intégrale (4.5), s'ajoutent constructivement localement, sans interférence destructrice. Par conséquent, lorsqu'il s'agira de superposer des états cohérents d'une trajectoire classique, la distribution de Husimi de la somme $|e\rangle$ sera localisée au voisinage de cette trajectoire.

Pour justifier correctement ce point, vérifions que en $t = 0$, c'est bien la connexion qui convient. Considérons pour cela un chemin d'états quantiques $|\Psi(t)\rangle$, et comme pour (1.7), on note $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n = e^{if(t)} |\Psi(t)\rangle_n$ un autre relèvement à priori quelconque. On suppose que les états $|\Psi(t)\rangle$ et $|\Psi(t')\rangle_n$ deviennent rapidement orthogonaux entre eux, si $t \neq t'$. Ce sera effectivement le cas dans les paragraphes suivants où il s'agira des états cohérents. On construit alors localement la somme :

$$|e\rangle = \int_{-T}^{+T} |\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n dt$$

et l'on cherche une condition sur le relèvement $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n$, (ou sur la fonction $f(t)$) pour que la composante de cette somme sur l'état $|\Psi(0)\rangle$ soit maximale (c'est à dire $|\langle \widetilde{\Psi}(0)|e\rangle|$ maximum). On a

$$|\widetilde{\Psi}(t)\rangle_n = |\widetilde{\Psi}(0)\rangle_n + |\dot{\widetilde{\Psi}}(0)\rangle_n t + \frac{1}{2} |\ddot{\widetilde{\Psi}}(0)\rangle_n t^2 + o(t^2)$$

donc

$${}_n \langle \widetilde{\Psi}(0) | e \rangle = {}_n \langle \widetilde{\Psi}(0) | \widetilde{\Psi}(0) \rangle_n + \frac{1}{6} T^3 {}_n \langle \ddot{\widetilde{\Psi}}(0) | \ddot{\widetilde{\Psi}}(0) \rangle_n + o(T^3)$$

Et on a :

$$|\langle \Psi(0)|e \rangle|^2 = {}_n\langle \widetilde{\Psi}(0)|\widetilde{\Psi}(0)\rangle_n^2 + \frac{1}{3}T^3 \text{Re}[_n\langle \widetilde{\Psi}(0)|\widetilde{\Psi}(0)\rangle_n] {}_n\langle \widetilde{\Psi}(0)|\widetilde{\Psi}(0)\rangle_n + o(T^3)$$

or ${}_n\langle \widetilde{\Psi}(0)|\widetilde{\Psi}(0)\rangle_n = (i\ddot{f} - \dot{f}^2) + 2i\dot{f} \langle \Psi|\dot{\Psi} \rangle + \langle \Psi|\ddot{\Psi} \rangle$ et $\langle \Psi|\dot{\Psi} \rangle \in i\mathbb{R}$ donc :

$$\text{Re}[_n\langle \widetilde{\Psi}(0)|\widetilde{\Psi}(0)\rangle_n] = -\dot{f}^2 + 2i\dot{f} \langle \Psi|\dot{\Psi} \rangle + \text{Re}[\langle \Psi|\ddot{\Psi} \rangle]$$

est maximum pour $\dot{f} = i \langle \Psi|\dot{\Psi} \rangle$ qui correspond à la définition (1.10) du transport parallèle.

Quantification d'une trajectoire périodique classique par les états cohérents standard.

Nous allons maintenant voir de quelle manière la connaissance de l'évolution des états cohérents standard décrite au paragraphe 2.2 nous informe sur les états stationnaires. Pour cela, nous allons considérer la construction de A.J. Heller [32], qui consiste à superposer des états cohérents le long d'une trajectoire périodique classique. Nous venons de voir que cette construction donne un état stationnaire dans le cas où un état cohérent reste rigoureusement un état cohérent au cours du temps, autrement dit dans le cas où l'angle α est nul. Dans le cas général, l'angle α est non nul mais proche de zéro, et l'on évaluera l'incertitude en énergie de l'état ainsi construit.

Soit $\Gamma = \{z(t)\}$ une trajectoire périodique de période T , de la dynamique classique (2.46). $z(T) = z(0)$. Soit $|z(0)\rangle_n$ l'état cohérent initial, et $|z(\widetilde{t})\rangle_n$, les vecteurs correspondant aux états $[z(t)]$, obtenus par transport parallèle.

On suppose de plus que la phase de Berry de cette trajectoire est nulle : $|z(\widetilde{T})\rangle_n = |z(\widetilde{0})\rangle_n$, et de façon similaire à (4.5), on construit le vecteur (non normalisé) :

$$|e \rangle = \int_0^T |z(\widetilde{t})\rangle_n dt \quad (4.8)$$

Alors l'incertitude en énergie de l'état $[e]$ est $\Delta E \sim C\hbar$ (que la trajectoire soit stable ou instable) où C est une constante indépendante de \hbar .

Pour justifier cela rapidement, on évalue l'évolution de l'état $|e \rangle$ sur un temps court τ , que l'on écrit sous la forme :

$$\hat{U}_\tau |e \rangle = e^{-i\frac{E\tau}{\hbar}} (|e \rangle + |\epsilon \rangle \tau + o(\tau))$$

le vecteur $|\epsilon \rangle$ est lié au fait que la trajectoire exacte sort de la surface, et l'on montre que $\langle \epsilon|\epsilon \rangle$ est de l'ordre de : $\langle \epsilon|\epsilon \rangle \sim T\bar{V}^2\bar{\alpha}^2/\sqrt{\hbar}$, où $\bar{V}^2\bar{\alpha}^2 = \langle \alpha^2 V^2 \rangle$ est le carré de l'angle α et de la vitesse $V = |\dot{\mathcal{Z}}|$ dans l'espace de phase, pris en moyenne sur la

trajectoire.

Par ailleurs, $\langle e|e \rangle \sim \sqrt{\hbar T} 2\pi$, si bien qu'à l'aide de (1.6), et (1.22), on déduit que :

$$\Delta E = \hbar \frac{ds}{d\tau} \leq \hbar \sqrt{\frac{\langle \epsilon|\epsilon \rangle}{\langle e|e \rangle}} \sim \sqrt{\hbar} \bar{V} \bar{\alpha}$$

Et en utilisant l'expression (2.40) pour l'angle α , on déduit la forme cherchée : $\Delta E \sim \hbar |\partial_{\mathcal{Z}}^2 \bar{\mathcal{H}}|$.

D'après (1.16), la condition que la phase de Berry de la trajectoire est nulle s'exprime aussi par :

$$2\pi n = -i \oint_{\Gamma} \mathcal{A} = -i \iint_{\mathcal{S}_{\Gamma}} \mathcal{F} = \frac{1}{\hbar} \text{Aire}(\mathcal{S}_{\Gamma}) \quad (4.9)$$

avec $n \in \mathbb{N}$ et \mathcal{S}_{Γ} est une surface de l'espace de phase ayant Γ pour bord (\mathcal{S}_{Γ} est unique à un degré de liberté). On obtient donc la condition de quantification d'Einstein (sans indice de Maslov) ([1]) :

$$\text{Aire}(\mathcal{S}_{\Gamma}) = 2\pi \hbar n \quad (4.10)$$

selectionnant des trajectoires Γ d'énergie $\bar{E}_n = \mathcal{H}_{cl}(\Gamma)$.

Signalons pour finir que cette construction n'est pas valable pour les points fixes et notamment le fondamental. Mais d'après (2.38), un état cohérent placé en ces points fixes (où $\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_{cl} = 0$) a pour incertitude en énergie : $\Delta E = \hbar (|\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_{N_1}|^2 + \frac{1}{2} |\partial_{\mathcal{Z}^2} \mathcal{H}_N|^2)^{1/2}$. (Cela correspond au résultat obtenu par le principe variationnel indépendant du temps appliqué au états cohérents). Le résultat est donc analogue. D'un point de vue géométrique, $\frac{\Delta E}{\hbar}$ est la vitesse à laquelle la trajectoire quantique sort orthogonalement de la surface des états cohérents standard. Voir la figure 1.4.

Illustration pour l'oscillateur harmonique.

L'Hamiltonien de l'oscillateur hamonique est :

$$\hat{H}_{\omega} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\omega^2}{2} \hat{q}^2 \quad (4.11)$$

avec $\omega \in \mathbb{R}^{+*}$.

Le symbole normal est :

$$\mathcal{H}_N(q, p) = {}_n \langle z | \hat{H} | z \rangle_n = \mathcal{H}_{cl}(q, p) + \hbar \frac{(\omega^2 + 1)}{4} = \mathcal{H}(q, p) + O(\hbar) \quad (4.12)$$

avec l'Hamiltonien classique :

$$\mathcal{H}_{cl}(q, p) = \frac{(\omega^2 - 1)}{4} (\mathcal{Z}^2 + \bar{\mathcal{Z}}^2) + \frac{(\omega^2 + 1)}{2} \bar{\mathcal{Z}} \mathcal{Z} = \frac{1}{2} p^2 + \frac{\omega^2}{2} q^2 \quad (4.13)$$

Les trajectoires classiques sont des ellipses d'équation : $p^2 + \omega^2 q^2 = 2E$, et de période $\frac{2\pi}{\omega}$.

Il est connu que le spectre exact de \hat{H}_ω est :

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n \in \mathbb{N} \quad (4.14)$$

or ici la règle de quantification (4.10) donne : $\bar{E}_n = \hbar\omega n$. L'erreur est donc ici : $E_n - \bar{E}_n = \hbar\frac{\omega}{2} = O(\hbar)$. Cette erreur est entièrement due à la non prise en compte de la déformation elliptique du paquet d'onde lors de son évolution.

Etat cohérent déformé minimisant l'énergie de déformation.

Nous avons vu que l'évolution du paramètre de déformation $R(t)$, équ. (3.6), est caractérisée par les dérivées secondes de l'Hamiltonien classique \mathcal{H}_{cl} , formant la matrice du Hessian. La déformation évolue donc localement (à (q, p) fixés) comme sous l'action d'un Hamiltonien quadratique :

$$\tilde{\mathcal{H}}(\delta q, \delta p) = \frac{1}{2}\delta q^2(\partial_q^2 \mathcal{H}_{cl}) + \frac{1}{2}\delta p^2(\partial_p^2 \mathcal{H}_{cl}) + \delta q\delta p(\partial_q\partial_p \mathcal{H}_{cl})$$

Cet Hamiltonien quadratique possède un point fixe en $(\delta q, \delta p) = (0, 0)$, qui est stable ou instable selon le signe du discriminant de la forme quadratique ($\Delta > 0$ ou $\Delta < 0$) :

$$\Delta = (\partial_q^2 \mathcal{H})(\partial_p^2 \mathcal{H}) - (\partial_q\partial_p \mathcal{H})^2 = \partial_{\mathcal{Z}}\partial_{\bar{\mathcal{Z}}}\mathcal{H} - |\partial_{\bar{\mathcal{Z}}}^2 \mathcal{H}|^2$$

On obtient alors que dans le cas où $\delta > 0$, c'est à dire si l'Hamiltonien quadratique local possède un point fixe stable, alors il existe un état cohérent déformé, de paramètre de déformation $R_0(q, p)$, en ce point de l'espace de phase, qui vérifie les trois propriétés équivalentes :

1. $\partial_t R_{/R_0} = 0 \Leftrightarrow (\partial_{\mathcal{Z}} + R_0\partial_{\mathcal{Z}})^2 \mathcal{H} = 0$, d'après (3.6). Cela signifie que R_0 est un point fixe de la dynamique tangente.

$$R_0 = \frac{\sqrt{\partial_{\mathcal{Z}}\partial_{\bar{\mathcal{Z}}}\mathcal{H}_{cl}^2 - |\partial_{\mathcal{Z}}^2 \mathcal{H}_{cl}|^2} - \partial_{\mathcal{Z}}\partial_{\bar{\mathcal{Z}}}\mathcal{H}_{cl}}{2\partial_{\mathcal{Z}}^2 \mathcal{H}_{cl}} \quad (4.15)$$

2. L'état cohérent $|R_0\rangle$ est le fondamental de l'Hamiltonien quadratique $\tilde{\mathcal{H}}$, qui est en fait un oscillateur harmonique.
3. R_0 correspond à la déformation qui extrémise le terme quantique $\mathcal{H}_{qu}(R)$ (3.4), et que l'on peut ainsi appeler "énergie de déformation". D'après (3.4),

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{qu}(R_0) &= R_0\partial_{\mathcal{Z}}^2 \mathcal{H}_{cl} + \mathcal{H}_{N_1}(\mathcal{Z}) \\ &= \frac{1}{2}[\sqrt{\partial_{\mathcal{Z}}\partial_{\bar{\mathcal{Z}}}\mathcal{H}_{cl}^2 - |\partial_{\mathcal{Z}}^2 \mathcal{H}_{cl}|^2} - \partial_{\mathcal{Z}}\partial_{\bar{\mathcal{Z}}}\mathcal{H}_{cl}] + \mathcal{H}_{N_1}(\mathcal{Z}) \end{aligned} \quad (4.16)$$

R_0 correspond à un minimum ou à un maximum de $\mathcal{H}_{qu}(R)$ selon que $\partial_Z \partial_{\bar{Z}} \mathcal{H}_{cl} > 0$ ou < 0 , c'est à dire selon que l'oscillateur harmonique est un "puits" ou un "sommet" d'énergie.

Notons que si $\Delta < 0$, le point fixe de $\tilde{\mathcal{H}}$ est instable, $\mathcal{H}_{qu}(R)$ n'a pas d'extrémum, et $\partial_t R = 0$ n'a pas de solution.

En application directe de ce qui précède, on peut chercher l'état cohérent déformé qui a une incertitude minimale aux points fixes de la dynamique $\mathcal{Z}(t)$. Soit donc un point fixe \mathcal{Z}_0 , vérifiant $\partial_{\bar{Z}} \mathcal{H}_{cl}(\mathcal{Z}_0) = 0$. Si il s'agit d'un point fixe stable, on choisit R_0 donné par (4.15). D'après (A.91), (A.96), l'état cohérent $|\mathcal{Z}_0, R_0\rangle$ a pour incertitude en énergie :

$$\Delta E = \hbar^{3/2} \left\{ \frac{1}{\Upsilon_0} [R_0 (\partial_Z \mathcal{H}_{qu})^2 + \bar{R}_0 (\partial_{\bar{Z}} \mathcal{H}_{qu})^2 + (1 + R_0 \bar{R}_0) |\partial_Z \mathcal{H}_{qu}|^2] + \frac{1}{\Upsilon_0^3} |(\partial_Z + \bar{R}_0 \partial_{\bar{Z}})^3 \mathcal{H}_{cl}|^2 \right\}^{1/2} + o(\hbar^{3/2})$$

Par contre, si il s'agit d'un point fixe instable, on ne peut pas annuler $\partial_R \mathcal{H}_{qu}$, et l'incertitude en énergie de l'état $|\mathcal{Z}_0, R\rangle$ est :

$$\Delta E = \frac{\hbar}{2} \Upsilon |\partial_R \mathcal{H}_{qu}| + o(\hbar)$$

qui admet un minimum pour une certaine valeur de R .

Etats cohérents déformés et indice de Maslov

R.G. Littlejohn [35, 36] a montré que l'indice de Maslov s'obtient lorsque la déformation elliptique du paquet d'onde est prise en compte. On peut le voir pour une trajectoire périodique, pour un système à un degré de liberté, dans le cas où l'application tangente sur une période est l'identité. (Dans le cas général, c'est une application parabolique. Cela revient à supposer que $d\omega/dE = 0$).

Soit $|R(0), \mathcal{Z}(0)\rangle$ un état cohérent déformé placé sur cette trajectoire, et $|R(t), \mathcal{Z}(t)\rangle$ son évolution. Au bout d'une période, on a $\mathcal{Z}(T) = \mathcal{Z}(0)$ et $R(T) = R(0)$.

L'énergie moyenne sur cette trajectoire vaut d'après A.70, 3.3 :

$$E = H_W + \hbar H_{q|W} + o(\hbar)$$

où H_W est le symbole de Weyl et :

$$H_{q|W} = \frac{i}{4\Upsilon} (\bar{R}\dot{R} - R\dot{\bar{R}}) + \frac{\dot{\theta}}{2}$$

Cette valeur est constante sur la trajectoire, donc :

$$E = \frac{1}{T} \oint (H_W + h\bar{H}_{q|W}) dt$$

La phase de Berry de cette trajectoire est d'après A.50 :

$$\Phi = i \oint \mathcal{A} = \frac{1}{\hbar} \oint pdq + \frac{i}{4\Upsilon} \oint (\bar{R}dR - Rd\bar{R})$$

Alors si la phase de Berry est un multiple de 2π : $\Phi = 2\pi n$, il vient :

$$E = \frac{1}{T} \oint H_W + \frac{\hbar}{T} (2\pi n - \frac{1}{\hbar} \oint pdq) + \frac{\hbar}{T} \oint \frac{\dot{\theta}}{2}$$

On peut choisir la déformation initiale $R(0)$ telle que $E = \frac{1}{T} \oint H_W$. L'énergie de la trajectoire est donc donnée par le symbole de Weyl. Ensuite, $\theta(t)$ est périodique et plus précisément, $\theta(T) = \theta(0) + 2\pi n_t$, où $n_t \in \mathbb{Z}$ est le nombre de tours effectués par le vecteur vitesse tangent à la trajectoire.

Il vient donc :

$$\oint pdq = h(n + \frac{n_t}{2}) \tag{4.17}$$

$n \in \mathbb{Z}$ et $\frac{n_t}{2} = \frac{\mu}{4}$ où μ est l'indice de Maslov. Cette condition sélectionne un ensemble discret de trajectoires périodiques Γ_n , et leur énergie E_{Wn} donnée par le symbole de Weyl, qui constitue une approximation du spectre exact.

Chapitre 5

Illustration : évolution d'états cohérents dans le modèle de Harper.

Nous choisissons d'illustrer les résultats précédents concernant la propagation des états cohérents, sur le modèle de Harper. Ce modèle est présenté en détail dans la partie 2. Notons juste que l'espace de phase (q, p) est un tore. Nous travaillerons avec des fonctions d'ondes périodiques en position et impulsion (les conditions de périodicité sont $(\theta_1, \theta_2) = (0, 0)$ avec les notations de la partie 2).

Considérons l'Hamiltonien :

$$\mathcal{H}(q, p) = -\cos(2\pi q) - \frac{1}{2}\cos(2\pi p) \quad (5.1)$$

Il s'agit d'un système à un degré de liberté qui est donc intégrable. Les trajectoires dans l'espace de phase (q, p) sont représentées sur la figure 5.1 a.

La fonction $\alpha(q, p)$ (2.42) représente l'angle avec lequel un état cohérent sort de la surface des états cohérents lors de son évolution. $\alpha(q, p)$ est représenté sur la figure 5.1.b.

Nous allons maintenant considérer l'évolution d'un état cohérent initialement placé sur une trajectoire périodique, au point A de la figure 5.1.a.

La figure 5.2 (a) représente cette évolution en distribution de Husimi, sur une période $T = 0.284$.

Cette évolution est approximativement décrite par les états cohérents déformés $|R(t)z(t)\rangle$. Les équations de mouvement pour $R(t), z(t)$ sont obtenues par projection des trajectoires exactes sur la famille des états cohérents déformés $|R, z\rangle$. La figure 5.2 (b) représente les

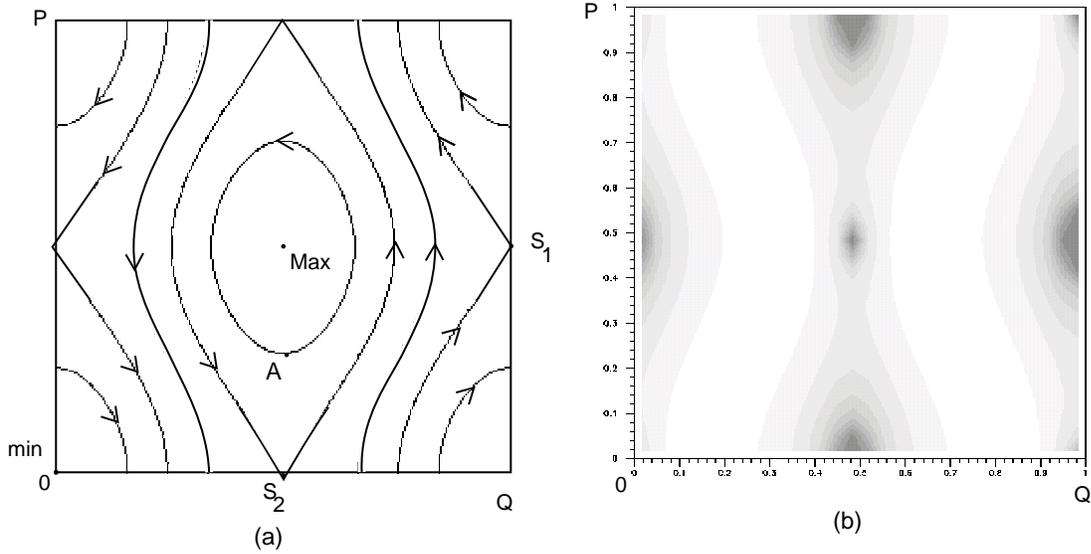


Figure 5.1: (a) : trajectoires dans l'espace de phase de l'Hamiltonien (5.1). Il y a deux points fixes instables (S_1 et S_2), et deux points fixes stables (min et Max).

(b) : L'angle $\alpha(q, p)$ (2.42) représenté en niveaux de gris entre 0 et $\pi/2$. Pour chaque point (q, p) , $\alpha(q, p)$ est l'angle avec lequel l'état cohérent $|q, p\rangle$ sort de la surface des états cohérents. $\alpha(q, p)$ traduit aussi l'amplitude de la déformation que subit la distribution de Husimi de l'état cohérent $|q, p\rangle$ lors de son évolution. On n'est donc pas étonné de trouver que $\alpha(q, p)$ est maximum aux deux points fixes instables.

distributions de Husimi de ces états $|R(t), z(t)\rangle$. Le déplacement moyen de la distribution dans l'espace de phase est décrit par $z(t)$. $z(t)$ pourrait s'obtenir aussi par projection de l'évolution exacte sur les états cohérents standard. La distribution de Husimi des états cohérents $|z(t)\rangle$ se déplacerait sur la trajectoire mais serait circulaire à tout instant, et ne décrirait donc pas du tout l'étalement.

La figure 5.2 (c) représente l'évolution de la distribution initiale avec l'équation de Liouville classique. On observe nettement un étalement elliptique qui est plus prononcé que celui de l'évolution exacte. Avec l'équation (A.58), nous avons vu que la déformation elliptique est plus importante par une puissance deux.

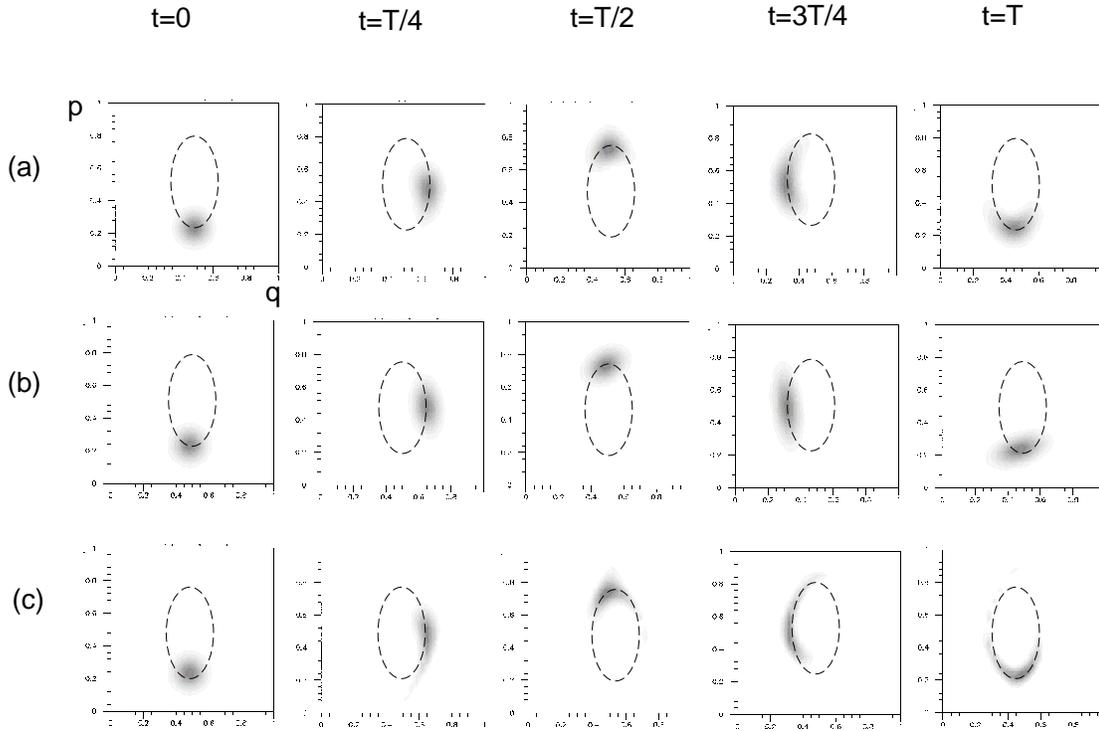


Figure 5.2: *Evolution de distributions dans l'espace de phase sur une trajectoire périodique de période $T = 0.284$. L'état initial est un état cohérent $|q, p\rangle$, placé au point A de la figure (5.1). On a choisi un espace de Hilbert de $N = 41$ états, soit $\hbar = \frac{1}{N2\pi} = 0.0039\dots$*

(a) : *Distribution de Husimi de l'évolution exacte.*

(b) : *Distribution de Husimi des états cohérents $|R(t)z(t)\rangle$, qui approche l'évolution exacte dans le cadre de l'approximation linéaire de l'étalement du paquet d'onde.*

(c) : *Evolution classique de la distribution initiale avec l'équation de Liouville.*

Le désaccord entre l'évolution exacte (a) et l'évolution d'états cohérents déformés (b) apparaît rapidement, et correspond aux déformations non elliptiques.

De façon plus quantitative, la figure 5.3 représente la distance de Fubiny-Study $d(t)$, qui sépare l'évolution exacte de l'évolution approchée. Approchée par les états cohérents standard, puis par les états cohérents déformés. On y observe clairement que l'approximation par les états cohérents déformés est meilleure que celle par les états cohérents standard, au moins pour les temps courts. Plus précisément, la tangente à l'origine de ces courbes forme un angle ϕ qui est relié à α (angle avec lequel l'état sort de la surface des états cohérents). Pour $\hbar \rightarrow 0$, cet angle tend vers zéro pour les états cohérents déformés, et tend vers une constante pour les états cohérents standard.

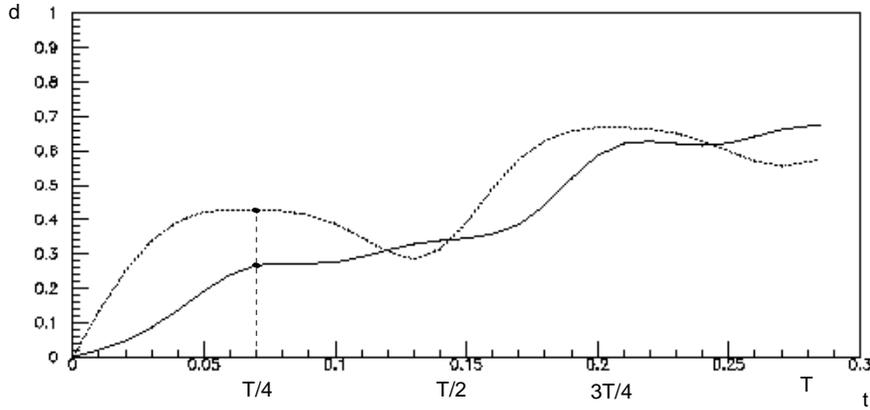


Figure 5.3: $N = 41$. Cette figure présente la distance de Fubiny-Study $d(t)$ entre l'évolution exacte et une description approchée en fonction du temps :

. : approximation par un état cohérent standard.

— : approximation par un état cohérent déformé.

Finalement, la figure 5.4 présente la distance entre l'évolution exacte et son approximation par un état cohérent standard ou déformé, après une durée fixée $t = T/4$, et en fonction de $N \sim 1/\hbar$. On aperçoit nettement que dans l'approximation par un état cohérent standard, cette distance tend vers une constante non nulle pour $\hbar \rightarrow 0$, comme prévu par (2.45). Car il manque la prise en compte de la déformation. Au contraire, dans l'approximation par un état cohérent déformé, cette distance semble tendre vers 0, comme attendu par (3.8).

Ces derniers résultats sont qualitativement indépendants de la nature de la dynamique (intégrable ou chaotique) et du point initial dans l'espace de phase, tout au moins pour

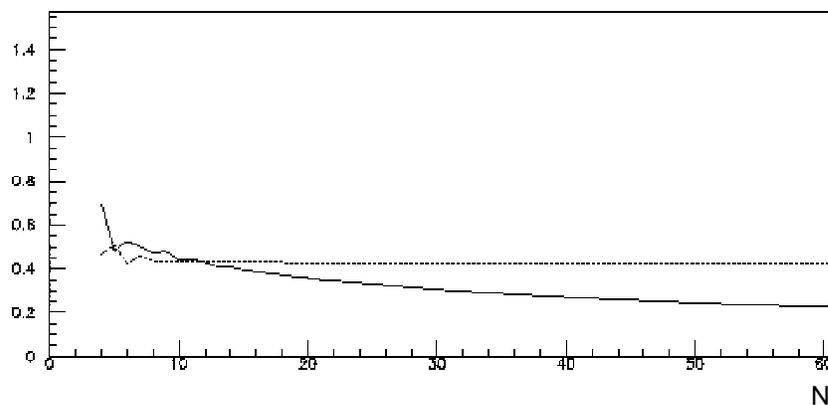


Figure 5.4: Après une durée fixée $t = T/4$, et en fonction de $N \sim 1/\hbar$, cette figure présente la distance de Fubiny-Study $d(N)$ entre l'évolution exacte et une description approchée :

. : approximation par un état cohérent standard.

——— : approximation par un état cohérent déformé.

les temps courts.

Voici, en deuxième illustration, l'évolution d'un état cohérent initialement placé sur le point fixe instable S_2 de la figure 5.1.

La figure 5.5 (a) représente la distribution de Husimi de cette évolution sur une durée $T = 0.1$. Le point fixe étant instable, la distribution s'étire le long des deux séparatrices. Dans l'approximation par un état cohérent standard $|z(t)\rangle$, cet étalement n'est pas décrit, et $z(t)$ est en fait constant. L'état cohérent standard reste fixé sur le point fixe instable.

Dans l'approximation de l'évolution par un état cohérent déformé, l'étalement est correctement décrit pour les temps courts, comme le montre la figure 5.5 (b).

La figure 5.5 (c) représente elle l'évolution de la distribution initiale par l'équation de Liouville classique. Le renforcement de la déformation elliptique par une puissance deux est bien visible dans les premiers temps.

Et comme plus haut, les figures 5.6 et 5.7 montrent la distance de Fubiny-Study entre l'état exact et son approximation par un état cohérent standard (fixé au point instable) ou par un état cohérent déformé. Les mêmes conclusions sont encore valables.

Dans la conclusion de cette thèse, nous discuterons l'approximation de l'évolution par un état cohérent en comparaison avec l'approximation semi-classique par la formule de

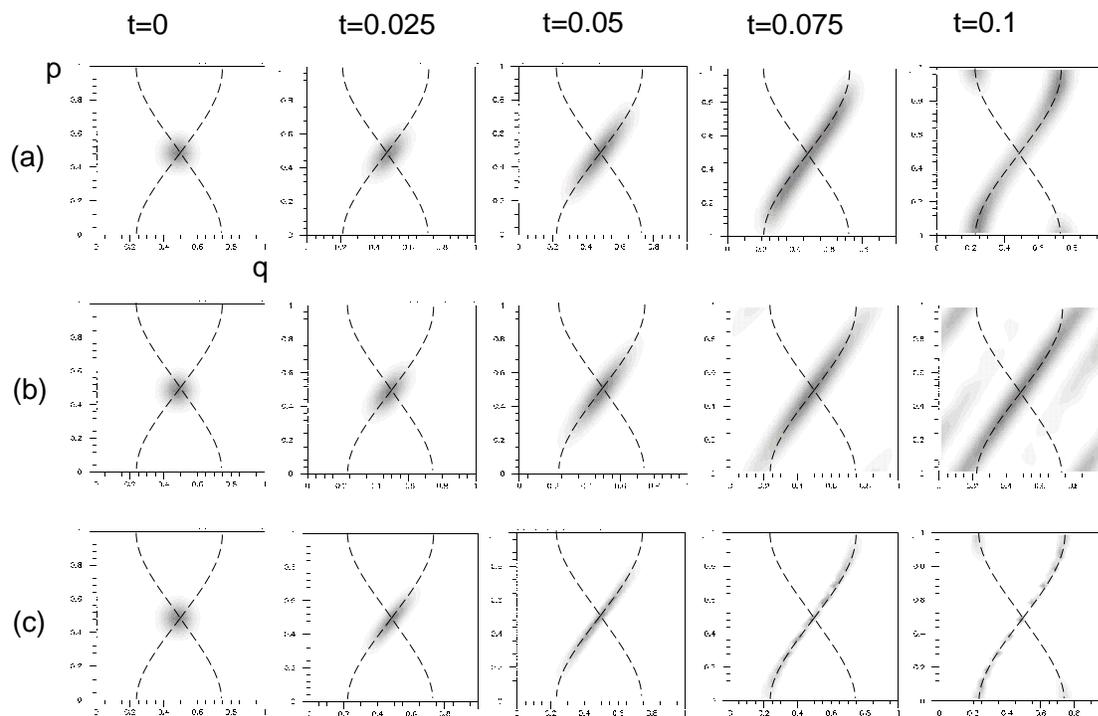


Figure 5.5: Evolution de distributions dans l'espace de phase sur un point fixe classique instable. L'état initial est un état cohérent $|q, p\rangle$, placé au point S_2 de la figure (5.1). On a choisit un espace de Hilbert de $N = 41$ états.

(a) : Distribution de Husimi de l'évolution exacte.

(b) : Distribution de Husimi des états cohérents $|R(t)z(t)\rangle$, qui approche l'évolution exacte dans le cadre de l'approximation linéaire de l'étalement du paquet d'onde.

(c) : Evolution classique de la distribution initiale avec l'équation de Liouville.

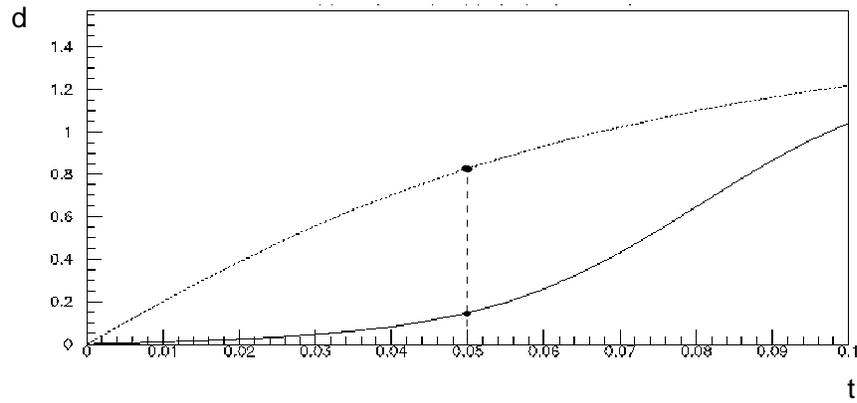


Figure 5.6: $N = 41$. Cette figure présente la distance de Fubini-Study $d(t)$ entre l'évolution exacte et une description approchée en fonction du temps :

. : approximation par un état cohérent standard.

— : approximation par un état cohérent déformé.

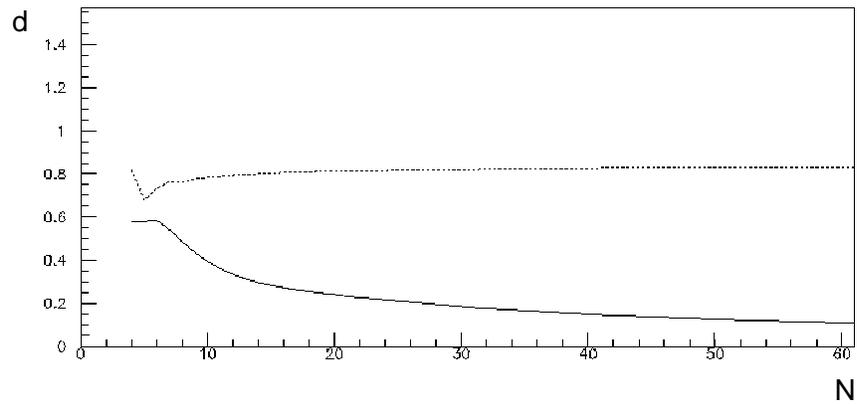


Figure 5.7: Après une durée fixée $t = 0.05$, et en fonction de $N \sim 1/\hbar$, cette figure présente la distance de Fubini-Study $d(N)$ entre l'évolution exacte et une description approchée :

. : approximation par un état cohérent standard.

— : approximation par un état cohérent déformé.

Van-Vleck qui est incontestablement meilleure.

Partie II

Mécanique quantique sur le tore

Le premier paragraphe montre comment la mécanique quantique sur le tore en tant qu'espace de phase apparaît en physique du solide. A partir du paragraphe suivant commence l'étude du spectre, dans l'objectif d'établir des relations entre les valeurs de l'indice de Chern associés aux bandes d'énergies, et la limite classique de la dynamique [37]. Ces relations nous permettront d'établir une description du phénomène d'apparition des dégénérescences dans le spectre, d'un point de vue semi-classique.

Chapitre 6

Modèle physique d'électrons dans un plan

A partir du paragraphe 7.1, nous commencerons l'étude d'une dynamique à un degré de liberté, sur un espace de phase plan, régie par un Hamiltonien périodique à la fois en position et en impulsion. L'objet de ce chapitre est de rappeler le modèle physique direct qui correspond à cette dynamique, à savoir un modèle d'électrons confinés dans une fine couche ($\sim 100 \text{ \AA}$) à l'interface entre des semi-conducteurs, à très faible température ($1 - 4^\circ K$), et dans un champ magnétique élevé ($3 - 15$ Tesla). On suppose de plus que dans le plan (x, y) où ils sont confinés, les électrons sont soumis à un potentiel extérieur $V(x, y)$, bi-périodique en x et y , [38].

Ce potentiel peut-être celui créé par les atomes d'un réseau cristallin, ou celui créé artificiellement par des nano-structures. Dans cette dernière éventualité, notons les progrès remarquables des technologies dans la fabrication de nano-structures mésoscopiques, qui permettent par exemple d'expérimenter une forme quelconque de potentiel $V(x, y, t)$ [39]. Lorsqu'un faible champ électrique uniforme est appliqué, il apparait que chaque bande d'énergie sous le niveau de Fermi, contribue à la conductivité de Hall par un multiple entier de e^2/h . Cet entier qui est responsable de la quantification de la conductivité est un invariant topologique, c'est à dire qu'il est invariant sous les faibles perturbations de l'Hamiltonien comme celles qui prennent en compte les impuretés, les interactions entre électrons..., ce qui explique l'incroyable précision de la quantification entière observée dans les expériences, précision jusqu'à 10^{-8} . En mathématiques, cet entier s'appelle l'indice de Chern, et il est associé à chaque bande d'énergie. Un bon résumé de l'aspect topologique de l'effet Hall quantique et de son développement est par exemple celui de Y.S. Wu [40]. Au paragraphe 6.2, nous présenterons la démonstration de D.J. Thouless pour la quantifi-

cation de la conductivité de Hall au moyen de la formule de Kubo. Au paragraphe 10.7, nous établirons une démonstration équivalente, en terme de déplacement d'un paquet d'onde dans le plan (x, y) , qui nous semble de ce fait plus intuitive.

Le comportement des électrons dans un conducteur plongé dans un champ magnétique fait l'objet de nombreuses études en physique du solide. Ces études étaient tout d'abord motivées par le fait que l'on accède ainsi aux propriétés de la surface de Fermi. Ensuite la découverte de l'effet Hall quantique a stimulé un intérêt supplémentaire pour ces études, notamment sur la conductivité. Expérimentalement, l'observation de la structure des niveaux est difficile, mais des techniques récentes de fabrication de conducteurs très purs ayant des structures microscopiques précises, provoquent un fort développement dans le domaine de la recherche qui correspond à la physique mésoscopique.

6.1 Electrons dans un plan soumis à un potentiel périodique et à un champ magnétique.

Dans ce paragraphe, nous allons étudier un modèle physique concernant des électrons indépendants restreints dans un plan (x, y) , soumis à un champ magnétique extérieur uniforme \vec{B} orthogonal au plan, et à un potentiel $V(x, y)$ comprenant par exemple l'interaction avec les atomes du réseau cristallin et un potentiel moyen dans une approximation de Hartree-Fock pour l'interaction entre les électrons.

La dynamique d'un électron est donc régie par le Hamiltonien (opérateur quantique) :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(x, y) \quad (6.1)$$

agissant dans l'espace de Hilbert : $\mathcal{H}_{total} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^2)$. \hat{H}_0 est l'Hamiltonien sans potentiel :

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 \quad (6.2)$$

\vec{A} est le potentiel vecteur déterminé à une transformation de Jauge près par : $\vec{B} = (\partial_x A_y - \partial_y A_x)\vec{e}_z$. Par exemple dans la Jauge symétrique :

$$\vec{A} = (-\frac{1}{2}By, \frac{1}{2}Bx) = -\frac{1}{2}\vec{r} \wedge \vec{B} \quad (6.3)$$

a) Niveaux de Landau :

L'Hamiltonien \hat{H}_0 s'écrit alors :

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}[(p_x + \frac{eB}{2c}y)^2 + (p_y - \frac{eB}{2c}x)^2] \quad (6.4)$$

Considérons alors la transformation linéaire canonique :

$$\begin{cases} \tilde{x} = \mathcal{C}(p_x + \frac{eB}{2c}y) \\ p_{\tilde{x}} = \mathcal{C}(p_y - \frac{eB}{2c}x) \\ \tilde{y} = \mathcal{C}(p_x - \frac{eB}{2c}y) \\ p_{\tilde{y}} = \mathcal{C}(-p_y - \frac{eB}{2c}x) \end{cases} \quad (6.5)$$

où la constante \mathcal{C} est telle que $\tilde{x}, p_{\tilde{x}}, \tilde{y}, p_{\tilde{y}}$ soient des opérateurs canoniques :

$$[\tilde{x}, p_{\tilde{x}}] = [\tilde{y}, p_{\tilde{y}}] = i\hbar \quad (6.6)$$

il faut :

$$\mathcal{C} = \sqrt{\frac{c}{eB}}$$

On a aussi : $[\tilde{x}, \tilde{y}] = [\tilde{x}, p_{\tilde{y}}] = [\tilde{y}, p_{\tilde{x}}] = [p_{\tilde{x}}, p_{\tilde{y}}] = 0$, et donc une autre décomposition de l'espace de Hilbert :

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{\tilde{x}} \otimes \mathcal{H}_{\tilde{y}} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \quad (6.7)$$

où $\mathcal{H}_{\tilde{x}}$ et $\mathcal{H}_{\tilde{y}}$ sont les espaces où agissent effectivement les opérateurs respectifs $(\tilde{x}, p_{\tilde{x}})$ et $(\tilde{y}, p_{\tilde{y}})$. Inversement :

$$\begin{cases} x = -\mathcal{C}(p_{\tilde{x}} + p_{\tilde{y}}) \\ p_x = \frac{1}{2\mathcal{C}}(\tilde{x} + \tilde{y}) \end{cases} \quad \begin{cases} y = \mathcal{C}(\tilde{x} - \tilde{y}) \\ p_y = \frac{1}{2\mathcal{C}}(p_{\tilde{x}} - p_{\tilde{y}}) \end{cases} \quad (6.8)$$

Remarquons que les variables $\tilde{x}, p_{\tilde{x}}, \tilde{y}, p_{\tilde{y}}$ s'expriment dans les même unités physiques. Ce sont des variables canoniques conjuguées, et l'on conviendra pour cette raison d'appeler \tilde{x}, \tilde{y} variables de position, et $p_{\tilde{x}}, p_{\tilde{y}}$ variables d'impulsion pour la suite de cette partie.

Il vient alors :

$$\hat{H}_0 = \frac{\omega}{2}(p_{\tilde{x}}^2 + \tilde{x}^2) \quad (6.9)$$

avec $\omega = \frac{eB}{mc}$.

Le Hamiltonien \hat{H}_0 est donc celui de l'oscillateur harmonique, dont le spectre est :

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n \in \mathbb{N} \quad (6.10)$$

et les vecteurs propres associés sont notés $|n\rangle_{\tilde{x}} \in \mathcal{H}_{\tilde{x}}$.

Les niveaux d'énergie (6.10) sont appelés *niveaux de Landau*. Le fait que les opérateurs \tilde{y} et $p_{\tilde{y}}$ n'interviennent pas dans (6.9) fait que ces niveaux sont infiniment dégénérés.

La trajectoire classique générée par H_0 (6.9) est un cercle de centre $(0,0)$ dans l'espace de phase $(\tilde{x}, p_{\tilde{x}})$, et $(\tilde{y}, p_{\tilde{y}})$ est une quantité conservée. D'après le changement de variable (6.8), on voit que dans l'espace réel (x, y) et (p_x, p_y) , la trajectoire est aussi un

cercle de centre quelconque. C'est la trajectoire circulaire d'un électron dans un champ magnétique. Les niveaux de Landau correspondent à une quantification de ces trajectoires, et leur dégénérescence correspond à l'invariance par translation.

Pour poursuivre plus dans cette interprétation classique, remarquons que à un niveau quantifié n , il correspond dans l'espace $(\tilde{x}, p_{\tilde{x}})$ une trajectoire circulaire de rayon \tilde{R}_n tel que : $\pi\tilde{R}_n^2 = (n + \frac{1}{2})h$, d'après la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld. D'après (6.8), dans l'espace physique (x, y) , l'électron décrit un cercle de rayon : $R_n = \sqrt{\frac{c}{eB}}\tilde{R}_n$. Le flux magnétique traversant ce cercle est :

$$\Phi_n = \pi R_n^2 B = (n + \frac{1}{2}) \frac{2\pi c\hbar}{e}$$

Le flux est donc "quantifié", et un quanta de flux $\Delta\Phi = \frac{2\pi c\hbar}{e}$ correspond à un élément de surface :

$$\Delta S = \frac{\Delta\Phi}{B} = \frac{2\pi c\hbar}{eB} \quad (6.11)$$

b) Adjonction du potentiel $V(x, y)$

considérons maintenant l'Hamiltonien avec potentiel :

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + V(x, y) \\ &= \frac{\omega}{2}(p_{\tilde{x}}^2 + \tilde{x}^2) + V\left(-\sqrt{\frac{c}{eB}}(p_{\tilde{x}} + p_{\tilde{y}}), \sqrt{\frac{c}{eB}}(\tilde{x} - \tilde{y})\right) \end{aligned} \quad (6.12)$$

C'est un problème de mécanique à deux degrés de liberté. La nature de son spectre dépend de la fonction potentiel $V(x, y)$.

Nous allons supposer que le potentiel est périodique :

$$V(x, y) = V(x + X, y) = V(x, y + Y), \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^2. \quad (6.13)$$

Cela permet d'appliquer le théorème de Bloch. En effet \hat{H} est alors périodique en $(\tilde{y}, p_{\tilde{y}})$ de périodes respectives :

$$Q = \frac{Y}{C}, \quad P = \frac{X}{C} \quad (6.14)$$

Cela signifie que \hat{H} commute avec les opérateurs de "translation magnétiques" :

$$\hat{T}_Q = e^{-iQ\hat{p}_{\tilde{y}}/\hbar}, \quad \hat{T}_P = e^{iP\hat{y}/\hbar} \quad (6.15)$$

$$[\hat{H}, \hat{T}_Q] = [\hat{H}, \hat{T}_P] = 0 \quad (6.16)$$

Si de surcroît, les opérateurs \hat{T}_Q et \hat{T}_P commutent entre eux, c'est à dire :

$$[\hat{T}_Q, \hat{T}_P] = 0 \quad (6.17)$$

alors la dynamique quantique est invariante dans chaque espace propre de T_Q, T_P . Nous traiterons les calculs avec plus de détail au paragraphe 7.2, en voici les résultats essentiels dans ce contexte :

1. La condition (6.17) est équivalente à la condition : $QP = Nh$ avec $N \in \mathbb{N}$ et $h = 2\pi\hbar$, c'est à dire :

$$XY = N\Delta S \quad (6.18)$$

Il y a un nombre entier de quanta de flux par cellule XY .

2. La décomposition en sous espaces propres communs à \hat{T}_Q et \hat{T}_P est :

$$\mathcal{H}_{\bar{y}} = \iint \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2) d\theta_1 d\theta_2 \quad (6.19)$$

$$\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2) = \left\{ |\Psi \rangle \in \mathcal{H} \quad \text{t.q.} \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{T}_Q |\Psi \rangle = e^{i\theta_1} |\Psi \rangle \\ \hat{T}_P |\Psi \rangle = e^{i\theta_2} |\Psi \rangle \end{array} \right. \right\}$$

avec $(\theta_1, \theta_2) \in [0; 2\pi]^2$.

3. on montre aussi que $\dim_{\mathbb{R}} \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2) = N$.

Ainsi, on peut diagonaliser \hat{H} séparément dans chaque sous-espace $\mathcal{H}_{\bar{x}} \otimes \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$, pour $(\theta_1, \theta_2) \in [0; 2\pi]^2$ fixés. Le spectre obtenu est discret indicé par $n \in \mathbb{N}$, et donc le spectre global de \hat{H} est structuré en bandes d'énergies paramétrées par $(\theta_1, \theta_2) \in [0; 2\pi]^2$.

$$\hat{H} |\Psi_n(\theta_1, \theta_2) \rangle = E_n(\theta_1, \theta_2) |\Psi_n(\theta_1, \theta_2) \rangle \quad (6.20)$$

Si une bande d'énergie est remplie et non dégénérée, elle contient une densité de un électron par cellule XY .

c) Limite du champ magnétique élevé.

Si l'amplitude maximum du potentiel V vérifie, $V \ll \omega\hbar \Leftrightarrow B \gg \frac{mcV}{e\hbar}$, alors d'après la théorie des perturbations au premier ordre d'un niveau dégénéré, on déduit que l'adjonction du potentiel V à \hat{H}_0 a pour effet de lever la dégénérescence de chaque niveau de Landau (voir figure 6.1).

Les valeurs propres et les vecteurs propres de \hat{H} sont déterminés par les diagonalisations de la restriction de \hat{H} dans chaque sous espace $|n \rangle_{\bar{x}} \otimes \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ correspondant au niveau de Landau n . Chaque niveau de Landau se sépare donc en N bandes d'énergie.

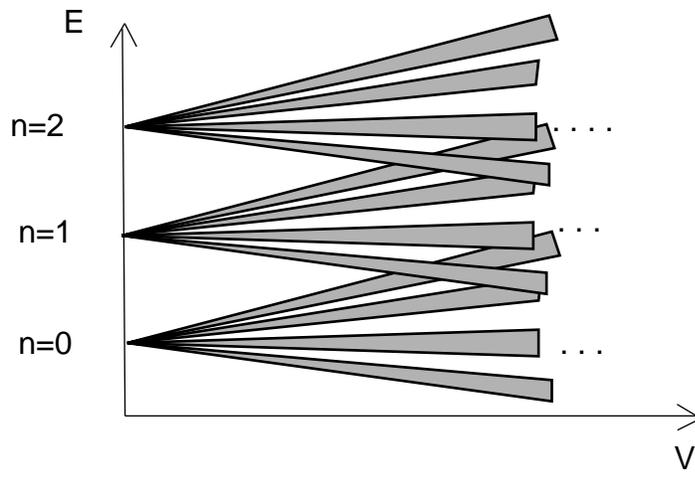


Figure 6.1: Levée de la dégénérescence des niveaux de Landau. Ici chaque niveau de Landau se sépare en $N = 4$ bandes.

Afin d'expliciter la restriction de $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$ dans chacun de ces sous-espaces, on considère la décomposition en séries de Fourier de $V(x, y)$ sous la forme :

$$V = \sum_{m,l} A_{m,l} V_{m,l}$$

$$\text{avec } V_{ml} = \cos\left(2\pi m \frac{x}{X} + \phi_x\right) \cos\left(2\pi l \frac{y}{Y} + \phi_y\right), \quad A_{m,l} \in \mathbb{R} \quad (6.21)$$

qui à l'aide de (6.8) s'écrit aussi :

$$\begin{aligned} V_{ml} &= \cos\left(\frac{2\pi m p_{\tilde{x}}}{P} - \phi_x\right) \cos\left(\frac{2\pi m \tilde{x}}{Q} + \phi_y\right) \cos\left(\frac{2\pi m p_{\tilde{y}}}{P}\right) \cos\left(\frac{2\pi m \tilde{y}}{Q}\right) + \dots \\ &= V_{m,l,\tilde{x},p_{\tilde{x}}} V_{m,l,\tilde{y},p_{\tilde{y}}} \end{aligned} \quad (6.22)$$

où $V_{m,l,\tilde{x},p_{\tilde{x}}}$ est un opérateur fonction seulement des opérateurs \tilde{x} et $p_{\tilde{x}}$. $V_{m,l,\tilde{y},p_{\tilde{y}}}$ est un opérateur fonction seulement des opérateurs \tilde{y} et $p_{\tilde{y}}$ et vérifiant :

$$[V_{m,l,\tilde{y},p_{\tilde{y}}}, \hat{T}_Q] = [V_{m,l,\tilde{y},p_{\tilde{y}}}, \hat{T}_P] = 0 \quad (6.23)$$

$V(x, y)$ s'écrit donc sous la forme : $V = \sum_{m,l} V_{m,l,\tilde{x},p_{\tilde{x}}} V_{m,l,\tilde{y},p_{\tilde{y}}}$, et la restriction de \hat{H} au niveau de Landau $|n \rangle_{\tilde{x}}$ est :

$$\hat{H}_{/n} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\mathbb{I} + V_{/n}$$

$$\text{avec } V_{/n} = \sum_{m,l} A_{m,l} \langle n | V_{m,l,\tilde{x},p_{\tilde{x}}} | n \rangle V_{m,l,\tilde{y},p_{\tilde{y}}} \quad (6.24)$$

On est donc ramené à résoudre un problème à un degré de liberté, périodique en position \tilde{y} et en impulsion $p_{\tilde{y}}$. Ce sera le point de départ au chapitre suivant.

En particulier, pour les premiers niveaux de Landau, dans la limite où le champ magnétique est si fort que le potentiel est linéaire à l'échelle du rayon cyclotron, il vient :

$$V_{/n} \approx V\left(-\sqrt{\frac{c}{eB}}p_{\tilde{y}}, -\sqrt{\frac{c}{eB}}\tilde{y}\right) \quad (6.25)$$

l'Hamiltonien à un degré de liberté qui régit la dynamique des premiers niveaux de Landau est donc obtenu en substituant les variables d'impulsion et de position $p_{\tilde{y}}, \tilde{y}$ dans la fonction de potentiel. C'est une analogie avec la substitution de Peierls [38], qui elle est valable dans la limite du champ faible $B \rightarrow 0$.

La réduction à un problème à un degré de liberté est une propriété aussi valable en mécanique classique. En effet pour $V = 0$, un électron décrit dans le plan, un cercle de période $T = \frac{2\pi}{\omega}$. Pour $V \not\approx 0$, en considérant V comme une perturbation, la méthode de la moyenne [21] affirme que l'étude de l'évolution du point est remplacée par l'étude de l'évolution de cercles (les trajectoires sous H_0), avec un Hamiltonien effectif sur la famille des cercles de période T donné par :

$$\tilde{H} = \frac{1}{T} \int_0^T V(\phi_t) dt$$

où ϕ_t est le flot Hamiltonien par H_0 . L'espace de phase de cette famille de cercles s'obtient par le quotient d'une couche d'énergie E de l'espace de phase initial (x, y, p_x, p_y) par les trajectoires circulaires de H_0 : " $E_0/(y = \phi_t(x))$ ". Y. Colin de Verdières a montré que cet espace de phase a une structure symplectique naturelle induite par le quotient [41]. Cet espace s'identifie à l'espace de phase à un degré de liberté des variables $(\tilde{y}, p_{\tilde{y}})$.

Dans le cas d'un cercle de petit rayon, on peut comprendre intuitivement la substitution de Peierls qui affirme que les trajectoires classiques sont les équipotentielles du potentiel V (car lignes de niveau du nouvel Hamiltonien effectif) avec la figure (6.2). En effet, localement, à l'échelle de la trajectoire circulaire de l'électron, le potentiel est linéaire. D'après la règle de conservation de l'énergie, lorsque l'électron passe dans des potentiels plus élevés, son énergie cinétique diminue, et donc le rayon cyclotron augmente. Au contraire du côté des potentiels plus bas, son rayon cyclotron diminue. Il en résulte une dérive moyenne de l'électron le long de l'équipotentielle. Ce résultat est d'ailleurs exact si le potentiel est rigoureusement linéaire.

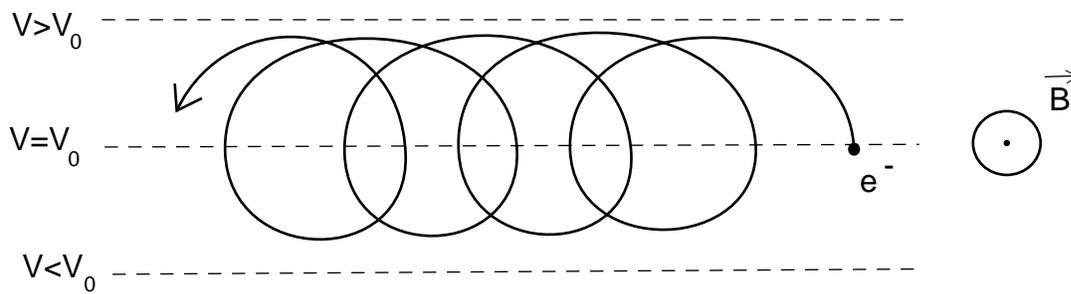


Figure 6.2: *Phénomène de dérive de l'électron dans un potentiel linéaire et un champ magnétique transverse.*

Ce phénomène de dérive ("drift") se rencontre aussi à la surface de la Terre où le rôle de la force de Lorentz est joué par la force de Coriolis. Ainsi le vent a tendance à suivre les lignes d'isobare, ou encore une bouée à la surface de la mer a tendance à dériver orthogonalement à la direction du vent.

6.2 Expression de la conductivité par la formule de Kubo

Considérons comme précédemment des électrons indépendants dans un conducteur plan (x, y) dont la dynamique est régie par l'Hamiltonien \hat{H} (6.1).

Ajoutons à cela un faible champ électrique uniforme \vec{E} . L'Hamiltonien devient alors :

$$\hat{H}_{total} = \hat{H} - e\vec{x}\vec{E} \quad (6.26)$$

rappel : une bande d'énergie remplie correspond à une densité de un électron par cellule XY .

La densité de courant électrique engendrée est donc :

$$\vec{j} = \frac{e}{XY} \vec{v} = \frac{e}{XY} (\partial_{p_x} \hat{H}, \partial_{p_y} \hat{H})$$

On note le spectre de \hat{H} par : $\hat{H}|\Psi_\alpha\rangle = E_\alpha|\Psi_\alpha\rangle$ et le spectre de \hat{H}_{tot} par : $\hat{H}_{tot}|\Phi_\alpha\rangle = \mathcal{E}_\alpha|\Phi_\alpha\rangle$. Le tenseur antisymétrique de conductivité σ_{xy}^α pour un niveau α est défini comme étant la réponse linéaire du courant pour un faible champ électrique appliqué :

$$\langle \Phi_\alpha | j_\mu | \Phi_\alpha \rangle = \langle \Psi_\alpha | j_\mu | \Psi_\alpha \rangle + \sum_\nu \sigma_{\mu,\nu}^\alpha E_\nu, \quad \mu, \nu = x, y \dots \quad (6.27)$$

La théorie des perturbations au premier ordre permet d'établir la formule de Kubo :

$$\sigma_{\mu,\nu}^{\alpha} = i\hbar \sum_{\beta(\neq\alpha)} \frac{\langle \Psi_{\alpha} | j_{\nu} | \Psi_{\beta} \rangle \langle \Psi_{\beta} | j_{\mu} | \Psi_{\alpha} \rangle - \langle \Psi_{\alpha} | j_{\mu} | \Psi_{\beta} \rangle \langle \Psi_{\beta} | j_{\nu} | \Psi_{\alpha} \rangle}{(E_{\alpha} - E_{\beta})^2} \quad (6.28)$$

où l'indice α , correspond au triplet d'indices (n, θ_1, θ_2) , voir (6.20), et la somme porte à priori sur tous les autres états β du spectre. Mais les opérateurs j_x et j_y ne couplent pas les états $(\theta'_1, \theta'_2) \neq (\theta_1, \theta_2)$, car $[j_x, \hat{T}_Q] = [j_y, \hat{T}_P] = 0$, si bien que la somme est réduite aux seuls états $\beta \equiv (n', \theta_1, \theta_2)$, $n' \neq n$.

On définit ensuite la conductivité moyenne de la bande d'énergie n par :

$$\bar{\sigma}_{xy}^n = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint d\theta_1 d\theta_2 \sigma_{xy}^n(\theta_1, \theta_2) \quad (6.29)$$

Moyennant quelques manipulations algébriques, que l'on trouve détaillées par exemple dans [40], on aboutit à l'expression suivante pour la conductivité de Hall de la bande n :

$$\bar{\sigma}_{xy}^n = \frac{e^2}{h} C_n \quad (6.30)$$

avec :

$$C_n = \frac{i}{2\pi} \iint d\theta_1 d\theta_2 (\langle \partial_{\theta_2} \Psi_n | \partial_{\theta_1} \Psi_n \rangle - \langle \partial_{\theta_1} \Psi_n | \partial_{\theta_2} \Psi_n \rangle) \quad (6.31)$$

C_n est un entier, l'indice de Chern qui caractérise la topologie de la bande d'énergie $|\Psi_n\rangle$, exprimé ici comme l'intégrale de la courbure de Berry. Nous reviendrons plus en détail sur le sens géométrique de cette expression au chapitre (10.2).

Ce résultat est indépendant de la valeur du champ magnétique, il suppose seulement que l'énergie de Fermi soit dans un "gap" du spectre. La conductivité du matériau est alors la somme des conductivités (quantifiées) des bandes occupées, situées sous le niveau de Fermi.

Cette interprétation de l'effet Hall quantique entier est due à D.J. Thouless et al. [10], et B. Simon [42] a ensuite précisé le sens géométrique de l'intégrale (6.31).

Chapitre 7

Modèle périodique à un degré de liberté.

Le chapitre précédent a montré l'intérêt d'étudier des Hamiltoniens à un degré de liberté périodiques en position et impulsion, en physique du solide. Mais cette étude a un intérêt plus général, car sur le tore, on peut élaborer des modèles simples (ex : l'application du boulanger, ou le chat d'Arnold), qui permettent d'étudier des propriétés liées aux systèmes dynamiques en général.

Dans ce chapitre, nous présentons la mécanique classique sur le tore en tant qu'espace de phase, et la mécanique quantique associée. Les propriétés et les notations de ce chapitre nous seront utiles pour la suite, et elles proviennent en général de [14] et [26]. Il ressortira essentiellement de ce chapitre que la résolution de l'équation de Schrödinger pour une dynamique sur le tore, se fait dans un espace de dimension finie N ($\sim 1/h$). Cette résolution peut se faire pour des fonctions d'onde vérifiant des conditions de périodicité précises en position et impulsion, caractérisées par un couple d'angles (θ_1, θ_2) . On obtient ainsi une famille de spectres discrets différents (un pour chaque valeur de (θ_1, θ_2)) c'est à dire différents problèmes quantiques ayant tous la même limite classique.

7.1 Mécanique classique intégrable sur le tore.

Pour se faire une idée intuitive du tore comme espace de phase, nous commençons par présenter la dynamique classique intégrable sur le tore, définie par un Hamiltonien indépendant du temps.

Supposons donné un Hamiltonien à un degré de liberté sur le plan $\mathcal{H}(q, p)$, périodique en

position et impulsion, de périodes respectives Q et P :

$$\mathcal{H}(q + Q, p) = \mathcal{H}(q, p + P) = \mathcal{H}(q, p) \tag{7.1}$$

Du fait de cette périodicité, la dynamique classique, définie par les équations de Hamilton, est elle-même périodique, ou plus précisément invariante par les translations $\vec{Q} = (Q, 0)$ et $\vec{P} = (0, P)$.

Equations de Hamilton :

$$\begin{cases} \partial_t q(t) = \partial_p \mathcal{H}(q, p) \\ \partial_t p(t) = -\partial_q \mathcal{H}(q, p). \end{cases} \tag{7.2}$$

Exemple : modèle de Harper :

$$\mathcal{H}(q, p) = -V_1 \cos(2\pi q/Q) - V_2 \cos(2\pi p/P) \tag{7.3}$$

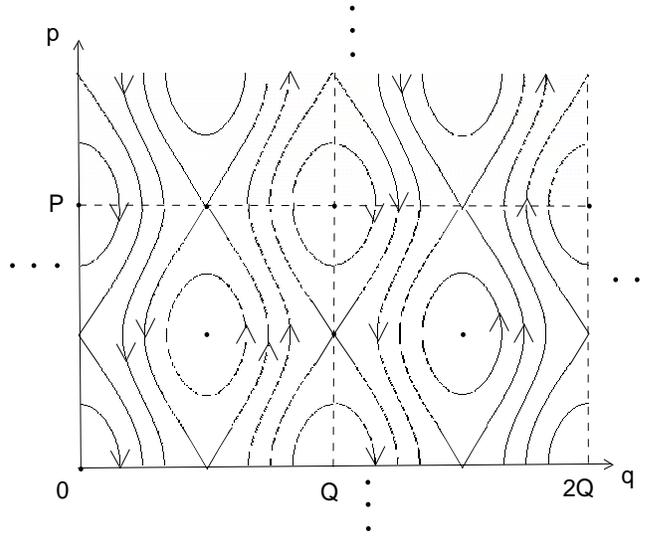


Figure 7.1: Trajectoires du modèle de Harper (7.3). $V_1 = 1$ $V_2 = 0.5$

Les trajectoires sont représentées sur la figure 7.1.

Remarque : d'après la conservation de l'énergie, et aussi du fait que ce soit un problème à un degré de liberté, les trajectoires sont localement identiques aux lignes de niveaux de la fonction $\mathcal{H}(q, p)$.

La propriété d'invariance de la dynamique sous les translations \vec{Q} et \vec{P} fait que nous ne perdons aucune information en identifiant les côtés opposés d'une cellule élémentaire de côtés (Q, P) , autrement dit, en identifiant tous les points du plan qui diffèrent entre eux

d'une translation du type $n_1Q + n_2P$, avec $(n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2$.

En faisant ces identifications, l'espace quotient obtenu est homéomorphe au tore T^2 , et la dynamique classique sur ce tore est engendrée par le même Hamiltonien $\mathcal{H}(q, p)$. voir la figure 7.2.

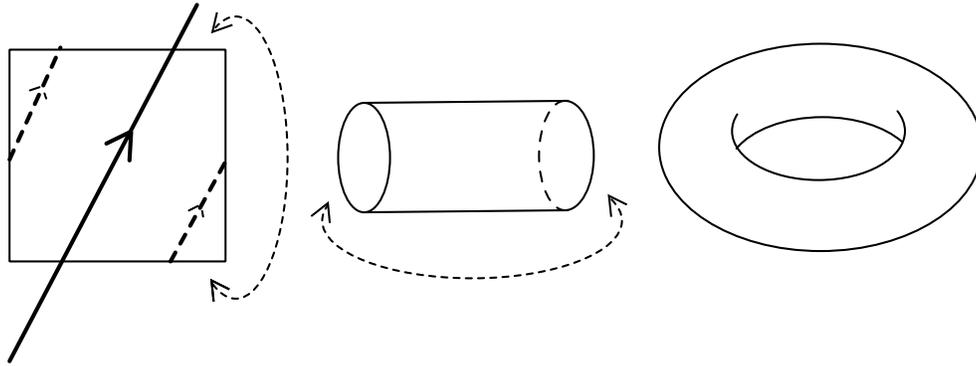


Figure 7.2: Le tore obtenu par identification des côtés opposés d'une cellule.

Les trajectoires (autres que les points fixes et les séparatrices) sont périodiques car elles correspondent aux courbes de niveau de la fonction \mathcal{H} . Nous pouvons donc associer à chacune un couple d'entiers $(n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2$, qui correspond au nombre de tours effectués en une période par la trajectoire, dans les directions q et p . C'est l'élément du groupe d'homotopie $\pi_1(T^2)$ associé à la trajectoire. (A deux trajectoires est associé le même couple (n_1, n_2) si par "déformation continue", on peut identifier les deux trajectoires[20]).

Les trajectoires de type $(0, 0)$ sont aussi appelées trajectoires *contractibles*, car par déformation on peut réduire la trajectoire à un point.

En définitive, il y a trois façons équivalentes pour représenter graphiquement les trajectoires classiques sur le tore et qui sont illustrées sur la figure (7.2) :

1. Représentation de la trajectoire sur le plan (en trait plein).
2. Représentation de la trajectoire sur le carré, en identifiant les côtés opposés (traits pointillés).
3. Représentation de la trajectoire sur une surface de forme "chambre à air", plongée dans \mathbb{R}^3 .

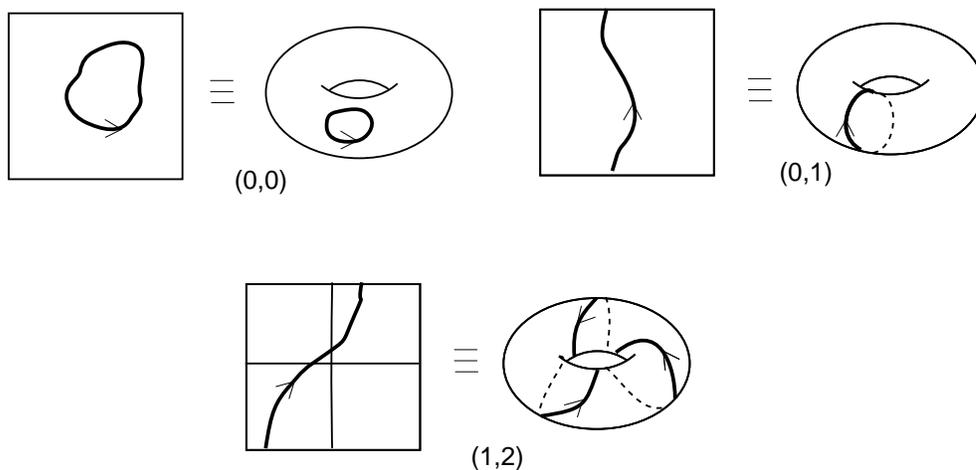


Figure 7.3: *Exemples de classe d'homotopie associée à une trajectoire*

La façon la plus commode pour s'imaginer ces nombres (n_1, n_2) , caractérisant la classe d'homotopie de la trajectoire, est peut-être de considérer la trajectoire dans le plan (q, p) , comme le montre la figure 7.3. (n_1, n_2) correspondent aux nombre de cellules traversées avant que la trajectoire ne revienne dans une configuration identique.

L'appendice B présente quelques propriétés et remarques pour une telle dynamique classique intégrable sur le tore.

Afin de pouvoir étudier une dynamique plus riche, nous considérerons des Hamiltoniens dépendants du temps au paragraphe 12. Il n'y aura plus alors les restrictions sur la dynamique imposées par la conservation de l'énergie, et nous pourrons observer dans de tels modèles une transition d'une dynamique régulière vers une dynamique chaotique.

Dans le paragraphe suivant, nous allons procéder de façon analogue à une réduction de la dynamique sur le plan à celle sur le tore, mais dans le cadre de la mécanique quantique.

Il va s'agir de la réduction de la dynamique dans un espace de Hilbert de dimension infinie, à plusieurs dynamiques dans des espaces de dimension finie, contenant des fonctions d'ondes périodiques en position et impulsion (i.e. et dont la transformée de Fourier est aussi périodique)

7.2 Le tore en mécanique quantique

a) Réduction aux fonctions d'ondes périodiques.

Nous supposons donné un Hamiltonien \hat{H} à un degré de liberté, opérateur hermitique sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

Dans les exemples que l'on traitera, un tel Hamiltonien sera donné par son expression à partir des opérateurs de position et d'impulsion \hat{q} et \hat{p} :

$$\hat{H} = \mathcal{H}(\hat{q}, \hat{p}) \quad (7.4)$$

(Les opérateurs q, p s'identifient aux opérateurs $\tilde{y}, p_{\tilde{y}}$ du paragraphe précédent).

De plus, nous supposons que cet Hamiltonien \hat{H} commute avec les opérateurs de translation en position et impulsion :

$$\hat{T}_Q = e^{-iQ\hat{p}/\hbar} \quad \hat{T}_P = e^{iP\hat{q}/\hbar}. \quad (7.5)$$

c'est à dire :

$$[\hat{T}_Q, \hat{H}] = [\hat{T}_P, \hat{H}] = 0, \quad (7.6)$$

Connaissant l'expression (7.4) de l'Hamiltonien, la condition de commutation (7.6) est vérifiée si cette expression est périodique en \hat{q} et \hat{p} :

$$\mathcal{H}(\hat{q} + Q, \hat{p}) = \mathcal{H}(\hat{q}, \hat{p} + P) = \mathcal{H}(\hat{q}, \hat{p}) \quad (7.7)$$

Par exemple l'Hamiltonien de Harper, obtenu par quantification de Weyl de l'Hamiltonien classique (7.3), vérifie de telles conditions :

$$\hat{H} = -V_1 \cos\left(2\pi \frac{\hat{q}}{Q}\right) - V_2 \cos\left(2\pi \frac{\hat{p}}{P}\right) \quad (7.8)$$

(C'est à dire que (7.3) est le symbole de Weyl de \hat{H} ; voir (A.64)).

Afin que, grâce aux propriétés d'invariance par translation, l'étude de la dynamique quantique puisse se simplifier, il faut supposer que les trois opérateurs \hat{H} , \hat{T}_Q et \hat{T}_P commutent entre eux. Car dans ce cas ces trois opérateurs sont diagonalisables simultanément.

En plus de l'équation (7.6), il faut donc supposer :

$$[\hat{T}_Q, \hat{T}_P] = 0 \quad (7.9)$$

Cette dernière équation est équivalente à :

$$QP = Nh \quad (7.10)$$

avec $N \in \mathbb{N}$, et en posant $h = 2\pi\hbar$.

(Pour montrer ce dernier point, nous utilisons la propriété : $e^A e^B = e^{[A,B]} e^B e^A$, vraie pour deux opérateurs A, B vérifiant : $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$; appliquée ici à $\hat{T}_Q = e^A \quad \hat{T}_P = e^B$)

La relation (7.10) s'interprète de la manière suivante : la surface QP du tore est un multiple entier de la constante de Planck h .

Une telle relation entre la surface de l'espace de phase classique et la constante de Planck se rencontre généralement lors de la quantification de surfaces compactes au moyen d'états cohérents [26]. Les modèles de Lipkin $SU(2)$ et $SU(3)$, en sont des exemples.

On reviendra plus sur les interprétations de cette relation dans la suite.

Décomposons l'espace de Hilbert \mathcal{H} en la somme directe des sous-espaces propres des opérateurs de translation \hat{T}_Q et \hat{T}_P :

$$\mathcal{H} = \iint \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2) d\theta_1 d\theta_2 \quad (7.11)$$

$$\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2) = \left\{ |\Psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \text{t.q.} \left\{ \begin{array}{l} \hat{T}_Q |\Psi\rangle = e^{i\theta_1} |\Psi\rangle \\ \hat{T}_P |\Psi\rangle = e^{i\theta_2} |\Psi\rangle \end{array} \right. \right\} \quad (7.12)$$

avec $(\theta_1, \theta_2) \in [0; 2\pi]^2$.

Chaque sous-espace propre $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ contient donc des fonctions d'ondes périodiques en position et impulsion, à des phases près θ_1 et θ_2 . On établira dans la suite (en cherchant une base de ces espaces) qu'ils sont de dimension finie N .

$$\dim_{\mathbb{C}} \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2) = N \quad (7.13)$$

Du fait que les trois opérateurs \hat{H} , \hat{T}_Q et \hat{T}_P soient diagonalisables simultanément, la dynamique engendrée par l'Hamiltonien \hat{H} est invariante dans chaque sous-espace propre $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$. Autrement dit, (θ_1, θ_2) sont de bons nombres quantiques.

Ainsi, dans chaque sous-espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$, les états stationnaires, vecteurs propres de l'Hamiltonien \hat{H} sont en nombre N , et le spectre est discret :

$$\hat{H} |\Psi_n(\theta_1, \theta_2)\rangle = E_n(\theta_1, \theta_2) |\Psi_n(\theta_1, \theta_2)\rangle \quad n = 1 \rightarrow N. \quad (7.14)$$

Par contre, à n fixé et pour (θ_1, θ_2) variant dans $[0; 2\pi]^2$, chaque niveau n d'énergie $E_n(\theta_1, \theta_2)$ varie de façon continue et décrit une bande d'énergie (selon la terminologie

de physique du solide, dans le cadre de la théorie de Bloch), c'est à dire un segment de \mathbb{R} . De la même façon, les vecteurs propres $|\Psi_n(\theta_1, \theta_2)\rangle$ de chaque niveau décrivent une surface dans l'espace projectif pour $(\theta_1, \theta_2) \in [0; 2\pi]^2$. La topologie de ce fibré en droites sera décrite dans le chapitre 2.6, à l'aide de l'indice de Chern.

Remarques :

1. Le spectre global de \hat{H} est donc formé de N bandes. Nous reviendrons plus en détail sur la description de ces bandes d'énergie dans le chapitre 9 "Distribution de Husimi".

D'après la relation (7.10), la limite classique $\hbar \rightarrow 0$ est obtenue pour $N \rightarrow +\infty$.

On s'aperçoit qu'il y a une infinité de dynamiques quantiques d'Hamiltonien \hat{H} , une pour chaque valeur de $(\theta_1, \theta_2) \in [0; 2\pi]^2$, et interne à chaque sous-espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$. Autrement dit, chaque sous-espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ correspond donc à une quantification possible de l'Hamiltonien classique $\mathcal{H}(q, p)$ sur le tore (7.1). Toutes ces dynamiques quantiques ont donc une même limite classique sur le tore pour $N \rightarrow +\infty$, et cela est illustré par le fait que sur la figure (D.1), les décalages des vecteurs de base, causés par $\vec{\theta}$, deviennent nuls dans cette limite.

Mais il nous semble que cela vient plus précisément du fait que les dynamiques quantiques dans chaque sous espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ s'obtiennent les unes des autres par l'action de l'opérateur de translation sur l'espace de phase $D(\alpha')$, d'après la relation (7.32). L'opération de translation dans l'espace de phase n'est donc pas une opération qui laisse invariante la dynamique quantique sur le tore, en ce sens qu'elle revient à changer les conditions de périodicité de la fonction d'onde. Au contraire, la translation est une transformation canonique du tore qui laisse donc invariante la dynamique classique. Cette non-invariance quantique qui disparaît pour la limite classique $N \rightarrow \infty$, se manifestera lors de l'étude des états cohérents du tore au paragraphe 8.2, et pourra alors s'interpréter comme étant due à une faible non uniformité de l'espace de phase qui disparaît à la limite $N \rightarrow \infty$. Voir la figure 8.4. Cette remarque peut suggérer une généralisation possible de l'étude qui fait l'objet de cette partie, pour une dynamique s'effectuant sur un espace de phase autre que le tore (le plan ou la sphère par exemple). Il s'agirait d'étudier une famille d'Hamiltoniens quantiques non équivalents mais possédant à la limite $\hbar \rightarrow 0$ des dynamiques classiques identiques, c'est à dire équivalentes par transformation canonique.

Une importante question subsiste néanmoins. Si toutes ces dynamiques quantiques ont une même limite classique, y a-t-il une limite commune pour leur spectre et

leurs états stationnaires (7.14) ?

Dans les exemples que nous traiterons, nous verrons qu'au contraire, les états stationnaires peuvent avoir une forte dépendance en fonction des paramètres (θ_1, θ_2) , et cette dépendance sera quantitativement exprimée par l'indice topologique de Chern. Les études numériques sont présentées aux chapitres 2.7 et 2.8, mais apparaissent aussi au cours des chapitres qui suivent pour illustrer certains propos.

2. Les relations (7.10) et (7.13) s'interprètent comme le fait que le nombre d'états quantiques est égal au nombre de cellules de Planck (surface élémentaire h) contenues dans l'espace de phase.

C'est aussi cette relation que l'on retrouve dans les formules asymptotiques de Bohr-Sommerfeld, de Weyl ou de Thomas-Fermi, pour la limite $\hbar \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \text{cardinal } \{ \text{états} | \Psi_n \rangle \text{ t.q. } E_1 < E_n < E_2 \} = & \quad (7.15) \\ \frac{1}{h} (\text{Volume}(q, p) \text{ t.q. } E_1 < \mathcal{H}(q, p) < E_2) + o\left(\frac{1}{h}\right) & \end{aligned}$$

3. La condition (7.10) peut paraître très restrictive, en effet Q, P étant fixés, elle ne permet d'étudier qu'un nombre discret de valeurs de h :

$$h = \frac{1}{N}QP \quad N \in \mathbb{N} \quad (7.16)$$

Nous pouvons cependant obtenir un nombre dense de valeurs de h dans \mathbb{R} , en posant :

$$h = \frac{t}{N}QP \quad (N, t) \in \mathbb{N} \quad (7.17)$$

qui s'écrit aussi : $Nh = (tQ)P$.

Nous obtenons donc à nouveau l'équation (7.10) et la décomposition qui s'en suit de l'espace de Hilbert en sous-espaces de dimension N , à la différence près que la décomposition se fait cette fois-ci avec les sous-espaces propres de $\hat{T}_{(tQ)}$ et \hat{T}_P .

Classiquement, cela revient à considérer un espace de phase toroïdal, contenant t répliques de la cellule de base (Q, P) :

Il y a donc par là une différence essentielle entre la dynamique quantique et la dynamique classique : la dynamique classique est indifférente vis à vis du nombre t de cellules identiques, alors que nous verrons dans l'analyse de certains modèles,

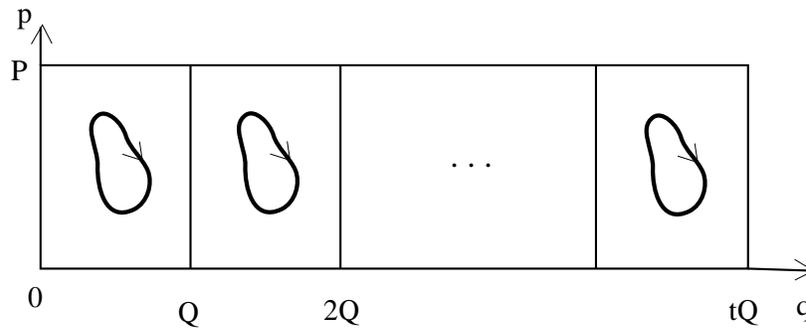


Figure 7.4: *Espace de phase contenant t cellules de base*

qu'un nombre t de puits identiques par translation, sera le siège d'effet tunnel quantique, et responsable de la conductivité dans le modèle de physique du solide exposé précédemment.

D'après (7.17), nous déduisons que lorsque h varie de façon continue parmi les réels, le spectre de l'Hamiltonien \hat{H} peut présenter une structure compliquée en cantor, pour la première fois mis en évidence par R.D. Hofstadter [38] et ensuite analysée par M. Wilkinson [43]. En prenant, $QP = 1$, chaque fois que h est rationnel, $h = \frac{t}{N}$, le spectre est structuré en N bandes. Et la distribution non régulière des valeurs de N lorsque h varie, est responsable de la structure fractale du spectre. Voir la figure 7.5. Cette structure a beaucoup été étudiée par J. Bellisard, A. Barrelli, B. Helffer, J. Sjöstrand et leurs collaborateurs [44]. T. Geisel et al. [45] ont aussi montré que le spectre présente une statistique de niveaux particulière, avec une loi en puissances [45].

b) Opérateurs de projection sur les sous-espaces $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$

Dans ce paragraphe, nous allons introduire des opérateurs de projection qui correspondent naturellement à la décomposition (7.11) de l'espace de Hilbert total \mathcal{H} en sous-espaces orthogonaux $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$. $\hat{P}_{(\theta_1, \theta_2)}$ sera l'opérateur de projection orthogonal sur le sous-espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$.

Mais avant de donner leur expression, nous allons préciser les notations, notamment introduire la notation de A.M. Perelomov [26] pour les opérateurs de translation dans l'espace de phase plan, notation qui a l'avantage d'être très maniable, et qui nous sera utile dans

Figure 7.5: Structure en fractale du spectre "papillon de Hofstadter" du modèle de Harper (tirée de [46]). Pour $h = \frac{t}{N}$, fraction rationnelle irréductible donnée, le spectre est structuré en N bandes. Notons que si N est pair, les deux bandes centrales sont dégénérées.

la suite.

Ces opérateurs ont déjà été utilisés dans la partie 1, chapitre 2.1.

A un point $(q, p) \in \mathbb{R}^2$ de l'espace de phase plan classique est associé un nombre complexe $z \in \mathbb{C}$:

$$z = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(q + ip) \quad (7.18)$$

Nous rappelons que l'intérêt d'un tel changement d'échelle avec un facteur $\frac{1}{\sqrt{\hbar}}$ est que dans le plan (q, p) , une cellule de Planck est de surface h alors que dans le plan $z \in \mathbb{C}$, une cellule de Planck est de surface constante : $\frac{1}{2}$ indépendante de \hbar .

Les "sommets" du tore $(Q, 0)$ et $(0, P)$ sont ainsi associés respectivement aux nombres complexes (voir la figure (7.6)) :

$$\omega_1 = \frac{Q}{\sqrt{2\hbar}} = \sqrt{N\pi} \frac{Q}{P} \quad \omega_2 = \frac{iP}{\sqrt{2\hbar}} = i\sqrt{N\pi} \frac{P}{Q} \quad (7.19)$$

La relation (7.10) s'écrit alors :

$$Im(\bar{\omega}_1 \omega_2) = \pi N \quad (7.20)$$

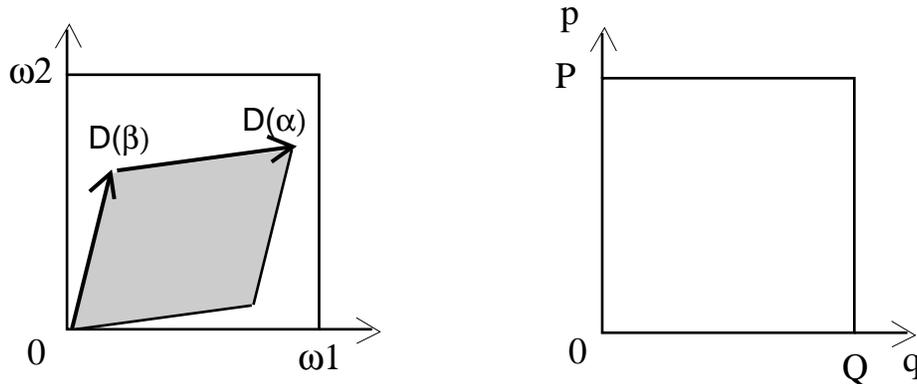


Figure 7.6: Plan complexe

et plan en variables réelles

L'expression de l'opérateur de Translation d'une valeur $z \equiv (q, p)$, dans l'espace de phase, est donné par :

$$D(z) = \exp(za^+ - \bar{z}a) = \exp\left(-\frac{i}{2\hbar}qp\right) \exp\left(i\frac{p\hat{q}}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{q\hat{p}}{\hbar}\right) \quad (7.21)$$

Ces opérateurs de translation vérifient la loi de composition suivante : pour $\alpha, \beta \in \mathbb{C}^2$

$$D(\alpha)D(\beta) = \exp(i\text{Im}(\alpha\bar{\beta}))D(\alpha + \beta) = \exp(2i\text{Im}(\alpha\bar{\beta}))D(\beta)D(\alpha) \quad (7.22)$$

Remarque : leur non-commutation est liée à la surface d'espace de phase $\text{Im}(\alpha\bar{\beta})$ contenue dans le parallélogramme (α, β) , voir la figure 7.6. C'est cette particularité qui est essentielle dans la correspondance semi-classique entre la mécanique quantique et la mécanique classique Hamiltonienne.

Les opérateurs de Translation \hat{T}_Q, \hat{T}_P (7.5) s'écrivent aussi :

$$\begin{cases} \hat{T}_Q = D(\omega_1) = \exp(-i\frac{2\pi N}{P}\hat{p}) \\ \hat{T}_P = D(\omega_2) = \exp(i\frac{2\pi N}{Q}\hat{q}). \end{cases} \quad (7.23)$$

Nous pouvons maintenant donner une expression des opérateurs de projection sur les états périodiques des espaces $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$. Tout d'abord, l'opérateur de projection sur les états périodiques en position, vérifiant $\hat{T}_Q|\Psi\rangle = e^{i\theta_1}|\Psi\rangle$, $\theta_1 \in [0; 2\pi]$, est donné par :

$$\begin{aligned} P_{\theta_1} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{n_1=-N}^{+N} e^{-in_1\theta_1} \hat{T}_Q^{n_1} \right) / \left(\sum_{n_1=-N}^{+N} 1 \right) \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}} e^{-in_1\theta_1} \hat{T}_Q^{n_1} \end{aligned} \quad (7.24)$$

avec $\mathcal{N} = \sum_{\mathbb{Z}} 1$ qui est infini, mais avec lequel nous pouvons renormaliser les résultats.

(L'opérateur P_{θ_1} a pour effet de rendre périodique un état quelconque avec la phase convenable θ_1) Nous pouvons vérifier que P_{θ_1} est hermitique, et que $P_{\theta_1}^2 = P_{\theta_1}$ et $P_{\theta_1}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$ si et seulement si $\hat{T}_Q|\Psi\rangle = e^{i\theta_1}|\Psi\rangle$.

De même, l'opérateur de projection sur les états périodiques en impulsion, vérifiant $\hat{T}_P|\Psi\rangle = e^{i\theta_2}|\Psi\rangle$, $\theta_2 \in [0; 2\pi]$, est donné par :

$$P_{\theta_2} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n_2 \in \mathbb{Z}} e^{-in_2\theta_2} \hat{T}_P^{n_2} \quad (7.25)$$

Grâce à la condition (7.9), ces deux opérateurs commutent entre eux : $P_{\theta_1}P_{\theta_2} = P_{\theta_2}P_{\theta_1}$. Nous obtenons alors l'opérateur de projection $P_{(\theta_1, \theta_2)}$ sur le sous-espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ (7.12), qui a pour action de rendre périodique les vecteurs, en position et impulsion, avec les phases convenables (θ_1, θ_2) :

$$P_{(\theta_1, \theta_2)} = P_{\theta_1}P_{\theta_2} = P_{\theta_2}P_{\theta_1} \quad (7.26)$$

Son expression est, compte tenu de (7.22) :

$$P_{(\theta_1, \theta_2)} = \frac{1}{\mathcal{N}^2} \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{Z}^2} \tilde{D}(\alpha_{n_1, n_2}, \vec{\theta}) \quad (7.27)$$

avec :

$$\vec{\theta} = (\theta_1, \theta_2), \quad \alpha_{n_1, n_2} = n_1 \omega_1 + n_2 \omega_2 \quad (7.28)$$

$$\begin{aligned} \tilde{D}(\alpha_{n_1, n_2}, \vec{\theta}) &= \exp(-in_1 \theta_1 - in_2 \theta_2) D(\omega_1)^{n_1} D(\omega_2)^{n_2} \\ &= \exp(-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}) D(\alpha_{n_1, n_2}) \end{aligned} \quad (7.29)$$

$$F_{n_1, n_2, \vec{\theta}} = n_1 \theta_1 + n_2 \theta_2 + n_1 n_2 N \pi \quad (7.30)$$

Propriétés :

1. $\tilde{D}(\alpha_{n_1, n_2}, \vec{\theta}) \tilde{D}(\alpha_{n_1', n_2'}, \vec{\theta}) = \tilde{D}(\alpha_{n_1+n_1', n_2+n_2'}, \vec{\theta})$. C'est à dire que ces opérateurs ont absorbé la phase de (7.22). Et pour $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$:

$$\tilde{D}(\alpha_{n_1, n_2}, \vec{\theta}) |\Psi\rangle = |\Psi\rangle \quad (7.31)$$

2. Une autre propriété qui nous servira pour le traitement des états cohérents :

$$D(\alpha') P_{\vec{\theta}} = P_{\vec{\theta} + \vec{\theta}'} D(\alpha') \quad (7.32)$$

avec $\vec{\theta}' = (\theta'_1, \theta'_2)$ et $\alpha' = \frac{\theta'_2 \omega_1}{2\pi N} - \frac{\theta'_1 \omega_2}{2\pi N}$.

3. Relation de fermeture :

$$I_{\mathcal{H}} = \iint_{[0, 2\pi]^2} P_{(\theta_1, \theta_2)} d\theta_1 d\theta_2 \quad (7.33)$$

L'appendice D présente les bases de l'espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ formées par les vecteurs de position et d'impulsions. Ces bases sont particulièrement utiles pour effectuer numériquement la diagonalisation de l'Hamiltonien \hat{H} . L'appendice E présente le calcul des éléments de matrice de \hat{H} dans la base de position $|n, \vec{\theta}\rangle$.

Et c'est en diagonalisant numériquement la matrice de \hat{H} à $(\theta_1, \theta_2) \in [0, 2\pi]^2$ fixés, que nous obtenons les composantes $\langle n, \vec{\theta} | \Psi_n(\vec{\theta}) \rangle$ des vecteurs propres, et les énergies $E_n(\vec{\theta})$, correspondantes, voir (7.14).

Des méthodes semi-classiques permettent de bien connaître la valeur des énergies $E_n(\vec{\theta})$ et des états propres $|\Psi_n(\vec{\theta})\rangle$ dans la limite $N \rightarrow +\infty$. Nous exposerons les résultats généraux au chapitre 9 après avoir introduit les états cohérents et la distribution de Husimi au chapitre suivant. Nous verrons des résultats plus précis dans le cas particulier où il y a effet tunnel, au chapitre 11

Chapitre 8

Les états cohérents, représentation de Husimi sur le tore

Les états cohérents du plan ont été décrits dans la partie 1, chapitre 2. A.M. Perelomov [26], P. Leboeuf et A. Voros [15] ont défini les états cohérents du tore comme étant la projection des états cohérents du plan sur un sous-espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$, c'est-à-dire comme étant des paquets d'ondes rendus périodiques sur l'espace de phase. Ils partagent avec les états cohérents standard (du plan) beaucoup de propriétés, par exemple celle de l'orthogonalité à la limite classique $N \rightarrow +\infty$, et celle de l'existence d'une section holomorphe (du fibré en droites complexes sur l'espace projectif).

Un état cohérent du tore a la propriété d'appartenir à un sous espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ et donc lors de son évolution, de rester dans ce sous espace. Il y aurait la possibilité de faire une étude comparée des évolutions selon l'espace d'appartenance (i.e. différentes valeurs de $\vec{\theta}$), ce que nous ne ferons pas. Nous comparerons par contre les états stationnaires à l'aide de l'indice de Chern. Ce que nous pouvons dire c'est que une différence dans les évolutions peut se faire sentir si l'état cohérent s'étale sur l'espace de phase et que des phénomènes d'interférences se produisent. Au minimum, cela peut arriver au bout d'un temps $t \sim \ln N$, pour $N \rightarrow \infty$, qui correspond à un "étalement hyperbolique" du paquet d'onde (par exemple situé sur un point fixe instable de la figure 11.1) [47].

Une propriété mathématique que perdent les états cohérents du tore par projection, à $\vec{\theta}$ fixé, est la possibilité de les obtenir par l'action d'un groupe d'opérateurs unitaires de translation agissant sur un état de base. En quelques sortes, il n'y a plus "uniformité quantique" de l'espace de phase. Cela est dû en fait à l'opération qui rend périodique un état cohérent du plan et qui crée des interférences, constructives ou destructives selon le point de l'espace de phase. Mais nous verrons qu'à la limite classique $N \rightarrow +\infty$, ces

interférences disparaissent de façon exponentielle.

C'est ce même phénomène d'interférences qui gouvernera la dynamique et la valeur des indices de Chern (caractérisant les états stationnaires) dans le cas de l'effet tunnel, au paragraphe 11.2. Nous en verrons ici le mécanisme de base.

Nous finirons ce chapitre en présentant les distributions de Bargmann et de Husimi sur le tore. Leur intérêt réside dans le fait qu'elles fournissent une représentation sur l'espace de phase d'objets quantiques (opérateur ou état).

La représentation de Bargmann associe un état $|\Psi\rangle$ de $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ à une fonction holomorphe thêta de Jacobi sur le plan. La distribution de Husimi est une fonction positive sur le tore associée à l'état $|\Psi\rangle$. Chose remarquable, les zéros de la distribution de Husimi (i.e. l'emplacement des pôles sur l'espace de phase), en nombre N , caractérisent univoquement l'état quantique $|\Psi\rangle$. Cette correspondance entre un état quantique et une collection de N points sur l'espace de phase classique a été mis en valeur et discutée principalement par A. Voros et P. Leboeuf [48, 49, 15].

Le chapitre 9 sera spécialement consacrée aux propriétés semi-classiques de la distribution de Husimi d'un état stationnaire.

8.1 Les états cohérents du tore

Nous utiliserons ci-après les mêmes notations que celles du paragraphe 2.1 utilisées pour présenter les états cohérents du plan (ou états cohérents standard). La figure (8.1) présente la distribution de Husimi d'un état cohérent du plan.

Nous voudrions définir des états quantiques qui partagent les propriétés remarquables des états cohérents standard, à savoir leur dépendance analytique et leur orthogonalité à la limite classique, mais avec la condition supplémentaire d'appartenir à un espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ (7.12), c'est à dire d'être invariants par les translations \hat{T}_Q et \hat{T}_P .

Une façon naturelle d'obtenir de tels états est de projeter les états cohérents $|z\rangle$ sur les espaces $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$, à l'aide de l'opérateur de projection $P_{\vec{\theta}}$, défini par (7.27).

Pour $z \in \mathbb{C}$, on définit ainsi un vecteur cohérent non normalisé :

$$|z, \vec{\theta}\rangle = P_{\vec{\theta}}|z\rangle \tag{8.1}$$

$|z, \vec{\theta}\rangle$ comme $|z\rangle$ ont une dépendance analytique en z .

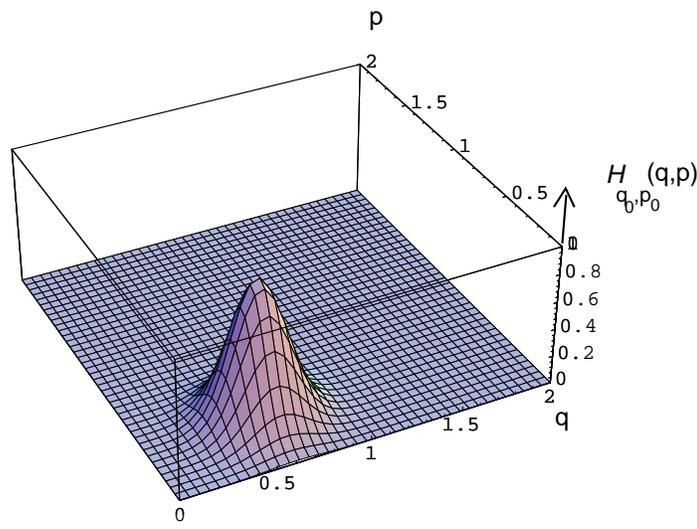


Figure 8.1: *Un état cohérent du plan en représentation de Husimi.* $(q_0, p_0) = (0.6, 0.4)$, $\hbar = 0.02$.

Le vecteur normalisé est :

$$|z, \vec{\theta}\rangle_n = \frac{|z, \vec{\theta}\rangle}{\langle z, \vec{\theta} | z, \vec{\theta} \rangle^{1/2}} \quad (8.2)$$

Voici tout de suite, sur la figure 8.2, pour s'en faire une idée, la distribution de Husimi sur le plan d'un tel état cohérent (à comparer avec l'image (8.1)).

Cette figure qui montre une superposition d'états cohérents standard, traduit l'expression suivante obtenue à partir de (7.29) et (2.17) :

$$\begin{aligned} |z, \vec{\theta}\rangle &= P_{\vec{\theta}} |z\rangle = \langle z | z \rangle^{1/2} \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{Z}^2} \tilde{D}(\alpha_{n_1, n_2}, \vec{\theta}) |z\rangle_n \\ &= \langle z | z \rangle^{1/2} \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{Z}^2} \exp(-iF_{n_1 n_2 \vec{\theta}}) \exp(iIm(\alpha_{n_1 n_2} \bar{z})) \\ &\quad |z + \alpha_{n_1 n_2}\rangle_n \end{aligned} \quad (8.3)$$

Rappel : $\alpha_{n_1 n_2} = n_1 \omega_1 + n_2 \omega_2$, et $F_{n_1 n_2 \vec{\theta}} = n_1 \theta_1 + n_2 \theta_2 + n_1 n_2 N \pi$.

Nous obtenons aussi que les vecteurs $|z + \alpha_{n_1, n_2}, \vec{\theta}\rangle$ et $|z, \vec{\theta}\rangle$ sont proportionnels entre eux, pour $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}^2$, et donc que les états quantiques correspondants sont égaux :

$$|z + \alpha_{n_1, n_2}, \vec{\theta}\rangle_n = e^{(iF_{n_1 n_2 \vec{\theta}})} e^{(-iIm(\alpha_{n_1 n_2} \bar{z}))} |z, \vec{\theta}\rangle_n \quad (8.4)$$

Ainsi, dans l'espace des états quantiques (l'espace projectif), les états cohérents du tore (à $\vec{\theta}$ fixé) forment une surface équivalente au tore.

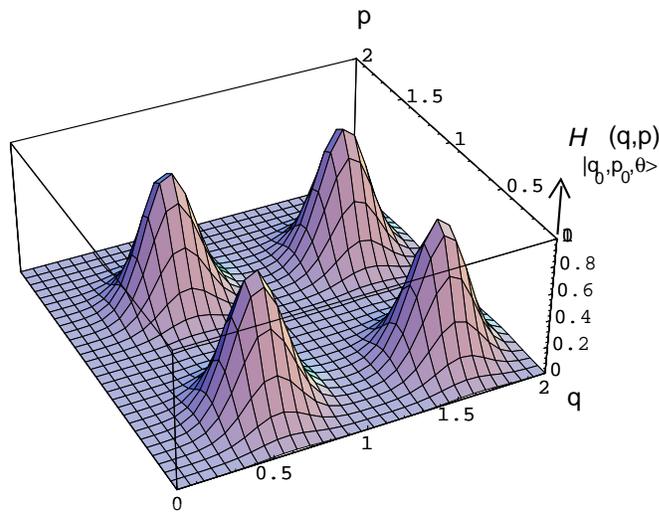


Figure 8.2: *Distribution de Husimi d'un état cohérent du tore $|z, \vec{\theta}\rangle$, représenté sur le plan (q, p) .*

$N = 8$. Périodes du tore : $Q = P = 1$, $(\theta_1, \theta_2) = (0, 0)$, $(q_0, p_0) = (0.6, 0.4)$.

Inversement, d'après la relation (7.33) :

$$|z\rangle = \iint d^2\vec{\theta} |z, \vec{\theta}\rangle \quad (8.5)$$

ce qui signifie que la somme des états cohérents $|z, \vec{\theta}\rangle$ (figure 8.2) se localise en z dans le plan complexe (figure 8.1). En fait le lieu de localisation peut être déplacé de α_{n_1, n_2} grâce à un facteur de phase approprié $i(n_1\theta_1 + n_2\theta_2)$:

$$\begin{aligned} |z + \alpha_{n_1, n_2}\rangle_n &= \iint d^2\vec{\theta} |z + \alpha_{n_1, n_2}, \vec{\theta}\rangle_n \\ &= e^{(-i\text{Im}(\alpha_{n_1, n_2}\bar{z}))} (-1)^{n_1 n_2 N} \iint d^2\vec{\theta} e^{i(n_1\theta_1 + n_2\theta_2)} |z, \vec{\theta}\rangle_n \end{aligned}$$

Cette dernière propriété que nous généraliserons, sera utile au paragraphe 10.7 pour donner une interprétation à la formule de Kubo qui identifie la conductivité et l'indice de Chern dans le modèle d'électrons dans un conducteur plan.

Finalement, remarquons que d'après la relation (7.32), l'action d'un opérateur de translation $D(\alpha)$ (équation 7.21), sur un état cohérent du tore est :

$$\begin{aligned} D(\alpha)|z, \vec{\theta}\rangle &= D(\alpha)P_{\vec{\theta}}|z\rangle \\ &= P_{\vec{\theta}+\vec{\theta}'}D(\alpha)|z\rangle_n \langle z|z\rangle^{1/2} \\ &= P_{\vec{\theta}+\vec{\theta}'}e^{i\text{Im}(\alpha\bar{z})}|z + \alpha\rangle_n \langle z|z\rangle^{1/2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= e^{i\text{Im}(\alpha z)} |z + \alpha, \vec{\theta} + \vec{\theta}' \rangle \frac{\langle z|z \rangle^{1/2}}{\langle z + \alpha|z + \alpha \rangle^{1/2}} \\
&= |z + \alpha, \vec{\theta} + \vec{\theta}' \rangle \exp(-\bar{\alpha}z - \frac{|\alpha|^2}{2})
\end{aligned} \tag{8.6}$$

avec $\alpha = \frac{\theta'_2 \omega_1}{2\pi N} - \frac{\theta'_1 \omega_2}{2\pi N}$.

Cete action n'est donc invariante dans $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ que pour les translations discrètes du type $D(\alpha_{k,k'})$, avec $k, k' \in \mathbb{Z}$ et :

$$\alpha_{k,k'} = k \frac{\omega_1}{N} + k' \frac{\omega_2}{N} \tag{8.7}$$

8.2 Phénomènes d'interférences dans la construction d'un état cohérent du tore.

Nous nous proposons de calculer la norme des états $|z, \vec{\theta} \rangle$ (éq. 8.1), c'est à dire d'évaluer $\langle z, \vec{\theta} | z, \vec{\theta} \rangle$.

Voici une première évaluation de la norme de $|z, \vec{\theta} \rangle$, en utilisant la relation (7.32) :

$$\begin{aligned}
\langle z, \vec{\theta} | z, \vec{\theta} \rangle &= \langle z | P_{\vec{\theta}}^2 | z \rangle = \langle z | P_{\vec{\theta}} | z \rangle \\
&= \langle z | z \rangle_n \langle 0 | D(-z) P_{\vec{\theta}} D(z) | 0 \rangle_n \\
&= \langle z | z \rangle_n \langle 0 | P_{\vec{\theta} + \vec{\theta}'} | 0 \rangle_n
\end{aligned} \tag{8.8}$$

avec (θ'_1, θ'_2) donné par $z = \frac{\theta'_2 \omega_1}{2\pi N} - \frac{\theta'_1 \omega_2}{2\pi N}$. Donc $\theta'_1 = -2\pi N \frac{p}{P}$ et $\theta'_2 = 2\pi N \frac{q}{Q}$.

Le facteur $\langle z | z \rangle = \exp(z\bar{z})$ est propre aux états cohérents du plan. Le deuxième terme est doublement périodique en z , de périodes $\frac{\omega_1}{N}$ et $\frac{\omega_2}{N}$.

L'idée est d'utiliser l'expression (7.27) du projecteur, et de ne considérer à la limite $N \rightarrow +\infty$ que la contribution de cellules voisines.

$$\begin{aligned}
{}_n \langle 0 | P_{\vec{\theta} + \vec{\theta}'} | 0 \rangle_n &= {}_n \langle 0 | \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{Z}^2} \tilde{D}(\alpha_{n_1, n_2}, \vec{\theta} + \vec{\theta}') | 0 \rangle_n \\
&= \sum_{n_1, n_2} {}_n \langle 0 | D(\alpha_{n_1, n_2}) | 0 \rangle_n e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta} + \vec{\theta}'}} \\
&= \sum_{n_1, n_2} {}_n \langle 0 | \alpha_{n_1, n_2} \rangle_n e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta} + \vec{\theta}'}}
\end{aligned}$$

or :

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \alpha_{n_1, n_2} \rangle_n &= \exp\left(-\frac{|\alpha_{n_1, n_2}|^2}{2}\right) \\
&= \exp\left\{-\frac{\pi N}{2QP} \left((n_1 Q)^2 + (n_2 P)^2\right)\right\}
\end{aligned} \tag{8.9}$$

donc :

$${}_n\langle 0 | P_{\vec{\theta} + \vec{\theta}'} | 0 \rangle_n = 1 + \sum_{n_1 \in \mathbf{Z}, n_2 > 0, (e n_2 = 0 \text{ si } n_1 > 0)} \exp\left\{-\frac{\pi N}{2QP} ((n_1 Q)^2 + (n_2 P)^2)\right\} (-1)^{n_1 n_2 N} 2 \cos(n_1(\theta_1 + \theta_1') + n_2(\theta_2 + \theta_2')) \quad (8.10)$$

Dans la limite classique $N \rightarrow +\infty$, les termes principaux de la somme (8.10) vont donc être (en supposant $Q \approx P$) :

$$(n_1, n_2) = (0, 0), \quad (1, 0), \quad (0, 1), \quad (-1, 0), \quad (0, -1) \quad (8.11)$$

C'est à dire que outre l'auto-interférence $(0, 0)$, nous considérons le recouvrement avec les quatres plus proches voisins.

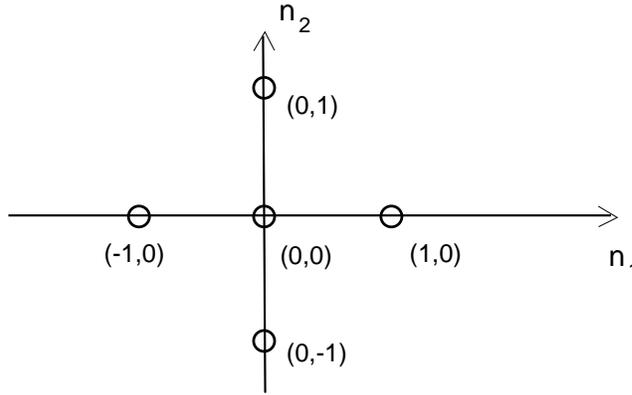


Figure 8.3: Cellules voisines prises en compte dans l'approximation de l'interférence

Dans cette approximation (exponentiellement bonne), (8.10) donne :

$$\frac{\langle z, \vec{\theta} | z, \vec{\theta} \rangle}{\langle z | z \rangle} = {}_n\langle 0 | P_{\vec{\theta} + \vec{\theta}'} | 0 \rangle_n \approx 1 + 2e^{(-\frac{\pi N}{2})} [\cos(\theta_1 - 2\pi N \frac{p}{P}) + \cos(\theta_2 + 2\pi N \frac{q}{Q})] \quad (8.12)$$

avec, nous le rappelons : $\langle z | z \rangle = \exp(z\bar{z})$.

Cette évaluation, représentée sur la figure (8.4), montre clairement que lorsqu'un état cohérent du plan est rendu périodique $|z, \vec{\theta} \rangle = P_{\vec{\theta}} |z \rangle$, il se produit un phénomène d'interférence responsable de fluctuations exponentiellement faibles autour d'une valeur constante. Ce phénomène d'interférence est constructif ou destructif selon la position z de l'état et selon la valeur des phases (θ_1, θ_2) fixant les conditions de périodicité.

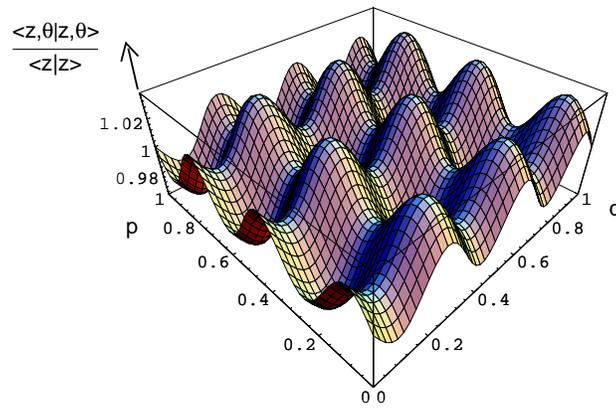


Figure 8.4: Norme de l'état $|z, \vec{\theta}\rangle$ en fonction de z et pour $(\theta_1, \theta_2) = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$, $N = 3$. $Q = P = 1$. De façon générale, l'amplitude est $\sim e^{-\frac{\pi N}{2}}$, la figure présente $N \times N$ bosses et creux. Et (θ_1, θ_2) ont pour effet de translater la figure de $\delta q = \frac{\theta_2 Q}{2\pi N}$ et $\delta p = -\frac{\theta_1 P}{2\pi N}$, en accord avec la figure D.1.

8.3 Représentation de Bargmann et de Husimi

Les états cohérents sont des états quantiques associés aux points de l'espace de phase classique. Par ailleurs, les états cohérents du plan vérifient une relation de fermeture, qui signifie qu'ils forment une base surcomplète de l'espace de Hilbert :

$$I_{\mathcal{H}} = \iint \frac{dq dp}{2\pi\hbar} |qp\rangle\langle n_{<qp}| \quad (8.13)$$

Une représentation d'un état quantique $|\Psi\rangle$ sur l'espace de phase s'obtient donc naturellement en considérant ses composantes ${}_n\langle qp|\Psi\rangle$ dans la famille des états cohérents à l'aide de cette relation de fermeture.

Cela nous amène à deux représentations intéressantes :

1. La *représentation de Bargmann* $\Psi(z) = \langle z|\Psi\rangle$ qui est une fonction analytique en $z = (q + ip)/\sqrt{2\hbar}$. Des propriétés particulières en découlent, notamment concernant ses zéros (i.e. les lieux où elle est nulle).
2. La *représentation de Husimi* $\mathcal{H}_{\Psi}(z) = |{}_n\langle z|\Psi\rangle|^2$ qui est une fonction positive sur l'espace de phase et qui permet de faire des correspondances assez directes avec la mécanique classique. Par exemple, dans la limite $N \rightarrow +\infty$, une distribution de Husimi satisfait l'équation d'évolution classique de Liouville au premier ordre [31, 6].

a) La distribution de Bargmann

Les résultats qui suivent ont été obtenus par A. Voros et P.Leboeuf [48, 15]. Considérons un état $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$, avec $\vec{\theta} \in [0, 2\pi]^2$.

Les états cohérents du plan non normalisés : $|z\rangle = e^{za^+}|0\rangle$ ont une dépendance analytique en $z \in \mathbb{C}$. Ainsi la représentation de Bargmann :

$$\Psi_{\vec{\theta}}(z) = \langle z | \Psi \rangle \quad (8.14)$$

est une fonction anti-analytique en z .

Remarque : Une définition avec les états cohérents du tore (8.1) serait équivalente, et ce sera la même chose pour la distribution de Husimi, car :

$$\Psi_{\vec{\theta}}(z) = \langle z, \vec{\theta} | \Psi \rangle = \langle z | P_{\vec{\theta}} | \Psi \rangle = \langle z | \Psi \rangle \quad (8.15)$$

La distribution de Bargmann de $|\Psi\rangle$ présente quelques propriétés découlant de l'appartenance de $|\Psi\rangle$ à $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$.

D'après (7.31),

$$\begin{aligned} \langle z | \Psi \rangle &= \langle z | \tilde{D}(\alpha_{n_1, n_2}, \vec{\theta}) | \Psi \rangle = e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} \langle z | D^+(-\alpha_{n_1, n_2}) | \Psi \rangle \\ &= e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} e^{\alpha \bar{z} - \frac{|\alpha|^2}{2}} \langle z - \alpha_{n_1, n_2} | \Psi \rangle \end{aligned}$$

donc

$$\Psi_{\vec{\theta}}(z - \alpha_{n_1, n_2}) = e^{iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} e^{-\alpha \bar{z} + \frac{|\alpha|^2}{2}} \Psi_{\vec{\theta}}(z) \quad (8.16)$$

qui est l'équation fonctionnelle pour les fonctions thêta de Jacobi [26]. Ses zéros sont périodiques dans le plan \mathbb{C} , de périodes \vec{Q} et \vec{P} . Nous allons maintenant nous intéresser aux zéros (z_k) situés dans une cellule, à l'aide de la formule générale pour les fonctions analytiques, qui est que pour une fonction analytique $f(z)$, dont les zéros dans un domaine de contour \mathcal{C} sont notés (z_k), et pour $n \in \mathbb{N}$:

$$\sum_k z_k^n = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} z^n \frac{f'(z)}{f(z)} dz \quad (8.17)$$

Nous appliquons ici cette formule pour la fonction antianalytique $\Psi(z)$, pour $n = 0$ et $n = 1$.

A l'aide de (8.16), nous avons :

$$\text{cardinal}(z_k) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\Psi'(z)}{\Psi(z)} d\bar{z} = N \quad (8.18)$$

(l'intégrale se fait sur le contour d'une cellule, dans le sens indirect). Cela signifie que $\Psi(z)$ possède N zéros exactement dans le domaine d'une cellule.

De plus,

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N \bar{z}_k &= \frac{1}{2\pi i} \oint \bar{z} \frac{\Psi'(z)}{\Psi(z)} d\bar{z} \\ &= -\frac{N}{2}(\bar{\omega}_1 + \bar{\omega}_2) + (\bar{\omega}_1 \frac{\theta_2}{2\pi} - \frac{\theta_1}{2\pi} \bar{\omega}_2) \end{aligned} \quad (8.19)$$

Ce qui signifie que le barycentre de ces N zéros $z_{0/N} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(q_0 + ip_0)$ est fixé (mais dépend de $\vec{\theta}$).

$$\begin{aligned} \bar{z}_{0/N} &= -\frac{1}{2}(\bar{\omega}_1 + \bar{\omega}_2) + \frac{1}{N}(\bar{\omega}_1 \frac{\theta_2}{2\pi} - \frac{\theta_1}{2\pi} \bar{\omega}_2) \\ q_0 + ip_0 &= -\frac{1}{2}(Q + iP) + \frac{1}{N}(\frac{\theta_2}{2\pi}Q - i\frac{\theta_1}{2\pi}P) \end{aligned} \quad (8.20)$$

Finalement, comme l'ont mit en valeur P. Leboeuf et A. Voros [49, 15] signalons qu'un théorème de factorisation de Weierstrass affirme que la fonction $\Psi(z)$ est déterminée (sauf sa phase globale) par l'emplacement des N zéros (z_k) dans la cellule :

$$\Psi(z) = Z_\Psi e^{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (z_k - \sqrt{N}z_{0/1})\bar{z}} \prod_{k=1}^N \Psi_1(z_{0/1} + \frac{z - z_k}{\sqrt{N}}) \quad (8.21)$$

où Ψ_1 est la fonction de Bargmann correspondant à $N = 1$, et $z_{0/1} = -\frac{1}{2\sqrt{N}}(\bar{\omega}_1 + \bar{\omega}_2) + \frac{1}{\sqrt{N}}(\bar{\omega}_1 \frac{\theta_2}{2\pi} - \frac{\theta_1}{2\pi} \bar{\omega}_2)$ est son unique zéro. Z_Ψ est un facteur de normalisation.

Ainsi, la représentation de Bargmann associée à chaque état quantique $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ une fonction anti-analytique thêta de Jacobi, qui est caractérisée par la collection de N points sur le tore (ses zéros), dont le barycentre est fixé par (8.19).

Remarquons au sujet des dimensions, que l'espace des N -uplets de zéros, vérifiant (8.19) est de dimension complexe $(N - 1)$. En rajoutant une dimension correspondant à la multiplication des fonctions par un nombre complexe (qui correspond à la liberté de phase globale), on retrouve le résultat (7.13), qui affirme que la dimension de $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ est N .

Il est remarquable ici qu'un état quantique soit entièrement caractérisé par la position des N zéros de sa distribution de Bargmann. On retrouve cette propriété dans le cas de la limite classique avec les états cohérents de $SU(2)$ [50], où l'espace de phase est la sphère S^2 . Cette propriété est intimement liée au fait que l'espace de phase soit compact (et aussi de dimension deux, afin de pouvoir utiliser la théorie des fonctions analytiques

à une variable). Il est important de remarquer que les zéros de la fonction de Bargmann sont des singularités topologiques, comme les zéros de toutes les fonctions analytiques). Cela signifie qu'en modifiant la fonction parmi les fonctions analytiques, les zéros peuvent se déplacer, se recouvrir, mais ni disparaître, ni apparaître.

Remarque : La représentation de Bargmann des états de position $|n, \vec{\theta}\rangle$ est à partir de (D.4) :

$$\langle z | n, \vec{\theta} \rangle = \left(\frac{2N}{QP} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{1}{2} z^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi N}{QP} \right) \left[\frac{Q}{N} \left(\frac{\theta_2}{2\pi} + n \right) \right]^2 + \sqrt{2 \left(\frac{2\pi N}{QP} \right)} \left(\frac{\theta_2}{2\pi} + n \right) z \right\} \vartheta_3(V, \tau) \quad (8.22)$$

avec :

$$\begin{aligned} \vartheta(V, \tau) &= \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} \exp(i\pi\tau\nu^2 + 2i\nu V) \\ \tau &= i \frac{NQ}{P} \\ V &= -\frac{\theta_1}{2} + i \frac{\pi}{P} Q \left(\frac{\theta_2}{2\pi} + n \right) - i \sqrt{\frac{\pi NQ}{P}} z \end{aligned} \quad (8.23)$$

Cette expression permet de calculer numériquement la distribution de Bargmann d'un état stationnaire $|\Psi_n(\vec{\theta})\rangle$, (en tronquant la somme (8.23) dont les termes décroissent exponentiellement vite avec ν). En effet la diagonalisation de l'Hamiltonien \hat{H} (E.3), ou du propagateur \hat{U} (12.20), dans la base $|n, \vec{\theta}\rangle$ fournit les coefficients $\langle n, \vec{\theta} | \Psi_n(\vec{\theta}) \rangle$, $n = 0 \rightarrow N - 1$, et l'on a d'après la relation de fermeture (D.6) :

$$\langle z | \Psi_n(\vec{\theta}) \rangle = \sum_{n=0}^{N-1} \langle z | n, \vec{\theta} \rangle \langle n, \vec{\theta} | \Psi_n(\vec{\theta}) \rangle \quad (8.24)$$

b) La distribution de Husimi.

La distribution de Husimi d'un état $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ est la fonction positive définie sur le tore :

$$\mathcal{H}_\Psi(z) = |\langle n | z | \Psi \rangle|^2 = |\Psi(z)|^2 e^{-z\bar{z}} \quad (8.25)$$

Elle est bien définie sur le tore car à l'aide de (7.31), on obtient que \mathcal{H}_Ψ est périodique par translation :

$$\mathcal{H}_\Psi(z + \alpha_{n_1, n_2}) = \mathcal{H}_\Psi(z), \quad \forall n_1, n_2 \in \mathbb{Z} \quad (8.26)$$

Les zéros de $\mathcal{H}_\Psi(z)$ sont les zéros de $\Psi(z)$, qui caractérisent l'état quantique, nous l'avons vu. On remarque donc que la distribution de Husimi qui ne concerne que le module de $\Psi(z)$, contient néanmoins toute l'information sur l'état quantique. Cela est dû à la propriété générale des fonctions analytiques qui sont déterminées par leur module.

De la propriété de factorisation de la fonction de Bargmann (8.21), on déduit une factorisation de la distribution de Husimi :

$$\mathcal{H}_\Psi(z) = Z^2 \prod_{k=1}^N \mathcal{H}_{\Psi_1} \left(z_{0/1} + \frac{z - z_k}{\sqrt{N}} \right)$$

Si l'on définit une distribution de Husimi avec les états cohérents du tore, cette fois-ci le résultat est différent :

$$\mathcal{H}'_\Psi(z) = | \langle z, \vec{\theta} | \Psi \rangle |^2 = \frac{|\langle z | P_{\vec{\theta}} | \Psi \rangle|^2}{\langle z, \vec{\theta} | z, \vec{\theta} \rangle} = \mathcal{H}_\Psi(z) \frac{1}{\langle 0 | P_{\vec{\theta} + \vec{\theta}'} | 0 \rangle}$$

Mais le facteur $\langle 0 | P_{\vec{\theta} + \vec{\theta}'} | 0 \rangle$ fluctue très faiblement autour de 1 comme nous l'avons vu (8.12, figure 8.4).

Comme exemple de distribution de Husimi, celle d'un état cohérent du tore est représentée sur la figure 8.2. Dans les paragraphes suivants, nous allons particulièrement nous intéresser aux distributions de Husimi des états stationnaires.

Chapitre 9

Etats stationnaires d'une dynamique intégrable.

Les distributions de Husimi associées aux états stationnaires de la dynamique ont beaucoup été étudiées ces dernières années [31, 51].

Pour une dynamique intégrable, l'aspect qualitatif de ces distributions est différent, selon qu'il y a effet tunnel ou pas. Dans ce chapitre, nous allons décrire ces différents cas, dans le cadre particulier qui nous intéresse, à savoir la dynamique sur le tore. Il faut noter que l'aspect qualitatif des distributions de Husimi pour une dynamique non intégrable est très différent, et nous aborderons ce sujet au paragraphe 12.2.

Pour une dynamique intégrable, générée par un Hamiltonien indépendant du temps, les méthodes semi-classiques comme la méthode W.K.B. montrent que certaines trajectoires périodiques (dites quantifiées) sont associées à des états stationnaires. Or les trajectoires se divisent en trois classes, comme nous l'avons vu au paragraphe 7.1 :

1. Les trajectoires périodiques contractibles.
2. Les trajectoires périodiques non-contractibles (de type $(n_1, n_2) \neq (0, 0)$).
3. Correspondant aux valeurs exceptionnelles de l'énergie où le Hessien de l'Hamiltonien est nul, il y a les points fixes (stables et instables) et les séparatrices.

Les deux premiers paragraphes s'attacheront à décrire les distributions de Husimi associés aux trajectoires périodiques contractibles et non-contractibles, en ajoutant quelques mots concernant les points fixes et les séparatrices.

Les résultats qui seront présentés sont aussi valables dans les régions presque régulières

d'une dynamique non-intégrable, pour décrire des états stationnaires associés à des courbes invariantes.

Un phénomène purement quantique (i.e. sans analogue classique) se produit dans le cas d'une dynamique régulière, lorsque deux états stationnaires ont des énergies suffisamment voisines. Il y a alors un phénomène de résonance qui fait que les états stationnaires sont chacun répartis sur deux trajectoires différentes. Une distribution initialement localisée sur une trajectoire peut alors, lors de son évolution, passer sur l'autre trajectoire par "effet tunnel". Nous décrirons ce mécanisme au paragraphe 9.3.

9.1 Etat stationnaire associé à une trajectoire contractible

a) Existence de quasi-modes

Les articles [52, 53, 54] décrivent les états stationnaires en représentation de Husimi dans le cas d'une dynamique intégrable, à l'aide d'une méthode W.K.B. modifiée (en travaillant sur l'espace de phase, ce qui évite les problèmes de raccordements liés à la présence de caustiques, propres à la représentation en position). Ces résultats concernent la quantification de trajectoires périodiques dans le plan, et s'appliquent donc ici pour les trajectoires contractibles sur le tore. Les trajectoires non-contractibles sur le tore, ne sont pas périodiques sur le plan, et nous verrons au paragraphe suivant comment modifier les règles de quantification.

La méthode W.K.B. dans le cas à une dimension, permet de construire des quasi-modes associés à des trajectoires périodiques. Un quasi-mode est un état quantique Ψ dont les régions de fortes amplitudes de la distribution de Husimi sont localisées sur une trajectoire périodique, et ce quasi-mode vérifie l'équation de Schrödinger stationnaire $\hat{H}\Psi = E\Psi$ à l'ordre \hbar^N , pour tout $N \geq 2$, et dans la limite $\hbar \rightarrow 0$.

Voici le résultat obtenu dans les articles [52, 53, 54] :

Dans la limite classique $\hbar \rightarrow 0$, une trajectoire Γ d'énergie E supporte un quasi-mode si elle vérifie la condition de quantification de Bohr-Sommerfeld :

$$\oint_{\Gamma} pdq = (n + \frac{1}{2})h + o(h) \quad n \in \mathbb{N} \quad (9.1)$$

Alors, la distribution de Husimi du quasi-mode est (à l'ordre \hbar) :

$$\mathcal{H}_\Psi(q, p) = \mathcal{N} \frac{1}{v(q, p)} \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \left(\frac{\mathcal{H}_W(q, p) - E}{v(q, p)} \right)^2 \right) \quad (9.2)$$

où $\mathcal{H}_W(q, p)$ est l'Hamiltonien classique (symbole de Weyl), et $v(q, p)$ est la vitesse du point (q, p) sur l'espace de phase.

L'énergie du quasi mode est E , l'énergie de la trajectoire classique (à l'ordre \hbar).

Remarques :

1. L'intégrale sur le contour de la trajectoire $\oint pdq$ est l'aire englobée par celle-ci.
2. Le symbole de Weyl \mathcal{H}_W diffère à l'ordre \hbar du symbole normal, voir la partie 1, A.65.

La distribution de Husimi du quasi-mode est donc bien concentrée sur la trajectoire avec une intensité dépendant de la vitesse. (A la différence d'une distribution invariante de Liouville).

En général un quasi-mode est un état stationnaire à la limite $\hbar \rightarrow 0$, sauf dans le cas où plusieurs quasi-modes se trouvent avoir la même énergie E . Il y a alors un phénomène de résonance que nous décrirons partiellement au paragraphe 9.3, et que nous analyserons au paragraphe 11.2. Mais ce cas est exceptionnel en ce sens qu'il est non générique. Il est par exemple dû à des symétries de l'Hamiltonien, ou pour un Hamiltonien dépendant d'un paramètre, à des valeurs particulières du paramètre.

L'expression (9.2), nous renseigne sur la distribution de Husimi de l'état stationnaire seulement au voisinage de la trajectoire périodique quantifiée, mais P. Leboeuf et A. Voros [48, 49, 15], ont montré que l'on pouvait avoir des informations aussi sur la distribution dans des régions où elle est très faible en intensité, notamment là où elle s'annule. Plus précisément, nous avons vu d'après (8.18) que la distribution s'annule en N points de l'espace de phase. Lorsque la dynamique est intégrable, ces N zéros se situent sur des lignes et sont éloignés les uns des autres d'une distance de l'ordre de \hbar . L'argument, conforté par les expériences numériques, est basé sur l'expression semi-classique W.K.B. de l'état stationnaire.

De plus, la méthode W.K.B. montre que pour une trajectoire quantifiée vérifiant (9.1) avec $n \in \mathbb{N}$, la fonction de Bargmann du quasi-mode vérifie :

$$\frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\Psi'(z)}{\Psi(z)} d\bar{z} = n \quad (9.3)$$

et donc la fonction de Bargmann comme la distribution de Husimi contiennent n zéros à l'intérieur de la trajectoire (et $N - n$ zéros à l'extérieur).

Pour les applications numériques, on peut localiser précisément chaque zéro sur l'espace de phase en utilisant une méthode de dichotomie et la propriété qui est que le nombre de zéros contenus dans un contour \mathcal{C} est $n = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} \frac{\Psi'(z)}{\Psi(z)} d\bar{z}$.

Remarquons que l'expression (9.2) ne fait pas intervenir les paramètres de périodicité de la fonction d'onde (θ_1, θ_2) . Par conséquent, l'état stationnaire $|\Psi_n(\theta_1, \theta_2)\rangle$ associé à une trajectoire contractible quantifiée, ne dépend pas de (θ_1, θ_2) (à tout ordre en \hbar [41]) pour $\hbar \rightarrow 0$, et son énergie $E_n(\theta_1, \theta_2)$ est elle même constante (à \hbar^∞ près). Autrement dit, la bande d'énergie $E_n(\theta_1, \theta_2)$ a une largeur exponentiellement faible ($\propto \hbar^\alpha \exp(-\frac{c}{\hbar})$, que M. Wilkinson [43] a évalué au moyen de corrections semi-classiques pour l'effet tunnel entre différentes cellules), et la distribution de Husimi de $|\Psi_n(\theta_1, \theta_2)\rangle$ ne fluctue pas avec (θ_1, θ_2) . Elle est figée et concentrée sur la trajectoire classique.

Intuitivement, cela se comprend par le fait que le quasi-mode est construit localement sur une trajectoire contractible. D'une part la trajectoire est un objet classique indépendant de (θ_1, θ_2) , et d'autre part la règle de Bohr-Sommerfeld (9.1) pour la phase de $\Psi(z)$ est aussi indépendante de (θ_1, θ_2) car la trajectoire est contractible.

b) Illustration sur le modèle de Harper

Voici des distributions de Husimi pour le Hamiltonien de Harper :

$$\mathcal{H}(q, p) = -\cos(2\pi q) - \cos(2\pi p) \quad (9.4)$$

(On a choisi $Q = P = 1$).

La figure 9.1 (a) montre les trajectoires classiques. Toutes sont périodiques et contractibles hormis la séparatrice et les points fixes instables.

La figure 11.3 en $D = 0$, montre le spectre des bandes d'énergies $E_n(\vec{\theta})$ pour $N = 21$ niveaux. (Donc $\hbar = \frac{1}{2\pi N} = 0.0075$). On y observe que les bandes sont effectivement très étroites sauf au voisinage de l'énergie de la séparatrice. La position moyenne des bandes est prédite à l'ordre \hbar par la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld (9.1).

La figure (9.1) nous montre la distribution de Husimi de l'état $n = 13$, pour différentes valeurs de (θ_1, θ_2) . On peut y vérifier qualitativement la concordance avec l'expression (9.2) :

1. La distribution est bien concentrée le long d'une trajectoire classique, et a une amplitude plus forte près des points fixes, où la vitesse est plus faible.
2. $(N - n) = 8$ zéros sont situés à l'intérieur de la trajectoire. Ils sont alignés.
3. La distribution varie très peu avec (θ_1, θ_2) .

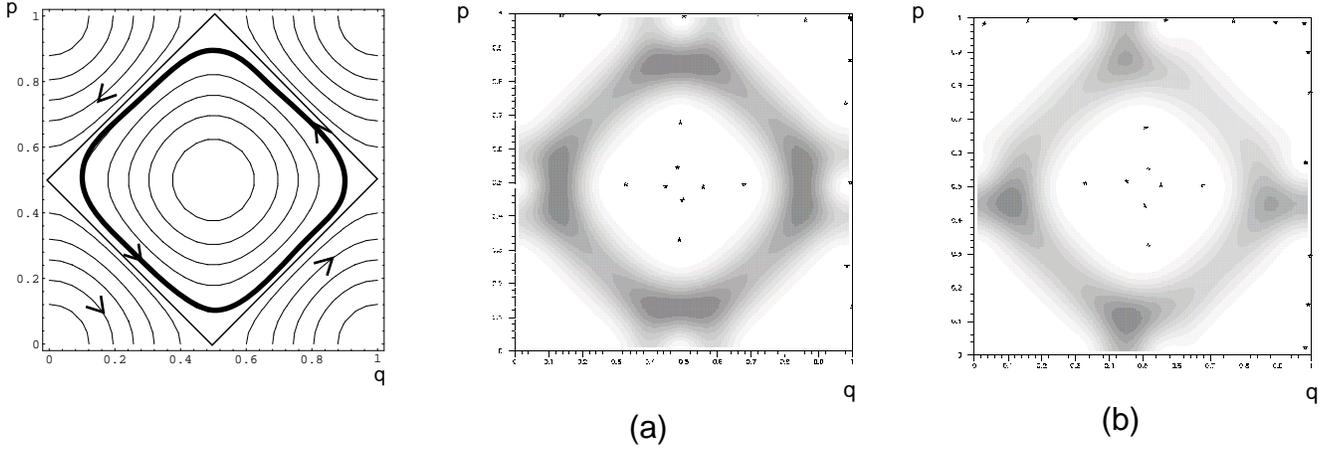


Figure 9.1: *Trajectoire classique et distribution de Husimi pour le Hamiltonien de Harper (9.4).*

$N = 21 \quad n = 13$. *Les étoiles indiquent l'emplacement des zéros.*

(a) : $(\theta_1, \theta_2) = (0, 0)$ (b) : $(\theta_1, \theta_2) = (\pi/2, \pi/2)$

c) Distribution de Husimi près d'une séparatrice

La distribution de Husimi d'un état associé à un point fixe instable a été étudiée [55, 56, 57, 58, 59] dans le cas de problèmes à une dimension. La méthode consiste à construire une distribution invariante au voisinage du point fixe, que l'on recolle à des distributions construites sur les branches de la séparatrice. Cela permet d'obtenir l'expression de la distribution de Husimi et celle du spectre d'énergie.

Si l'ensemble du point fixe instable et de la séparatrice est contractible, alors les conditions de périodicité (θ_1, θ_2) n'interviennent pas dans ces expressions, et la bande d'énergie est donc étroite. Voici pour illustration, le modèle :

$$\mathcal{H}_R(q, p) = -\cos(2\pi q) - \cos(4\pi p) - \frac{1}{4} \cos\left(4\pi q + \frac{\pi}{4}\right) - \cos(2\pi p) \quad (9.5)$$

dont les trajectoires sont dessinées sur la figure 9.3. Il y a trois séparatrices, une contractible, et les deux autres non contractible. La figure 9.2 montre le spectre pour $N = 21$, près de l'énergie de la séparatrice contractible qui sépare les deux puits du centre. On vérifie que les bandes sont étroites. Les doublets de valeurs propres pour des énergies supérieures sont dues à de l'effet tunnel entre les deux familles de trajectoires qui sont alors présentes.

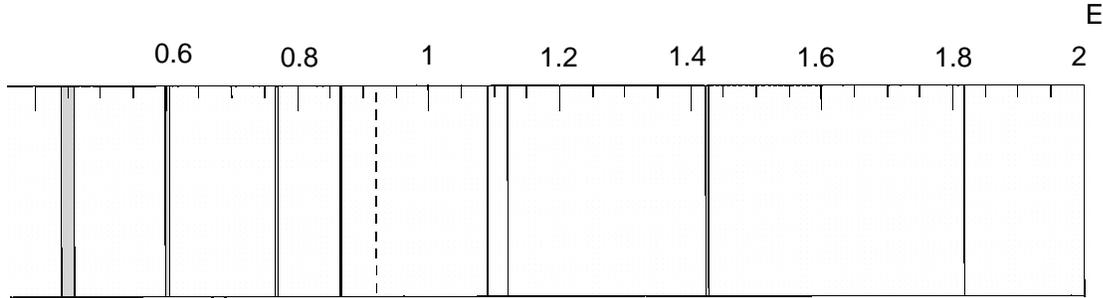


Figure 9.2: Spectre de l'Hamiltonien (9.5) $N = 21$. En pointillés, l'énergie classique de la séparatrice contractible. Pour des énergies plus élevées, les bandes vont par doublets quasi-dégénérés.

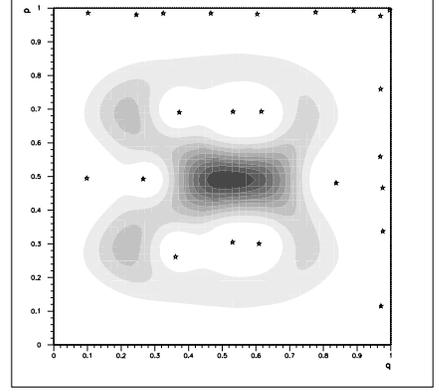
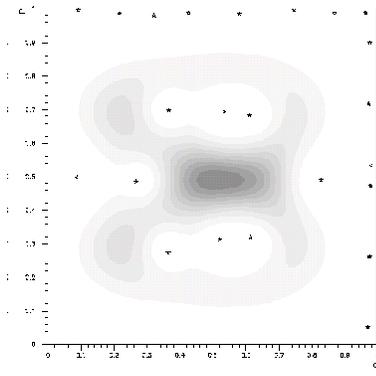
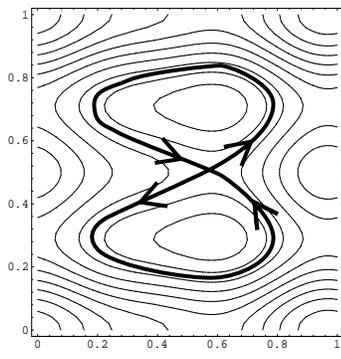
La figure 9.3 montre la distribution de Husimi de l'état $n = 17$, pour différentes valeurs de (θ_1, θ_2) . On y vérifie à nouveau la concentration de la distribution sur le point fixe instable, ainsi que la quasi-indépendance de la distribution avec les paramètres de périodicité (θ_1, θ_2) .

L'indépendance de la distribution de Husimi en fonction de (θ_1, θ_2) est caractéristique des états stationnaires quantifiant des trajectoires contractibles. En particulier leurs zéros ne recouvre pas tout l'espace de phase lorsque (θ_1, θ_2) varient, et cela sera quantitativement exprimé au chapitre suivant par l'indice de Chern qui dans ce cas est nul.

9.2 Etat stationnaires associés à une trajectoire non-contractible

a) Règle de quantification

M. Wilkinson [43] a obtenu la règle de quantification pour les trajectoires non contractibles sur le cylindre, en appliquant la méthode W.K.B. au problème du pendule $H = \frac{p^2}{2} + \cos(q)$,



(a)

(b)

Figure 9.3: Trajectoires et distribution de Husimi de l'Hamiltonien (9.5). $N = 21$ $n = 17$.

(a) : $(\theta_1, \theta_2) = (0, 0)$ (b) : $(\theta_1, \theta_2) = (\pi/2, \pi/2)$

afin de déduire une règle de quantification pour les trajectoires non contractibles du tore. Dans ce paragraphe, nous réobtenons directement cette règle à partir d'un argument différent et présenté dans la partie 1 chapitre 4, qui est que les trajectoires quantifiées ont une phase de Berry nulle.

La classe d'homotopie d'une trajectoire non contractible est caractérisée par un couple d'entier $(n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2$ tel que $(n_1, n_2) \neq (0, 0)$.

Il est néanmoins possible dans le cas intégrable, de construire un quasi-mode associé à une telle trajectoire. En effet localement, la méthode W.K.B. est toujours valable, seulement la règle de quantification globale (9.1) change, l'expression (9.2) elle, subsiste.

Dans la partie 1, nous avons vu que la condition de quantification sans indice de Maslov d'une trajectoire périodique à l'ordre \hbar s'exprime par le fait que sa phase de Berry (sur les états cohérents standard) est nulle (modulo 2π), voir (4.4).

Or pour une trajectoire périodique sur le tore, de classe d'homotopie $(n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2$ sur le tore, passant par $z(0) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(q_0 + ip_0) \in \mathbb{C}$ et $z(T) = z(0) + \alpha_{n_1, n_2}$, la phase de Berry est :

$$\phi = \phi_1 + \phi_2$$

où ϕ_1 est la différence de phase entre les états $|z(0)\rangle$ et $|z(T)\rangle$, donnée par (8.4) :

$$|z(T), \vec{\theta}\rangle_n = e^{i\phi_1} |z(0), \vec{\theta}\rangle_n$$

$$\begin{aligned} \phi_1 &= F_{n_1, n_2, \vec{\theta}} - \text{Im}(\alpha_{n_1, n_2} \bar{z}_0) \\ &= \frac{1}{2\hbar} [(n_1 Q)(n_2 P) + (n_1 Q)p_0 - (n_2 P)q_0] + n_1 \theta_1 + n_2 \theta_2 \end{aligned}$$

$F_{n_1, n_2, \vec{\theta}}$ et α_{n_1, n_2} sont donnés par (7.30), et ϕ_2 exprime la différence de phase entre le transport parallèle et l'état $|z(T)\rangle_n$. D'après (1.18), et (F.3) :

$$\begin{aligned}\phi_2 &= -\frac{1}{i} \int_0^T \mathcal{A} \\ &= \frac{1}{2\hbar} \int_{(q_0, p_0)}^{(q_T, p_T)} (pdq - qdp)\end{aligned}$$

Finalement, la phase de Berry est un multiple de 2π , si :

$$\phi = n_1\theta_1 + n_2\theta_2 + \frac{1}{\hbar}\mathcal{S} = 2\pi n$$

avec $n \in \mathbb{Z}$, et où \mathcal{S} est la somme des surfaces de l'espace de phase provenant des autres termes de ϕ_1 et ϕ_2 . On montre facilement que c'est aussi la surface située à droite de la trajectoire dans une cellule élémentaire. On vient d'appliquer ici la règle de quantification d'Einstein, qu'il convient de corriger par l'indice de Maslov. Or l'indice de Maslov est $-\frac{n_t}{2}$ où n_t est le nombre de tours effectués par le vecteur vitesse dans l'espace de phase sur une période (voir [60], ou l'équation (4.17)). On déduit donc que l'indice de Maslov est nul pour les trajectoires non contractibles, et qu'il est $(\pm\frac{1}{2})$ pour les trajectoires contractibles.

La nouvelle règle de quantification est donc :

L'énergie E d'une trajectoire est quantifiée si la trajectoire vérifie :

$$\mathcal{S} = (n + [\frac{1}{2}] - n_1\frac{\theta_1}{2\pi} - n_2\frac{\theta_2}{2\pi})h \quad (9.6)$$

avec $n \in \mathbb{Z}$, et l'indice de Maslov $\frac{1}{2}$ seulement pour les trajectoires contractibles $(n_1, n_2) = (0, 0)$.

Si l'on considère le graphe de la trajectoire dans une cellule élémentaire du tore, \mathcal{S} est la surface de la cellule située à droite de la trajectoire. (Ou ce qui donnerait le même résultat, la surface située à gauche de la trajectoire comptée négativement).

Les figures (9.4), (9.5), (9.6) montrent quelques exemples de trajectoires, visualisant la surface \mathcal{S} .

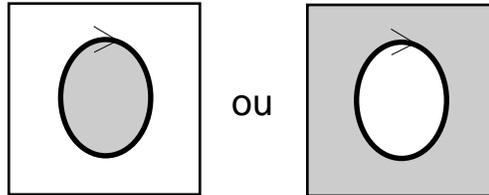


Figure 9.4: Trajectoires contractibles $(n_1, n_2) = (0, 0)$

La règle (9.6) contient donc en particulier le cas des trajectoires contractibles (9.1). Dans ce cas d'ailleurs, le signe de l'action \mathcal{S} ne joue pas car la règle (9.6) reste valable, et \mathcal{S} peut être la surface à l'extérieur ou à l'intérieur de la trajectoire; cela ne joue pas car $\mathcal{S}_{tot} = QP = Nh$.

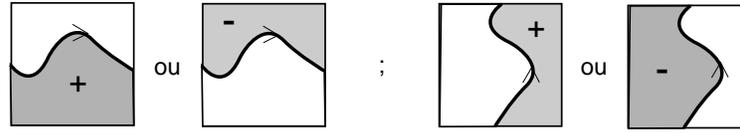


Figure 9.5: Trajectoires de type $(1, 0)$ et $(0, 1)$

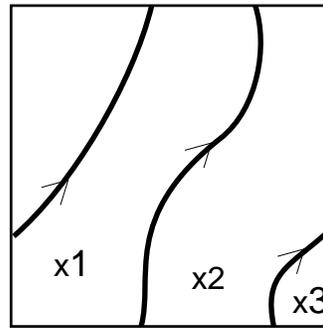


Figure 9.6: Trajectoire de type $(1, 2)$. Pour calculer \mathcal{S} dans ce cas, il faut ajouter chaque portion de surface avec la multiplicité indiquée.

Remarque : Les trajectoires d'énergie plus élevées se trouvent à gauche d'une trajectoire donnée, du fait que $\partial_t(q, p) \wedge \vec{grad}(\mathcal{H}) \geq 0$. Donc $E(\mathcal{S})$ est une fonction croissante.

Au appendices (B, C), il est montré que l'étude générale d'une dynamique intégrable possédant des trajectoires non contractibles de type (n_1, n_2) , se ramène à l'étude de trajectoires non contractibles de type $(0, 1)$. On vérifie que la règle de quantification (9.6) obéit à cette correspondance. En effet à l'aide de (C.6), on obtient : $\mathcal{S} = \mathcal{S}' = (n - \theta'_2)h$ qui est aussi la règle de quantification d'une trajectoire de type $(0, 1)$.

b) Application, structure des bandes du modèle de Harper

Nous allons appliquer la règle de quantification (9.6) pour comprendre qualitativement la structure en bande du modèle de Harper (7.3).

$$\mathcal{H}(q, p) = -V_1 \cos(2\pi q) - V_2 \cos(2\pi p) \quad (9.7)$$

avec $V_1 = 1$, $V_2 = 0.5$.

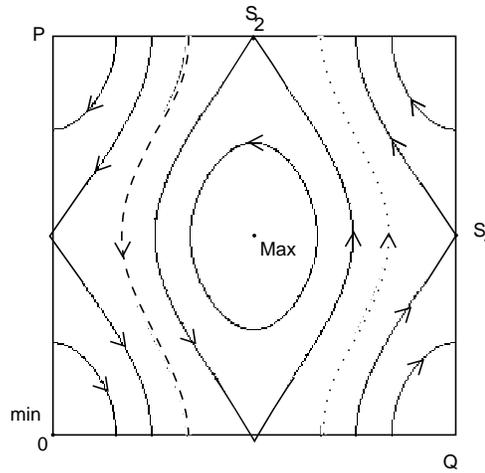


Figure 9.7: Trajectoires

- L'énergie minimum est celle du point fixe stable $(q, p) = (0, 0)$. $E_{min} = -V_1 - V_2 = -1.5$.
- Il y a ensuite un point fixe instable en $(q, p) = (0, \frac{1}{2})$, d'énergie $E_{S1} = -V_1 + V_2 = -0.5$.
- Puis un point fixe instable en $(q, p) = (\frac{1}{2}, 0)$, d'énergie $E_{S2} = V_1 - V_2 = 0.5$.
- Enfin un point fixe stable d'énergie maximum en $(q, p) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, d'énergie $E_{Max} = V_1 + V_2 = 1.5$.

Voici maintenant la nature des trajectoires et la structure des bandes en fonction de l'énergie E :

- Pour $E_{min} < E < E_{S1}$ et $E_{S2} < E < E_{Max}$: les trajectoires sont contractibles. D'après la règle de quantification, l'énergie quantifiée est indépendante de (θ_1, θ_2) .
- Pour $E_{S1} < E < E_{S2}$, les trajectoires sont non contractibles. Une famille de trajectoire est de type $(0, -1)$, l'autre de type $(0, 1)$.

La règle de quantification (9.6), donne pour les trajectoires de type $(0, -1)$:

$$\begin{cases} \mathcal{S}_n &= (n + \frac{\theta_2}{2\pi})h \\ E_n &= \text{Energie des trajectoires de surface } \mathcal{S}_n \end{cases} \quad (9.8)$$

Pour $n \in \mathbb{Z}$ donné, $\mathcal{S}_n(\theta_2)$ est croissante, or $E(\mathcal{S})$ est croissante, donc $E_n(\theta_2)$ est croissante. De plus, $E_n(2\pi) = E_{n+1}(0)$.

Pour les trajectoires de type $(0, 1)$, on a :

$$\mathcal{S}_n = (n - \frac{\theta_2}{2\pi})h \quad n \in \mathbb{Z} \quad (9.9)$$

$\mathcal{S}_n(\theta_2)$ est décroissante, et $E(\mathcal{S})$ est croissante, donc $E(\theta_2)$ est décroissante. De plus, $E_n(2\pi) = E_{n-1}(0)$.

La structure du spectre ainsi décrite est reproduite qualitativement sur la figure 9.8 (non valable près des énergies des séparatrices E_{S1} et E_{S2}). La règle de quantification ne prévoit pas de dépendance avec la variable θ_1 .

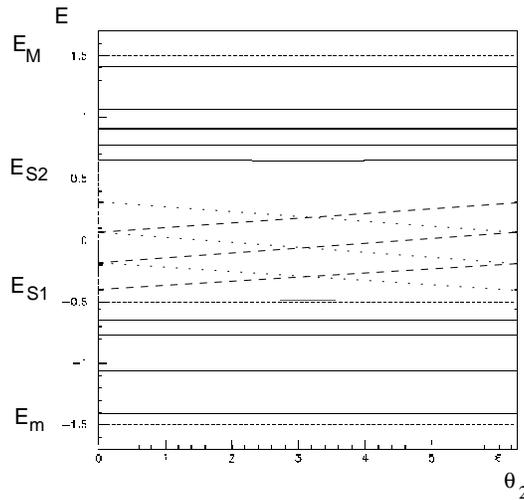


Figure 9.8: Spectre d'énergie semi-classique du modèle de Harper (9.7).

- - - - : énergie des trajectoires de type $(0, -1)$

..... : énergie des trajectoires de type $(0, 1)$

—— : énergie des trajectoires contractibles de type $(0, 0)$

La figure 9.9 montre le spectre d'énergie exact $E_n(\theta_1, \theta_2)$ où la dépendance en θ_1 est responsable de la largeur très faible des bandes perceptible seulement sur le grossissement. Le phénomène de résonance entre deux niveaux d'énergies semi-classiques qui se croisent,

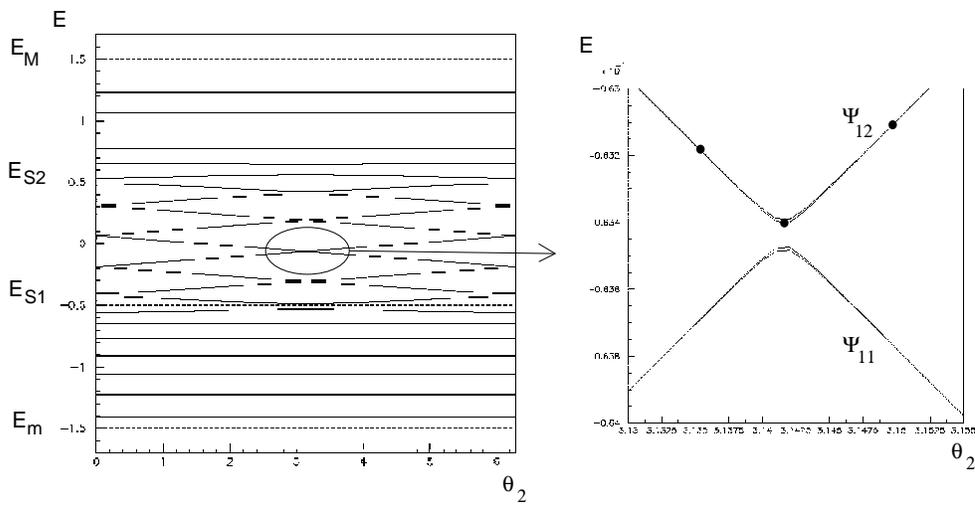


Figure 9.9: *Spectre d'énergie exact du modèle (9.7). $N = 23$. Les énergies des points fixes classiques sont en pointillé. Dans la figure détaillée, la faible largeur témoigne d'une légère dépendance des énergies en fonction de θ_1 .*

est responsable de la répulsion observée.

La distribution de Husimi fluctue donc d'une trajectoire à l'autre avec θ_2 , pour les énergies dans l'intervalle $]E_{S1}, E_{S2}[$. La figure 9.10 montre un exemple dans les conditions précisées par des points sur la figure (9.9).

Dans le diagramme (θ_1, θ_2) , les lieux où il y a quasi-dégénérescence, et croisement des niveaux semi-classique sont deux courbes $(\theta_2 = 0, \theta_2 = \pi)$, de type $(1, 0)$.

9.3 Phénomène de résonance entre deux quasi-modes

Si deux (ou plusieurs) quasi-modes quantifient deux trajectoires distinctes dans l'espace de phase mais d'énergies (ou quasi-énergies) voisines, il y a alors le phénomène de résonance. Dans le modèle de Harper, M. Wilkinson a étudié en détail les effets de résonance entre différentes cellules, pour expliquer la structure complexe du spectre ainsi que la largeur des bandes. Nous rappelons ici seulement l'essentiel du phénomène, par l'étude simple et l'interprétation de la diagonalisation d'une matrice 2×2 . Ensuite nous considérerons différents cas où ce phénomène de résonance peut se produire entre états stationnaires de

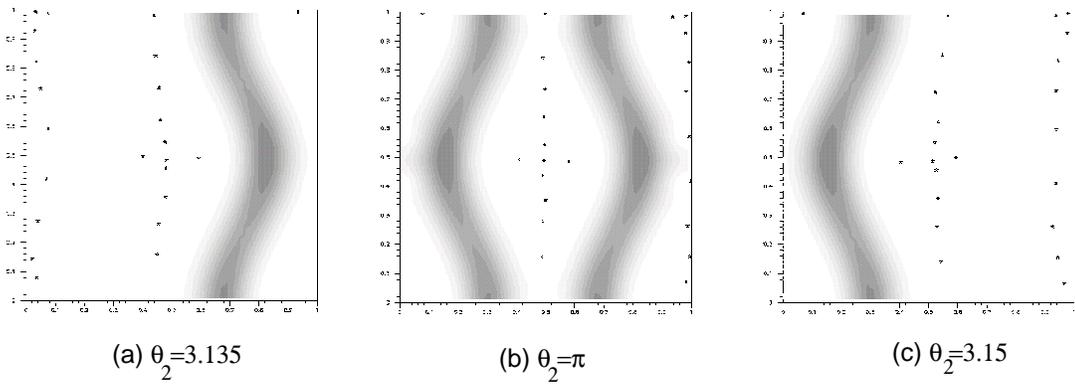


Figure 9.10: *Distribution de Husimi du niveau $n = 12$, $\theta_1 = 0$. Ces trois images correspondent aux trois points de la figure (9.9)*

(a) : $\theta_2 = 3.135$ (b) : $\theta_2 = \pi$ (c) : $\theta_2 = 3.15$.

la dynamique sur le tore.

Supposons que l'on connaisse deux quasi-modes $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$, d'énergie moyenne $E_1 = \langle \Psi_1 | \hat{H} | \Psi_1 \rangle$ et $E_2 = \langle \Psi_2 | \hat{H} | \Psi_2 \rangle$ voisines (i.e. tel que $|E_2 - E_1|$ et $\Delta E_{1,2}$ soient beaucoup plus petits que l'écart avec les autres niveaux d'énergie). Leur microsupport (trajectoire ou courbe invariante dans l'espace de phase sur lesquelles ils sont localisés) sont notés \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 . Pour connaître l'expression des véritables états stationnaires et de leur énergie propre, d'après la théorie des perturbations d'un niveau dégénéré (ou quasi-dégénéré), il faut diagonaliser la restriction de l'Hamiltonien \hat{H} au sous espace engendré par $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$. Soustraire l'opérateur $\frac{(E_1+E_2)}{2}I$ ne change pas les résultats qui vont suivre. On suppose donc que $E_1 = -E$, $E_2 = E$. Dans la base $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$, la matrice de cette restriction est :

$$H_{\Psi_1, \Psi_2} = \begin{pmatrix} -E & \epsilon \\ \bar{\epsilon} & E \end{pmatrix} \quad (9.10)$$

avec $\epsilon = \langle \Psi_1 | \hat{H} | \Psi_2 \rangle \in \mathbb{C}$, terme de module très faible (par rapport à l'écart d'énergie avec les autres niveaux), et non nul en général.

Dans le cas de modèle intégrable, et si il s'agit d'effet tunnel entre deux puits, le terme ϵ de couplage peut s'exprimer en fonction de l'action \mathcal{S} d'une trajectoire complexe reliant les deux puits, [61], et est de la forme $\epsilon \sim e^{-\mathcal{S}/\hbar} \ll 1$. Une telle expression semi-classique a permis à A. Barrelli et al. d'expliquer précisément des structures particulières de tressage dans le spectre de modèles de Harper intégrables à plusieurs puits, [46, 44]. Mais de telles expressions perdent leur sens dans le cas de systèmes non intégrables, lorsqu'il y a des régions chaotiques qui séparent deux régions régulières \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 entre lesquelles il y a effet

tunnel. O. Bohigas et al. ont observé dans ces cas-là un important effet de renforcement de l'effet tunnel [62, 63, 64]. P. Kaminski, M. Ploszajczak et R. Arvieu ont au contraire observé une disparition de l'effet tunnel dans un autre modèle [65].

La diagonalisation de la matrice (9.10), $\hat{H}|\Psi_{\pm}\rangle = E_{\pm}|\Psi_{\pm}\rangle$, donne les valeurs propres :

$$E_{\pm} = \pm\sqrt{E^2 + \epsilon\bar{\epsilon}} \quad (9.11)$$

Et les vecteurs propres :

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \alpha_1^{\pm}|\Psi_1\rangle + \alpha_2^{\pm}|\Psi_2\rangle \quad (9.12)$$

avec :

$$\frac{\alpha_2^{\pm}}{\alpha_1^{\pm}} = \frac{E \pm |E|\sqrt{1 + \frac{\epsilon\bar{\epsilon}}{E^2}}}{\epsilon} = \frac{\bar{\epsilon}}{-E \pm |E|\sqrt{1 + \frac{\epsilon\bar{\epsilon}}{E^2}}} \quad (9.13)$$

Discutons maintenant deux cas limites. On suppose pour simplifier, que $E > 0$.

1. Si $|\epsilon| \ll E$ alors :

$$E_{\pm} \approx \pm E \left(1 + \frac{\epsilon\bar{\epsilon}}{2E^2}\right) \quad (9.14)$$

Les deux niveaux sont légèrement écartés mais peu modifiés relativement à leur écart.

$$\begin{aligned} \left|\frac{\alpha_2^+}{\alpha_1^+}\right| &\approx \left|\frac{2E}{\epsilon}\right| \gg 1 \\ \left|\frac{\alpha_2^-}{\alpha_1^-}\right| &\approx \left|\frac{\bar{\epsilon}}{2E}\right| \ll 1 \end{aligned} \quad (9.15)$$

Donc $|\Psi_+\rangle$ et $|\Psi_-\rangle$ sont respectivement localisés sur \mathcal{C}_2 et \mathcal{C}_1 .

2. Si $|\epsilon| \gg E$ alors :

$$E_{\pm} \approx \pm|\epsilon| \quad (9.16)$$

Les niveaux sont donc écartés de $2|\epsilon|$. On dit qu'il y a répulsion des niveaux.

$$\frac{\alpha_2^+}{\alpha_1^+} \approx \pm\frac{|\epsilon|}{\epsilon} \quad (\text{nombre de module } 1) \quad (9.17)$$

Les états $|\Psi_+\rangle$ et $|\Psi_-\rangle$ ont même amplitude sur les états $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$. Leur support est donc \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 . On dit qu'il y a résonance entre les quasi-modes $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$. Ce deuxième cas est alors responsable d'effet tunnel entre les zones \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 de l'espace de phase.

Par exemple, $|\Psi_1\rangle$ est localisé sur \mathcal{C}_1 , et $|\Psi_1\rangle \propto (|\Psi_+\rangle + |\Psi_-\rangle)$.

Donc lors de l'évolution :

$$|\Psi_1(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}|\Psi_1\rangle \propto \left(e^{-i\frac{|\epsilon|t}{\hbar}}|\Psi_+\rangle + e^{+i\frac{|\epsilon|t}{\hbar}}|\Psi_-\rangle\right) \quad (9.18)$$

Donc pour $t \sim t^* = \frac{\pi}{2\hbar|\epsilon|}$, il vient : $|\Psi_1(t)\rangle \propto (-i|\Psi_+\rangle + i|\Psi_-\rangle) \propto |\Psi_2\rangle$.

Ainsi, au bout du temps $t \sim t^*$ (très long puisque $|\epsilon|$ est supposé être petit), l'état $|\Psi_1(t)\rangle$ est localisé sur \mathcal{C}_2 , le support de $|\Psi_2\rangle$.

Ce phénomène de résonance peut se produire lorsque la dynamique est intégrable ou quasi-intégrable. Comme la dépendance du phénomène avec (θ_1, θ_2) nous intéresse particulièrement, nous distinguons deux cas :

1. Si les trajectoires qui supportent les quasi-modes sont contractibles, l'énergie des quasi-modes, ainsi que le terme de couplage $\epsilon = \langle \Psi_1 | \hat{H} | \Psi_2 \rangle$ varient de façon exponentiellement faible en fonction de (θ_1, θ_2) . Pour déterminer la dépendance des états stationnaires $|\Psi_+\rangle, |\Psi_-\rangle$ avec (θ_1, θ_2) , il faut faire une étude plus précise, à laquelle est consacré le paragraphe 11.2.
2. Dans le cas où les quasi-modes sont associés à des trajectoires non-contractibles, leur énergie semi-classique varie en fonction de (θ_1, θ_2) . Seulement pour les valeurs particulières de (θ_1, θ_2) pour lesquelles les énergies semi-classiques se croisent, (voir figure 9.8), il y a résonance entre les deux quasi-modes, et alors répulsion des niveaux exacts d'énergie comme nous pouvons l'observer sur la figure 9.9.

Chapitre 10

Indice de Chern pour caractériser la topologie des bandes d'énergie.

10.1 Introduction

Lorsque (θ_1, θ_2) varie dans le tore $T_\theta^2 = [0; 2\pi]^2$, l'état stationnaire $[\Psi_n(\vec{\theta})]$ de la bande n (7.14), (ou l'état quasi-stationnaire (12.19)) varie et décrit en général une surface notée \mathcal{T} de dimension deux dans l'espace des états quantiques (l'espace projectif). On fait l'hypothèse qu'il ne se produit pas de dégénérescence. Cette surface \mathcal{T} est paramétrée par (θ_1, θ_2) et elle est donc topologiquement équivalente au tore T^2 . Or à un état quantique donné $[\Psi]$ (un point de l'espace projectif), correspond toute une famille de vecteurs quantiques, vecteurs de l'espace de Hilbert, colinéaires entre eux ($|\Psi\rangle \sim |\Phi\rangle$ si $|\Psi\rangle = \lambda|\Phi\rangle$, $\lambda \in \mathbb{C}$). Cette famille isomorphe au plan complexe \mathbb{C} , est appelée la fibre de $[\Psi]$, et est notée \mathcal{F}_Ψ . Voir la partie 1.

Lorsque l'état $[\Psi]$ varie de façon continue sur la surface \mathcal{T} , la famille de vecteurs \mathcal{F}_Ψ varie aussi de façon continue dans l'espace de Hilbert. Voir la figure 10.1. L'ensemble des fibres $\mathcal{F}_n = \cup_{[\Psi] \in \mathcal{T}} \mathcal{F}_\Psi$, est un espace fibré en droites complexes, noté : $\mathcal{F}_n \rightarrow \mathcal{T}$. \mathcal{T} est appelé l'espace de base, et \mathbb{C} est la fibre caractéristique, car chaque fibre \mathcal{F}_Ψ est isomorphe à \mathbb{C} .

Il est important de remarquer que deux espaces fibrés peuvent ne pas être topologiquement équivalents (i.e. que l'on ne puisse pas transformer continuellement l'un en l'autre), bien que leur espace de base soit topologiquement équivalents (ici au tore T^2).

L'espace fibré est dit trivial, si il est topologiquement équivalent à l'espace produit direct : $\mathcal{T} \times \mathbb{C}$.

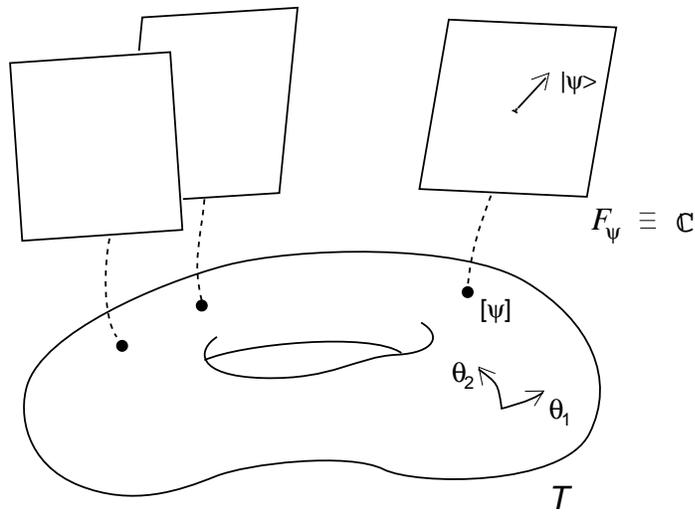


Figure 10.1: Espace fibré \mathcal{F}_n sur l'espace des états $[\Psi_n(\vec{\theta})] \in \mathcal{T}$ de la bande d'énergie n .

Pour illustrer ces propos, considérons par exemple le cas d'espaces dont la fibre caractéristique est la droite réelle \mathbb{R} , et l'espace de base le cercle S^1 . La figure 10.2 montre deux exemples de tels espaces fibrés en droite réelle $\mathbb{R} \rightarrow S^1$. Clairement, ces deux espaces ne sont pas équivalents. On peut deviner que la topologie d'un espace fibré en droite réelle $\mathbb{R} \rightarrow S^1$ est caractérisé par un nombre entier $C \in \mathbb{Z}$, qui compte le nombre d'entrelacements du ruban formés par les fibres. Par exemple sur la figure 10.2, au ruban trivial et au ruban de Mœbius sont respectivement associés les nombres $C = 0$ et $C = -1$. (Le ruban de Mœbius est le fibré canonique sur l'espace projectif réel $P^1 = P(\mathbb{R}^2)$, voir [66]).

Pour distinguer les espaces fibrés non topologiquement équivalents, on leur associe des objets mathématiques appelés classes caractéristiques, qui sont des classes de cohomologie de l'espace de base [20, 66]. Dans le cas qui nous intéresse, la topologie de l'espace fibré \mathcal{F}_n est caractérisée par un nombre entier $C_n \in \mathbb{Z}$ appelé indice de Chern de la bande n , qui caractérise l'entrelacement global des fibres de la figure 10.1.

Les paragraphes suivants présentent deux méthodes pour obtenir l'indice de Chern d'une bande d'états stationnaires.

Premièrement, l'indice de Chern s'exprime comme l'intégrale de la courbure de Berry sur le tore T_θ^2 . Cette façon de calculer l'indice de Chern permet d'obtenir une formule applicable numériquement, et permet aussi de donner une interprétation physique de l'indice de Chern. A l'aide de la formule de Kubo, l'indice de Chern apparait au facteur e^2/\hbar près,

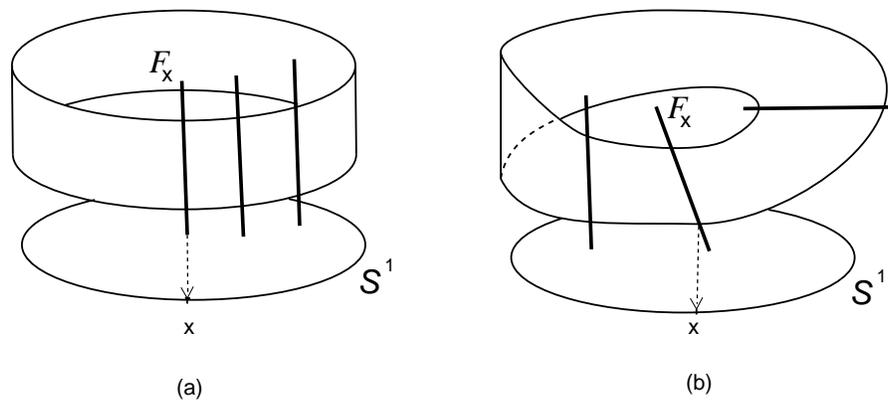


Figure 10.2: Deux exemples d'espaces fibrés en droite non équivalents.

(a) l'espace trivial $\mathbb{R} \times S^1$

(b) Le ruban de Möbius

comme étant la conductivité de la bande n , lorsque l'on soumet le matériau à un faible champ électrique transverse. Par cette correspondance, D.J. Thouless et al. ont expliqué la quantification de la conductivité de Hall [10]. Une interprétation physique différente sera donnée au paragraphe 10.7.

Deuxièmement, D.P. Arovas et al. [11] ont proposé une interprétation de l'indice de Chern au moyen des zéros de la distribution de Husimi des états stationnaires. Précisément, nous avons vu qu'un état stationnaire $|\Psi_n(\vec{\theta})\rangle$ est caractérisé par les zéros de sa distribution de Husimi. Lorsque (θ_1, θ_2) varie, les zéros se déplacent sur l'espace de phase (le tore (q, p)). L'indice de Chern est alors le nombre de fois, compté algébriquement, où un point donné de l'espace de phase est recouvert par les zéros de la distribution de Husimi.

Par cette caractérisation, on peut interpréter l'indice de Chern comme mesurant la sensibilité de l'état stationnaire $\Psi_n(\theta_1, \theta_2)$ avec les conditions de périodicité (θ_1, θ_2) . Par exemple, pour une dynamique régulière, les états stationnaires associés à une trajectoire contractible ont leur distribution de Husimi localisée sur la trajectoire. Lorsque (θ_1, θ_2) varie, les zéros ne peuvent donc pas passer sur cette trajectoire et *l'indice de Chern est nul*. Cela est une première correspondance que l'on peut faire entre la nature de la dynamique classique et la valeur de l'indice de Chern.

Au paragraphe 10.5, pour des problèmes dépendant d'un paramètre γ , nous dégagerons la relation qu'il y a entre la variation d'indice de Chern d'une bande, et la présence d'une dégénérescence. (Il faut pouvoir varier trois paramètres pour observer génériquement des dégénérescences entre niveaux. Ce sont ici (θ_1, θ_2) et γ).

Nous étudierons d'autres correspondances possibles entre la valeur de l'indice de Chern et la dynamique classique autour d'exemples précis dans les chapitres suivants. Il s'agira par exemple dans le cas régulier d'étudier l'indice de Chern pour des bandes d'énergie quantifiant une séparatrice non-contractible, ou des trajectoires présentant des résonances et de l'effet tunnel. Et lors de la transition d'une dynamique intégrable vers une dynamique chaotique, P. Leboeuf et al. [14] ont observé de même, au niveau quantique, un changement de régime net à travers les variations fréquentes des indices de Chern et la présence de nombreuses dégénérescences.

10.2 L'indice de Chern par une intégrale de Courbure.

Dans ce paragraphe nous utiliserons la connexion de Berry, ainsi que les notions d'holonomie et de courbure qui lui sont associées. Ces notions sont présentées dans la partie 1, paragraphe 1.1.

Considérons l'espace fibré \mathcal{F}_n associé aux états stationnaires de la bande n , avec l'hypothèse qu'il n'y a pas de dégénérescence de $E_n(\theta_1, \theta_2)$, pour toutes les valeurs de $(\theta_1, \theta_2) \in [0; 2\pi]^2$. La connexion de Berry est une structure existant globalement sur tout l'espace fibré. Il semble naturel que de l'information concernant la topologie de l'espace fibré $\mathcal{F}_n \rightarrow \mathcal{T}$, et particulièrement son indice de Chern, soit donnée par une expression faisant intervenir la connexion de Berry. Nous allons voir en effet que l'indice de Chern s'exprime avec l'intégrale de la courbure de Berry sur l'espace de base.

Remarque : Il est possible de munir l'espace fibré $\mathcal{F} \rightarrow \mathcal{T}$ de plusieurs connexions différentes, la connexion de Berry est la connexion induite naturellement par le produit hermitien sur l'espace de Hilbert. Mais l'indice de Chern qui est un nombre topologique, est indépendant de la connexion particulière que l'on peut choisir.

Considérons sur \mathcal{T} , la famille de chemins contractibles $(\mathcal{C}_t)_{t \in [0,1]}$ qui sont représentés sur la figure 10.3. Cette famille de chemins recouvre complètement le tore \mathcal{T} .

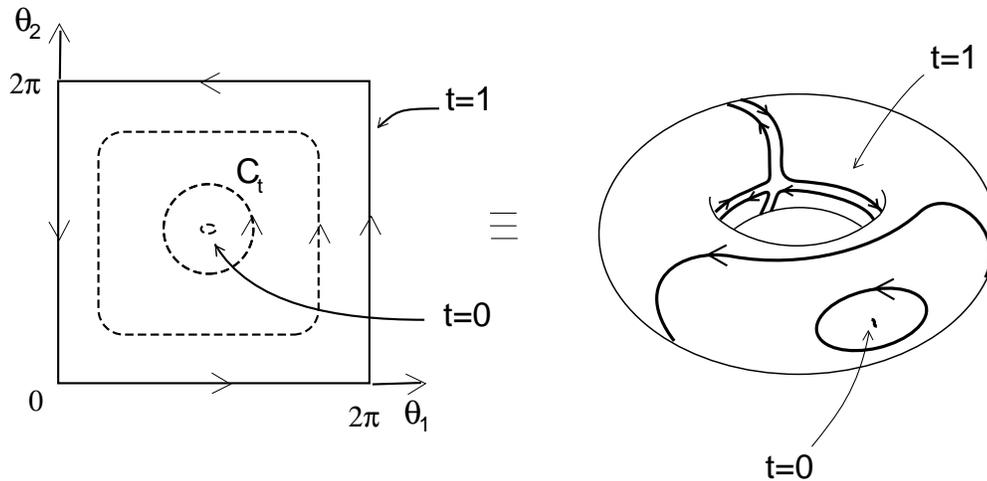


Figure 10.3: Famille de chemins (\mathcal{C}_t) , $t \in [0; 1]$ sur \mathcal{T} .

Appelons $h(t) \in U(1)$ (nombre complexe de module 1), l'holonomie du chemin \mathcal{C}_t . \mathcal{C}_0

est réduit à un point et \mathcal{C}_1 se recouvre lui-même. L'holonomie est donc nulle sur ces deux chemins : $h(0) = h(1) = 1$. Mais pour t variant entre 0 et 1, l'holonomie des chemins $h(t)$ peut avoir varié et effectué un certain nombre de tours C_n , du cercle $U(1)$. Ce nombre de tours qui est un invariant topologique est précisément l'indice de Chern C_n de la bande n .

On note $h(t) = e^{i\phi(t)}$. $\phi(t) \in \mathbb{R}$ est la phase de Berry du contour C_t . Ici c'est une fonction continue de t . $\phi(0) = 0$, $\phi(1) = 2\pi C_n$.

Or la phase de Berry s'exprime comme l'intégrale de courbure (voir éq. (1.16)) :

$$\phi(t) = i \iint_{\mathcal{S}_t} \mathcal{F} \quad (10.1)$$

Où $\mathcal{F} = (\langle \partial_{\theta_2} \Psi_n | \partial_{\theta_1} \Psi_n \rangle - \langle \partial_{\theta_1} \Psi_n | \partial_{\theta_2} \Psi_n \rangle) d\theta_1 \wedge d\theta_2$ est la courbure de Berry ($\Psi_n(\theta_1, \theta_2) \rangle$ sont des états stationnaires normalisés), et \mathcal{S}_0 est la surface nulle, et par continuité, \mathcal{S}_t est la surface de contour C_t . Donc $\mathcal{S}_1 = \mathcal{T}$. Et \mathcal{F} est la courbure de Berry. On déduit donc l'expression de l'indice de Chern :

$$C_n = \frac{i}{2\pi} \iint_{\mathcal{T}} \mathcal{F} \quad (10.2)$$

Remarque : A partir de cette expression de l'indice de Chern comme intégrale de courbure, on peut par exemple calculer l'indice de Chern C de l'espace fibré des états cohérents du tore.

La courbure est F.3 $\mathcal{F} = i\Omega = \frac{i}{\hbar} dq \wedge dp + o(N^{-\infty})$

On déduit que $C = -\frac{1}{\hbar} \int_{[0,Q] \times [0,P]} dq dp + o(N^{-\infty}) = -\frac{QP}{\hbar} + o(N^{-\infty}) = -N + o(N^{-\infty})$. Donc $C = -N$ (au moins pour N assez grand), car C est un entier. La caractérisation de l'indice de Chern par les zéros au paragraphe suivant, permettra de conclure que $C = -N$, du fait que la distribution de Husimi d'un état cohérent possède N zéros.

Vérifions que l'indice de Chern d'un espace fibré trivial est nul. La propriété d'un fibré en droite trivial, est que l'on peut trouver une section globale ne s'annulant pas, c'est à dire une famille continue de vecteurs non nuls, que l'on normalise :

$$|\Psi_n(\theta_1, \theta_2) \rangle, \text{ tels que } \forall (\theta_1, \theta_2), \begin{cases} |\Psi_n(\theta_1, 2\pi) \rangle = |\Psi_n(\theta_1, 0) \rangle \\ |\Psi_n(2\pi, \theta_2) \rangle = |\Psi_n(0, \theta_2) \rangle \end{cases} \quad (10.3)$$

Alors, par le théorème de Stokes :

$$\begin{aligned} \phi(1) &= \oint_{C_1} \langle \Psi_n | d\Psi_n \rangle \\ &= \int_0^{2\pi} d\theta_1 \langle \Psi_n | \partial_{\theta_1} \Psi_n \rangle |_{\theta_2=0} + \int_0^{2\pi} d\theta_2 \langle \Psi_n | \partial_{\theta_2} \Psi_n \rangle |_{\theta_1=2\pi} \\ &\quad - \int_0^{2\pi} d\theta_1 \langle \Psi_n | \partial_{\theta_1} \Psi_n \rangle |_{\theta_2=2\pi} - \int_0^{2\pi} d\theta_2 \langle \Psi_n | \partial_{\theta_2} \Psi_n \rangle |_{\theta_1=0} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (10.4)$$

et donc $C_n = 0$.

Conséquence importante : L'indice de Chern d'une bande d'énergie quantifiant une trajectoire contractible, est nul.

En effet, nous avons vu que la distribution de Husimi ne s'annule pas au voisinage de la trajectoire, pour toutes valeurs de $\vec{\theta}$, voir paragraphe 9.1. Soit un point (q, p) de cette trajectoire. On choisit alors la phase globale de l'état $|\Psi_n(\vec{\theta})\rangle$ en imposant que $\langle qp | \Psi_n(\vec{\theta}) \rangle$ soit strictement positif. On obtient alors une section globale de l'espace fibré \mathcal{F} , ne s'annulant pas. Son indice de Chern est donc nul. Nous arriverons à la même conclusion au paragraphe suivant en s'intéressant aux zéros de la distribution de Husimi. Dans les exemples de cette partie, le calcul numérique de l'indice de Chern a été fait selon la méthode proposée dans [14], au moyen de la formule de Berry pour la courbure [16].

10.3 L'indice de Chern et les zéros de la distribution de Husimi

Nous avons vu au paragraphe 8.3 qu'un état stationnaire $|\Psi_n(\theta_1, \theta_2)\rangle$ est caractérisé par la position sur l'espace de phase des N zéros de sa distribution de Husimi.

Lorsque (θ_1, θ_2) varient, les zéros de la distribution de Husimi bougent et il semble naturel que l'indice de Chern qui caractérise l'ensemble des états $|\Psi_n(\theta_1, \theta_2)\rangle$, $(\theta_1, \theta_2) \in [0, 2\pi]^2$, se déduise du mouvement global des zéros.

D.P. Arovas et al. [11] ont remarqué que la valeur de l'indice de Chern est relié au fait que les zéros recouvrent ou non l'espace de phase et ils ont relié la valeur de l'indice aux propriétés de permutation des zéros. De plus J.E. Avron et al. [67] ont montré que l'indice de Chern est le seul invariant topologique caractérisant l'espace fibré \mathcal{F}_n de la bande n . Nous allons considérer un invariant topologique construit à partir des zéros. Il s'identifiera donc à l'indice de Chern.

Remarquons tout d'abord que pour que deux zéros se rencontrent, il faut ajuster deux paramètres. Cela ne se passe donc que pour des valeurs particulières des angles $(\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2)_{i \in I}$, et en des points particuliers correspondants de l'espace de phase $(\tilde{q}, \tilde{p})_i \equiv \tilde{z}_i$. Pour des valeurs (θ_1, θ_2) différentes de $(\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2)_i$, chaque zéro est isolé sur l'espace de phase. Considérons alors un de ces zéros, de position $z(\vec{\theta})$, localement. (Remarque : globalement, seule est définie l'application $\vec{\theta} \rightarrow \{z_i(\vec{\theta})\}_{i=1 \rightarrow N}$, les zéros étant indiscernables entre eux). Cette application $z(\vec{\theta})$ est de rang deux en la plupart des points (son jacobien est non nul),

sauf en des lignes singulières (codimension 1). Hors de ces lignes, le signe du Jacobien nous informe si localement cette application conserve ou non l'orientation. Voir la figure 10.4.

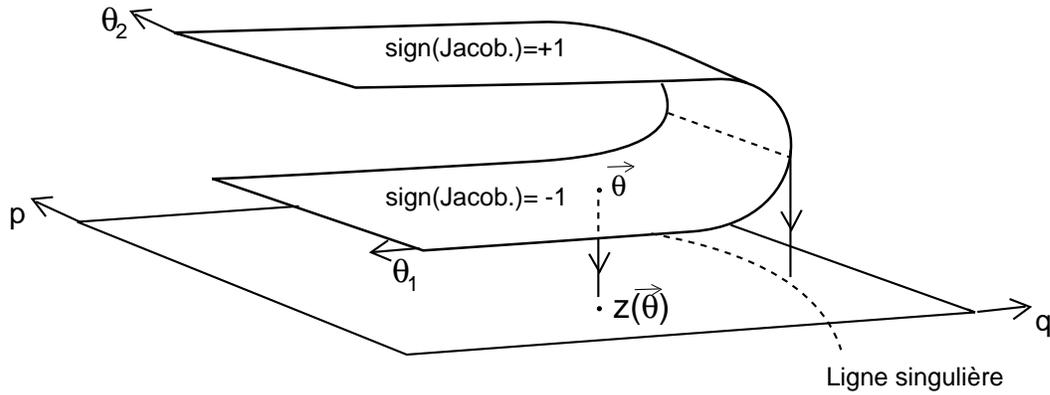


Figure 10.4: Visualisation locale de l'application $z(\vec{\theta})$, position d'un zéro de la distribution de Husimi sur l'espace de phase.

Soit maintenant (q_0, p_0) , un point de l'espace de phase (différent de $(\tilde{q}, \tilde{p})_{i \in I}$, et hors d'une ligne singulière). On lui associe $C(q_0, p_0)$, la somme algébrique des signes des Jacobiens des applications $z(\vec{\theta})$ en $\vec{\theta} = \vec{\theta}_0$, tel que $z(\vec{\theta}_0) = (q_0, p_0)$. Voir la figure 10.5. L'application $C(q_0, p_0)$ à valeur entière est localement constante, et il est clair d'après la figure 10.5 qu'elle ne varie pas lorsque (q_0, p_0) franchit une ligne singulière (car $+1-1=0$). $C(q_0, p_0)$ est donc indépendant de (q_0, p_0) . Ce nombre est appelé le *degré de Brower* de l'application $\vec{\theta} \in [0, 2\pi]^2 \rightarrow (z_i(\vec{\theta}))_{i=1 \rightarrow N}$, et c'est un invariant topologique. Voir par exemple le petit livre de J.W Milnor [68]

On est donc amené à la propriété suivante :

Propriété : Soit (q_0, p_0) un point de l'espace de phase. L'indice de Chern C_n de la bande n est la somme algébrique des recouvrements de ce point par les zéros de la distribution de Husimi de l'état stationnaire, lorsque $\vec{\theta}$ varie dans $[0, 2\pi]^2$. (Et C_n est indépendant du point (q_0, p_0) choisit).

Conséquence : Supposons qu'un point (q_0, p_0) de l'espace de phase ne soit visité par aucun zéro de la distribution de Husimi pour toutes valeurs de $\vec{\theta}$. Alors, d'après ci-dessus,

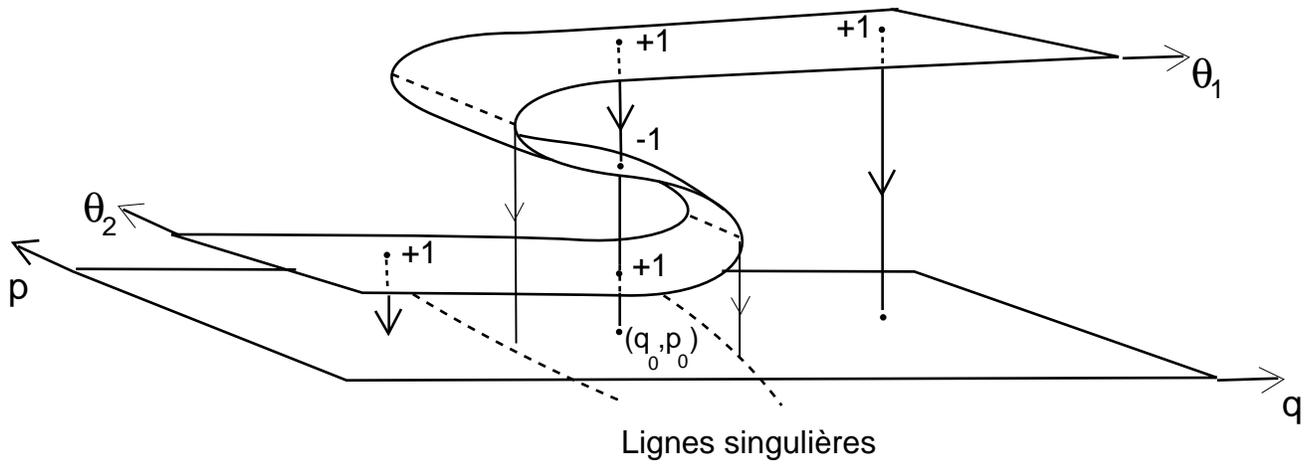


Figure 10.5: Visualisation de l'indice de Chern, degré de l'application $(z_i(\vec{\theta}))_{i=1 \rightarrow N}$. Ici $C = +1$

l'indice de Chern de la bande est nul. C'est ainsi que l'on retrouve que l'indice de Chern d'une bande d'énergie quantifiant une trajectoire contractible est nul, résultat déjà établi avec l'expression de l'indice de Chern comme une intégrale de courbure, cf page 123. Mais il faut noter que la réciproque est fautive. C'est à dire qu'il est possible que les zéros recouvrent entièrement l'espace de phase et que l'indice de Chern soit nul. Cela pourrait s'observer pour une bande d'énergie dans le régime d'une dynamique classique chaotique.

L'expression de l'indice de Chern en terme des zéros peut se formuler autrement. Un point (q_0, p_0) de l'espace de phase étant fixé, appelons $(\vec{\theta}_0)$ les valeurs de $\vec{\theta}$ pour lesquelles il y a un zéro en (q_0, p_0) . On suppose ces valeurs $(\vec{\theta}_0)$ isolées sur le tore $T_{\vec{\theta}} = [0, 2\pi]^2$. (et c'est le cas générique). Il est alors possible de choisir dans un voisinage ϑ_0 de $(\vec{\theta}_0)$, une section locale de $|\Psi_n(\vec{\theta})\rangle$, en imposant par exemple $\langle q_1, p_1 | \Psi_n(\vec{\theta}) \rangle \in \mathbb{R}^+$, où (q_1, p_1) est un point non visité par un zéro lorsque $\vec{\theta} \in \vartheta_0$. Pour $\vec{\theta}$ variant dans ce voisinage ϑ_0 de $(\vec{\theta}_0)$, il y a donc un zéro $z(\vec{\theta})$ qui varie dans un voisinage \mathcal{P}_0 de (q_0, p_0) et $(q_1, p_1) \notin \mathcal{P}_0$. Nous avons vu que la fonction de Bargmann (8.14) $\psi(z) = \langle z | \Psi_n(\vec{\theta}_0) \rangle$ est anti-analytique (ou analytique selon les conventions) et donc l'application :

$$(q, p) \in \mathcal{P}_0 \mapsto \arg(\langle qp | \Psi_n(\vec{\theta}_0) \rangle) \in U(1) \quad (10.5)$$

possède une singularité en $(q, p) = (q_0, p_0)$ qui est d'indice $\iota = +1$. Voir la figure (10.6). Car par définition, pour (q, p) décrivant un petit cercle autour de (q_0, p_0) dans le sens direct, l'indice est $\iota = +1$ (respect. -1), si $\arg(\langle qp | \Psi_n(\vec{\theta}_0) \rangle)$ décrit le cercle $U(1)$ dans

le sens direct (respect. indirect), voir Milnor [68]. Voir la figure 10.8. La notion d'indice est en générale définie pour une singularité d'un champ de vecteur sur une variété. Ici la variété est le tore, et le champ de vecteur est associé à $arg(\langle qp|\Psi_n(\vec{\theta}_0)\rangle)$ au voisinage d'un zéro (pour cela on projette localement \mathbb{C} sur l'espace de phase)..

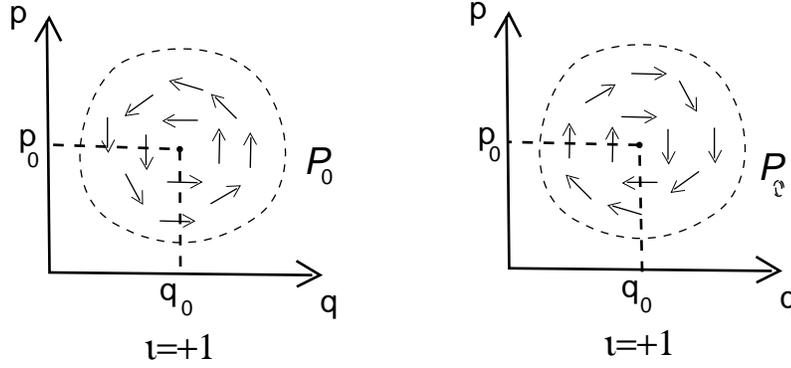


Figure 10.6: *Argument de la fonction de Bargmann $\langle qp|\Psi_n(\vec{\theta}_0)\rangle$ dans le voisinage de (q_0, p_0) . Une flèche représente un nombre complexe de module 1. Les singularités sont d'indice $\iota = +1$, quelque-soit la convention adoptée : analytique ou anti-analytique.*

Ensuite, lorsque $\vec{\theta}$ décrit un tour dans le sens direct autour de $\vec{\theta}_0$, le zéro $z(\vec{\theta})$ fait le tour de (q_0, p_0) en sens direct (respect. indirect) si le Jacobien de $z(\vec{\theta})$ en $\vec{\theta} = \vec{\theta}_0$ est positif (respect. négatif), et alors $arg(\langle qp|\Psi_n(\vec{\theta}_0)\rangle)$ décrit $U(1)$ en sens direct (respect. indirect). Voir la figure 10.7.

On déduit que l'application $\vec{\theta} \in \vartheta_0 \mapsto arg(\langle qp|\Psi_n(\vec{\theta}_0)\rangle)$ possède une singularité en $\vec{\theta} = \vec{\theta}_0$ d'indice $\iota = +1$ (respect. $\iota = -1$), voir la figure 10.8.

Cela nous amène donc à cette troisième caractérisation équivalente de l'indice de Chern qui est la formulation de M. Kohmoto [69] :

Propriété : Soit (q_0, p_0) un point de l'espace de phase. appelons $(\vec{\theta}_0)_{i \in I}$ les valeurs de $\vec{\theta}$ pour lesquelles la distribution de Husimi de l'état $(\Psi_n(\vec{\theta}))$ s'annule en (q_0, p_0) . (On suppose les valeurs de $\vec{\theta}_0$ isolées). Fixons au voisinage de chaque $\vec{\theta}_0$ une section des états stationnaires $|\Psi_n(\vec{\theta})\rangle_i$. L'indice de Chern C_n est alors la somme algébrique des indices des singularités de l'application $\vec{\theta} \in \vartheta_0 \mapsto arg(\langle qp|\Psi_n(\vec{\theta}_0)\rangle)$, aux points $\vec{\theta} = (\vec{\theta}_0)_i$.

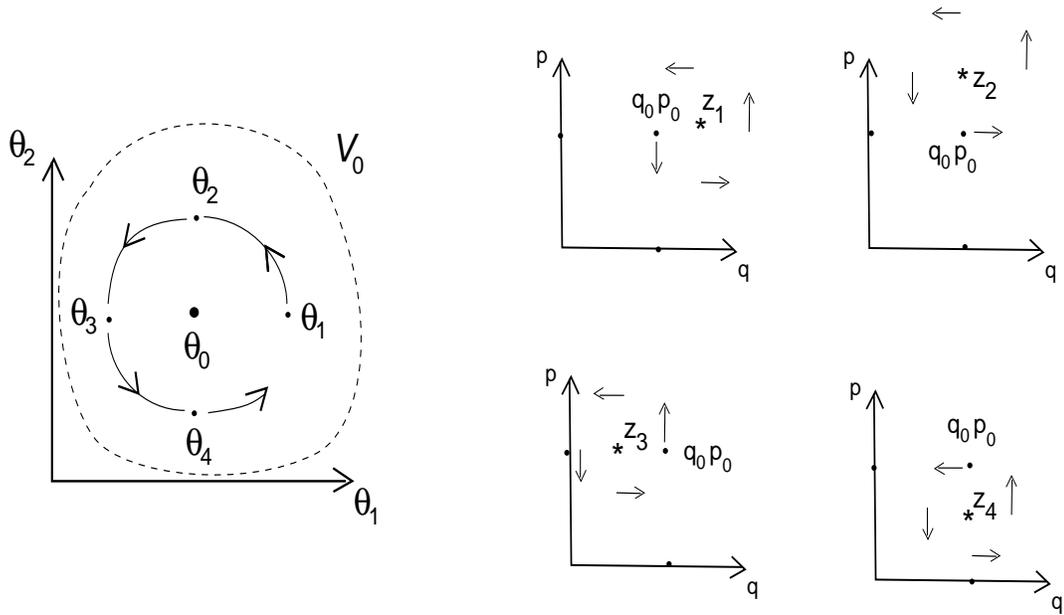


Figure 10.7: Le zéro $z(\vec{\theta})$ est représenté par une étoile, et $\arg(\langle qp | \Psi_n(\vec{\theta}_0) \rangle)$ par une flèche placée en (q_0, p_0) . Ici représentation pour le cas $\iota = +1$, car cette flèche tourne dans le sens direct lorsque $\vec{\theta}$ tourne dans le sens direct autour de $\vec{\theta}_0$. Cela correspond au fait que le zéro $z(\vec{\theta})$ tourne dans le sens direct autour de (q_0, p_0) .

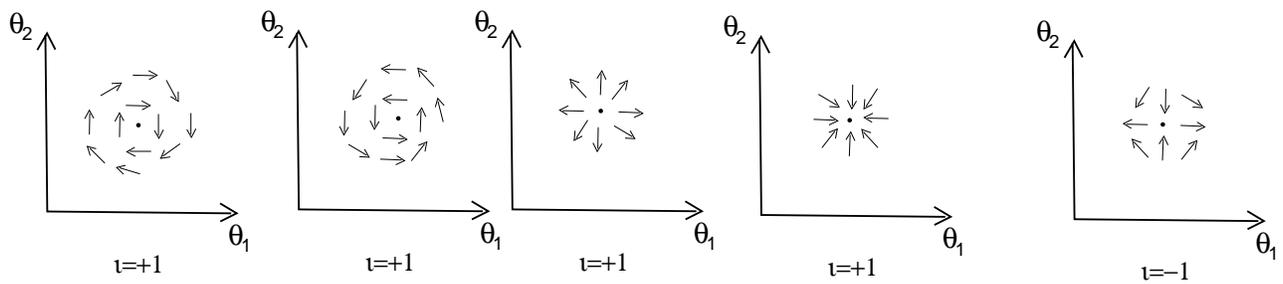


Figure 10.8: Exemples de singularités d'indice $\iota = +1$ et $\iota = -1$. La première image correspond au cas de la figure 10.7

(Rappel : il n'est pas possible de choisir une section globale de $|\Psi_n(\vec{\theta})\rangle$ sauf si $C_n = 0$).

À partir de cette dernière caractérisation, on obtient une méthode applicable numériquement et analytiquement, pour calculer l'indice de Chern en terme des zéros. L'idée est de choisir un autre point $(q_1, p_1) \neq (q_0, p_0)$ pour fixer la phase de $|\Psi_n(\vec{\theta})\rangle$ au voisinage de $\vec{\theta}_0$.

Considérons alors l'application f :

$$f : \vec{\theta} \in [0, 2\pi]^2 \mapsto f(\vec{\theta}) = \left(\frac{\langle q_0, p_0 | \Psi(\vec{\theta}) \rangle}{\langle q_1, p_1 | \Psi(\vec{\theta}) \rangle} \right) \in \mathbb{C} \quad (10.6)$$

Grâce au quotient, cette application ne dépend pas de la phase de $|\Psi(\vec{\theta})\rangle$. Cette fonction est donc définie sur la surface \mathcal{T} dans l'espace projectif. Pour cette raison, il est possible de faire des calculs analytiques ou numériques à partir d'une telle fonction. Ses singularités, zéros ou pôles, $\vec{\theta}_0$ sont caractérisées à la fois par l'indice $\iota = \pm 1$ de $arg(f)$, et par leur nature (zéro si $\langle q_0, p_0 | \Psi(\vec{\theta}_0) \rangle = 0$, et pôle si $\langle q_1, p_1 | \Psi(\vec{\theta}_0) \rangle = 0$). La somme des indices des singularités est nul puisque f est définie sur tout le tore $[0, 2\pi]^2$ (dont la caractéristique d'Euler est nulle).

Et d'après ci-dessus,

L'indice de Chern C_n est la somme des indices des zéros de f (ou l'opposé de la somme des indices des pôles de f).

Pour illustrer cela, la figure 10.9 montre la fonction $arg(f(\vec{\theta}))$, ainsi que la nature des singularités déduites de l'étude de $|f(\vec{\theta})|$, pour le modèle du Harper pulsé qui sera présenté au paragraphe 12.3.

Notons que les caractérisations de l'indice de Chern en terme de zéros peuvent s'interpréter géométriquement de manière assez simple. En effet, nous avons appelé \mathcal{T} la surface décrite par les états stationnaires $\Psi_n(\vec{\theta})$, $\vec{\theta} \in [0, 2\pi]^2$, dans l'espace projectif. L'état cohérent $[q_0, p_0]$ est un point de l'espace projectif, et l'ensemble des vecteurs $|\Psi\rangle$ qui lui sont orthogonaux définit un hyperplan de l'espace projectif, noté \mathcal{N}_{q_0, p_0} , de codimension complexe un. Les valeurs $\vec{\theta}_0$ pour lesquelles un zéro de la distribution de Husimi passe au point (q_0, p_0) correspond donc aux intersections de la surface \mathcal{T} avec l'hyperplan \mathcal{N}_{q_0, p_0} . Or \mathcal{N}_{q_0, p_0} est naturellement transversalement orienté (puisque'il s'agit d'un espace complexe),

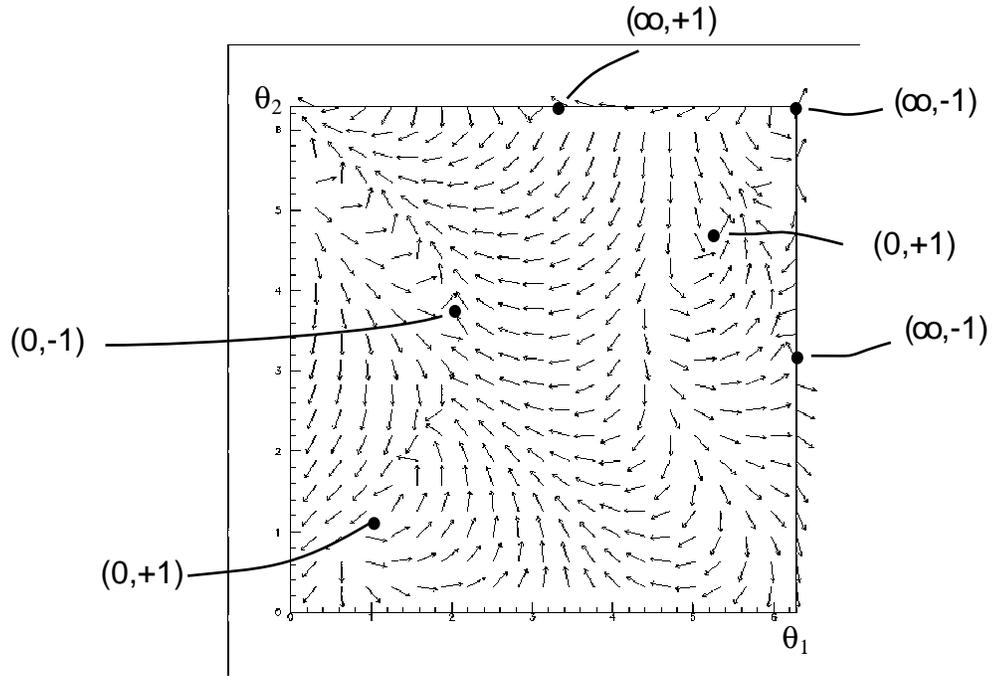


Figure 10.9: $Arg(f(\vec{\theta}))$ pour le modèle du Harper pulsé 12.21. $0, \infty$ indique qu'il s'agit d'un zéro ou d'un pôle de f , et ± 1 indique leur indice. On déduit que l'indice de Chern est $C_{\Psi_4} = 1$. Les données sont : $\gamma = 0.65, N = 11$, état Ψ_4 . $(q_0, p_0) = (0.72, 0.32)$, $(q_1, p_1) = (0, 0)$

et on peut à chaque intersection associer un indice $\iota = \pm 1$ selon que \mathcal{T} coupe \mathcal{N}_{q_0, p_0} selon cette orientation ou non. Bien sûr, cette caractérisation est valable indépendamment de l'état $[q_0, p_0]$ choisi, et de façon un peu plus générale :

Soit \mathcal{N} un hyperplan de l'espace projectif. L'indice de Chern est la somme des indices des intersections entre \mathcal{T} et \mathcal{N} . Voir la figure 10.10.

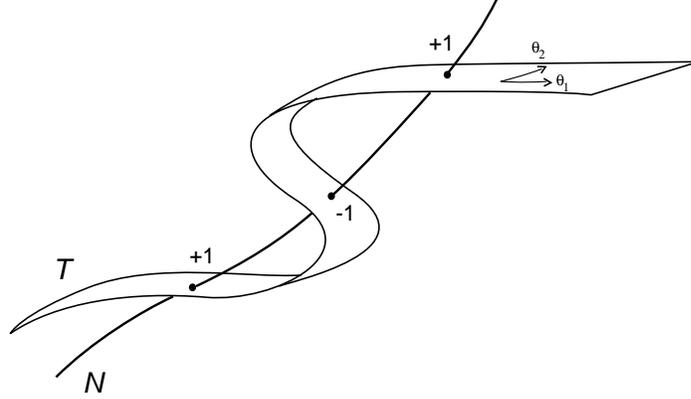


Figure 10.10: *Indice de Chern* $C_n = +1 - 1 + 1 = +1$

Cette caractérisation de l'indice de Chern en terme des zéros, peut être considérée comme un cas particulier de l'expression comme une intégrale de courbure, pour une courbure particulière concentrée aux valeurs de $\vec{\theta}_0$, et nulle ailleurs. Voir les résultats de Y. Colin de Verdières [70]. Cela justifie que l'indice calculé par les zéros ou par la courbure de Berry est le même.

10.4 Propriété globale des indices de Chern

En supposant que chaque bande n est non dégénérée, et en notant C_n son indice de Chern, il y a la relation suivante :

$$\sum_{n=1}^N C_n = 1 \quad (10.7)$$

Cette formule est démontrée à l'aide de la formule de Berry dans [14], et à l'aide d'arguments plus géométriques par Yves Colin de Verdières [70]. Cette dernière démonstration consiste à montrer que l'espace fibré total $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ sur (θ_1, θ_2) est non trivial, d'indice

Remarques :

1. Considérons le modèle de Harper où toutes les trajectoires sont contractibles sauf la séparatrice d'énergie $E_S = 0$, (voir figure 11.1). D'après le résultat page 123, les indices de Chern des bandes d'énergie différentes de E_S sont nuls, et d'après (10.7), il y a au moins une bande d'énergie voisine de E_S , d'indice de Chern non nul. Cette association entre l'indice de Chern non nul et la séparatrice classique motivera l'étude du premier exemple au paragraphe 11.1.
2. Le résultat (10.7) et celui de la page 123 ne sont pas en contradiction avec le fait mentionné dans l'appendice B, qu'il ne peut pas y avoir que des trajectoires contractibles.
3. Pour un modèle dont le spectre possède une symétrie par rapport à $E = 0$, (comme le modèle de Harper (7.5) ou le Harper pulsé (12.21), la valeur des indices de Chern est aussi symétrique, ce qui est incompatible avec la relation (10.7), dans le cas d'un nombre pair de bandes (N pair). Effectivement, dans ce cas, les deux bandes centrales sont dégénérées [46], si bien que seul un indice de Chern global à elles deux (et impair) peut être défini.

10.5 Indice de Chern et dégénérescence entre niveaux.

L'étude des dégénérescences dans un spectre au moyen de la phase de Berry et de l'indice de Chern a vraiment débuté autour du célèbre article de M.V.Berry [16, 71] et de l'interprétation géométrique donnée par B. Simon [23].

a) Apparition de dégénérescences pour une famille d'Hamiltoniens dépendant d'un paramètre. Variation de l'indice de Chern

L'indice de Chern d'une bande est un invariant topologique. Cela signifie que si l'Hamiltonien est modifié continument, et en supposant que lors de cette variation il n'y a pas de dégénérescence, alors l'indice de Chern reste constant. Seule la présence d'une dégénérescence entre niveaux peut donc causer une variation de l'indice de Chern.

Un théorème célèbre de Von-Neumann [72] établit que pour une famille d'opérateurs hermitiques (ou unitaires), dépendants continument de plusieurs paramètres réels, l'ensemble

des paramètres pour lesquels il y a une dégénérescence entre deux niveaux, est génériquement de codimension 3. (Par exemple pour la matrice (9.10), il faut d'après (9.11), $\epsilon = 0$, $E = 0$, soit satisfaire trois équations réelles.)

Dans notre étude de la dynamique quantique sur le tore, l'équation aux valeurs propres (7.14) dépend déjà de deux paramètres (θ_1, θ_2) . C'est pourquoi, si l'on considère une famille à un paramètre d'Hamiltoniens $\hat{H}(\gamma)$, des dégénérescences entre niveaux se produisent génériquement pour des valeurs isolées $(\theta_1^*, \theta_2^*, \gamma^*)$. Si l'on suit la valeur de l'indice de Chern d'une bande donnée, en fonction de γ , elles sera constante sur des intervalles délimités par la présence des dégénérescences, en $(\gamma_1^*, \gamma_2^*, \dots)$.

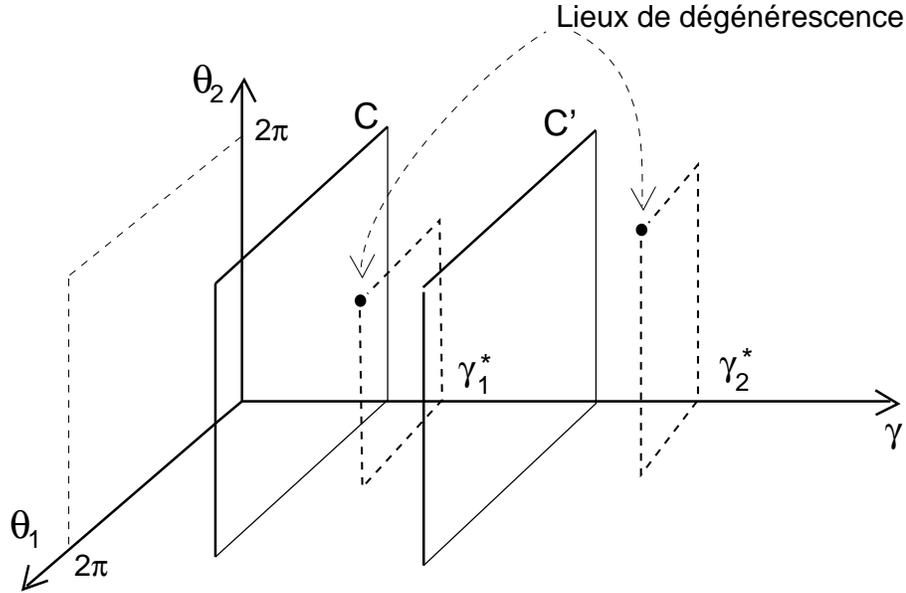


Figure 10.11: Espace des paramètres $(\theta_1, \theta_2, \gamma)$, et présence de dégénérescences. L'indice de Chern est défini sur chaque plan $\gamma = \text{constante}$. A une dégénérescence en γ_i^* correspond une variation de l'indice de Chern $\Delta C = C' - C$.

L'indice de Chern a la propriété d'être additif (voir 10.2). La figure 10.12 montre alors clairement que la variation d'indice de Chern ΔC est l'indice de Chern d'une famille sphérique d'états entourant la dégénérescence dans l'espace à trois paramètres $(\theta_1, \theta_2, \gamma)$. On a alors $C' = C + \Delta C$.

De plus, l'étude de l'indice de Chern de cette famille sphérique d'états ne concerne que les deux niveaux et les deux états propres pour lesquels se produit la dégénérescence. L'espace à deux dimensions engendré par les deux états propres varie continument au voisinage du point $(\vec{\theta}^*, \gamma^*)$. On peut donc en choisir une base qui varie continument.

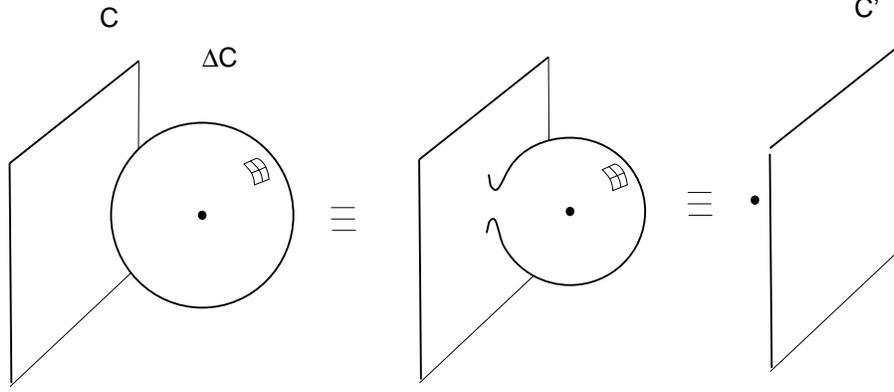


Figure 10.12: C est l'indice de Chern avant la dégénérescence .

ΔC est l'indice de Chern d'une famille d'états entourant la dégénérescence .

C' est l'indice de Chern après la dégénérescence . On déduit de ces figures que $C' = C + \Delta C$.

L'étude de la variation d'indice de Chern ΔC , se ramène donc à considérer une famille de matrices 2×2 dépendant de trois paramètres réels. Et si une dégénérescence se produit en un point particulier de l'espace des paramètres, il s'agit de calculer l'indice de Chern d'une famille sphérique de vecteurs propres entourant cette dégénérescence .

Ce calcul est effectué dans au paragraphe suivant en utilisant la caractérisation par les zéros.

Si l'on considère une famille générique d'Hamiltoniens à un paramètre $\hat{H}(\gamma)$, sans symétrie particulière, il en découlera que la variation de l'indice de Chern d'une bande au passage d'une dégénérescence est $\Delta C = \pm 1$. Remarquons que pour une famille d'Hamiltoniens dépendant de deux paramètres, $\hat{H}(\gamma_1, \gamma_2)$, et pour un niveau donné, le lieu des dégénérescences sont des lignes (de codimension un). L'indice de Chern du niveau est défini hors de ces lignes, et il varie de ± 1 , en les traversant. Ces lignes sont ainsi transversalement orientées. Imaginons que deux lignes de dégénérescences se croisent en un point particulier $\vec{\gamma}^*$. Alors pour une sous famille à un paramètre $\vec{\gamma}(t), t \in \mathbb{R}$, passant en ce point, ($\gamma(0) = \gamma^*$), la variation de l'indice de Chern du niveau peut-être ± 2 , ou 0, selon les cadrans traversés par le chemin $\vec{\gamma}(t)$. Voir la figure 10.13.

Il faut noter que chaque ligne de dégénérescences correspond à une dégénérescence avec le niveau supérieur ou avec le niveau inférieur.

Ces considérations se généralisent sans difficulté pour une famille d'Hamiltoniens dépendant de plusieurs paramètres.

C'est ainsi que s'expliquent les variations non génériques ($\Delta C \neq \pm 1$) d'indice de Chern dans le modèle du Harper pulsé au chapitre 12.3. Ce modèle ayant beaucoup de symétries

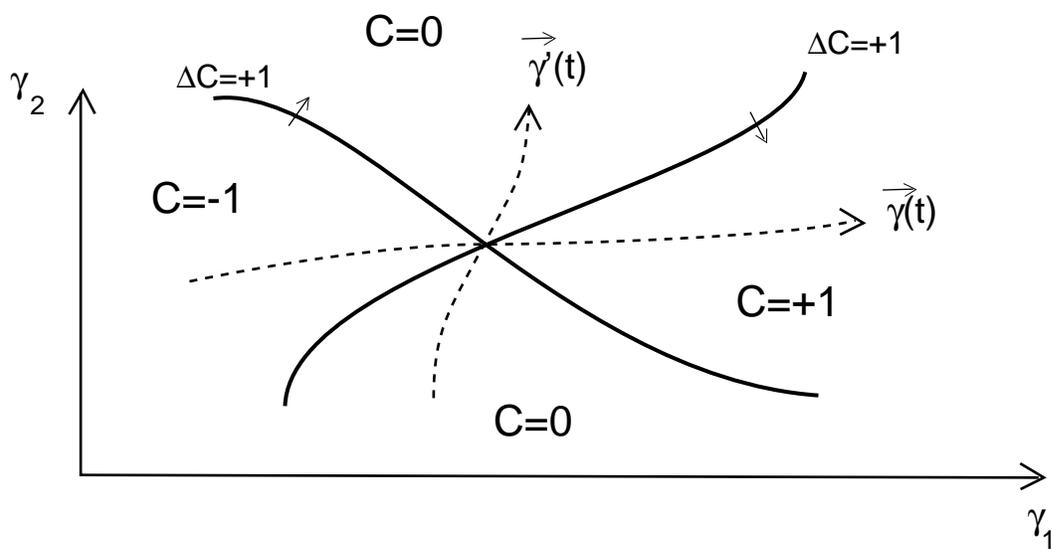


Figure 10.13: Lignes de dégénérescences et indice de Chern d'un niveau d'énergie, pour un Hamiltonien dépendant de deux paramètres (γ_1, γ_2) . Pour le chemin $\gamma(t)$, $\Delta C = +2$; pour le chemin $\gamma'(t)$, $\Delta C = 0$.

particulières, il faut le considérer comme faisant partie d'une famille à plusieurs paramètres. Chaque paramètre est chargé de briser une symétrie.

Dans les chapitres suivants, nous nous intéresserons particulièrement à l'aspect qualitatif que prennent ces lignes de dégénérescence selon la nature de la dynamique classique. Nous montrerons que pour une dynamique intégrable, et pour le phénomène de résonance entre deux trajectoires contractibles, les lignes de dégénérescences forment des boucles de petit diamètre, et ces boucles sont alignées, voir figure 11.18.

Par contre pour une dynamique chaotique, les lignes ne sont plus refermées sur elles-mêmes, et se développent sur l'espace des paramètres avec une certaine densité.

10.6 Etude de l'indice de Chern pour une famille de matrices 2×2 , et variation générique de l'indice de Chern.

Nous allons faire cette étude à l'aide de la caractérisation de l'indice de Chern donné page 128 . Le calcul par l'intégrale de courbure se trouve dans l'article de M.V.Berry [16].

Les résultats de ce paragraphe ont été utilisés au paragraphe précédent et seront à nouveau

utilisés au chapitre 11.

On considère une famille d'opérateurs hermitiques $\hat{H}(M)$, $M \in \mathbb{R}^3$, agissant dans un espace de dimension 2, et dont la matrice exprimée dans une base orthogonale $|\Psi_1(M)\rangle$, $|\Psi_2(M)\rangle$ continue, est de la forme :

$$H(M) = \begin{pmatrix} -E(M) & \epsilon(M) \\ \bar{\epsilon}(M) & E(M) \end{pmatrix} \quad (10.8)$$

Cette famille est paramétrée par $M \in \mathbb{R}^3$, et soit \mathcal{S} une surface de dimension 2, compacte, orientable incluse dans \mathbb{R}^3 (par exemple la sphère ou le tore). La diagonalisation de cette matrice a été faite au paragraphe 9.3, page 112. Reprenons les notations et les résultats (9.11,9.12). Notons $|\Psi_+(M)\rangle$ et $|\Psi_-(M)\rangle$ les vecteurs propres de $\hat{H}(M)$. On suppose qu'il n'y a pas de dégénérescence entre les deux niveaux pour tout $M \in \mathcal{S}$.

Considérons la fonction :

$$f_+(M) = \frac{\langle \Psi_2 | \Psi_+(M) \rangle}{\langle \Psi_1 | \Psi_+(M) \rangle} = \frac{\alpha_2^+}{\alpha_1^+} \quad (10.9)$$

invariante par changement de phase du vecteur $|\Psi_+(M)\rangle$.

Appelons $(M_0)_{i \in I}$ les zéros de f_+ et $(M_\infty)_{i \in I}$ les pôles. A chaque pôle et zéro, on associe $\sigma(M_{0,\infty})_i = \pm 1$, qui est l'indice de la fonction $arg(f)$. Alors d'après (10.3), l'indice de Chern de la famille $(|\Psi_+(M)\rangle)_{M \in \mathcal{S}}$ est la somme des indices de M_0 :

$$C_+ = \sum_{i \in I} \sigma(M_0)_i = - \sum_{i \in I} \sigma(M_\infty)_i \quad (10.10)$$

Ici, les pôles et les zéros de f_+ sont pour $\epsilon = 0$, (les zéros de $\epsilon(M)$), que l'on note $(M_i)_{i \in I}$. Par hypothèse, $E(M_i) \neq 0$, sinon, il y aurait une dégénérescence en M_i .

Pour $M \rightarrow M_i$, on a $\epsilon(M) \rightarrow 0$, et :

1. Si $E(M_i) > 0$, alors :

$$|f_+(M)| = \left| \frac{\alpha_2^+}{\alpha_1^+} \right| = \left| \frac{E(1 + \sqrt{1 + \frac{|\epsilon|^2}{E^2}})}{\epsilon} \right| \rightarrow \infty \quad (10.11)$$

donc M_i est un pôle, noté $M_{\infty,i}$.

2. Si $E(M_i) < 0$, alors :

$$|f_+(M)| = \left| \frac{\alpha_2^+}{\alpha_1^+} \right| = \left| \frac{\bar{\epsilon}}{E(-1 - \sqrt{1 + \frac{|\epsilon|^2}{E^2}})} \right| \rightarrow 0 \quad (10.12)$$

donc M_i est un zéro, noté $M_{0,i}$.

En conclusion :

Le signe de la fonction $E(M)$ partitionne la surface \mathcal{S} :

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}^+ \cup \mathcal{S}^- \cup \mathcal{S}^0 \tag{10.13}$$

$$\begin{cases} \mathcal{S}^+ = \{M \in \mathcal{S} \text{ t.q. } E(M) > 0\} \\ \mathcal{S}^- = \{M \in \mathcal{S} \text{ t.q. } E(M) < 0\} \\ \mathcal{S}^0 = \{M \in \mathcal{S} \text{ t.q. } E(M) = 0\} \end{cases} \tag{10.14}$$

La fonction $\epsilon(M)$ s'annule en un certain nombre de points $M_i \in \mathcal{S}$. A chacun d'eux, on associe un entier $\sigma(M_i)$ qui est l'indice de la fonction $arg(\epsilon)$. (En général, $\sigma = \pm 1$, et c'est le signe du jacobien de la fonction ϵ).

Alors l'indice de Chern de la famille d'états $|\Psi_+(M)\rangle$, $M \in \mathcal{S}$ est :

$$\begin{aligned} C_+ &= \sum_{M_i \in \mathcal{S}^+} \sigma(M_i) \\ &= -\sum_{M_i \in \mathcal{S}^-} \sigma(M_i) \end{aligned} \tag{10.15}$$

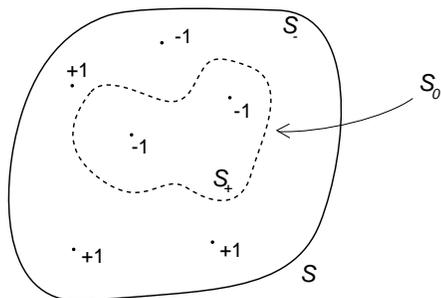


Figure 10.14: Ici $C^+ = -2$

Remarques :

1. Du fait que $\epsilon(M)$ soit une fonction à valeurs complexes, globalement définie sur \mathcal{S} , la somme des indices de ses zéros est nulle (il y a donc un nombre pair de zéros, si ils sont génériquement d'indice ± 1). Cela est clair en imaginant par exemple la fonction $\epsilon : M \in \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{C}$ comme une projection de la surface \mathcal{S} sur le plan complexe. Les zéros de ϵ sont les antécédants de 0.
2. Pour calculer l'indice de Chern C_- de l'état $|\Psi_- \rangle$, il suffit d'invertir les domaines \mathcal{S}^+ et \mathcal{S}^- . Donc $C^+ = -C^-$.

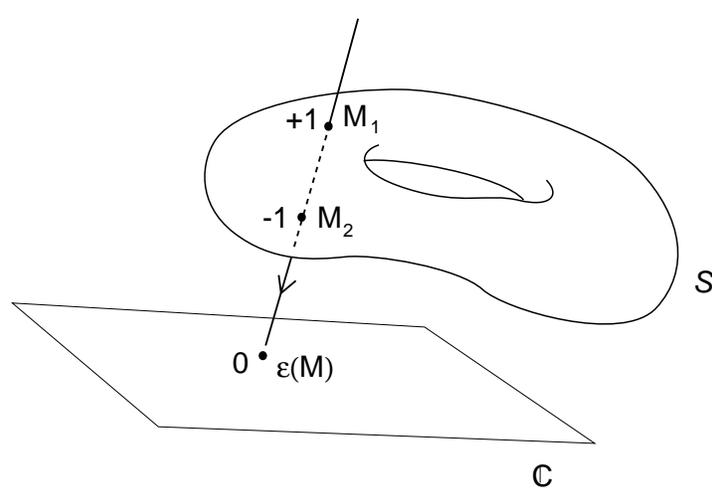


Figure 10.15: Image de l'application $\epsilon(M)$

3. Si maintenant la famille d'Hamiltoniens \hat{H} dépend d'un troisième paramètre γ , (cela signifie que la surface \mathcal{S} dépend du paramètre γ), alors lorsque γ varie, les zéros de ϵ bougent sur \mathcal{S} , ils peuvent apparaître ou disparaître par paires ± 1 , en se rencontrant. Cela est clair sur la figure 10.15. Les domaines \mathcal{S}^+ , \mathcal{S}^- et la ligne \mathcal{S}^0 varient aussi. Remarquons que lorsqu'un zéro de ϵ franchit la ligne \mathcal{S}^0 , il se produit une dégénérescence en ce point (puisque $\epsilon = E = 0$) et l'indice de Chern (10.15) varie de ± 1 .

Considérons par exemple la famille de matrices :

$$H = \begin{pmatrix} -Z & X + iY \\ X - iY & Z \end{pmatrix}, \quad X, Y, Z \in \mathbb{R}^3 \quad (10.16)$$

alors :

$$\begin{cases} \epsilon = X + iY \\ E = Z \end{cases} \quad (10.17)$$

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2} \quad (10.18)$$

Il y a une dégénérescence conique (générique) en $X = Y = Z = 0$.

Considérons comme surface \mathcal{S} , la sphère de rayon 1 : $X^2 + Y^2 + Z^2 = 1$, orientée par la normale extérieure. \mathcal{S}^+ est l'hémisphère $Z > 0$, et $\epsilon = 0$ pour les deux points $M_{\pm 1}$ où $Z = \pm 1$. En $M_{+1} \in \mathcal{S}^+$, (X, Y) sont des coordonnées locales orientées. Or $\epsilon = X + iY$ donc $\sigma(M_1) = +1$. Donc l'indice de Chern de la famille d'états $|\Psi_+(M)\rangle$ est :

$$C_+ = +1 \quad (10.19)$$

Application : Variation de l'indice de Chern pour une dégénérescence générique

Revenons maintenant à l'étude de la variation de l'indice de Chern lors d'une dégénérescence .

Considérons une famille générique d'Hamiltoniens à un paramètre $\hat{H}(\gamma)$, sans symétrie particulière. Nous allons montrer que la variation de l'indice de Chern d'une bande au passage d'une dégénérescence est $\Delta C = \pm 1$. En effet, au voisinage d'une dégénérescence , disons en $M^* = (\vec{\theta}^*, \gamma^*)$ dans l'espace des paramètres $M = (\vec{\theta}, \gamma)$, la matrice hermitique de l'Hamiltonien restreint à l'espace à deux dimension (engendré par les deux vecteurs propres qui subissent la dégénérescence), peut s'écrire :

$$H = \begin{pmatrix} A_0 - A_Z & A_X + iA_Y \\ A_X - iA_Y & A_0 + A_Z \end{pmatrix} \quad (10.20)$$

avec les fonctions continues : $\vec{A}(M) = (A_X(M), A_Y(M), A_Z(M)) \in \mathbb{R}^3$ et $A_0(M) \in \mathbb{R}$.

D'après (9.11), les valeurs propres sont :

$$E_{\pm}(M) = A_0 \pm \sqrt{A_X^2 + A_Y^2 + A_Z^2} = A_0 \pm \|\vec{A}\| \quad (10.21)$$

Pour $M = M^*$, lieu de la dégénérescence , on a $\|\vec{A}\| = 0$. Dans le cas générique, le Jacobien est non nul : $\left| \frac{D\vec{A}}{DM} \right|_{M=M^*} \neq 0$. On a vu que la variation ΔC est l'indice de Chern calculé sur une sphère entourant la dégénérescence . Or si l'on change de façon continue le système de coordonnées $M = (X, Y, Z)$ au voisinage de M^* , cet indice de Chern ne varie pas. Ainsi :

Dans le cas où $\left| \frac{D\vec{A}}{DM} \right|_{M=M^*} > 0$, on peut trouver par continuité, un système de coordonnées (X, Y, Z) tel que $\vec{A} = (X, Y, Z)$, dans un voisinage de M^* . Cela est dû au fait que l'ensemble des matrices 3×3 inversibles, à déterminant positif, est connexe, et contient l'identité. Dans ce système de coordonnées, la matrice H s'écrit :

$$H = \begin{pmatrix} A_0 - Z & X + iY \\ X - iY & A_0 + Z \end{pmatrix} \quad (10.22)$$

Avec le résultat (10.19), on déduit que la variation d'indice de Chern du niveau supérieur est $\Delta C = +1$ (et -1 pour le niveau inférieur).

Dans le cas où $\left| \frac{D\vec{A}}{DM} \right|_{M=M^*} < 0$, on se ramène à un système de coordonnées tel que $\vec{A} = (X, Y, -Z)$, et alors pour le niveau supérieur, $\Delta C = -1$.

10.7 Interprétation de l'indice de Chern en physique du solide

Dans ce paragraphe, nous allons obtenir à nouveau l'expression de la conductivité de Hall quantifiée (6.30), mais par une approche différente de celle exposée au paragraphe 6.2.

Cette nouvelle approche consiste à considérer des paquets d'ondes sur le plan (plûtôt que sur le tore), construits par une superposition de différents états d'une bande. On montre alors que la position moyenne d'un tel paquet est "quantifiée", c'est à dire qu'elle ne peut prendre que des valeurs discrètes, en correspondance avec une cellule particulière.

Une conséquence de cela est que lors de l'évolution (qui est une déformation continue du paquet d'onde), la position moyenne du paquet d'onde reste constante.

Ensuite nous verrons que si un faible champ électrique est appliqué (disons dans la direction x), dans l'hypothèse adiabatique, la position moyenne du paquet d'onde se déplace dans la direction y , avec une vitesse proportionnelle à l'indice de Chern de la bande. Par conséquent, la vitesse de déplacement de l'onde électronique est quantifiée, et l'on retrouve l'expression de la conductivité (6.30).

a) Paquets d'onde construits à partir d'une bande.

Considérons une bande d'états $|\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle \in \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ paramétrée par $(\theta_1, \theta_2) \in [0, 2\pi]^2$. Pour ce paragraphe, ce peut être une bande d'énergie, ou même une famille quelconque comme les états cohérents du tore (8.1), $|z, \vec{\theta}\rangle$, à z fixé. La topologie de cette famille est caractérisée par l'indice de Chern C .

Chaque état $|\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle$ est quasi-périodique sur le plan (état propre des opérateurs de translation \hat{T}_Q, \hat{T}_P) si bien que sa distribution de Husimi est non localisée. Pour construire un paquet d'onde $|\Psi\rangle$ dont la distribution de Husimi est localisée sur le plan (i.e fonction d'onde de carré sommable), il faut superposer les états $|\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \iint d\theta_1 d\theta_2 |\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle \quad (10.23)$$

Pour cela il faut que $|\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle \in \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ soit une famille continue de $\vec{\theta}$. La propriété de localisation découle ensuite par un argument du type "phase stationnaire".

Remarque : si l'indice de Chern C de la bande est non nul, nécessairement les vecteurs $|\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle$ s'annulent pour certaines valeurs de (θ_1, θ_2) .

D'autres paquets d'onde localisés sur le plan mais translatés du vecteur $\alpha_{n_1, n_2} = n_1\omega_1 + n_2\omega_2$ s'obtiennent par :

$$|\Psi_{n_1, n_2}\rangle = D(\alpha_{n_1, n_2})|\Psi\rangle \quad (10.24)$$

Dans la suite, on associera donc l'état $|\Psi_{n_1, n_2}\rangle$ au site (n_1, n_2) sur le plan.

On obtient :

$$|\Psi_{n_1, n_2}\rangle = (-1)^{n_1 n_2 N} \iint d\theta_1 d\theta_2 e^{in_1\theta_1 + in_2\theta_2} |\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle \quad (10.25)$$

Ces états sont du type fonctions de Wannier en physique du solide.

Inversement :

$$|\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle = \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{Z}^2} e^{-in_1\theta_1 - in_2\theta_2} |\Psi_{n_1, n_2}\rangle \quad (10.26)$$

Ainsi, pour l'intuition, la phase $(in_1\theta_1 + in_2\theta_2)$ dans l'intégrale (10.25) a pour effet de localiser la superposition d'états sur le site (n_1, n_2) .

Mais cette propriété se généralise de la façon suivante : considérons l'état quantique :

$$|\Phi\rangle = \iint d\theta_1 d\theta_2 e^{if(\theta_1, \theta_2)} |\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle$$

où $f(\theta_1, \theta_2)$ est une fonction réelle continue périodique en (θ_1, θ_2) :

$$\begin{cases} f(\theta_1 + 2\pi, \theta_2) = f(\theta_1, \theta_2) + N_1 2\pi \\ f(\theta_1, \theta_2 + 2\pi) = f(\theta_1, \theta_2) + N_2 2\pi \end{cases}$$

$(N_1, N_2) \in \mathbb{Z}^2$ sont deux entiers qui caractérisent la topologie de la fonction f (i.e. si la fonction f est modifiée continument parmi les fonctions réelles continues périodiques, N_1, N_2 restent constants.)

Ensuite si l'on décompose l'état $|\Phi\rangle$ sur les différents sites (n_1, n_2) :

$$|\Phi\rangle = \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{Z}^2} \phi_{n_1, n_2} |\Psi_{n_1, n_2}\rangle$$

$|\phi_{n_1, n_2}|^2$ peut s'interpréter comme la probabilité ou l'intensité de présence de l'état $|\Phi\rangle$ sur le site $|\Psi_{n_1, n_2}\rangle$.

On obtient alors :

$$\begin{cases} N_1 = \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{Z}^2} n_1 |\phi_{n_1, n_2}|^2 \\ N_2 = \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{Z}^2} n_2 |\phi_{n_1, n_2}|^2 \end{cases}$$

Autrement dit, N_1, N_2 correspondent à la position moyenne (le site moyen) de l'état $|\Phi\rangle$.

Et par conséquent, *la position moyenne est "quantifiée"*.

(il s'agit en fait d'une propriété de la série de Fourier qui est que : si $g(\theta) = \sum_n c_n e^{in\theta} =$

$e^{if(\theta)}$ est périodique et $f(2\pi) = f(0) + N2\pi$, alors $N = \sum_n n |c_n|^2$.

Conséquence : Initialement, l'état $|\Psi\rangle = |\Psi_{0,0}\rangle$ est localisé sur le site $(0,0)$. En notant $E(\theta_1, \theta_2)$ l'énergie (ou la quasi-énergie) de l'état stationnaire $|\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle$, on déduit l'expression de l'évolution de l'état $|\Psi\rangle$ après un temps t :

$$|\Psi_t\rangle = \hat{U}_t |\Psi\rangle = \iint d\theta_1 d\theta_2 e^{-i\frac{E(\theta_1, \theta_2)t}{\hbar}} |\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle$$

Ici la phase $f(\theta_1, \theta_2) = -i\frac{E(\theta_1, \theta_2)t}{\hbar}$ est périodique de type $(N_1 = 0, N_2 = 0)$ puisque par variation continue ($t \rightarrow 0$ ou $E(\theta_1, \theta_2) \rightarrow E$) on obtient $f = 0$. Par conséquent, lors de son évolution, l'état $|\Psi_t\rangle$ reste localisé en moyenne sur le site $(0,0)$. (Mais la distribution peut s'étaler si la bande $E(\vec{\theta})$ est large.)

Remarque : ces résultats contiennent en particulier ceux mentionnés pour les états cohérents du tore (8.3),(8.5).

Remarque : ce résultat semble paradoxal pour des états construits avec une bande quantifiant une trajectoire non contractible car classiquement, un point de cette trajectoire part à l'infini. Mais comme nous l'avons vu autour de la figure 9.10, la bande fluctue entre deux (ou plusieurs) trajectoires ayant des directions opposées. La distribution de $|\Psi_t\rangle$ est composée de paquets d'ondes se déplaçant sur chaque trajectoire, si bien que la position moyenne est fixe.

b) Quantification de la conductivité.

Les états $|\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle$ de la bande d'énergie sont des états stationnaires de \hat{H} et (θ_1, θ_2) sont de "bons nombres quantiques". Si un faible champ électrique uniforme et constant \vec{E} est appliqué, en reprenant la description physique du paragraphe 6, cela implique une dépendance en temps du potentiel vecteur (équation de Maxwell) : $\vec{E} = -\frac{1}{c}\partial_t\vec{A}$.

Le théorème d'adiabaticité, [73] complété par M.V. Berry [16], montre que si le champ \vec{E} est "assez faible", lors de leur évolution, les états $|\Psi(\vec{\theta})\rangle$ restent états stationnaires de \hat{H} , mais les paramètres (θ_1, θ_2) évoluent selon :

$$\begin{cases} \theta_1(t) = -\frac{eX}{\hbar}E_x t \\ \theta_2(t) = -\frac{eY}{\hbar}E_y t \end{cases}$$

(X et Y sont les dimensions d'une cellule élémentaire).

Supposons pour simplifier que $\vec{E} = (E_x, 0)$ soit selon x . alors $\theta_2(t) = \theta_2$ est constant et $\theta_1(t)$ est périodique de période $T = \frac{h}{eXE_x}$.

En particulier, au bout d'une période T , l'état $|\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle$ est devenu :

$$\hat{U}_T |\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle = |\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle e^{i\phi_D(\theta_1, \theta_2) + i\phi_B(\theta_1, \theta_2)}$$

où $\phi_D(\theta_1, \theta_2)$ est la phase dynamique et $\phi_B(\theta_1, \theta_2)$ est la phase de Berry du chemin $\theta_1(t)$ et ne dépend donc pas de θ_1 . Dans cette hypothèse de champ \vec{E} faible, le paquet d'onde $|\Psi\rangle$ évolue donc au bout d'une période T selon :

$$|\Psi_T\rangle = \hat{U}_T |\Psi\rangle = \iint d\theta_1 d\theta_2 e^{i\phi_D(\theta_1, \theta_2) + i\phi_B(\theta_1, \theta_2)} |\Psi(\theta_1, \theta_2)\rangle$$

Nous avons vu que ϕ_D est une fonction périodique de type $(N_1 = 0, N_2 = 0)$ (on fait par exemple $E(\vec{\theta}) \rightarrow 0$), et un raisonnement semblable à celui de la figure 10.3 montre que $\phi_B(\theta_1, \theta_2) \equiv C2\pi\theta_2$, c'est à dire que $\phi_B(\theta_1, \theta_2)$ est de type $(N_1 = 0, N_2 = C)$ où C est l'indice de Chern de la bande.

Par conséquent, l'état $|\Psi_T\rangle$ est localisé en moyenne sur le site $(n_1 = 0, n_2 = C)$.

Au cours du temps, la distribution de Husimi de l'état $|\Psi\rangle$ se déplace donc selon la direction y avec une vitesse : $V_y = \frac{CY}{T}$ (car les sites sont distants de Y). Cette vitesse est quantifiée et ne dépend pas du paquet d'onde $|\Psi\rangle$ que l'on a pu construire avec la bande $|\Psi(\vec{\theta})\rangle$.

Pour une bande d'énergie, la densité d'électrons est de un électron par cellule : $\rho = \frac{1}{XY}$. Si bien que la densité de courant électrique engendrée par la bande remplie est :

$$j_y = \rho e V_y = \frac{e^2}{h} C E_x$$

On retrouve donc l'expression pour la quantification de la conductivité de Hall :

$$\sigma_{xy} = \frac{j_y}{E_x} = \frac{e^2}{h} C$$

Chapitre 11

L'indice de Chern dans des modèles intégrables

Les propriétés des distributions de Husimi à la limite semi-classique, et l'indice de Chern ayant été présentés séparément dans les chapitres précédents, nous allons maintenant étudier l'indice de Chern dans la limite semi-classique, autour de quelques exemples.

Dans ce chapitre, nous allons nous limiter à une dynamique classique intégrable sur le tore (définie par un Hamiltonien indépendant du temps), et nous essayerons de dégager des règles de correspondance entre la dynamique classique d'une part et la valeur des indices de Chern d'autre part. Il ne s'agit pas d'une étude systématique et complète, mais plutôt d'une approche.

Pour une dynamique intégrable, un état stationnaire est associé à une trajectoire classique (voire un nombre fini, si il y a effet tunnel), et cela rend l'analyse possible au moyen de méthodes semi-classiques. D'après la propriété importante citée page (123), l'indice de Chern peut-être non nul si l'état stationnaire est associé à une trajectoire non contractible, ou bien contractible mais étant en résonance (i.e. effet tunnel) avec d'autres trajectoires. Néanmoins, dans ces cas là, l'indice de Chern n'est pas systématiquement non nul, et nous verrons quelles autres conditions doivent être vérifiées.

Dans leur étude de l'effet Hall quantique au moyen des indices de Chern, D.J. Thouless et al. [11], ont calculé les indices de Chern pour un Hamiltonien de Harper : $\mathcal{H}_\epsilon(q, p) = -\cos(t2\pi q) - \epsilon \cos(2\pi p)$, pour $\epsilon \rightarrow 0$ et $t \in \mathbb{N}^*$. Les trajectoires sont alors toutes non contractibles de type $(0, \pm 1)$, et la dynamique possède une symétrie par la translation $T_{Q/t}$, si bien que les indices de Chern non nuls peuvent s'interpréter comme étant une conséquence d'un effet de résonance entre les différentes trajectoires symétriques par translation, et de même énergie.

Les autres résultats concernant l'indice de Chern dans des modèles intégrables sont ceux obtenus par Y. Huo et R.N. Bhatt [74], qui ont fait une étude numérique, en calculant la distribution statistique de la valeur de l'indice de Chern, en fonction de l'énergie, pour des Hamiltoniens tirés au hasard. Leur principal résultat est que dans la limite $N \rightarrow \infty$, les bandes d'énergie ayant un indice de Chern non nul se situent au milieu du spectre et correspondent aux bandes d'énergie ayant une forte largeur et donc aux trajectoires non contractibles. L'effet tunnel est un phénomène "exceptionnel" si bien qu'il échappe à leur étude statistique.

Au premier paragraphe, l'indice de Chern non nul est associé à une trajectoire non contractible particulière, puisqu'il s'agit d'une séparatrice. Nous étudierons ensuite autour d'exemples, le cas d'une résonance entre deux trajectoires contractibles en dégagant une règle qualitative pour une famille d'Hamiltoniens à deux paramètres, montrant que les lignes de dégénérescence forment des boucles très petites et alignées. Ce phénomène est générique aux extrémités du spectre d'énergie. Nous observerons ensuite numériquement un modèle ayant trois trajectoires contractibles symétriques par translation.

Il manque en fait l'étude complète des indices de Chern pour des trajectoires non contractibles qui peuvent exister au milieu du spectre d'énergie.

11.1 Modèle de Harper à séparatrice unique

Le modèle suivant est une extension à un paramètre du modèle de Harper (9.4). Voici l'Hamiltonien classique dépendant du paramètre $D \in [0, 1]$:

$$\mathcal{H}_S(q, p) = -\cos(2\pi q) - \cos(2\pi p) - D \cos(2\pi(q - p)) \quad (11.1)$$

La figure 11.1 montre les trajectoires (i.e. les lignes de niveau de \mathcal{H}_S) pour différentes valeurs de D .

L'intérêt réside dans le fait que la dynamique ne possède que des trajectoires contractibles hormis une séparatrice S_1 (et deux points fixes instables). D'après la propriété importante (page 123) qui est que l'indice de Chern associé à une trajectoire contractible est nul, et le fait que la somme des indices de Chern est égal à un (page 130), on déduit que les indices de Chern des bandes sont nuls sauf pour une (ou éventuellement plusieurs) bande, d'énergie voisine de l'énergie de la séparatrice.

Une nouvelle séparatrice S_2 et deux maxima apparaissent pour $D > \frac{1}{2}$. La figure 11.2 montre l'énergie classique des différents points fixes en fonction de D .

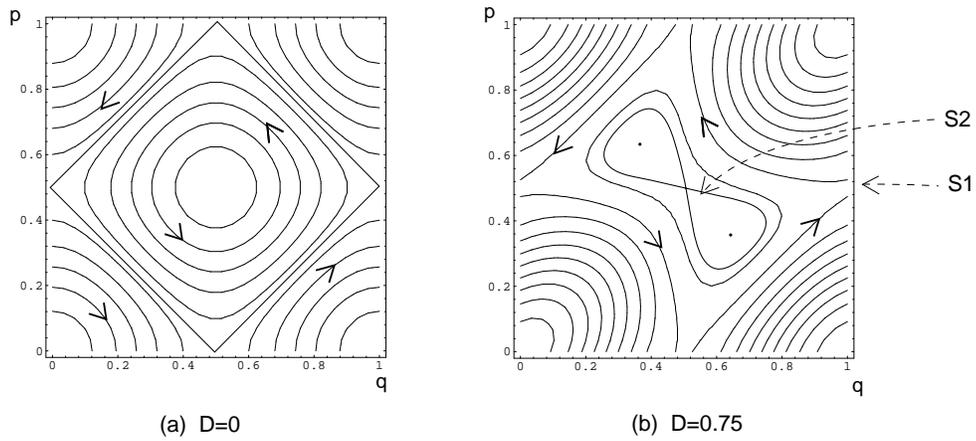


Figure 11.1: Trajectoires de l'Hamiltonien \mathcal{H}_S , (11.1).

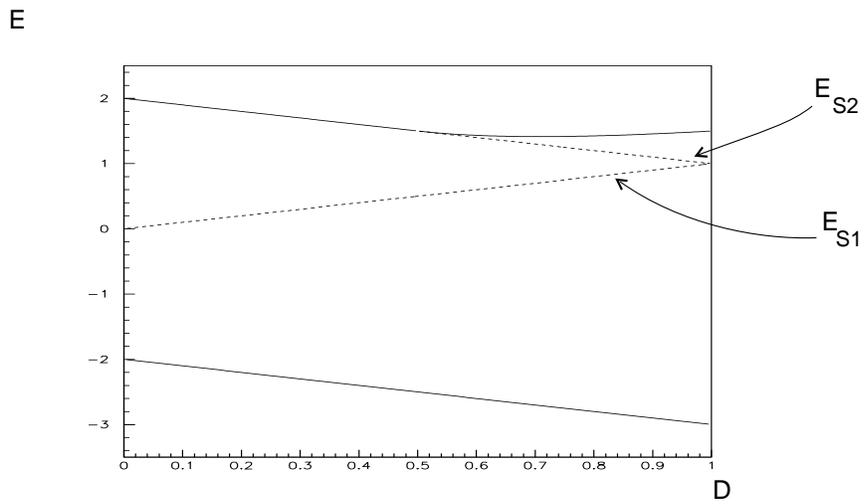


Figure 11.2: Points fixes de l'Hamiltonien \mathcal{H}_S , (11.1).
 — : point fixes stable (minimum et maximum de \mathcal{H}).
 : point fixe instable (et séparatrices).

Nous allons dans la suite nous intéresser à la séparatrice non contractible S_1 . Le fait essentiel est que lorsque D augmente, le volume d'espace de phase des trajectoires contractibles d'énergie $E < E_{S_1}$ augmente. Cela est visible sur la figure (11.1). Il en découle d'après la formule semi-classique de Weyl (2.47), que le nombre d'états stationnaires d'énergie $E < E_{S_1}$ augmente, et ainsi que l'indice de Chern non nul, passe tour à tour d'une bande d'énergie à la bande supérieure lorsque D augmente, de façon à rester associé à une bande d'énergie voisine de E_{S_1} . Nous avons vu que le changement d'indice de Chern implique une dégénérescence entre niveaux, et donc le spectre quantique doit présenter une série de dégénérescences localisées près de l'énergie de la séparatrice.

La figure (11.3), résultat d'un calcul numérique, montre que cela se produit effectivement. On y observe que l'énergie des dégénérescences suit de très près l'énergie de la séparatrice. De plus, comme prévu par des méthodes semi-classique, la largeur des bandes d'énergie quantifiant des trajectoires contractibles est très étroite, sauf au voisinage de la séparatrice non contractible.

La deuxième séparatrice qui apparaît à partir de $D = 0.5$ est contractible et ne supporte donc pas de bande à indice de Chern non nul. Pour une énergie $E > E_{S_2}$, nous observons que les bandes toujours étroites se rassemblent par paires. Cela est un effet de résonance, ou effet tunnel, entre les deux puits contenant les maxima. Le fait que l'indice de Chern de ces bandes est nul est lié à la proximité des deux puits dans l'espace de phase; ce thème fait l'objet du paragraphe suivant.

Sur la figure 11.4, on peut observer la distribution de Husimi des états de la bande $n = 13$ pour $D = 0.5$, et différentes valeurs de (θ_1, θ_2) . L'indice de Chern est non nul $C_{13} = 1$. Lorsque (θ_1, θ_2) varie, les zéros recouvrent l'espace de phase, et en particulier la figure 11.4 montre des états pour lesquels les zéros sont situés aux points fixes instables. La figure 11.5 permet de vérifier que un zéro passe une seule fois en ces points et que l'indice de Chern est bien $C_{13} = 1$.

On remarque de plus que un zéro franchit la séparatrice lorsque $\vec{\theta}$ varie : pour $\vec{\theta} = (\pi, \pi)$, il y a 8 zéros à "l'intérieur" de la séparatrice et 13 à l'extérieur, Pour $\vec{\theta} = (0, 0)$, il y a 9 zéros à l'intérieur et 12 à l'extérieur. Par rapport à la règle semi-classique, on peut dire que ce zéro qui passe d'un côté à l'autre de la séparatrice est un zéro "de trop". Nous avons vu que lorsqu'une famille de trajectoires contractibles est quantifiée, la distribution de Husimi d'un niveau encercle un zéro de plus que la distribution de Husimi du niveau précédent. Dans ce modèle, la séparatrice est la frontière entre deux puits et échappe à cette règle : pour le puits d'énergie maximale, l'état Ψ_{14} encercle $(21 - 14) = 7$ zéros, et

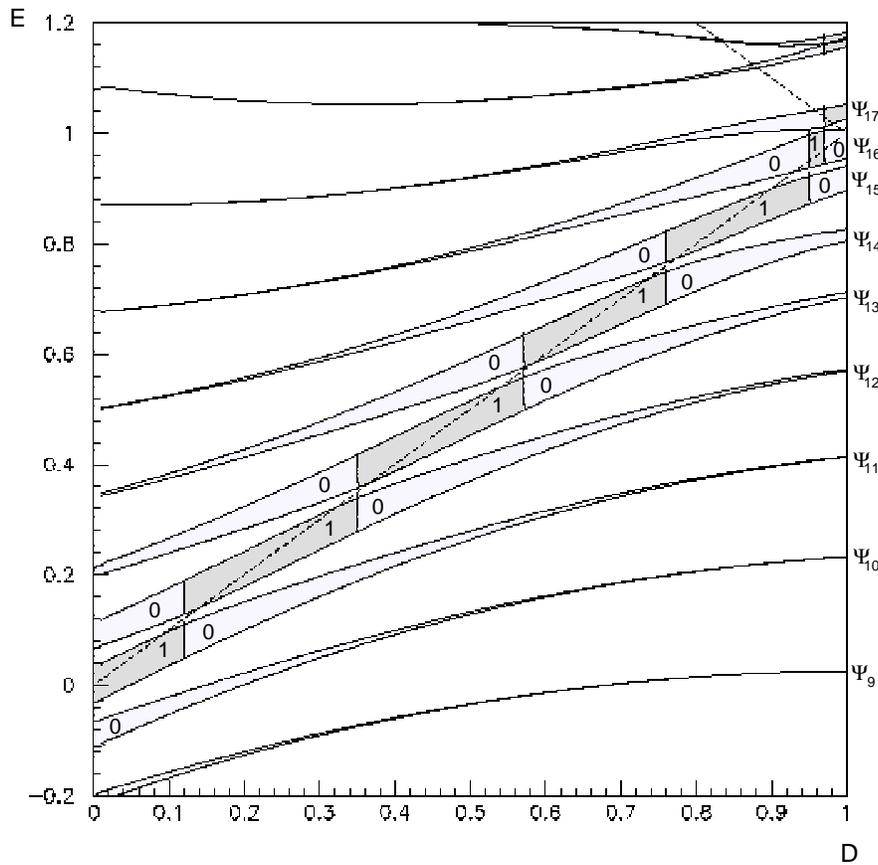


Figure 11.3: *Spectre de $N = 21$ états. Cette figure représente les bandes d'énergie et leur indice de Chern pour l'Hamiltonien \mathcal{H}_S , (11.1). Chaque bande est délimitée ici par son énergie maximum et minimum lorsque (θ_1, θ_2) varie. La couleur et le numéro entre ces deux limites indiquent l'indice de Chern de la bande. L'énergie des séparatrices classiques S_1 et S_2 , reportée de la figure 11.2, est en ligne pointillée. Un segment vertical indique la présence d'une dégénérescence . (A cause d'une trop faible discrétisation en (θ_1, θ_2) , sur la figure les bandes ne se touchent pas lors d'une dégénérescence . Elles sont en réalité légèrement plus larges et se touchent.)*

nous voyons que l'état Ψ_{13} encercle 8 ou 9 zéros selon la valeur de θ , soit un ou deux zéros de plus que l'état Ψ_{14} . Et il en est de même pour le puits d'énergie maximale. Une méthode semi-classique de quantification des points fixes [56] devrait vraisemblablement expliquer quantitativement ces résultats.

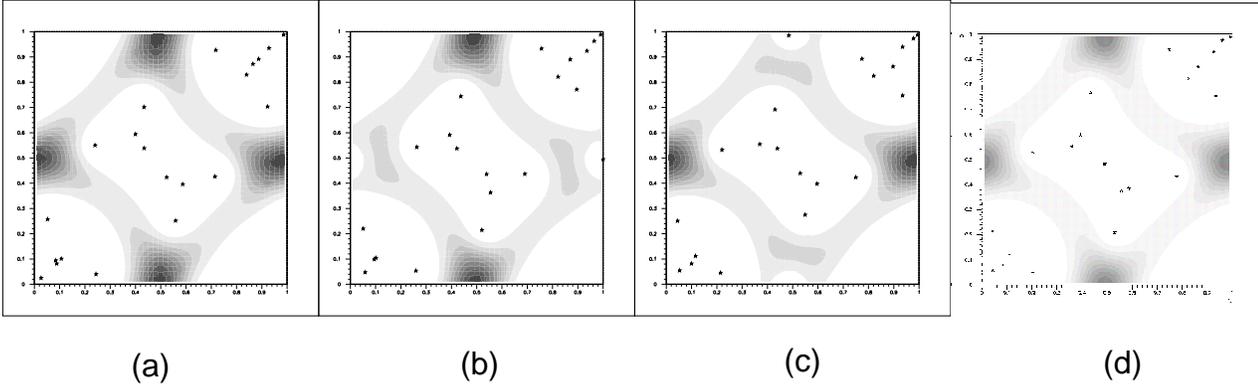


Figure 11.4: *Distribution de Husimi de la bande Ψ_{13} , avec un indice de Chern égal à un. $D = 0.5$, $N = 21$. Les étoiles marquent les zéros de la distribution.*

- (a) $\vec{\theta} = (\pi, \pi)$: il y a une forte intensité sur chaque point fixe et 8 zéros sont au centre.
- (b) $\vec{\theta} = (0, \pi)$: un zéro se trouve sur le point fixe instable $(q, p) = (0, 0.5)$.
- (c) $\vec{\theta} = (\pi, 0)$: un zéro se trouve sur l'autre point fixe instable $(q, p) = (0.5, 0)$.
- (d) $\vec{\theta} = (0, 0)$: il y a une forte intensité sur chaque point fixe et 9 zéros sont au centre.

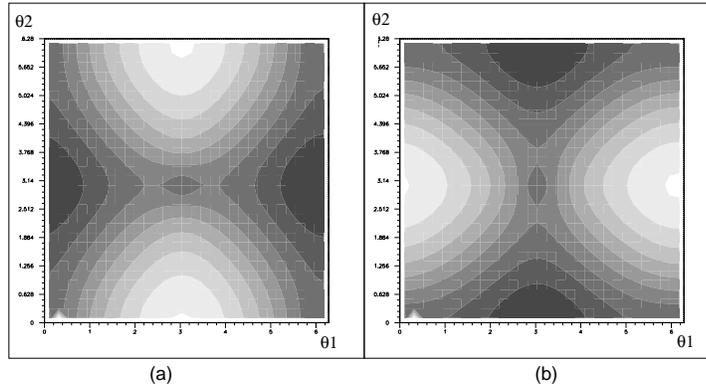


Figure 11.5: *Densité de la distribution de Husimi de l'état Ψ_{13} aux points fixes instables, en fonction de (θ_1, θ_2) .*

11.2 Résonance entre deux trajectoires contractibles

Dans ce paragraphe, nous allons nous intéresser à la valeur que peut prendre l'indice de Chern si il y a un effet de résonance entre deux trajectoires contractibles quantifiées. Cet effet de résonance s'observe par exemple pour une dynamique possédant "deux puits" et lorsque ceux-ci sont symétriques, ou s'ils sont dissymétriques mais dépendant d'un paramètre, et la résonance se produit pour des valeurs particulières du paramètre.

La symétrie entre les deux puits peut être une symétrie par translation ou par réflexion. Nous allons tout d'abord expérimenter numériquement trois Hamiltoniens correspondant à ces différents cas de résonance. Nous analyserons ensuite ces résultats en dégagant une règle générale qui permettra de comprendre l'apparition générique de dégénérescences dans les extrémités du spectre (où il n'y a que des trajectoires contractibles) pour une famille de Hamiltoniens dépendants de deux paramètres.

a) Deux puits symétriques par translation.

Considérons l'Hamiltonien suivant dépendant du paramètre $V \in [0, 1/2]$:

$$\mathcal{H}_T(q, p) = -\cos(2\pi q) - \cos(4\pi p) - \frac{1}{4} \cos(4\pi q + \frac{\pi}{4}) - V \cos(8\pi p + \frac{\pi}{2}) \quad (11.2)$$

La figure 11.6 montre les trajectoires. Cet Hamiltonien est choisi tel que pour $V = 0$, les deux puits (de maximum) au centre de la figure soient symétriques à la fois par la translation $T_{p=1/2}$ et par réflexion par rapport à la droite $p = 1/2$. Ensuite pour $V > 0$, la symétrie par réflexion est brisée, et ne subsiste que la symétrie par translation. Ce sont donc les bandes dans les extrémités du spectre qui nous intéressent.

La figure 11.10 page 153 montre le spectre en bande ainsi que leur indice de Chern, en fonction de V , pour $N = 11$.

L'observation principale est que les indices de Chern ne sont pas affectés par la brisure de la symétrie par réflexion. Ils prennent les valeurs prédites par D.J.Thouless et al. [10], ± 1 par doublet de bande (la valeur $+1$ est prise par la bande d'énergie extrême). On remarque aussi que l'espace (le "gap") entre deux bandes d'un doublet est très faible, beaucoup plus faible que pour le système à trois puits présenté plus loin.

Puisque l'indice de Chern est non nul, cela signifie que les zéros de la distribution de Husimi recouvrent tout l'espace de phase, lorsque (θ_1, θ_2) varie et entre autre que la présence de l'état stationnaire varie dans chacun des puits, allant jusqu'à l'annulation. La figure 11.7 montre l'intensité de la distribution de Husimi en chacun des puits pour

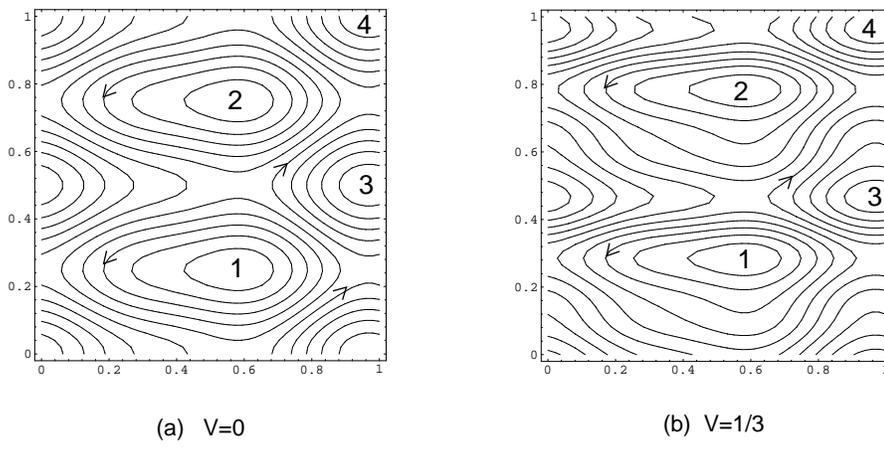


Figure 11.6: *Trajectoires de l'Hamiltonien \mathcal{H}_T (11.2).*

la bande Ψ_{11} . On note $|q_1, p_1\rangle$ et $|q_2, p_2\rangle$ les états cohérents situés au centre des puits notés 1 et 2 sur la figure 11.6. Les valeurs de (θ_1, θ_2) pour lesquelles cette intensité est nulle correspond au passage d'un zéro au fond du puits.

On observe sur la figure 11.8 la distribution de Husimi sur tout l'espace de phase, pour les valeurs particulières de (θ_1, θ_2) où cette distribution est nulle dans un puits. Une conséquence au niveau de la dynamique est que l'effet tunnel créé par les états Ψ_{10} et Ψ_{11} est supprimé pour ces valeurs particulières de (θ_1, θ_2) (et au voisinage).

Si l'on considère même que l'effet tunnel est supprimé lorsque l'intensité de la distribution de Husimi de l'état stationnaire n'atteint pas 10 pour cent de l'intensité dans l'autre puits, on déduit à partir de la figure 11.7 que l'effet tunnel est effectivement supprimé dans ce modèle pour la plupart des valeurs de (θ_1, θ_2) , sauf au voisinage des lignes $\theta_1 = 2.4$, $\theta_1 = 5.4$.

Cette description concerne la bande Ψ_{11} , mais la bande Ψ_{10} qui forme un doublet avec Ψ_{11} présente des fluctuations semblables, mais en opposition.

b) Deux puits symétriques par réflexion.

Considérons maintenant l'Hamiltonien dépendant du paramètre $V \in [0, 2]$,

$$\mathcal{H}_R(q, p) = -\cos(2\pi q) - \cos(4\pi p) - \frac{1}{4}\cos(4\pi q + \frac{\pi}{4}) - V\cos(2\pi p) \quad (11.3)$$

La figure 11.9 montre les trajectoires. Pour $V = 0$, les Hamiltoniens \mathcal{H}_T et \mathcal{H}_R sont identiques, mais pour $V > 0$, la symétrie par translation est brisée, seule reste la symétrie

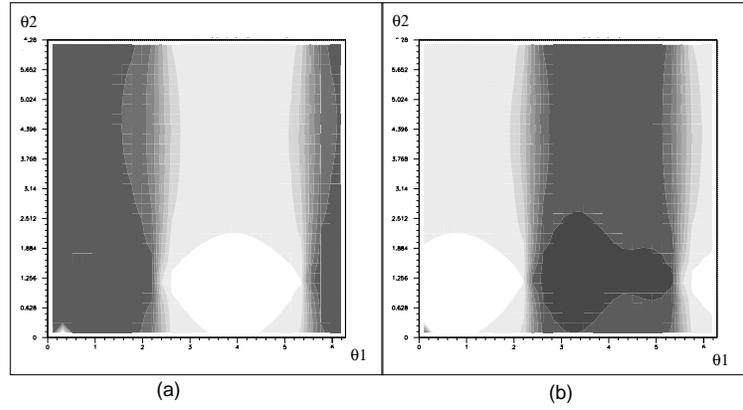


Figure 11.7: Intensité de la distribution de Husimi de l'état Ψ_{11} au fond des puits 1 et 2. $N = 11$, $V = 1/3$.

- (a) puits 1, représentation de $|\langle q_1, p_1 | \Psi_{11}(\vec{\theta}) \rangle|^2$ avec $(q_1, p_1) = (0.56, 0.26)$.
 (b) puits 2, représentation de $|\langle q_2, p_2 | \Psi_{11}(\vec{\theta}) \rangle|^2$ avec $(q_2, p_2) = (0.56, 0.78)$.

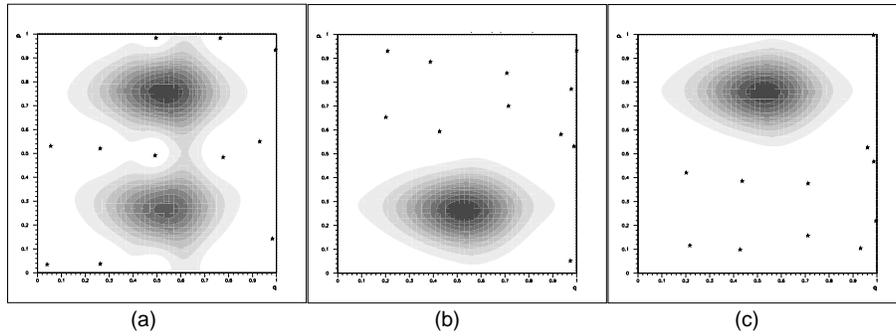


Figure 11.8: Distribution de Husimi de l'état Ψ_{11} . $V = 1/3$, $N = 11$.

- (a) $(\theta_1, \theta_2) = (2.5, 4.4)$.
 (b) $(\theta_1, \theta_2) = (0.9, 1.256)$. (suppression de l'effet tunnel).
 (c) $(\theta_1, \theta_2) = (3.14, 1.256)$. (suppression de l'effet tunnel).

par réflexion, si bien qu'il doit toujours y avoir résonance entre les deux puits d'énergie maximum.

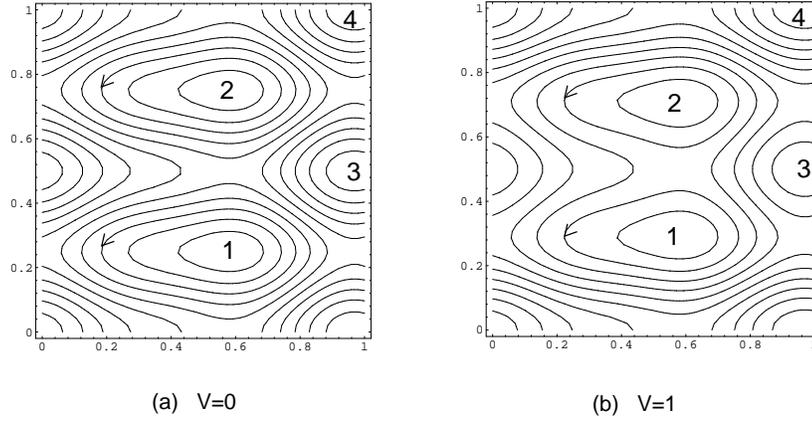


Figure 11.9: *Trajectoires de l'Hamiltonien \mathcal{H}_R , (11.3).*

Remarquons que près de l'énergie minimale, les deux puits ne sont pas symétriques, et ainsi $V > 0$ doit lever l'effet de résonance dans le bas du spectre. Le spectre en bande de l'Hamiltonien quantique en fonction de V , et pour $N = 11$, est montré sur la figure 11.11 page 153.

Cette fois-ci dans le haut du spectre, les bandes Ψ_{10} et Ψ_{11} vont par doublet mais pour $V = V^*$ proche de zéro, une dégénérescence se produit et ensuite l'indice de Chern est nul. On remarque aussi que les bandes deviennent plus étroites. La situation est donc bien différente de la précédente. On s'attend à ce que la distribution de Husimi des états Ψ_{10} et Ψ_{11} fluctue peu avec (θ_1, θ_2) pour $V > 0$. On observe en effet qu'à partir de $V > V^*$, les zéros ne pénètrent plus au sommet des puits, c'est à dire que les distributions de Ψ_{10} et Ψ_{11} fluctuent mais ne vont pas jusqu'à s'annuler au sommet des puits. Et pour V assez grand, les distributions fluctuent très peu, et restent dans la configuration "habituelle" du double puits avec des intensités égales dans chaque puits.

Les deux puits 3 et 4 d'énergie minimum correspondant au bas du spectre ne sont pas symétriques, c'est pourquoi les deux bandes Ψ_1 et Ψ_2 s'écartent en respectant chacune la quantification W.K.B. d'un des deux puits. Avant de s'écarter, une dégénérescence se produit pour V proche de zéro, et l'indice de Chern des bandes devient nul, conformément au fait que les fonds de puits sont contractibles, et qu'il n'y a plus de résonance.

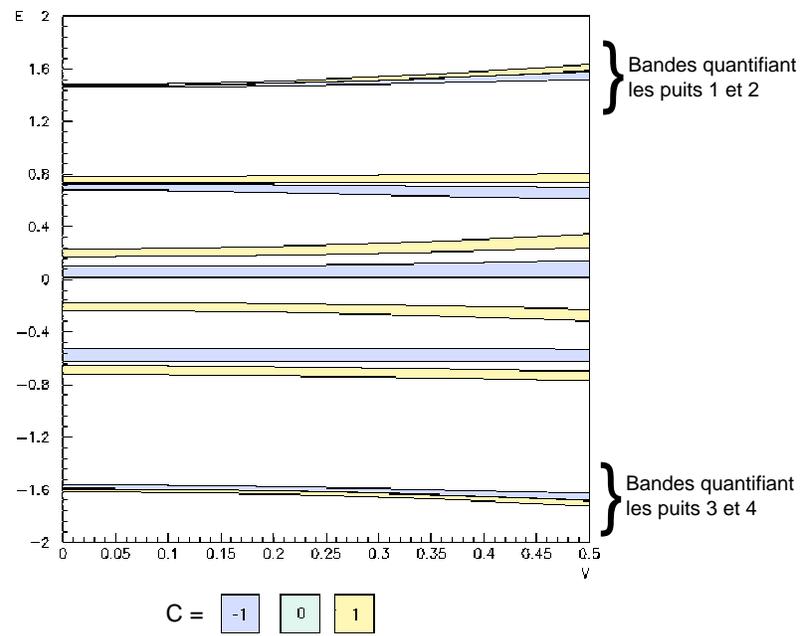


Figure 11.10: *Bandes d'énergie et indice de Chern de \mathcal{H}_T . (11.2). $N = 11$. Les indices de Chern sont constants. Il n'y a pas de dégénérescence .*

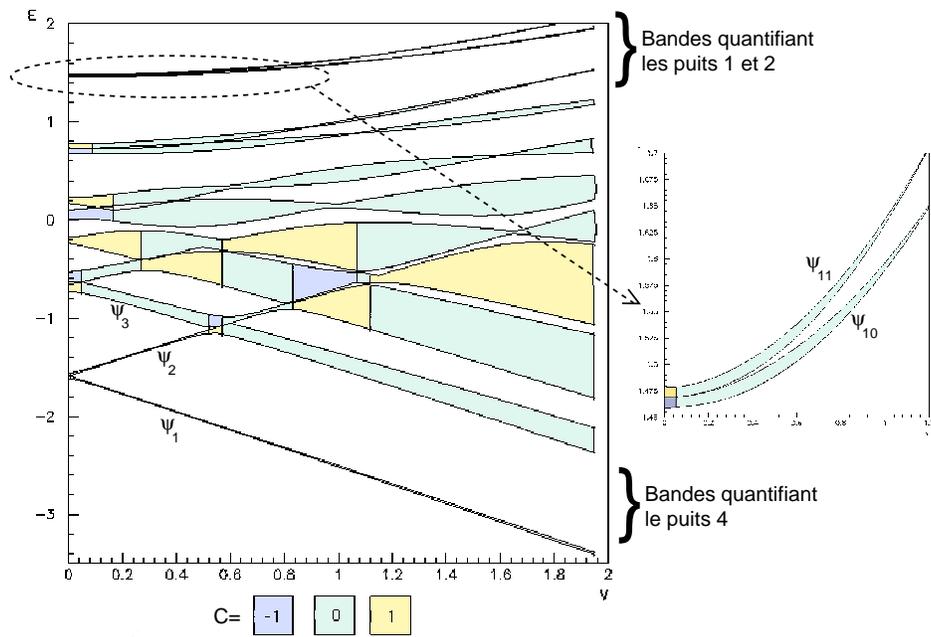


Figure 11.11: *Bandes d'énergies et indice de Chern de \mathcal{H}_R (11.3). $N = 11$. Pour $V = 0$, les spectres et les indices de Chern de \mathcal{H}_R et \mathcal{H}_T sont identiques. Il faut remarquer sur le détail que en $V = 0$, les indices de Chern sont $C = \pm 1$, et qu'une dégénérescence se produit en $V^* \neq 0$.*

Pour $V \sim 0.6$, le fondamental Ψ_2 du puits 3 le plus élevé croise le deuxième niveau Ψ_3 du puits 4 et une résonance de produit à nouveau, encadrée ici par deux dégénérescences entre lesquelles les indices de Chern sont ± 1 pour les bandes Ψ_2 et Ψ_3 . Cela signifie toujours que la distribution de Husimi fluctue entre les deux supports de trajectoire).

c) Analyse pour deux trajectoires contractibles quelconques.

Le but est de comprendre les résultats observés ci-dessus.

Considérons deux trajectoires 1 et 2 contractibles, d'une dynamique intégrable sur le tore qui appartiennent à deux puits différents pas nécessairement symétriques. Appelons $|1\rangle$ et $|2\rangle$ les quasi-modes qui quantifient leur représentant respectif sur le plan dans le domaine fondamental $[0, Q] \times [0, P]$. Les représentations de Husimi dans le plan des états $|1\rangle$ et $|2\rangle$ sont donc concentrées dans le domaine fondamental, sur les trajectoires 1 et 2.

On se fixe (θ_1, θ_2) , et l'on construit des "états du tore" en rendant périodiques les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$:

$$\begin{cases} |\Psi_1\rangle = \hat{P}_{(\theta_1, \theta_2)} |1\rangle \\ |\Psi_2\rangle = \hat{P}_{(\theta_1, \theta_2)} |2\rangle \end{cases} \quad (11.4)$$

On a alors :

$$\begin{aligned} E_1 = \langle \Psi_1 | \hat{H} | \Psi_1 \rangle &= \langle 1 | \hat{P}_{(\theta_1, \theta_2)}^+ \hat{H} \hat{P}_{(\theta_1, \theta_2)} |1\rangle \\ &= \langle 1 | \hat{H} \hat{P}_{(\theta_1, \theta_2)}^2 |1\rangle = \langle 1 | \hat{H} \hat{P}_{(\theta_1, \theta_2)} |1\rangle \\ &= \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{Z}^2} \langle 1 | \hat{H} \tilde{D}(\alpha_{n_1, n_2}, \vec{\theta}) |1\rangle \\ &= \sum_{n_1, n_2} e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} \langle 1 | \hat{H} D(\alpha_{n_1, n_2}) |1\rangle \end{aligned} \quad (11.5)$$

or :

$$\begin{aligned} e^{-iF_{-n_1, -n_2, \vec{\theta}}} \langle 1 | \hat{H} D(\alpha_{-n_1, -n_2}) |1\rangle &= \overline{e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} \langle 1 | D^+(\alpha_{-n_1, -n_2}) \hat{H} |1\rangle} \\ &= \overline{e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} \langle 1 | \hat{H} D(\alpha_{n_1, n_2}) |1\rangle} \end{aligned} \quad (11.6)$$

donc :

$$E_1(\vec{\theta}) = \langle \Psi_1 | \hat{H} | \Psi_1 \rangle = \langle 1 | \hat{H} |1\rangle + 2 \sum_{(n_1, n_2) \neq (0,0)} \text{Re} \{ e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} \langle 1 | \hat{H} D(\alpha_{n_1, n_2}) |1\rangle \} \quad (11.7)$$

et donc :

$$E(\vec{\theta}) = \frac{E_2 - E_1}{2} = \frac{\langle 2 | \hat{H} |2\rangle - \langle 1 | \hat{H} |1\rangle}{2} + \sum_{(n_1, n_2) \neq (0,0)} \text{Re} \{ e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} (\langle 2 | \hat{H} D(\alpha_{n_1, n_2}) |2\rangle - \langle 1 | \hat{H} D(\alpha_{n_1, n_2}) |1\rangle) \} \quad (11.8)$$

$$- \langle 1 | \hat{H} D(\alpha_{n_1, n_2}) | 1 \rangle \rangle \} \quad (11.9)$$

rappel : $F_{n_1, n_2, \vec{\theta}} = n_1 \theta_1 + n_2 \theta_2 + n_1 n_2 \pi N$.

par ailleurs,

$$\epsilon(\vec{\theta}) = \langle \Psi_1 | \hat{H} | \Psi_2 \rangle = \sum_{n_1, n_2} \langle 1 | \hat{H} D(\alpha_{n_1, n_2}) | 2 \rangle e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} \quad (11.10)$$

Dans ces deux sommes, l'amplitude des termes décroît exponentiellement vite lorsque $|n_1|, |n_2|$ augmentent. Le module de ces termes $m = | \langle 1 | \hat{H} D(\alpha_{n_1, n_2}) | 2 \rangle |$ correspond à la distance "tunnel" entre le quasi-mode $|1 \rangle$ et $|2 \rangle_{n_1, n_2} = D(\alpha_{n_1, n_2}) | 2 \rangle$, images translatées du quasi mode $|2 \rangle$ dans les domaines du plan. Le module décroît comme $\exp(-d_{n_1, n_2} N)$, où d_{n_1, n_2} est du même ordre de grandeur que la distance sur l'espace de phase entre les supports de $|1 \rangle$ et $|2 \rangle_{n_1, n_2}$. Voir la figure 11.12.

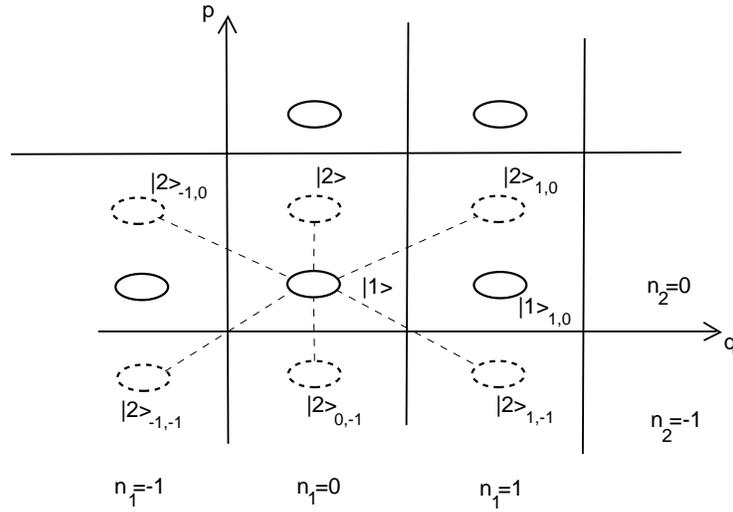


Figure 11.12: L'espace de phase plan. L'emplacement des quasi-modes est noté par $|2 \rangle_{n_1, n_2} = D(\alpha_{n_1, n_2}) | 2 \rangle$.

En supposant E_1 et E_2 voisins, les états stationnaires $|\Psi_+(\vec{\theta}) \rangle$ et $|\Psi_-(\vec{\theta}) \rangle$ sont donnés par la diagonalisation de la restriction de \hat{H} dans la base $|\Psi_1(\vec{\theta}) \rangle$, $|\Psi_2(\vec{\theta}) \rangle$, comme expliqué au paragraphe 9.3. Ici on s'intéresse à l'indice de Chern des bandes $|\Psi_+(\vec{\theta}) \rangle$ et $|\Psi_-(\vec{\theta}) \rangle$, et d'après les résultats du paragraphe 10.6, il est déterminé par l'emplacement des zéros de $\epsilon(\vec{\theta})$ et de leur indice par rapport à l'ensemble $\mathcal{S}^+ = \{ \vec{\theta} / E(\vec{\theta}) > 0 \}$.

1. Changement de signe de $E(\vec{\theta})$: Pour que l'indice de Chern soit non nul, il est tout d'abord nécessaire que $E(\vec{\theta})$ s'annule et change de signe, définissant ainsi une par-

tion $\mathcal{S}^+ \cup \mathcal{S}^- \cup \mathcal{S}^0$ du tore $\theta \in [0, 2\pi]^2$, voir (10.14). Le terme constant de $E_1(\theta)$ (respect. $E_2(\vec{\theta})$) est $\langle 1|\hat{H}|1\rangle$, énergie du quasi-mode $|1\rangle$ (respect. $|2\rangle$). Les autres termes dépendent de $\vec{\theta}$, mais ont une amplitude exponentiellement faible en fonction de N , et pour que $E(\vec{\theta})$ change de signe, il faut que les bandes très fines $E_1(\vec{\theta})$ et $E_2(\vec{\theta})$ se recouvrent. cela se produit si il y a une symétrie exacte (auquel cas $\langle 1|\hat{H}|1\rangle = \langle 2|\hat{H}|2\rangle$), ou si \hat{H} dépend d'un paramètre γ , qui fait que ces deux bandes se croisent, et se recouvrent donc pour une valeur particulière du paramètre. La condition que $E(\vec{\theta})$ change de signe est somme toute pas très restrictive, et correspond à la condition de résonance $E \ll |\epsilon|$ du paragraphe 9.3.

2. Les zéros de $\epsilon(\vec{\theta})$: Nous allons discuter de la possibilité pour $\epsilon(\vec{\theta})$ de s'annuler dans un cas générique. $\epsilon(\vec{\theta})$ se décompose d'après (11.10) comme une somme de termes dépendants de (θ_1, θ_2) par $F_{n_1, n_2, \vec{\theta}}$. Sauf cas particulier, (on discutera par exemple la symétrie par translation au paragraphe suivant), le module des termes de (11.10), peuvent se ranger par ordre décroissant $m_a \gg m_b \gg m_c \dots$, et la décroissance est si rapide que seul le premier terme est prépondérant. Le module de ϵ est $|\epsilon| \approx m_a$ et ainsi $\epsilon(\vec{\theta})$ ne s'annule pas. Voir la figure 11.13(a). Par conséquent *l'indice de Chern est nul*.

Pour que $\epsilon(\vec{\theta})$ puisse s'annuler, il faut donc déjà que les modules des deux termes prépondérants soient du même ordre $m_a \approx m_b$ ou tout au moins, que leur différence soit plus petite que le module du troisième terme : $|m_a - m_b| \leq m_c \gg m_d \dots$. Voir la figure 11.13(b). $\epsilon(\vec{\theta})$ s'écrit donc approximativement :

$$\begin{aligned} \epsilon(\vec{\theta}) &\approx m_a e^{n_a \vec{\theta} + \phi_a} + m_b e^{n_b \vec{\theta} + \phi_b} + m_c e^{n_c \vec{\theta} + \phi_c} \\ &= e^{n_a \vec{\theta}} \left(m_a e^{\phi_a} + m_b e^{(n_b - n_a) \vec{\theta} + \phi_b} + m_c e^{(n_c - n_a) \vec{\theta} + \phi_c} \right) \end{aligned} \quad (11.11)$$

avec $\vec{n}_a = (n_{a1}, n_{a2}) \in \mathbb{Z}^2$ correspond au domaine où est représenté le terme a .

Il faut de plus que la dépendance relative des termes en $\vec{\theta}$ soit indépendante, c'est à dire d'après (11.11) que les fonctions $f_b(\vec{\theta}) = (n_b - n_a) \vec{\theta}$ et $f_c(\vec{\theta}) = (n_c - n_a) \vec{\theta}$ soient indépendantes, ou encore :

$$\frac{n_{b1} - n_{a1}}{n_{b2} - n_{a2}} \neq \frac{n_{c1} - n_{a1}}{n_{c2} - n_{a2}} \quad (11.12)$$

qui signifie graphiquement que les points $\vec{n}_a, \vec{n}_b, \vec{n}_c$ ne sont pas alignés. Intuitivement, cette condition permet aux trois premier termes de $\epsilon(\vec{\theta})$ de décrire une surface de \mathbb{C} et non une ligne, et de pouvoir réaliser $\epsilon(\vec{\theta}) = 0$.

Notons aussi que si $\epsilon(\vec{\theta})$ s'annule pour une configuration donnée, (fig. 11.13(b)),

$\epsilon(\theta)$ s'annule alors aussi pour une configuration symétrique (fig. 11.13(c)), avec un signe opposé.

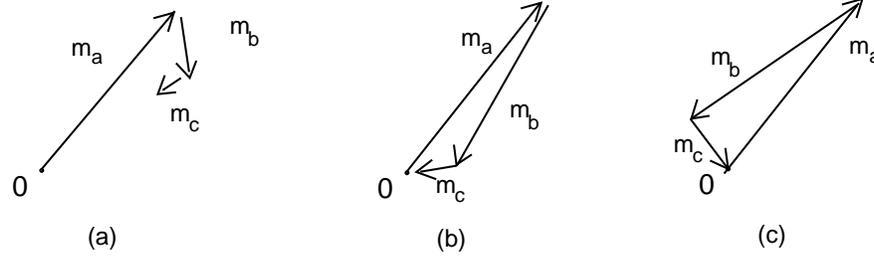


Figure 11.13: Les trois premiers termes de $\epsilon(\vec{\theta})$, de modules m_a, m_b, m_c .

En conclusion de ce paragraphe, nous avons vu que les indices de Chern d'un couple de quasi-modes en résonance peut être non nul à condition que les conditions suivantes soient réalisées :

1. "Condition de résonance" : $\langle 1|\hat{H}|1 \rangle \approx \langle 2|\hat{H}|2 \rangle$, (vérifiée si il y a une symétrie, de translation ou réflexion ou lorsque deux bandes semi-classiques se croisent.). cela permet à $E(\vec{\theta})$ de changer de signe.
2. "Condition d'équidistance" : Il faut que les deux plus proches représentants du quasi-mode $|2 \rangle$ soient à égale distance ("distance tunnel" liée à la barrière énergétique) du quasi-mode $|1 \rangle$ (dans le plan), et que le troisième représentant ne soit pas aligné avec les deux précédents. Voir figure 11.14. Cela permet à $\epsilon(\vec{\theta})$ de s'annuler.
3. L'indice de Chern dépend ensuite de l'emplacement relatif des zéros de $\epsilon(\vec{\theta})$ (et leur indice) par rapport au domaine \mathcal{S}^+ , voir le paragraphe 10.6.

d) Cas de deux trajectoires contractibles symétriques par translation et analyse des résultats de \mathcal{H}_T .

La symétrie par translation d'ordre t n'est en fait pas exceptionnelle dans le contexte physique d'électrons dans un potentiel périodique et un fort champ magnétique, puisqu'elle correspond d'après (7.17) à quantifier le plan avec $h = \frac{t}{N}QP$, ou encore d'après (6.18) à avoir un nombre rationnel $\frac{N}{t}$ de quanta de flux de champ magnétique par cellule périodique.

Nous allons analyser le spectre de l'Hamiltonien \mathcal{H}_T et considérer donc le cas de deux

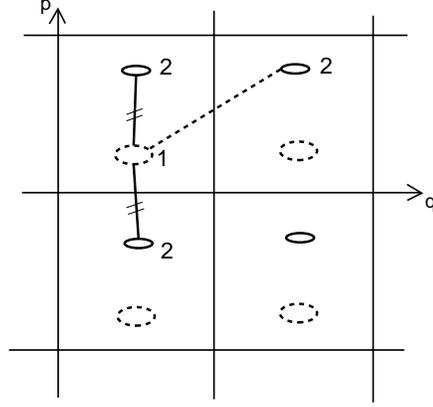


Figure 11.14: *Illustration des conditions pour avoir $C = \pm 1$.*

trajectoires contractibles symétriques par translation. Il s'agit d'un cas particulier du paragraphe précédent. D'après la règle établit ci-dessus, l'indice de Chern peut être non nul. Il reste cependant à préciser plus le dernier point. Supposons que la symétrie est en impulsion : $\hat{T}_{P/2} = D(\omega_2/2)$ commute avec \hat{H} . L'exemple (11.2) sert d'illustration. On peut aussi supposer que les deux quasi-modes sont liés par : $|2\rangle = D(\omega_2/2)|1\rangle$. On a alors avec (7.22) :

$$\begin{aligned} \langle 2|\hat{H}D(\alpha_{n_1,n_2})|2\rangle &= \langle 1|\hat{H}D(\frac{-\omega_2}{2})D(\alpha_{n_1,n_2})D(\frac{\omega_2}{2})|1\rangle \\ &= e^{-in_1\pi N} \langle 1|\hat{H}D(\alpha_{n_1,n_2})|1\rangle \end{aligned} \quad (11.13)$$

et (11.8) donne :

$$E(\vec{\theta}) = \frac{E_2 - E_1}{2} = \sum_{(n_1,n_2) \neq (0,0)} \text{Re}\{e^{-iF_{n_1,n_2,\vec{\theta}}}(1 - e^{-in_1\pi N}) \langle 1|\hat{H}D(\alpha_{n_1,n_2})|1\rangle\} \quad (11.14)$$

(le terme constant est parti, comme $\langle 1|\hat{H}|1\rangle = \langle 2|\hat{H}|2\rangle$, et cela fait que $E(\vec{\theta})$ oscille, change de signe, et donc les domaines \mathcal{S}^+ et \mathcal{S}^- sont non vides).

Remarque : si N est pair, $E(\vec{\theta})$ est nul, ce à quoi l'on s'attend du fait que dans ce cas, on peut effectuer le quotient du plan par $T_Q, T_{P/2}$ et diagonaliser \hat{H} dans les sous espaces $\mathcal{H}_{N/2}(\theta_1, \theta_2)$, ce qui ramène à un problème à un seul puit. On suppose donc par la suite, que N est impair.

Ensuite, la symétrie par translation induit une relation entre le terme $(-n_1, -n_2)$ et

$(n_1, n_2 - 1)$ de la somme (11.10). Cela est clair sur le graphique 11.12 :

$$\begin{aligned}
\langle 1|\hat{H}D(\alpha_{-n_1, -n_2})|2\rangle e^{-iF_{-n_1, -n_2, \vec{\theta}}} &= \langle 1|\hat{H}D(\frac{-\omega_2}{2})D(-n_1\omega_1 - (n_2 - 1)\omega_2)D(\frac{-\omega_2}{2})|2\rangle \\
&\quad e^{-iF_{-n_1, -n_2, \vec{\theta}}} \\
&= \langle 1|D^+(\frac{\omega_2}{2})D^+(n_1\omega_1 + (n_2 - 1)\omega_2)\hat{H}|1\rangle \\
&\quad e^{in_1\theta_1 + in_2\theta_2 - in_1n_2\pi N} \\
&= \frac{\langle 1|\hat{H}D(\alpha_{n_1, (n_2-1)})|2\rangle e^{-iF_{n_1, (n_2-1), \vec{\theta}}}}{e^{-i\theta_2 - in_1\pi N}}
\end{aligned} \tag{11.15}$$

On a alors :

$$\begin{aligned}
\epsilon(\vec{\theta}) &= \sum_{n_2 \geq 0} \frac{\langle 1|\hat{H}D(\alpha_{n_1, n_2})|2\rangle e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}}}{\langle 1|\hat{H}D(\alpha_{n_1, n_2})|2\rangle e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} e^{-i\theta_2 + in_1\pi N}} \\
&= 2e^{-\frac{i\theta_2}{2}} \{ \sum_{n_2 \geq 0, n_1 \text{ pair}} Re[\langle 1|\hat{H}D(\alpha_{n_1, n_2})|2\rangle e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} e^{i\frac{\theta_2}{2}}] \\
&\quad + i \sum_{n_2 \geq 0, n_1 \text{ impair}} Im[\langle 1|\hat{H}D(\alpha_{n_1, n_2})|2\rangle e^{-iF_{n_1, n_2, \vec{\theta}}} e^{i\frac{\theta_2}{2}}] \}
\end{aligned} \tag{11.16}$$

$\epsilon(\vec{\theta})$ s'annule si chacune des sommes à valeur réelle s'annule simultanément. Ce sont des termes qui oscillent et les solutions de $\epsilon(\vec{\theta}) = 0$ existent donc.

Dans le cas de l'exemple (11.2), et d'après la figure 11.6, le terme principal de (11.14) est pour $n_1 = \pm 1, n_2 = 0$, ce qui fait que :

$$E(\vec{\theta}) = \frac{E_2 - E_1}{2} = 4Re\{e^{-i\theta_1} \langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|1\rangle\} \tag{11.17}$$

Le signe de $E(\vec{\theta})$ partitionne donc le tore $[0, 2\pi]$ en deux bandes parallèles à l'axe θ_2 , \mathcal{S}^+ , et \mathcal{S}^- , de largeur $\Delta\theta_1 = \pi$. $\mathcal{S}^+ = \{(\theta_1, \theta_2) \text{ t.q. } \tilde{\theta}_1 < \theta_1 < \tilde{\theta}_1 + \pi\}$. $\tilde{\theta}_1 \in [0, 2\pi]$

Ensuite les termes principaux des deux sommes intervenant dans $\epsilon(\vec{\theta})$ (11.16) sont respectivement : $(n_1, n_2) = (0, 0)$ et $(n_1, n_2) = (1, 0)$ ce qui donne :

$$\epsilon(\vec{\theta}) \approx 2e^{-i\frac{\theta_2}{2}} \{ Re[\langle 1|\hat{H}|2\rangle e^{i\frac{\theta_2}{2}}] + i Im[\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|2\rangle e^{-i\theta_1 + i\frac{\theta_2}{2}}] \} \tag{11.18}$$

$\epsilon(\vec{\theta})$ s'annule donc en deux points $\vec{\theta} = (\theta_1^*, \theta_2^*)$ et $\vec{\theta}' = (\theta_1^* + \pi, \theta_2^*)$. Selon la valeur de θ_1^* par rapport à la valeur de $\tilde{\theta}_1$, les indices de Chern des bandes $|\Psi_+\rangle$ et $|\Psi_-\rangle$ sont ± 1 , en accord avec les résultats numériques de la figure 11.10.

La valeur précise de $\tilde{\theta}_1$, θ_1^* et θ_2^* dépendent de l'argument des nombres complexes $\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|1\rangle$, $\langle 1|\hat{H}|2\rangle$ et $\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|2\rangle$ que seul un traitement semi-classique de l'effet tunnel pourrait déterminer.

Remarques :

1. Il n'est pas possible de savoir quel niveau a l'indice de Chern +1, sans connaître les phases des nombres $\langle 1|\hat{H}|2\rangle$, $\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|1\rangle$, $\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|2\rangle$. Il apparaît néanmoins numériquement se dégager une règle générale dans les modèles intégrables, qui est que l'indice de Chern +1 est porté par la bande la plus extrême au spectre, c'est à dire celle d'énergie la plus voisine du point fixe, et la plus éloignée de la séparatrice du puit. (Mais on peut sans la symétrie de translation, imaginer des configurations où cet énoncé n'a pas de sens). Au chapitre suivant, il apparaîtra néanmoins les deux possibilités dans des modèles dépendant du temps non intégrables, et dans le régime quasi-régulier.

2. Afin de vérifier les expression ci dessus, on peut calculer approximativement la probabilité de présence de l'état $|\Psi_+(\vec{\theta})\rangle$ sur la trajectoire 1. A l'aide de (9.12,9.13),

$$P_1^+(\vec{\theta}) = \frac{|\langle \Psi_+|\Psi_1\rangle|^2}{\langle \Psi_+|\Psi_+\rangle\langle \Psi_1|\Psi_1\rangle} = (1 + \frac{|\alpha_2^+|^2}{|\alpha_1^+|^2})^{-1} \quad (11.19)$$

$$\text{avec } \frac{|\alpha_2^+|^2}{|\alpha_1^+|^2} = \frac{E + \sqrt{E^2 + \epsilon\bar{\epsilon}}}{\epsilon} \quad (11.20)$$

et en utilisant les expression (11.17) et (11.18) pour $E(\vec{\theta})$ et $\epsilon(\vec{\theta})$, on obtient la fonction représentée sur la figure 11.15 qui s'identifie très bien avec la courbe numérique, figure 11.7 a. (On a choisit $|\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|1\rangle| = |\langle 1|\hat{H}|2\rangle|$ et des phases convenables pour l'identification).

3. L'écart entre les niveaux est d'après (9.11) :

$$\Delta E(\vec{\theta}) = 2\sqrt{E^2 + |\epsilon|^2} \approx 4\{ \text{Re}^2[e^{-i\theta_1} \langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|1\rangle] + \text{Re}^2[\langle 1|\hat{H}|2\rangle e^{i\frac{\theta_2}{2}}] + \text{Im}^2[\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|2\rangle e^{-i\theta_1 + i\frac{\theta_2}{2}}] \}^{1/2} \quad (11.21)$$

Au niveau du module des termes, on a :

$$1 \gg |\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|1\rangle| \approx |\langle 1|\hat{H}|2\rangle| \gg |\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|2\rangle| \quad (11.22)$$

si bien que la largeur des deux bandes est de l'ordre de $|\langle 1|\hat{H}|2\rangle|$ mais l'espace entre les deux bandes (" le gap") est beaucoup plus faible, et de l'ordre de $|\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|2\rangle|$, comme observé numériquement sur la figure 11.10. Le minimum est atteint lorsque les deux premiers termes sont nuls.

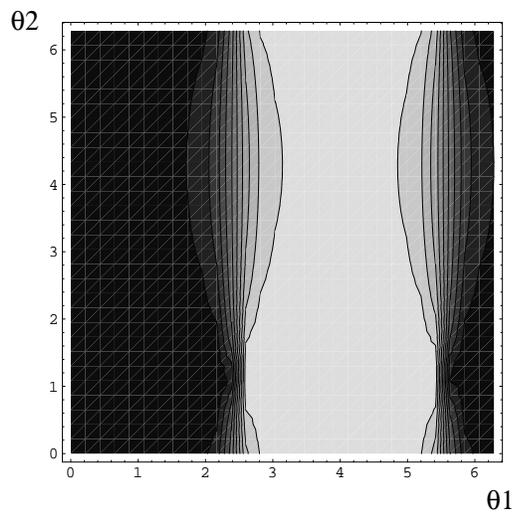


Figure 11.15: *Densité de niveau de la fonction $P_1^+(\vec{\theta})$ (11.19), qui est la probabilité de présence de l'état $|\Psi_+(\vec{\theta})\rangle$ sur la trajectoire 1, et qui s'identifie bien avec la courbe numérique (11.7) (a).*

e) Analyse des résultats de l'Hamiltonien \mathcal{H}_R .

La règle obtenue page (157), nous permet de comprendre la valeur des indices de Chern des bandes situées à l'extrémité du spectre de l'Hamiltonien \mathcal{H}_R , figure 11.11.

Pour ce qui concerne le haut du spectre, il est clair avec la figure (11.9) que les deux puits symétriques par réflexion ne vérifient pas la condition "d'équidistance" illustrée par la figure (11.14). Au contraire, dès que la symétrie par translation est brisée ($V > 0$), leur distance minimale est atteinte de façon unique, voir la figure (11.16)(a). Cela explique pourquoi l'indice de Chern des bandes Ψ_{10} et Ψ_{11} devient rapidement nul (par passage d'une dégénérescence), pour $V > 0$, sur la figure (11.11).

De plus, le signe de la fonction $E(\vec{\theta})$ (11.8) varie toujours (il y a toujours résonance), avec une amplitude de l'ordre de $|\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|1\rangle|$ mais la fonction $\epsilon(\vec{\theta})$ (11.10) est dominée par le terme constant $|\langle 1|\hat{H}|2\rangle| \gg |\langle 1|\hat{H}D(\omega_1)|1\rangle|$, si bien que $|\epsilon| \gg E$, et l'on se retrouve dans le cas de résonance avec effet tunnel décrit au paragraphe 9.3, cas 2, et (θ_1, θ_2) n'interviennent pas. Cela explique par exemple l'étroitesse des bandes des états Ψ_{10} , Ψ_{11} , pour $V > 0$, et la non fluctuation de leur distribution de Husimi.

En ce qui concerne le bas du spectre, les deux puits 3 et 4 ne sont pas symétriques, mais pour $V \approx 0.6$, une résonance se produit entre les bandes Ψ_2 (niveau fondamental du puits 3) et Ψ_3 (premier niveau excité du puits 4). La configuration des deux trajectoires contractibles est celle de la figure 11.16 (b). Les deux distances minimales sont égales, ce qui

explique la variation d'indice de Chern ± 1 , et les deux dégénérescences qui accompagnent cette résonance.

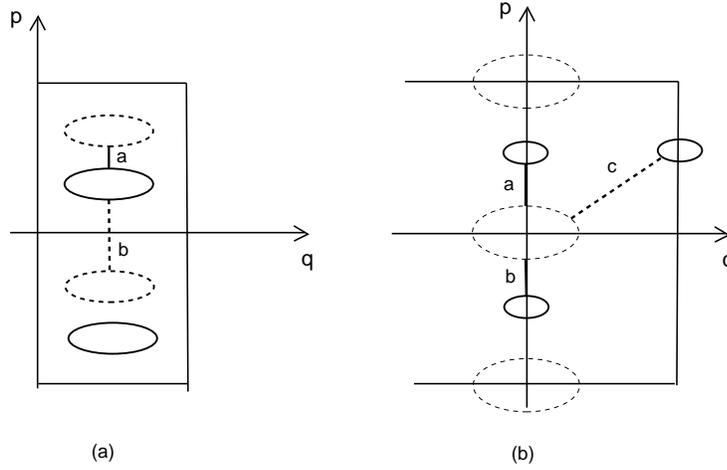


Figure 11.16: Distance minimale entre les deux puits de l'Hamiltonien \mathcal{H}_R .

(a) Dans le haut du spectre, une distance est minimale, $d_a > d_b$, donc l'indice de Chern est nul.
 (b) Dans le bas du spectre, deux distances minimales sont équivalentes $d_a = d_b$, (et la troisième image est non alignée). L'indice de Chern peut être non nul.

f) Aspect qualitatif des lignes de dégénérescences.

Voyons ce que la règle page 157 peut nous permettre de déduire sur l'apparition possible d'indice de Chern non nul, entre deux trajectoires contractibles, pour une famille d'Hamiltoniens dépendant de plusieurs paramètres $\hat{H}(\gamma_1, \gamma_2, \dots)$. (on met de côté le cas de trajectoires non contractibles). La première condition de résonance est de codimension un, c'est à dire qu'elle peut être réalisée en faisant varier un paramètre. Par exemple l'action d'une trajectoire, notée \mathcal{A} . La deuxième condition qui exige que le puits 1 se trouve sur la "médiatrice" entre deux images du puits 2, est aussi de codimension 1. Ce paramètre est par exemple la composante en impulsion de la distance mutuelle entre les deux trajectoires, notée \mathcal{P} . Seulement pour des valeurs particulières de ces paramètres $(\mathcal{A}, \mathcal{P}) = (\mathcal{A}^*, \mathcal{P}^*)$, l'indice de Chern des bandes considérées peut être non nul (± 1 , génériquement). en fait, il est non nul dans un voisinage exponentiellement étroit ($\sim \exp(-\delta N)$), et hors de ce voisinage, l'indice de Chern retrouve sa valeur générique, zéro. A la limite de ce voisinage, il y a une ligne de dégénérescence qui accompagne le changement d'indice de Chern. Cela est illustré sur la figure (11.17). La condition de résonance est vérifiée sur la ligne $\mathcal{A} = \mathcal{A}^*$. La condition d'égale distance est vérifiée pour $\mathcal{P} = \mathcal{P}^*$.

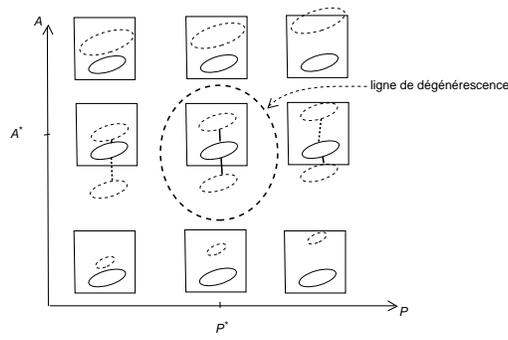


Figure 11.17: Diagramme montrant deux familles de trajectoires contractibles (au voisinage de $E = \mathcal{H}(q, p)$), pour un Hamiltonien dépendant de deux paramètres $(\mathcal{A}, \mathcal{P})$. L'indice de Chern est $C = \pm 1$ dans un voisinage de $(\mathcal{A}^*, \mathcal{P}^*)$ limité par une ligne fermée de dégénérescence, hors de laquelle $C = 0$.

Notons de plus que si \mathcal{A} varie, la condition de résonance va à nouveau se réaliser entre deux autres niveaux quantifiés (qui sont distants de $\Delta\mathcal{A} \sim \hbar$) et une autre boucle de dégénérescence apparaît.

En conclusion, l'occurrence de dégénérescence pour une bande d'énergie associée à une trajectoire contractible (et à une énergie telle que la couche d'énergie $E = \mathcal{H}(q, p)$ n'ait que des composantes connexes contractibles), pour une famille générique d'Hamiltoniens, se produit localement sur des "tubes de codimension 2" de diamètre exponentiellement petit ($\sim e^{-\delta N} \sim e^{-\delta/\hbar}$) qui sont alignés et distants de l'ordre de ($\sim \hbar \sim \frac{1}{N}$).

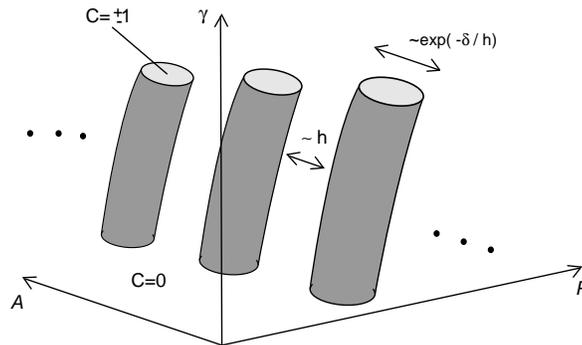


Figure 11.18: Valeur de l'indice de Chern d'une bande, et tubes de dégénérescence dans un espace à trois paramètres $(\mathcal{A}, \mathcal{P}, \gamma)$. A l'intérieur $C = \pm 1$, à l'extérieur, $C = 0$.

Les trois directions $(\mathcal{A}, \mathcal{P}, \gamma)$ apparaissent dans les exemples étudiés ci dessus. La

variable γ correspond à la variable V de l'Hamiltonien \mathcal{H}_T , figure 11.10; la variable \mathcal{P} correspond à la variable V de l'Hamiltonien \mathcal{H}_R , et pour le haut du spectre, figure 11.11. La variable \mathcal{A} correspond à la variable V de l'Hamiltonien \mathcal{H}_R , mais pour le bas du spectre.

Cette disposition des lignes de dégénérescence dans le cas intégrable est très particulière et contraste fortement avec la disposition que prennent les lignes de dégénérescence dans le cas chaotique, comme nous le verrons au paragraphe 12.5.

11.3 Résonance entre trois trajectoires contractibles.

Après avoir traité le cas de deux puits, l'Hamiltonien suivant a pour $V = 0$, trois puits symétriques sous la translation $\hat{T}_P^{1/2}$:

$$H(q, p) = -\cos(2\pi q) - \cos(6\pi p) - V \cos(8\pi p + \frac{\pi}{6}) - \frac{1}{4} \cos(2\pi q + \frac{\pi}{4}) \quad (11.23)$$

Les trajectoires dans l'espace de phase classique sont montrées sur la figure 11.19.

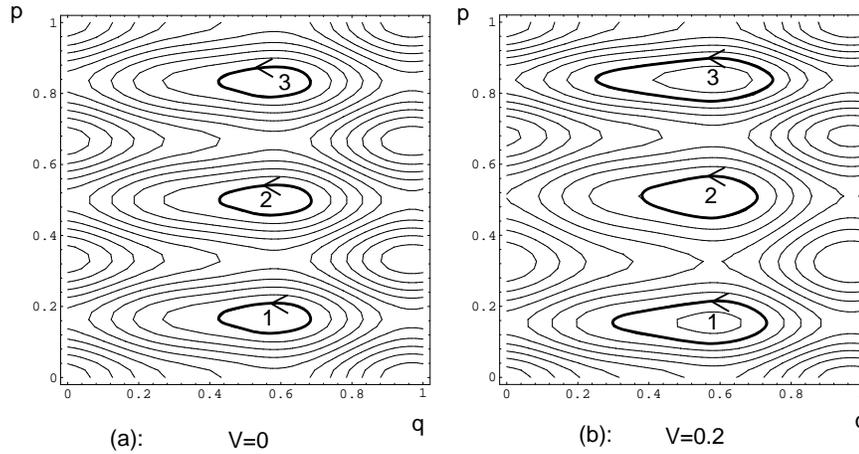


Figure 11.19: Trajectoires de l'Hamiltonien (11.23).

(a) : Pour $V = 0$, les trois puits d'énergie maximum sont symétriques sous les translation $\hat{T}_P^{1/3}$ dans la direction p .

(b) : Pour $V = 0.2$, la symétrie est brisée.

Une simple analyse semi-classique (en négligeant les effets tunnel) échoue dans ce cas car elle prédirait trois bandes dégénérées. En fait, il y a une répulsion exponentiellement faible entre elles (comme pour l'effet tunnel ordinaire entre deux puits) et les états stationnaires de chaque bande peuvent avoir (selon les valeurs de (θ_1, θ_2)) une amplitude non

nulle dans chacun des trois puits. Comme les trois puits sont symétriques par translation, l'effet tunnel crée un chemin non contractible qui joint les trois puits dans la direction p , et cela crée une forte dépendance de chaque bande en fonction de (θ_1, θ_2) . Cette dépendance fait que les distributions de Husimi de chaque bande oscillent entre les trois puits en fonction de (θ_1, θ_2) , produisant ainsi un indice de Chern non nul.

Les bandes d'énergie et les indices de Chern sont montrés sur la figure 12.14 page 187 pour $N = 11$ en fonction de V . Nous restreignons notre discussion aux états $\Psi_9, \Psi_{10}, \Psi_{11}$, correspondants aux états localisés sur les trois puits du centre de l'espace de phase. Lorsque $V = 0$, nous observons un indice de Chern non nul (dont la valeur a été analytiquement exprimée par D.J. Thouless et al. [10] et sont pour $N = 11$ $-1, 2, -1, -1, 2, -1, 2, -1, -1, 2, -1$ pour respectivement $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_{11}$). Lorsque θ_1 varie, les états $\Psi_9, \Psi_{10}, \Psi_{11}$ oscillent dans les trois puits, en correspondance avec la valeur de l'indice de Chern (voir figures 11.20, 11.21). Sur la figure 11.21, nous montrons comment la distribution de Husimi passe d'un puits à l'autre en fonction de θ_1 . Pour une valeur donnée de θ_1 , la distribution est concentrée sur l'un des puits. Les seules valeurs de θ_1 pour lesquelles la distribution est partagée entre deux puits sont autour des lignes de transition indiquées sur la figure 11.20.

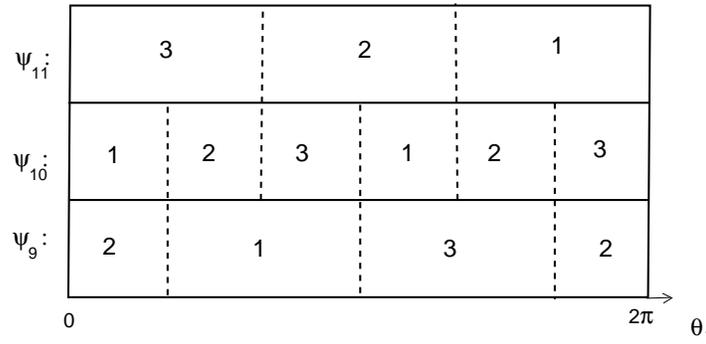


Figure 11.20: Le numéro du puits (voir figure (11.19)) où $\Psi_9, \Psi_{10}, \Psi_{11}$ sont localisés lorsque θ_1 varie, pour $V = 0$ et $N = 11$. Par exemple, Ψ_{10} fait deux fois le cycle $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$; et en correspondance, son indice de Chern est $C = +2$.

Lorsque V augmente, la symétrie est brisée, et les états $\Psi_9, \Psi_{10}, \Psi_{11}$ deviennent localisés dans un puits pour toutes les valeurs de (θ_1, θ_2) (les puits 2, 1, 3 respectivement) et acquièrent un indice de Chern nul. Ce comportement est attendu car si il y a une assymétrie suffisante entre les trois puits, la théorie WKB (sans effet tunnel) donne une bonne approximation pour les états individuels et, comme discuté avant, un état quantique est exponentiellement localisé sur une trajectoire classique et son indice de Chern

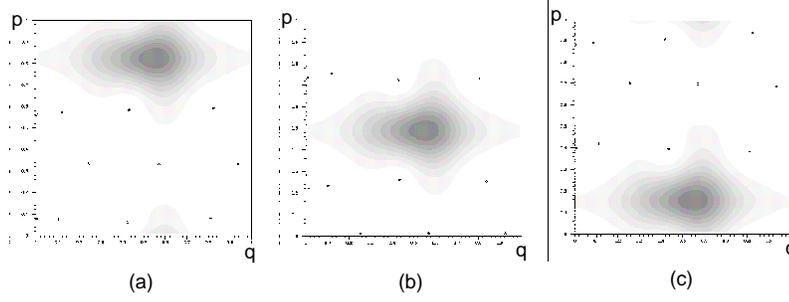


Figure 11.21: *Distribution de Husimi de Ψ_{11} , pour $N = 11$, $V = 0$, pour différentes valeurs de (θ_1, θ_2) . Avec $\theta_2 = 0$.*

(a) : $\theta_1 = 1$ (b) : $\theta_1 = 3$ (c) : $\theta_1 = 5$.

est nul. La transition entre les indices de Chern non nuls et nuls se fait par le passage de deux dégénérescences successives (figure 12.14). La figure 11.22 montre l'intensité de la distribution de Husimi de l'état Ψ_{10} en fonction de (θ_1, θ_2) en un point de l'espace de phase situé dans le puits 1. Avant la première dégénérescence, $C_{10} = 2$, et en correspondance, la densité s'annule deux fois (avec le même signe) lorsque (θ_1, θ_2) varient. Après la première dégénérescence, $C_{10} = 1$ est la densité ne s'annule qu'une fois. Finalement, après la deuxième dégénérescence, la densité est toujours positive.

L'effet de résonance observé pour $V = 0$ faisant que les indices de Chern sont non nuls, est dû à l'existence de cette symétrie particulière $\hat{T}_P^{1/3}$. Lorsque la symétrie est brisée ($V \neq 0$), l'effet disparaît, et l'on retrouve la situation générique pour un système intégrable qui est que presque tous les états ont un indice de Chern nul.

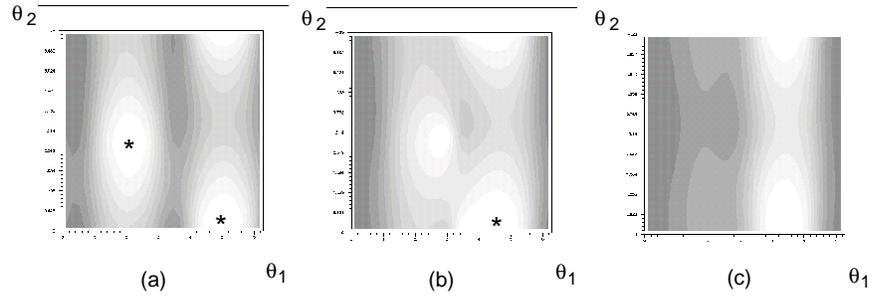


Figure 11.22: Densité de présence de l'état Ψ_{10} dans le puits 1, pour $N = 11$ en fonction de (θ_1, θ_2) , pour différentes valeurs de V .

(a) : $V = 0.01$: avant la première dégénérescence . La distribution de Husimi s'annule deux fois dans le plan (θ_1, θ_2) (les zéros sont marqués par une étoile). En correspondance, l'indice de Chern est deux.

(b) : $V = 0.065$: entre les deux dégénérescences. La distribution de Husimi s'annule une fois dans le plan (θ_1, θ_2) . En correspondance, l'indice de Chern est un.

(c) : $V = 0.14$: après les dégénérescences. La distribution de Husimi est strictement positive dans tout le plan (θ_1, θ_2) . En correspondance, l'indice de Chern est nul.

Chapitre 12

Dynamique chaotique et indices de Chern.

Afin de pouvoir étudier simplement les propriétés quantiques correspondant à une dynamique classique non intégrable, M.V. Berry et al. ont proposé de traiter une dynamique classique dépendant du temps de façon périodique. [75]. La dynamique classique s'analyse à l'aide des sections stroboscopiques des trajectoires (type section de Poincaré), et la dynamique quantique s'analyse en terme de quasi-énergies et d'états quasi-stationnaires, qui sont le spectre du propagateur sur une période.

L'étude des distributions de Husimi des états quasi-stationnaires a ensuite été initiée entre autres par P. Leboeuf et A. Voros [49]. P. Leboeuf et al. ont alors montré que l'indice de Chern peut-être adapté pour l'étude des états quasi-stationnaires, et qu'en particulier il prend des valeurs non nulles lorsque la dynamique classique devient chaotique, dans le modèle du Harper pulsé [14].

Nous rappelons tout d'abord comment la dynamique classique et quantique d'un Hamiltonien du type "Harper pulsé" peut-être traitée. Nous rappelons ensuite les principaux résultats connus qui concernent la distribution de Husimi d'un état quasi-stationnaire dans le régime chaotique.

Dans le cas intégrable, nous avons vu que les indices de Chern et les dégénérescences sont fortement contraints par la régularité de la dynamique. Nous allons maintenant observer l'influence d'une dynamique chaotique sur le spectre et les dégénérescences, au travers des indices de Chern. Cette étude se fera tout d'abord sur le modèle de "Harper pulsé" (12.12), puis sur un modèle analogue qui ne possède pas les symétries particulières du Harper pulsé. Dans ces deux modèles, nous étudierons l'apparition progressive du chaos, et son influence sur les indices de Chern, en notant particulièrement l'effet des symétries

dans le modèle de "Harper pulsé".

12.1 Dynamique chaotique sur le tore générée par un Hamiltonien dépendant du temps.

En correspondance avec l'Hamiltonien (E.2), nous nous proposons donc d'étudier cette fois-ci, l'Hamiltonien dépendant du temps, de période τ :

$$\mathcal{H}(q, p, t) = -V_p \cos\left(t_p 2\pi \frac{p}{P} + u_p\right) - V_q \cos\left(t_q 2\pi \frac{q}{Q} + u_q\right) K(t) \quad (12.1)$$

avec le "peigne de Dirac" :

$$K(t) = \tau \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(t - n\tau) \quad (12.2)$$

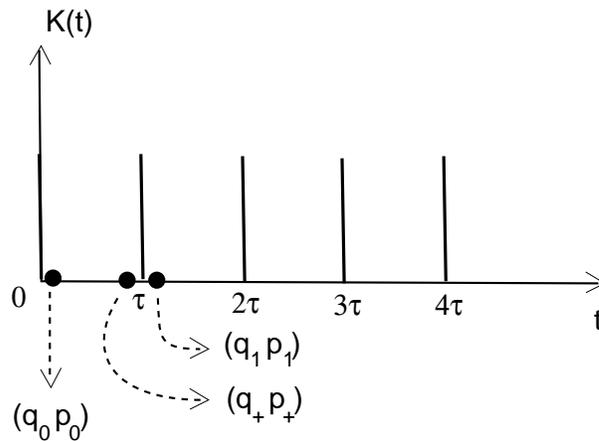


Figure 12.1: "Peigne de Dirac"

La dépendance particulière en temps que nous choisissons, rendra possible le calcul par intégration du propagateur.

Tout d'abord, intégrons les équations de mouvement classiques, sur une période. Nous décidons d'intégrer une trajectoire partant de (q_n, p_n) un instant juste après un pulse, à (q_{n+1}, p_{n+1}) , une période suivante. Faisons le calcul pour $t \in]0, \tau[\cup \{\tau\}$. Nous noterons cette application M_{o+} . Nous noterons aussi (q^+, p^+) , la position du point à $t = \tau^-$ (juste avant le pulse).

Pour $0 < t < \tau$: $\mathcal{H} = -V_q \cos(t_p 2\pi \frac{p}{P} + u_p)$ donc :

$$\begin{cases} \dot{q} = \partial_p \mathcal{H} = V_p t_p \frac{2\pi}{P} \sin(t_p 2\pi \frac{p}{P} + u_p) \\ \dot{p} = -\partial_q \mathcal{H} = 0. \end{cases} \quad (12.3)$$

et en intégrant :

$$\begin{cases} q^+ = q_n + V_p t_p \frac{2\pi\tau}{P} \sin(t_p 2\pi \frac{p_n}{P} + u_p) \\ p^+ = p_n. \end{cases} \quad (12.4)$$

Ensuite pour $t = \tau$, la distribution de Dirac intervient et :

$$\begin{cases} q_{n+1} = q^+ \\ p_{n+1} = p^+ - V_q t_q \frac{2\pi\tau}{Q} \sin(t_q 2\pi \frac{q^+}{Q} + u_q). \end{cases} \quad (12.5)$$

Donc finalement, nous obtenons l'expression de l'application stroboscopique $(q_n, p_n) \rightarrow (q_{n+1}, p_{n+1}) = M_{0+}(q_n, p_n)$:

$$M_{0+} \begin{cases} x_{n+1} = x_n + t_p \gamma_p \sin(t_p 2\pi y_n + u_p) \text{ modulo } 1 \\ y_{n+1} = y_n - t_q \gamma_q \sin(t_q 2\pi x_{n+1} + u_q) \text{ modulo } 1. \end{cases} \quad (12.6)$$

en introduisant les variables :

$$x = \frac{q}{Q} \quad y = \frac{p}{P} \quad \gamma_{q,p} = \frac{2\pi V_{q,p}\tau}{QP} \quad (12.7)$$

et sur n périodes : $(q_n, p_n) = M_{0+}^n(q_0, p_0)$

L'application stroboscopique du tore (q, p) dans lui-même caractérise la dynamique classique, et il faut noter qu'il n'y a plus conservation de l'énergie. Cette application stroboscopique peut s'identifier à une application de Poincaré pour un système à deux degrés de liberté, le tore (q, p) étant ici équivalent à une section de Poincaré d'une couche d'énergie particulière [76, 77].

Il y a plusieurs remarques à faire sur le résultat (12.6) de l'application M_{0+} .

1. Tout d'abord, sur une période, un point subit tout à tour l'action des deux termes du Hamiltonien (12.1). Comme énoncé par M.V.Berry et al. [75], on peut vérifier que le résultat de l'application (12.6) aurait été le même si on avait découpé la période en deux, $[0, \tau] = [0, t_i] \cup [t_i, \tau]$, et fait agir chaque terme avec un poids convenable sur chacune des parties.
2. L'application M_{0+} (12.6) est une transformation canonique du tore sur lui-même, elle conserve les surfaces. Le choix de l'instant initial $t_0 = 0^+$ est arbitraire. Pour

un autre choix t'_0 , et en notant $U_{t,t'}$ l'application qui fait évoluer un point entre t et t' , on obtient les relations :

$$M_{t_0} = U_{t_0, \tau+t_0} \quad M_{t'_0} = U_{t'_0, \tau+t'_0} \quad (12.8)$$

$$M_{t'_0} = U_{t_0, t'_0}^{-1} M_{t_0} U_{t_0, t'_0} \quad (12.9)$$

et pour n périodes :

$$M_{t'_0}^n = U_{t_0, t'_0}^{-1} M_{t_0}^n U_{t_0, t'_0} \quad (12.10)$$

Les deux applications $M_{t'_0}^n$ et $M_{t_0}^n$ ne diffèrent donc que par une transformation canonique fixe U_{t_0, t'_0} .

3. Etudions la limite où les pulses sont rapprochés, c'est-à-dire $\tau \rightarrow 0$ ou $\gamma \rightarrow 0$. L'application (12.6) devient proche de l'identité et :

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{q_{n+1} - q_n}{\tau} \approx V_p \frac{2\pi t_p}{P} \sin(t_p 2\pi \frac{p_n}{P} + u_p) = \partial_p \mathcal{H} \\ \dot{p} = \frac{p_{n+1} - p_n}{\tau} \approx V_q \frac{2\pi t_p}{Q} \sin(t_q 2\pi \frac{q_n}{Q} + u_q) = -\partial_q \mathcal{H}. \end{cases} \quad (12.11)$$

où \mathcal{H} est le Hamiltonien indépendant du temps (E.2). On déduit donc que pour τ ou $\gamma \rightarrow 0$, la dynamique converge vers la dynamique intégrable.

Le paramètre $\gamma \in \mathbb{R}^+$ permettra donc d'observer une transition progressive entre une dynamique intégrable et une dynamique chaotique. Classiquement, cette transition est décrite par le théorème K.A.M. [1]. Essentiellement, ce qu'il affirme dans notre cas, c'est que, pour $\gamma = 0$, les trajectoires sont sur des courbes invariantes de dimension un. Et pour $\gamma > 0$, ces courbes invariantes disparaissent progressivement. Celles qui restent partitionnent l'espace de phase en régions chaotiques.

Nous verrons dans nos modèles qu'à partir d'une certaine valeur de γ , il ne subsiste plus aucune courbe invariante, chaque trajectoire remplit le tore de façon dense par ses sections. La dynamique devient ergodique.

En interprétant le tore (q, p) comme une section stroboscopique de Poincaré d'un système conservatif, alors dans la limite intégrable $\gamma \rightarrow 0$, ce qui devient l'énergie E de l'Hamiltonien indépendant du temps (E.2) n'est en fait ici qu'une fonction de l'action. Ainsi, curieusement, au paragraphe 2.8 pour $\gamma \approx 0$, on observe de l'effet tunnel qui se produit entre des tores invariants correspondant à des énergies E différentes (par exemple entre le puits d'énergie maximum et le puits d'énergie minimum).

On a abouti à une application sur le tore qui conserve l'aire, comme l'application du chat d'Arnold ou l'application standard. Mais il faut noter une différence avec celles-ci, qui

est que ces dernières applications proviennent d'Hamiltoniens qui ne sont pas périodiques sur le plan (respectivement, le mouvement est linéaire hyperbolique ou c'est le rotateur pulsé). Seule l'application stroboscopique est périodique. Si bien que des questions liées au problème de localisation des fonctions d'ondes stationnaires se posent pour le rotateur pulsé et pas pour le Harper pulsé.

Par quantification canonique de l'Hamiltonien classique (12.1), nous obtenons l'Hamiltonien quantique :

$$\hat{H}(t) = -V_p \cos(t_p 2\pi \frac{\hat{p}}{P} + u_p) - V_q \cos(t_q 2\pi \frac{\hat{q}}{Q} + u_q) K(t) \quad (12.12)$$

A cause de la dépendance en temps de l'Hamiltonien \hat{H} , il n'est plus possible de caractériser la dynamique quantique qui en résulte par le spectre de \hat{H} comme nous l'avions fait avec l'équation (7.14). Il n'y a plus à proprement parler d'états stationnaires par la dynamique de $\hat{H}(t)$.

Néanmoins, par analogie avec le traitement classique précédant, nous pouvons considérer la transformation unitaire \hat{U} , appelé propagateur, qui fait évoluer un vecteur quantique sur une période :

$$|\Psi(\tau^+) \rangle = \hat{U}_{0^+} |\Psi(0^+) \rangle \quad (12.13)$$

Remarque : nous choisissons à nouveau l'intervalle de temps $]0; \tau]$.

Nous déduisons l'expression de \hat{U} par intégration de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \partial_t |\Psi(t) \rangle = \hat{H}(t) |\Psi(t) \rangle \quad (12.14)$$

d'où :

$$\hat{U}_{0^+} = T \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{0^+}^{\tau^+} \hat{H}(t) dt} \right\} \quad (12.15)$$

(Le symbole chronologique $T\{\}$ signifie que dans la série de l'exponentielle, il faut placer les opérateurs $\hat{H}(t)$ ($t \in \mathbb{R}$) qui ne commutent pas entre eux à priori, dans l'ordre chronologique : $\hat{H}(t)\hat{H}(t')$ si $t > t'$.)

Mais ici, grâce à la dépendance en temps particulière que nous avons, l'intégration se fait :

$$\hat{U}_{0^+} = \exp[iN\gamma_q \cos(t_q 2\pi \hat{x} + u_q)] \exp[iN\gamma_p \cos(t_p 2\pi \hat{y} + u_p)] \quad (12.16)$$

Grâce à la périodicité de $\hat{H}(t)$, cet opérateur d'évolution est le même pour les périodes suivantes, et nous pouvons connaître l'évolution aux périodes futures du vecteur $|\Psi(0^+) \rangle$:

$$|\Psi(n\tau^+) \rangle = \hat{U}_{0^+}^n |\Psi(0^+) \rangle \quad (12.17)$$

Remarque : en complète analogie avec l'équation classique (12.10), pour un autre instant de référence t'_0 , nous aurions trouvé :

$$\hat{U}_{t'_0}^n = \hat{U}_{t_0, t'_0}^{-1} \hat{U}_{t_0}^n \hat{U}_{t_0, t'_0} \quad (12.18)$$

Le passage se faisant par l'opérateur unitaire \hat{U}_{t_0, t'_0} .

A ce point, il est naturel de considérer le spectre de \hat{U}_{0+} . Pour cela, on vérifie que l'évolution (12.17) est invariante dans chaque sous-espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$. Il faut montrer que $[\hat{U}, \hat{T}_Q] = [\hat{U}, \hat{T}_P] = 0$; ce qui découle de l'expression (12.16) ou (12.12) et du fait que pour une fonction régulière $f : \hat{T}_Q^+ f(\hat{q}) \hat{T}_Q = f(\hat{q} + Q)$, $\hat{T}_P^+ f(\hat{p}) \hat{T}_P = f(\hat{p} + P)$. Le spectre de \hat{U} est fini dans chaque sous-espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$, $(\theta_1, \theta_2) \in [0; 2\pi]^2$.

$$\hat{U}_{0+} |\Psi_n(\vec{\theta})\rangle = e^{i\phi(\vec{\theta})} |\Psi_n(\vec{\theta})\rangle \quad n = 0 \rightarrow N - 1 \quad (12.19)$$

$|\Psi_n(\vec{\theta})\rangle$ est appelé *état quasi-stationnaire* et $\phi(\vec{\theta})$ *quasi-énergie* (nombre réel modulo 2π).

D'après l'équation (12.17), ce sont des états qui reviennent identiques à eux-même à chaque période.

Le problème de l'analyse semi-classique dans ce cas non intégrable et dépendant du temps, est de trouver des correspondances entre le spectre de \hat{U} et les sections stroboscopiques de M (12.6).

Afin de déterminer numériquement le spectre de \hat{U} (12.19), nous diagonalisons sa matrice représentante dans la base $|n, \vec{\theta}\rangle$ à (θ_1, θ_2) fixé et $n = 0 \rightarrow (N - 1)$. Pour cela les éléments de matrice sont d'après l'expression (12.16), et en utilisant (D.9, D.10, D.11) :

$$\begin{aligned} \langle n' \vec{\theta} | \hat{U} | n \vec{\theta} \rangle = & \exp\left(-i\frac{\theta_1}{N}(n' - n)\right) \exp\{iN\gamma_q \cos[\frac{t_q}{N}(2\pi n' + \theta_2) + u_q]\} \\ & \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} \exp[i\frac{2\pi}{N}m(n' - n)] \exp\{iN\gamma_p \cos[\frac{t_p}{N}(2\pi m - \theta_1) + u_p]\} \end{aligned} \quad (12.20)$$

12.2 Distribution de Husimi des états quasi-stationnaires

Considérons une dynamique engendrée par un Hamiltonien dépendant du temps comme (12.1). Pour des valeurs de γ assez élevées, les trajectoires deviennent instables, et la dynamique devient stochastique, comme peuvent le montrer les sections stroboscopiques de Poincaré, figure 12.3. Il n'est alors plus possible de construire des quasi modes vérifiant l'équation de Schrödinger à tout ordre en \hbar . Des expressions semi-classiques comme la formule des traces ou la formule de Gutzwiller montrent, que dans ce cas la totalité des

orbites périodiques "participent" à la valeur de chaque niveau d'énergie ainsi qu'à la structure des états stationnaires.

Beaucoup d'études analytiques et numériques ont été faites dans ce sens, et notons en particulier celles concernant les distributions de Husimi des états quasi stationnaires ([50, 48, 78, 49, 15]) et leur zéros. Dans le régime intégrable, la distribution de Husimi d'un état stationnaire présente une localisation à décroissance exponentielle, sur une trajectoire périodique classique. Cette propriété de localisation n'a plus de raison d'être si la dynamique cesse d'être régulière. Cette propriété de localisation exponentielle des fortes densité de la distribution de Husimi se traduit de façon équivalente en terme de ses zéros. Les auteurs observent que contrairement au cas intégrable où les zéros sont alignés et distants de $\propto \hbar$, dans le cas ergodique, les zéros semblent génériquement répartis sur l'espace de phase et distants de $\propto \sqrt{\hbar} \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$, (puisque il y a N zéros au total sur l'espace de phase). Les régions où la distribution de Husimi est importante en intensité sont les régions où il n'y a pas de zéro.

Le phénomène appelé "cicatrice", "scars", qui est une localisation de la distribution de Husimi autour d'une trajectoire périodique instable, correspond donc en terme des zéros à une trajectoire instable évitée par les zéros. Ce phénomène observé assez couramment numériquement, voir E.J. Heller dans [5], est en fait non générique à la limite semi-classique (c'est à dire exceptionnel, de mesure nulle parmi les états quasi-stationnaires). Un théorème mathématiques [79] montre que la distribution de Husimi de presque tous les états stationnaires converge vers la distribution invariante de Liouville, qui elle est uniforme sur la section stroboscopique. Notons que le phénomène de cicatrice n'est pas observé dans tous les modèles [80]. Et si il se produit, on doit observer une décroissance logarithmique de la densité de la distribution de Husimi le long des variétés stables et instables de la trajectoire, comme pour le point fixe instable du double puits [56].

Dans le cas mixte, où il y a coexistence de régions chaotiques et de régions presque régulières, il semble y avoir des états stationnaires associés à chacune des régions, et donc une classification possible entre états réguliers et non réguliers, sauf lorsque des effets de résonance ont tendance à créer des mélanges. Des études détaillées ont été effectuées par O. Bohigas et al. ([81, 82, 63]).

Lorsque (θ_1, θ_2) varient, les zéros qui sont répartis de façon désordonnée sur l'espace de phase, se déplacent avec une forte dépendance contrairement au cas intégrable. L'indice de Chern a la propriété de caractériser quantitativement et topologiquement cette dépendance, et P. Leboeuf et al. [14] ont suggéré qu'il mesure de ce fait l'influence du chaos classique sur la mécanique quantique.

La figure 12.2 montre par exemple les distributions de cinq niveaux consécutifs pour des valeurs différentes de $\vec{\theta}$, pour le modèle de Harper pulsé présenté ci dessous. Les distributions fluctuent à l'exception du niveau qui quantifie une région régulière. Le dernier niveau semble aussi être accroché au point fixe instable $(q, p) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

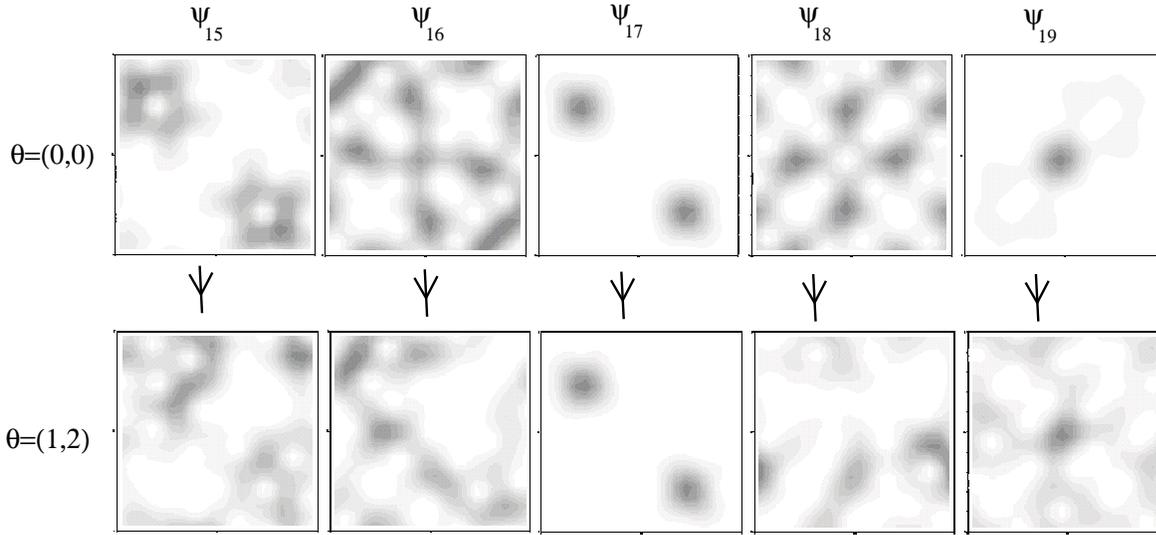


Figure 12.2: *Distribution de Husimi de cinq niveaux du modèle de Harper pulsé. $N = 25$, $\gamma = 0.5$. On y observe une forte dépendance des distributions avec $\vec{\theta}$, à l'exception du niveau régulier.*

12.3 Modèle de "Harper pulsé".

Le modèle de Harper pulsé est défini par le Hamiltonien dépendant du temps :

$$\mathcal{H}(q, p, t) = -\cos(2\pi\frac{p}{P}) - \cos(2\pi\frac{q}{Q})K(t) \quad (12.21)$$

La figure 12.3 montre les sections stroboscopiques (12.6) de quelques trajectoires, pour différentes valeurs de γ .

L'opérateur unitaire d'évolution quantique correspondant est (12.16) :

$$\hat{U} = e^{iN\gamma \cos(2\pi\frac{\hat{q}}{Q})} e^{iN\gamma \cos(2\pi\frac{\hat{p}}{P})} \quad (12.22)$$

noté : $\hat{U} = \hat{U}_{\hat{x}}\hat{U}_{\hat{y}}$. \hat{U} est caractérisé par son spectre d'états quasi-stationnaires et de quasi-énergies (12.19).

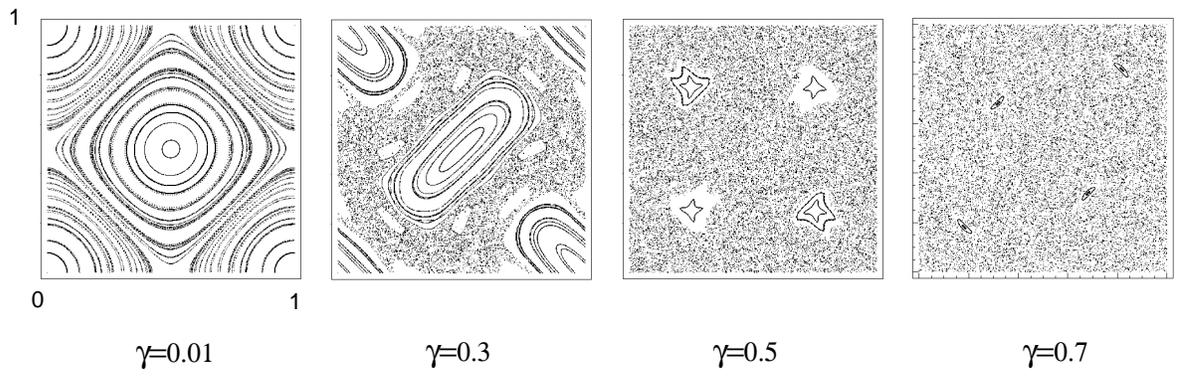


Figure 12.3: *Section stroboscopique classique du "Harper pulsé"*

a) Symétries du modèle.

Les symétries de ce modèle sont nombreuses et correspondent aux transformations :

1. La translation :

$$t = D\left(\frac{\omega_1}{2}\right)D\left(\frac{\omega_2}{2}\right) = T_{Q/2}T_{P/2} \quad (12.23)$$

Cet opérateur unitaire agit sur une fonction $f(\hat{q}, \hat{p})$ comme :

$$t^{-1}f(\hat{q}, \hat{p})t = f\left(\hat{q} + \frac{Q}{2}, \hat{p} + \frac{P}{2}\right)$$

On a $t^{-1}Ut = U^{-1}$. ce qui a pour effet de conjuguer les valeurs propres de \hat{U} et donc d'inverser le spectre de quasi-énergies par rapport à la quasi-énergie $\phi = 0$. De plus :

$$tP_{(\theta_1, \theta_2)} = P_{(\theta'_1, \theta'_2)}t \quad (12.24)$$

avec :

$$\begin{cases} \theta'_1 = \theta_1 - 2\pi\frac{N}{2} \\ \theta'_2 = \theta_2 + 2\pi\frac{N}{2} \end{cases} \quad (12.25)$$

donc l'opérateur t transforme le sous espace invariant $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ en $\mathcal{H}_N(\theta'_1, \theta'_2)$.

Si N est pair, $(\theta'_1, \theta'_2) \equiv (\theta_1, \theta_2) [2\pi]$, si bien que le spectre est auto-conjugué dans chaque sous espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$. Si N est impair, on déduit que \hat{U} a des spectres conjugués dans les sous espaces $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ et $\mathcal{H}_N(\theta_1 + \pi, \theta_2 + \pi)$. Dans les deux cas, on déduit que les bandes de quasi-énergie du modèle, et leur indice de Chern sont symétriques par rapport à la quasi-énergie $\phi = 0$.

2. La composée "inversion du temps et parité" :

$$S_q = PT$$

c'est un opérateur anti-unitaire qui agit sur une fonction $f(\hat{q}, \hat{p})$ comme :

$$S_q^{-1} f(\hat{q}, \hat{p}) S_q = f(-\hat{q}, \hat{p})$$

On a $S_q^{-1} \hat{U} S_q = \hat{U}$. Et : $S_q : \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2) \rightarrow \mathcal{H}_N(\theta_1, (2\pi - \theta_2))$.

Cette transformation conserve le spectre de \hat{U} .

3. Le renversement du temps :

$$S_p = T$$

c'est un opérateur anti-unitaire, qui agit sur une fonction $f(\hat{q}, \hat{p})$ comme :

$$S_p^{-1} f(\hat{q}, \hat{p}) S_p = f(\hat{q}, -\hat{p})$$

On a $S_p^{-1} \hat{U} S_p = \hat{U}$. Et : $S_p : \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2) \rightarrow \mathcal{H}_N(-\theta_1, \theta_2)$.

Cette transformation conserve le spectre de \hat{U} .

4. L'opération d'inversion :

$$S_I = \mathcal{I} \hat{U}_x^{-1}$$

où l'opérateur \mathcal{I} anti-unitaire, agit sur une $f(\hat{q}, \hat{p})$ comme :

$$\mathcal{I}^{-1} f(\hat{q}, \hat{p}) \mathcal{I} = f(\hat{q}, -\hat{p})$$

On a $S_I^{-1} \hat{U} S_I = \hat{U}$. Et : $S_I : \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2) \rightarrow \mathcal{H}_N(-\theta_1, -\theta_2)$.

Cette transformation conserve le spectre de \hat{U} . Mais sur l'espace de phase, cette symétrie n'est pas la réflexion ordinaire $(q, p) \rightarrow (p, q)$. La ligne invariante \mathcal{L} , est donnée par :

$$m \in \mathcal{L} \iff \mathcal{I} \hat{U}_x^{-1}(m) = m$$

Finalement, dans l'espace (θ_1, θ_2) , les symétries sont représentés par la figure 12.4.

Rappelons la remarque 3 du paragraphe 10.4 qui explique que si N est pair, il y a une dégénérescence entre les deux bandes centrales pour une certaine valeur de (θ_1, θ_2) .

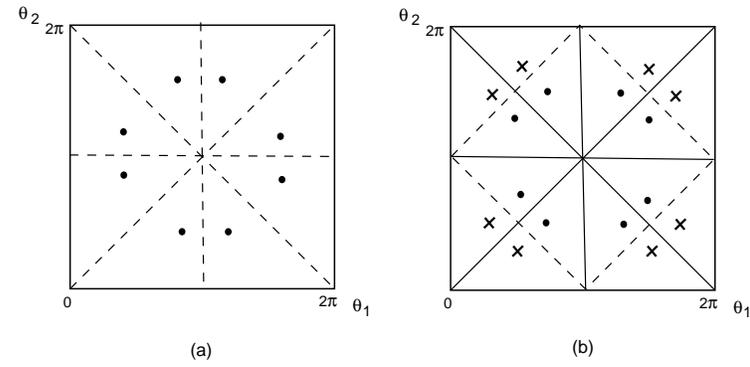


Figure 12.4: (a) : Si N est pair. Les spectres correspondant à l'emplacement d'un point sont identiques et auto-conjugués.

(b) : Si N est impair. La réflexion par rapport aux lignes en traits pleins conserve le spectre, et la réflexion par rapport aux lignes en traits pointillés conjugue le spectre. Ainsi les spectres correspondant aux emplacements d'un point et d'une croix sont conjugués.

b) Spectre et indices de Chern.

Nous avons calculé le spectre et les indices de Chern des bandes des états quasi-stationnaires pour $N = 11$ états et sur l'intervalle $\gamma \in [0; 1.16]$. Voir figure 12.5. Les indices de Chern ont été obtenus numériquement au moyen de la formule de Berry. Pour avoir l'indice de Chern avec une bonne certitude, il faut un pas d'intégration en (θ_1, θ_2) d'autant plus fin que γ augmente, et cela demande beaucoup de temps de calcul. Les résultats présentés ici sont fiables jusqu'à $\gamma = 0.8$, et au delà, la figure 12.5 rend plus compte de l'aspect qualitatif que de la position précise et systématique des dégénérescences. Lorsque les bandes se recouvrent, leur limite est toujours dessinée, mais l'indication de l'indice de Chern au moyen de couleurs est reportée de façon à ce que une bande cache la couleur de la bande voisine supérieure.

On note que la variation de l'indice de Chern lors d'une dégénérescence est souvent plus d'une unité. Ce comportement est non générique d'après l'analyse du paragraphe 10.5, et est dû aux nombreuses symétries du problème.

On peut distinguer principalement trois régimes différents en fonction de γ :

1. Premier régime, pour $\gamma \in [0, 0.16(\approx \frac{\pi}{2N})]$:

Avant le premier croisement entre les bandes de quasi-énergies, la dynamique classique est quasiment régulière, et les indices de Chern coïncident avec ceux du modèle de Harper non perturbé (figure 11.3, $D = 0$). Les bandes de quasi-énergie partent

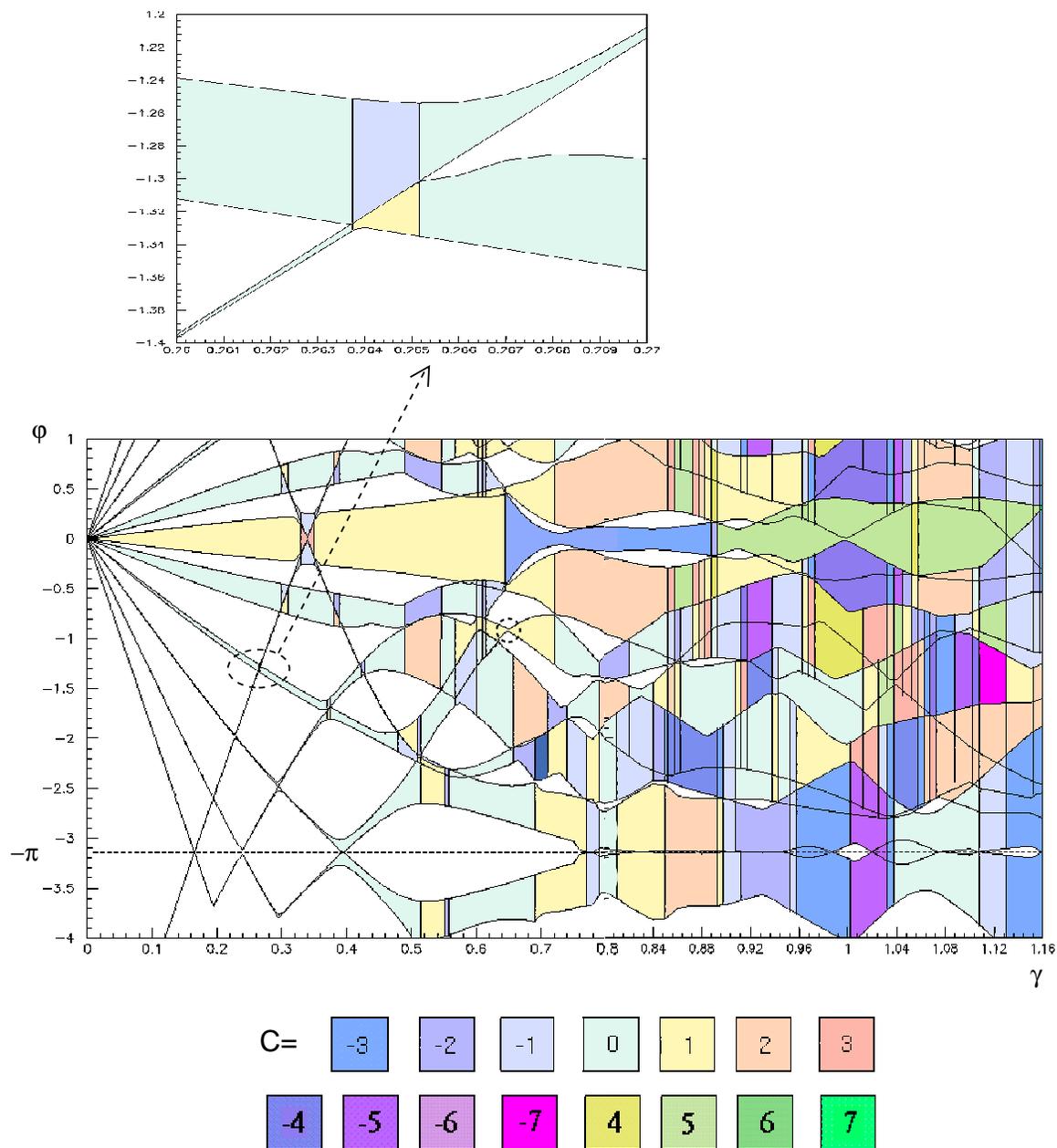


Figure 12.5: Bandes de quasi-énergies et leur indice de Chern pour le modèle de Harper pulsé (12.22) pour $N = 11$.

Le spectre de quasi-énergies est symétrique par rapport à $\phi = 0$. Lorsque les bandes se recouvrent, la couleur indiquée est celle de la bande d'énergie inférieure.

en "éventail" depuis $\phi = 0$. Cela s'explique simplement par le fait que l'argument du propagateur (12.22) est de la forme $\phi(\gamma) = N\gamma E_{classique}$.

2. Deuxième régime $\gamma \in [0.16, 0.4]$: région régulière.

A partir de $\gamma = 0.16 (\approx \frac{\pi}{2N})$, des croisements entre bandes d'énergies commencent à apparaître (prévisibles d'après l'expression (12.22), ou par une méthode semi-classique de quantification des quasi-énergies [76]). Dans cette région, la dynamique quantique est dominée par une dynamique classique régulière, et les bandes d'énergies quantifient des trajectoires stables de l'espace de phase. Les bandes extrêmes, les plus fines, quantifient le coeur des deux régions stables, et la bande centrale correspond à ce qui reste de la séparatrice.

Du fait que les quasi-énergies soient définies sur le cercle $] -\pi, \pi[$, les bandes se croisent, et c'est ainsi que la bande fine qui quantifie le point fixe stable $(q, p) = (0, 0)$ traverse pour la première fois toutes les bandes en les coupant, (à la montée sur la figure 12.5), suivi de la bande du premier niveau excité, etc.... Cela forme ainsi une structure en traillis, qui dans la limite $N \rightarrow \infty$, a tendance à devenir plus dense, et à se rapprocher de $\gamma = 0$.

Hors de ces croisements, l'indice de Chern est toujours nul. Et lors du croisement de deux bandes d'énergies, l'indice de Chern change, et deux dégénérescences se produisent de part et d'autre de ce croisement sur un intervalle de γ très faible (lié à la largeur des bandes). La présence de ces dégénérescences peut se comprendre comme un phénomène de résonance entre deux tores classiques invariants quantifiés, dont l'analyse a été faite au chapitre précédent.

Par exemple, le détail de la figure 12.5, présente une résonance entre la bande très fine Ψ_4 qui quantifie le point fixe stable $(q, p) = (0, 0)$ et la bande moins fine Ψ_3 qui quantifie le troisième niveau excité autour du point fixe stable $(q, p) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. La figure 12.6 montre la distribution de Husimi de l'état $\Psi_3(\theta_1, \theta_2)$ pour différentes valeurs de (θ_1, θ_2) . Cette distribution fluctue entre les deux tores invariants avec un indice de Chern $C = +1$, de la même façon que pour les deux puits symétriques par translation, figure 11.8.

La situation de ces deux tores invariants sur l'espace de phase est une situation symétrique, similaire à celle de la figure 11.16 (b), c'est à dire que la distance minimale entre eux-deux est atteinte deux fois. Cela explique la variation d'indice de Chern et les deux dégénérescences sur un intervalle de largeur très faible ($\Delta\gamma \sim$

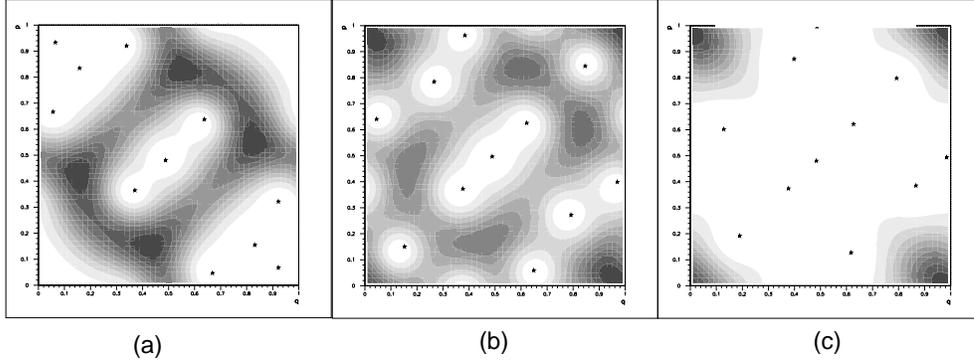


Figure 12.6: *Distribution de Husimi de l'état $\Psi_3(\theta_1, \theta_2)$ qui résonne entre deux tores quantifiés, pour $\gamma = 0.2645$ $N = 11$, et différentes valeurs de (θ_1, θ_2) :*

(a) : $(\theta_1, \theta_2) = (0, 0)$. *La distribution est sur un tore (3^{eme} niveau excité d'une famille).*

(b) : $(\theta_1, \theta_2) = (1, 1)$. *Superposition*

(c) : $(\theta_1, \theta_2) = (\pi, \pi)$. *La distribution est sur un tore (fondamental d'une famille).*

$\exp(-cN)$). Ces dégénérescences se produisent à chaque croisement, à l'exception des niveaux Ψ_1 et Ψ_{11} pour lesquels la symétrie et la conservation de la somme des indices de Chern lors d'une dégénérescence interdit une variation de ceux-ci. Notons aussi les variations non génériques $\Delta C = \pm 2$, lors des derniers croisements, (probablement dues à l'approche du régime chaotique).

En conclusion, lors des croisements, les dégénérescences peuvent s'interpréter comme le fait que le chemin du paramètre γ coupe une série de tubes de dégénérescences similaires à ceux de la figure 11.18.

3. Troisième régime, $\gamma > 0.4$.

La dynamique classique est dominée par le chaos. Il y a maintenant plusieurs dégénérescences entre les bandes, les indices de Chern sont pour la plupart non nuls, et la largeur des bandes a considérablement augmenté par rapport aux régimes précédents. Pour les dégénérescences, Il n'y a visiblement plus les restrictions propres aux régimes réguliers.

Notons la présence de bandes étroites et d'indice de Chern non nul (comme la bande Ψ_4 pour $\gamma = 0.66$) qui témoigne d'une distribution de Husimi qui fluctue entre des configurations de même quasi-énergie. La figure 12.7 montre les distributions de Husimi de la bande Ψ_4 pour $\gamma = 0.66$ qui a un indice de Chern $C = 1$. La distribution fluctue entre la région régulière (en $\vec{\theta} = (0, 0)$) et le point fixe instable (en $\vec{\theta} = (\pi, \pi)$). La figure 12.8 montre que pour toutes les valeurs de $\vec{\theta}$, la distribution

de Husimi est répartie principalement sur ces deux trajectoires (comme un effet de résonance). Nous avons observé numériquement que pour $\gamma = 0.66$, chaque bande du spectre peut de la sorte s'interpréter comme une superposition de quelques trajectoires stables ou instables.

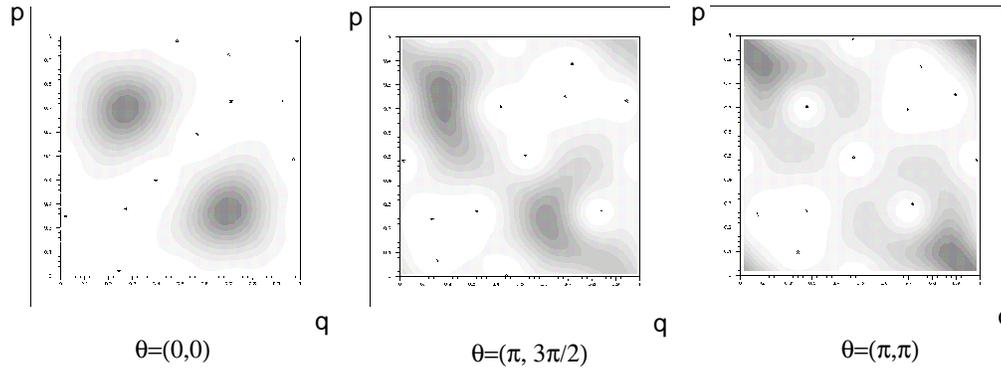


Figure 12.7: *Distribution de Husimi de la bande Ψ_4 , $\gamma = 0.66$. $N = 11$ d'indice de Chern $C = 1$. (la bande Ψ_4 est indiquée par un cercle sur la figure (12.5)). On observe que la distribution fluctue entre le point fixe instable $(q, p) = (0, 0)$ et la trajectoire périodique stable $(q, p) = (0.7, 0.25)$. Pour $(\theta_1, \theta_2) = (\pi, 3\pi/2)$ la distribution est une superposition des deux autres distributions.*

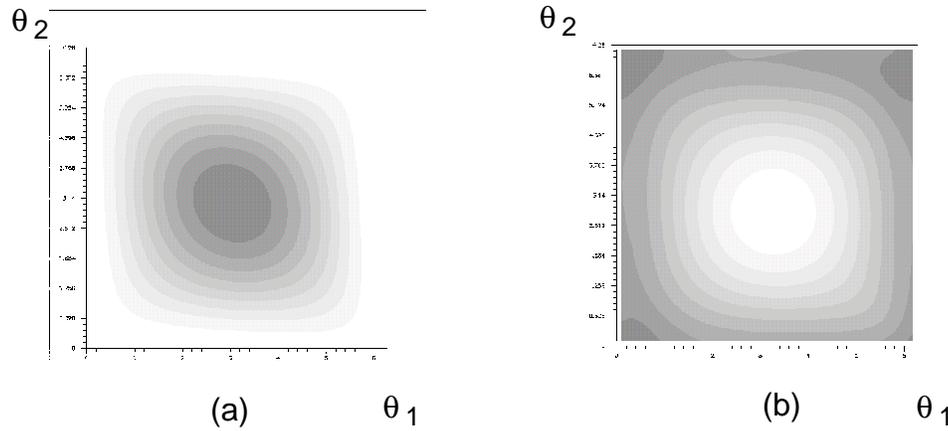


Figure 12.8: *Pour $\gamma = 0.66$. Intensité de la distribution de Husimi de la bande Ψ_4 sur :*
 (a) *le point fixe instable $(q, p) = (0, 0)$.*
 (b) *la trajectoire périodique stable $(q, p) = (0.7, 0.25)$*
Ces deux images sont complémentaires. On déduit que l'état Ψ_4 est essentiellement une superposition de ces deux structures.

Notons aussi la présence de bandes larges ayant un indice de Chern nul ce qui témoigne de la fluctuation de la distribution de Husimi, mais d'une fluctuation

”contractible”(en terme des zéros). La figure 12.9 montre par exemple les distributions de Husimi de la bande Ψ_3 pour $\gamma = 0.88$ qui a un indice de Chern $C = 0$. Il apparaît tout de même que la distribution fluctue avec $\vec{\theta}$.

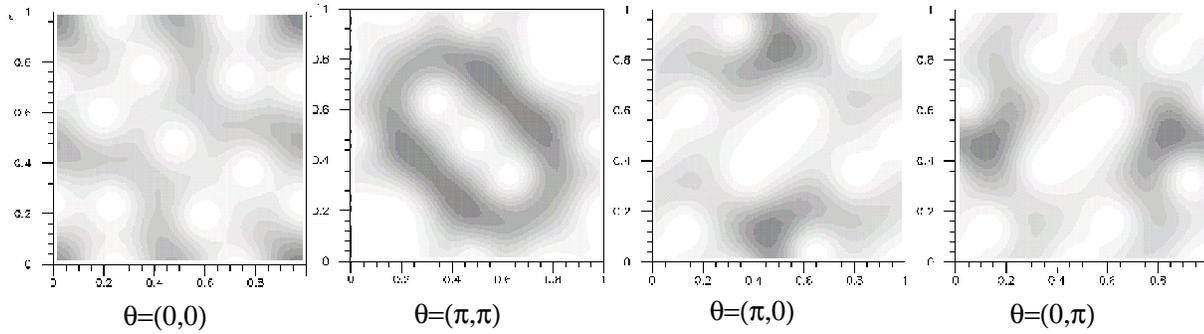


Figure 12.9: *Distribution de Husimi de la bande Ψ_3 pour $\gamma = 0.88$, ayant un indice de Chern $C = 0$. La distribution fluctue néanmoins avec $\vec{\theta}$.*

Pour une ”cicatrice” localisée sur une trajectoire contractible pour toute valeur de $\vec{\theta}$, la bande de quasi-énergie serait étroite et d’indice de Chern nul. On n’observe rien de tel. Mais si le phénomène de cicatrice ne se produit que pour des valeurs particulières de (θ_1, θ_2) , cela n’apparaît pas sur la figure 12.5. Par exemple, la distribution de Husimi de la figure 12.7 peut s’interpréter comme une cicatrice localisée sur la trajectoire instable $(q, p) = (0, 0)$ pour $\vec{\theta} = (0, 0)$ seulement.

Il est clair que les nombreuses dégénérescences ne peuvent avoir lieu que parce que les bandes sont assez larges et se recouvrent même. Il reste à savoir donc si la largeur des bandes est liée à la présence de trajectoires non contractibles. Dans un modèle où la région chaotique serait encerclée par des tores invariants contractibles, il n’y aurait sans doute pas une forte sensibilité du spectre avec (θ_1, θ_2) , ni la présence de toutes ces dégénérescences.

c) Variations non génériques de l’indice de Chern.

Il apparaît sur la figure 12.5 que beaucoup de variations de l’indice de Chern sont autre que $\Delta C = \pm 1$. Cela est dû aux symétries particulières du modèle. Par exemple pour $\gamma = 0.65$, pour la bande Ψ_2 , la variation d’indice est $\Delta C = -2$. La dégénérescence est unique et se situe en $(\theta_1, \theta_2) = (\pi, \pi)$. Il s’agit donc d’une dégénérescence non générique ($\Delta C = -2$). La figure 12.10 montre de plus que le contact entre les bandes est parabolique. Ce contact peut s’interpréter comme le résultat de deux dégénérescences génériques qui

se rencontrent.

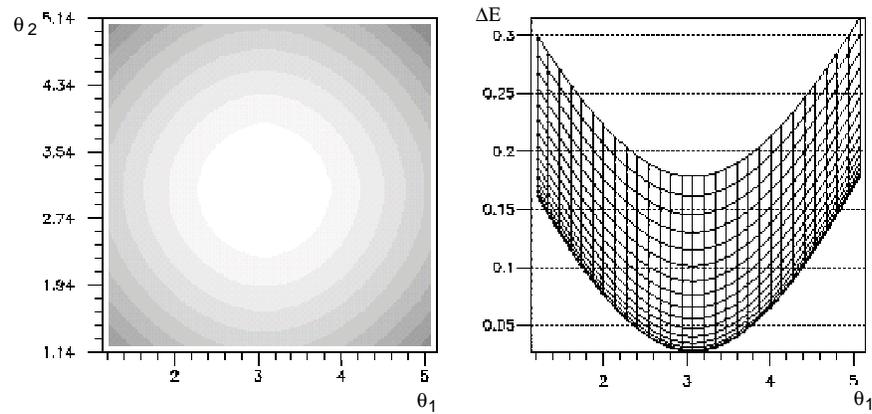


Figure 12.10: *Ecart d'énergie ΔE entre les bandes Ψ_2 et Ψ_3 pour $\gamma = 0.65$. Le contact est parabolique en $(\theta_1, \theta_2) = (\pi, \pi)$. La fonction $\Delta E(\theta_1, \theta_2)$ est représentée en niveaux de gris, puis de côté.*

Mais ce n'est pas toujours le cas. Par exemple pour $\gamma = 0.71$, la variation d'indice de la bande Ψ_2 est $\Delta C = +4$. Mais il s'agit de quatre dégénérescences génériques (points diaboliques) situés en quatre points du tore (θ_1, θ_2) , avec un contact conique. Voir la figure 12.11.

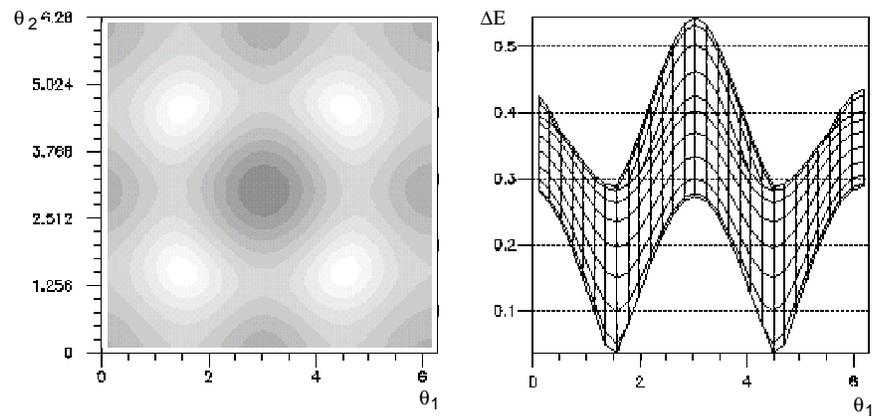


Figure 12.11: *Ecart d'énergie ΔE entre les bandes Ψ_2 et Ψ_3 pour $\gamma = 0.71$. Il y a quatre contacts coniques (génériques).*

12.4 Un modele sans symetrie.

Le Hamiltonien suivant est légèrement différent de celui du Harper pulsé, et a l'avantage de ne pas posséder les nombreuses symétries de celui ci. Nous verrons les différences que cela implique au niveau du spectre et des indices de Chern.

$$\mathcal{H}(q, p, t) = -\cos(2\pi q) - \frac{1}{4}\cos(4\pi q + \frac{\pi}{4}) - [\cos(2\pi p) + \frac{1}{2}\cos(4\pi p + \frac{\pi}{2})]K(t) \quad (12.26)$$

La figure 12.12 montre l'allure des sections stroboscopiques (12.6) pour différentes valeurs de γ . On y observe à nouveau une transition progressive du régime régulier vers un régime chaotique.

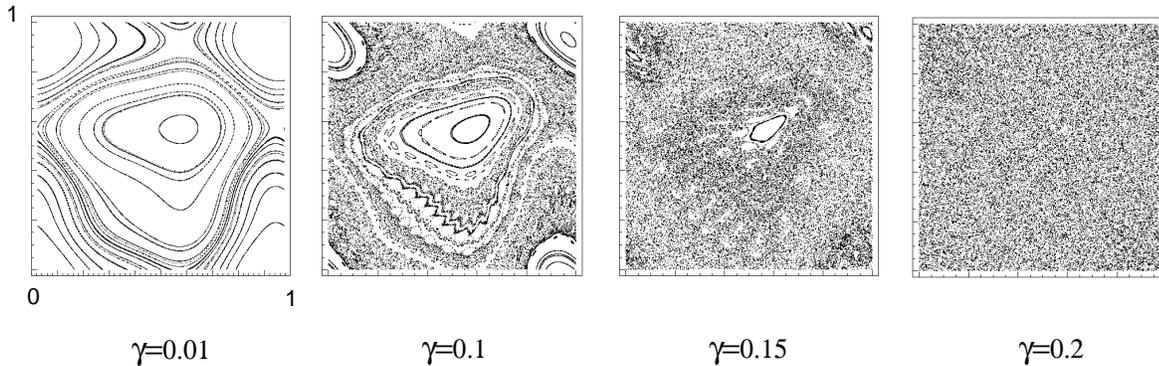


Figure 12.12: *Sections stroboscopiques des trajectoires classiques de l'Hamiltonien sans symétrie (12.26).*

La figure 12.13 montre les bandes de quasi-énergie et leur indice de Chern, pour $N = 11$, et sur l'intervalle $\gamma \in [0, 1.04]$. L'ergodicité classique apparaît pour des faibles valeurs de γ , et dans cet essai numérique, lorsque les premiers croisements ont lieu, la dynamique classique est déjà dominée par le chaos. Le paramètre de limite classique N n'est en fait pas assez élevé pour observer clairement le régime régulier associé à une dynamique classique quasi-intégrable. Néanmoins on observe :

1. Un régime régulier $\gamma < 0.4$, pour lequel il y a répulsion cette fois-ci entre les bandes de quasi-énergie quantifiant des tores invariants, sans apparition de dégénérescence ni variation de l'indice de Chern (sauf quelques cas limites).

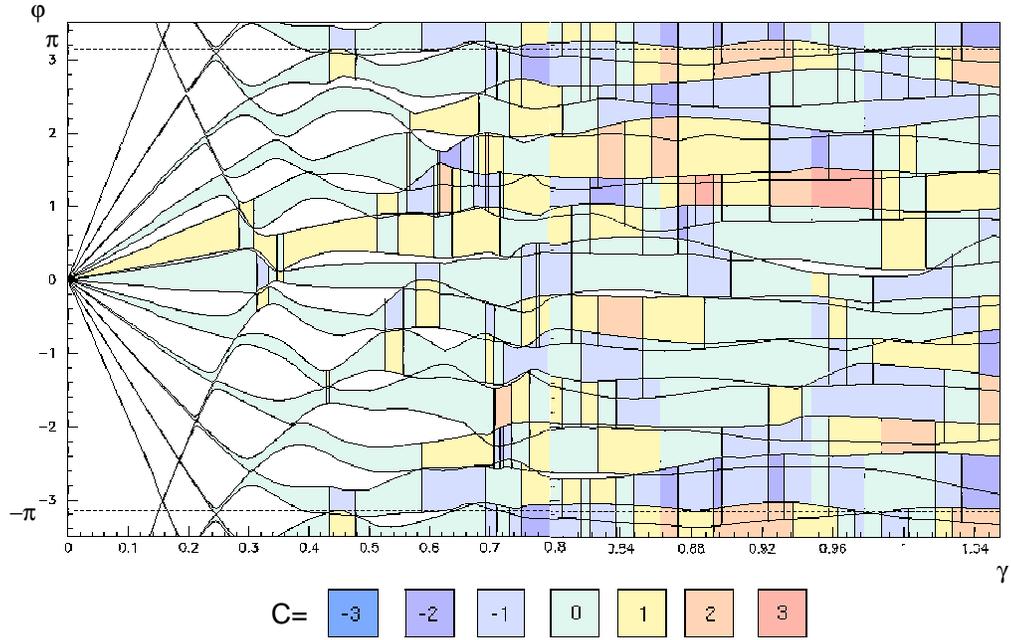


Figure 12.13: Bandes de quasi-énergies et indices de Chern du modèle sans symétrie (12.26) pour $N = 11$.

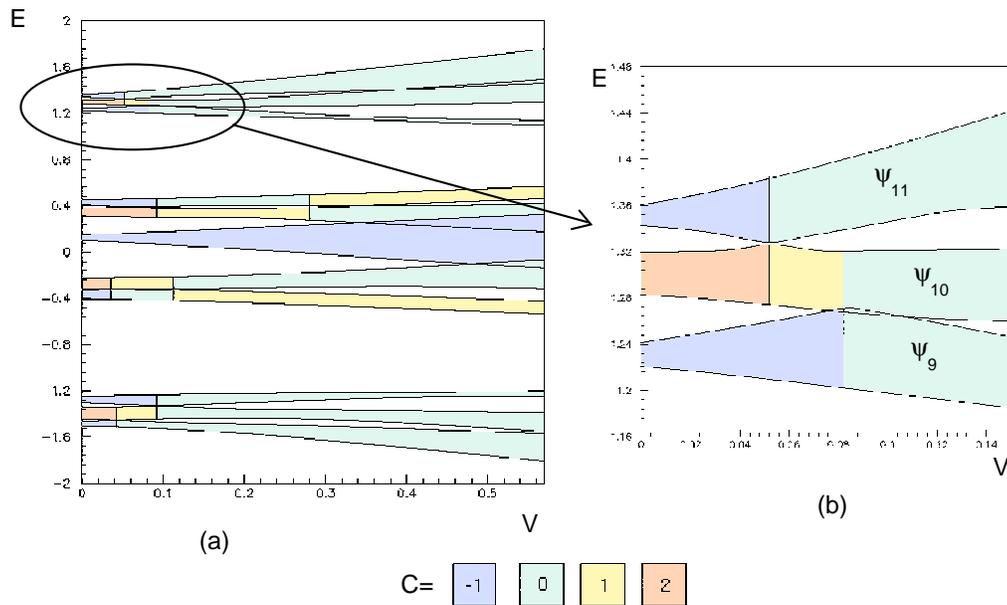


Figure 12.14: Bandes d'énergies et leur indice de Chern pour le spectre de l'Hamiltonien (11.23) (du chapitre précédent), pour $N = 11$.

(a) : Le spectre total. (b) : Détail du spectre pour les bandes $\Psi_9, \Psi_{10}, \Psi_{11}$, près de $V = 0$, montrant deux dégénérecences (lignes verticale).

Toujours à la lueur des résultats du chapitre précédent, cela s'explique par le fait que les résonances se produisent entre des tores quantifiés qui ne sont pas placés de façon symétrique dans l'espace de phase et entre lesquels il y a une unique "distance" minimale, comme schématisé sur la figure 11.16(a).

Les bandes dans cette région ne sont pas très fines, cela est dû au fait que la dynamique classique est déjà assez ergodique pour ces valeurs de γ .

Afin d'avoir une meilleure correspondance entre l'aspect du spectre et l'aspect des sections stroboscopiques, il faudrait avoir des résultats numériques dans une limite plus classique, i.e. N plus grand.

2. Dans le régime chaotique $\gamma \geq 0.4$, les bandes deviennent plus larges, mais cette fois-ci les variations de l'indice de Chern sont ± 1 , comme pour le cas générique. On observe de plus une faible dispersion de la valeur de l'indice de Chern autour de la valeur $C = 0$, et l'indice de Chern est même nul très fréquemment.

12.5 Présence de dégénérescences dans le cas chaotique.

Dans ce paragraphe, nous allons poursuivre la description des lignes de dégénérescences entreprise autour de la figure 10.13. Pour une famille de Hamiltoniens dépendant de deux paramètres $H(\gamma_1, \gamma_2)$, et pour une dynamique intégrable, il est apparu que lorsque la couche d'énergie est composée de trajectoires contractibles, les lignes de dégénérescence forment des petites boucles à l'extérieur desquelles l'indice de Chern est nul. Voir la figure 11.17.

Cette description nous permet d'interpréter les résonances avec dégénérescence dans le régime régulier du modèle de Harper pulsé symétrique comme une intersection de ces boucles. Elle nous permet aussi d'interpréter les résonances sans dégénérescence dans le régime régulier du modèle sans symétrie comme un passage "à côté" de ces boucles, sans les intercepter.

Lorsque le régime devient plus chaotique, les figures 12.5 et 12.13 ont tendance à montrer que ces boucles de dégénérescence deviennent plus larges jusqu'à finalement déborder les unes sur les autres et cesser d'être un phénomène exponentiellement localisé. Ainsi les premières dégénérescences du modèle sans symétrie peuvent s'interpréter comme une intersection du chemin $H(\gamma)$ avec le bord de ces boucles qui deviennent plus larges.

Dans le régime chaotique, la multitude des dégénérescences témoigne de multiples in-

tersections du chemin $H(\gamma)$ avec des lignes de dégénérescences. Cela porte à penser que contrairement au régime intégrable, les lignes de dégénérescence sont cette fois-ci dans une configuration "ouverte", ne formant pas de boucles, et sont dispersées comme aléatoirement sur un plan à deux paramètres (γ_1, γ_2) .

Cela signifie que lorsque la dynamique classique passe d'un régime régulier à un régime chaotique, ces lignes de dégénérescences subissent une "*transition de phase*", en passant d'une configuration régulière, en boucles très petites et alignées, à une configuration de lignes ouvertes pouvant se couper. Il s'agit d'une transition analogue à celle observée par A. Voros et P. Leboeuf sur les zéros de distributions de Husimi, ou celle observée dans la statistique des niveaux [1].

Afin de représenter quelques-unes de ces lignes, nous avons considéré l'Hamiltonien à deux paramètres V_1, V_2 suivant :

$$H(q, p, t) = -\cos(2\pi q) - V_1 \cos(4\pi q + \frac{\pi}{4}) - [\cos(2\pi p) + V_2 \cos(4\pi p + \frac{\pi}{4})]K(t) \quad (12.27)$$

Nous avons calculé l'indice de Chern des différentes bandes pour $N = 11$ niveaux et $\gamma = 0.51$, en discrétisant le domaine $(V_1, V_2) \in [0, 0.4]^2$.

Les lignes de dégénérescences entre deux niveaux apparaissent comme étant la frontière entre deux domaines d'indices différents.

La figure 12.15 montre le résultat pour la bande Ψ_1 , qui met en évidence deux lignes de dégénérescences génériques ($\Delta C = \pm 1$) se coupant, et pour les bandes Ψ_7 et Ψ_8 montrant des lignes de dégénérescences communes et d'autres qui sont en commun avec les bandes Ψ_6 et Ψ_9 . Certains détails échappent à la discrétisation. On observe des croisements entre les différentes lignes, comme schématisé et discuté à la figure 10.13.

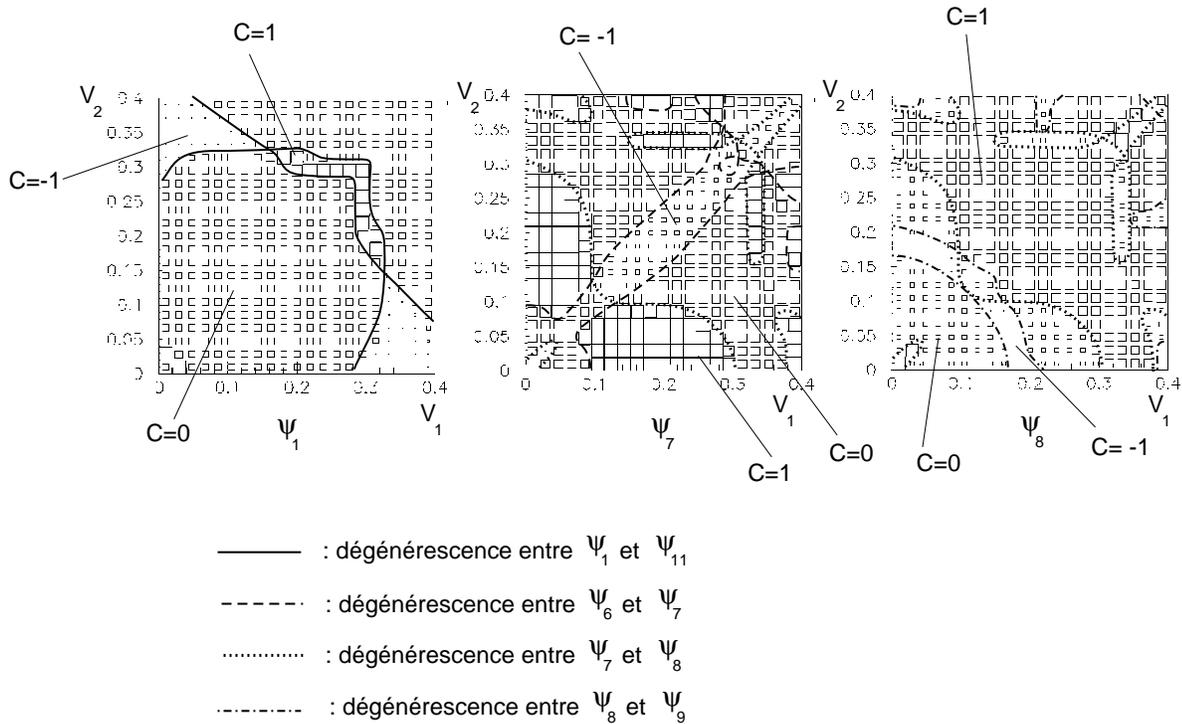


Figure 12.15: Indices de Chern de l'Hamiltonien $H(V_1, V_2)$ (12.27) pour les trois bandes Ψ_1 , Ψ_7 et Ψ_8 . Les lignes de dégénérescences entre les bandes correspondent aux frontières des domaines. La taille des carrés correspond à la valeur de l'indice de Chern calculée numériquement.

Chapitre 13

Conclusion et perspectives ...

La première partie de cette thèse était consacrée à une présentation géométrique de la limite semi-classique dans l'espace projectif.

Essentiellement, nous avons montré que la projection orthogonale sur la surface des états cohérents du champ de vecteur vitesse quantique définit une dynamique Hamiltonienne. Cette approximation est équivalente au principe variationnel dépendant du temps. Dans cette présentation géométrique, nous avons montré qu'une trajectoire quantique sort de la surface des états cohérents avec un angle de l'ordre $\sqrt{\hbar}$, si bien que cette trajectoire devient tangente à la surface, dans la limite classique $\hbar \rightarrow 0$.

Si on élargit la famille des états cohérents aux états cohérents déformés, nous avons montré que l'angle diminue et devient de l'ordre de \hbar . La description de l'évolution quantique devient donc meilleure. Cette amélioration peut se poursuivre en considérant une famille plus élargie d'états, en généralisant l'expression (A.41) de la façon suivante :

$$|r, R, f \rangle = e^{\frac{R}{2}a^{+2} + ra^{+}}(1 + fa^{+3})|0 \rangle$$

$R \in \mathbb{C}$ décrit les fluctuations elliptiques du paquets d'onde, et $f \in \mathbb{C}$ décrit des fluctuations d'ordre 3. (remarque: il n'est pas possible de mettre l'opérateur $e^{fa^{+3}}$ car l'algèbre engendrée par a^3, a^{+3} est de rang infini. Seul le premier terme de son développement a été mis.). Nous avons montré que la trajectoire quantique sort de cette famille avec un angle de l'ordre de $\hbar^{3/2}$, si $f = 0$. (Les calculs n'ont pas été présentés dans la thèse).

Le développement doit pouvoir se poursuivre ainsi pour décrire précisément l'évolution d'un état cohérent sur un temps fini, dans la limite classique $\hbar \rightarrow 0$. Cette description ne fait intervenir qu'une trajectoire classique ainsi que de l'information sur le comportement en son voisinage.

Pour des temps plus longs, le paquet d'onde s'étale. Il peut remplir l'espace de phase,

et des auto-interférences peuvent se produire pour un temps d'évolution de l'ordre de $t \sim -\ln(\hbar)$. Notre description qui est "locale" est alors inefficace.

Une description semi-classique par la formule de Van-Vleck [1] (obtenue en effectuant l'approximation de la phase stationnaire dans l'intégrale de chemin) est alors plus appropriée. Elle met en oeuvre plusieurs trajectoires classiques. Une généralisation de cette formule dans l'espace de phase complexifié, pour les états cohérents, a été donnée par J.R. Klauder [83] et Y. Weissman [84]. S. Adachi a effectué des études numériques approfondies, en étudiant le temps d'apparition des caustiques [30].

Par rapport à l'approximation par des états cohérents (standard ou déformés), cette dernière description a l'avantage d'être valable sur une échelle de temps plus longue. Par contre, l'approximation obtenue nécessite plusieurs trajectoires (ce qui est incontournable) et surtout l'approximation ne fait pas partie d'une famille d'états connus, paramétrés (comme les états cohérents par exemple).

Il faut noter que la validité de la formule de Van-Vleck sur des temps d'évolution de l'ordre de $t \sim -\ln(\hbar)$ est fortement suggérée par les essais numériques, mais reste actuellement une conjecture [47].

Sur des temps plus longs encore ($t \sim e^{-\frac{t}{\hbar}}$) peut se produire de l'effet tunnel.

L'approche géométrique décrite au chapitre un a été développée avec les états cohérents du plan, mais nous avons aussi fait les calculs de l'angle avec les états cohérents de spin. Ces états interviennent par exemple dans le modèle de Lipkin [85, 86] qui décrit un système de N fermions en interaction. L'angle trouvé est de l'ordre de $\alpha \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$, ce qui valide l'approximation classique pour $N \rightarrow \infty$.

Le calcul de l'angle pourrait également se faire dans d'autres modèles où une approximation de la dynamique quantique à l'aide de fonctions d'essais est utilisée (comme l'approximation de Hartree-Fock-Bogolubov, ou pour des problèmes de spin bosons couplés ...). Comme nous l'avons vu, cet angle donne des informations sur la précision de l'approximation.

Le deuxième chapitre était consacré plus précisément à l'étude de la mécanique quantique sur le tore en tant qu'espace de phase, toujours dans la limite semi-classique. Nous avons tout d'abord rappelé l'intérêt de cette étude en physique du solide, concernant des électrons en champ magnétique et dans un potentiel périodique. Les modèles envisagés sont similaires à celui de Harper.

Les états cohérents du tore qui ont un rôle privilégié dans la limite semi-classique et les résultats de P. Leboeuf et A. Voros sur la distribution de Husimi ont été présentés.

L'intérêt a été porté sur l'indice de Chern qui caractérise la topologie d'une bande d'énergie, et sur la présence de dégénérescences, en essayant de faire ressortir des correspondances entre la valeur de cet indice et la dynamique classique.

Dans le cas d'une dynamique intégrable, nous avons décrit les "configurations en boucles" que peuvent prendre les dégénérescences liées à l'effet tunnel entre deux puits.

Ces résultats pourraient s'inscrire dans une description qualitative complète des dégénérescences génériques pour une famille arbitraire à deux paramètres d'Hamiltoniens $H(\gamma_1, \gamma_2)$. Pour cela il faudrait rajouter l'étude des trajectoires non contractibles dont certains aspects ont été présentés.

Pour une famille d'Hamiltoniens à plusieurs paramètres, $H(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \dots)$, des dégénérescences liées à des phénomènes d'effet tunnel entre plusieurs puits deviennent génériques. Nous avons étudié numériquement cet effet pour trois puits.

Enfin, la valeur des indices de Chern et l'aspect des lignes de dégénérescence dans le cas chaotique ont été considérés. Nous avons essentiellement observé une augmentation et une uniformisation des dégénérescences entre les bandes, accompagnant la transition de la dynamique classique d'un régime régulier vers un régime chaotique. De façon qualitative, les boucles formées par les dégénérescences dans le cas régulier s'élargissent et s'ouvrent, pour finalement former des courbes disposées uniformément et qui se coupent, lorsque le régime est chaotique.

Il y a ainsi un lien évident entre la nature de la dynamique et les dégénérescences, ce qui permet d'envisager des expressions semi-classiques pour l'indice de Chern [87].

Pour la description des électrons en champ magnétique, l'indice de Chern représente la conductivité d'une bande. Récemment, G. Petschl et T. Geisel [13], ont discuté la possibilité expérimentale d'observer les finesses du spectre du modèle de Harper dans des réseaux semi-conducteurs. Il est envisageable que la conductivité (proportionnelle à l'indice de Chern) "induite" par la nature de la dynamique classique ait ainsi des conséquences observables.

D'un autre point de vue, discuté au paragraphe 7.2, la mécanique quantique sur le tore a la particularité de ne pas être invariante par translation, alors que la limite classique est invariante. A un Hamiltonien classique est associé une famille d'opérateurs quantiques. De cette propriété découle la structure en bande du spectre, l'introduction des indices de Chern et l'étude des dégénérescences.

Des études analogues pourraient être généralisées pour d'autres géométries, en considérant une famille d'Hamiltoniens quantiques ayant des dynamiques classiques équivalentes à une transformation canonique près. (L'invariance par transformation canonique ne se retrouve

en général pas au niveau quantique).

Appendice A

Définitions et quelques propriétés des états cohérents déformés.

(Voir le paragraphe 3, page 37)

A.1 Propriétés algébriques.

a) Transformation de Bogolubov

Il y a un certain arbitraire dans la définition (2.11) de la famille des états cohérents standard. cette famille est en effet liée au choix de la base $(a, a^+, 1)$ (2.4) de l'algèbre de Lie \mathcal{W}_1 . Si $(\tilde{a}, \tilde{a}^+, \tilde{1})$ est une autre base obtenue par transformation linéaire, et vérifiant les relations de commutation canoniques :

$$[\tilde{a}, \tilde{a}^+] = \tilde{1} \quad [\tilde{a}, \tilde{1}] = [\tilde{a}^+, \tilde{1}] = 0 \quad (\text{A.1})$$

ainsi que la condition "d'unitarité" :

$$\tilde{a}^+ = (\tilde{a})^+, \quad (\tilde{1})^+ = \tilde{1} \quad (\text{A.2})$$

alors on peut définir des états cohérents standard $|\tilde{z}\rangle_n$ comme en (2.9), associés à cette nouvelle base $(\tilde{a}, \tilde{a}^+, \tilde{1})$, par :

$$\begin{cases} \tilde{a}|\tilde{0}\rangle = 0 \\ |z\rangle_n = \tilde{D}(\tilde{z})|\tilde{0}\rangle \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

avec :

$$\tilde{D}(\tilde{z}) = \exp(\tilde{z}\tilde{a}^+ - \tilde{z}\tilde{a}) \quad (\text{A.4})$$

opérateur unitaire, et $\tilde{z} \in \mathbb{C}$.

La définition que l'on convient de prendre pour les états cohérents déformés est : les états cohérents déformés sont les états cohérents $|\widetilde{z}\rangle_n$, $\tilde{z} \in \mathbb{C}$ construits avec les divers choix de bases $(\tilde{a}, \tilde{a}^+, \tilde{1})$, [26, 2]. Les conditions (A.1, A.2), imposent que $(\tilde{a}, \tilde{a}^+, \tilde{1})$ soient de la forme :

$$\begin{pmatrix} \tilde{a} \\ \tilde{a}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V \\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c \\ \bar{c} \end{pmatrix}$$

$$\tilde{1} = e1$$

$$U\bar{U} - V\bar{V} = e$$

fixer $e = 1$ ne réduit pas l'ensemble des états obtenus, et de même prendre $c = 0$, ne réduit pas cet ensemble, grâce au paramètre \tilde{z} de translation qui joue un rôle analogue, d'après (2.17).

On s'intéresse donc aux transformations dites de Bogolubov, canoniques unitaires [2] :

$$\begin{pmatrix} \tilde{a} \\ \tilde{a}^+ \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

avec :

$$M = \begin{pmatrix} U & V \\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix}, \quad U, V \in \mathbb{C}$$

$$U\bar{U} - V\bar{V} = 1 \Leftrightarrow \bar{M}^t K M = K \text{ avec } K = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

en introduisant les opérateurs (q, p) et (\tilde{q}, \tilde{p}) par (2.2), on obtient une représentation réelle :

$$\begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \text{ avec } W = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix}, \quad W^{-1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

et la transformation de Bogolubov devient :

$$\begin{pmatrix} \tilde{q} \\ \tilde{p} \end{pmatrix} = M_R \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

avec :

$$M_R = W^{-1} M W = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} A = \operatorname{Re}(U) + \operatorname{Re}(V) \\ B = -\operatorname{Im}(U) + \operatorname{Im}(V) \\ C = \operatorname{Im}(U) + \operatorname{Im}(V) \\ D = \operatorname{Re}(U) - \operatorname{Re}(V) \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

M_R est une matrice réelle, et d'après (A.6) :

$$M_R J M_R^t = J \text{ avec } J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

Donc $M_R \in Sp(2, \mathbb{R})$, le groupe des matrices symplectiques réelles 2×2 . (A.8) définit une transformation symplectique dans le plan. De même, M appartient à un groupe G isomorphe au groupe $Sp(2, \mathbb{R})$, et dans le plan complexe, la transformation symplectique est donnée par :

$$\tilde{z} = Uz + V\bar{z} \quad (\text{A.11})$$

si bien que :

$$\widetilde{D}(\tilde{z}) = \exp(\tilde{z}\tilde{a}^+ - \bar{\tilde{z}}a) = \exp(za^+ - \bar{z}a) = D(z) \quad (\text{A.12})$$

Pour N degrés de libertés, les résultats sont analogues, ils se trouvent par exemple dans [26, 2]. Il apparait le groupe $Sp(N, \mathbb{R})$, non compact, et homéomorphe à l'espace $\mathbb{R}^{N(N+1)} \times SU(N) \times U(1)$, qui est non simplement connexe (à cause de $U(1)$). Le groupe symplectique est aussi traité dans [21, 6]. Remarquons que à une dimension, comme ici, on pourrait aussi bien identifier le groupe G à $SL(2, \mathbb{R})$ ou à $SU(1, 1)$ qui sont isomorphes.

b) Etude du groupe symplectique.

Ce groupe est homéomorphe à $\mathbb{R}^2 \times U(1)$. Nous allons étudier la transformation linéaire symplectique (A.8), ou bien en notation complexe :

$$z \in \mathbb{C} \mapsto \tilde{z} = Uz + V\bar{z} \in \mathbb{C} \quad (\text{A.13})$$

avec $U, V \in \mathbb{C}$, $U\bar{U} - V\bar{V} = 1$. Cette transformation est caractérisée par la matrice M (A.6), ou M_R (A.8).

Voici trois exemples de telles transformations :

1. Rotation d'angle θ : R_θ : $\tilde{z} = \exp(i\theta)z$, donc :

$$M_{R_\theta} = \begin{pmatrix} e^{i\theta} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

$$U = e^{i\theta}, \quad V = 0$$

2. Dilatation S_λ^Ψ de $\lambda \geq 1$ dans la direction Ψ , $0 \leq \Psi < \pi$:

$$S_\lambda^\Psi = R_\Psi S_\lambda R_{-\Psi}$$

avec $S_\lambda : \tilde{q} = \lambda q, \tilde{p} = \frac{1}{\lambda} p$.

Il est commode pour la suite de caractériser le couple (λ, Ψ) par le nombre complexe

:

$$R = \frac{\lambda^2 - 1}{\lambda^2 + 1} e^{2i\Psi} \quad (\text{A.15})$$

$R \in D_1 = \{R \in \mathbb{C} \text{ t.q. } |R| < 1\}$ appelé disque unité de Siegel. Le nombre R caractérise la transformation S_λ^Ψ .

Inversement :

$$\Psi = \frac{1}{2} \arg(R) \quad \lambda = \left(\frac{1 + |R|}{1 - |R|} \right)^{1/2} \quad (\text{A.16})$$

On pose aussi $\Upsilon = 1 - R\bar{R} \in]0; 1]$. Nous garderons ces notations tout au long de l'appendice.

Alors :

$$U = \frac{\lambda^2 + 1}{2\lambda} = \frac{1}{\sqrt{\Upsilon}} \quad V = e^{2i\Psi} \left(\frac{\lambda^2 - 1}{2\lambda} \right) = \frac{R}{\sqrt{\Upsilon}} \quad (\text{A.17})$$

Remarque : $(S_\lambda^\Psi)^{-1} = S_{\lambda^{-1}}^\Psi$.

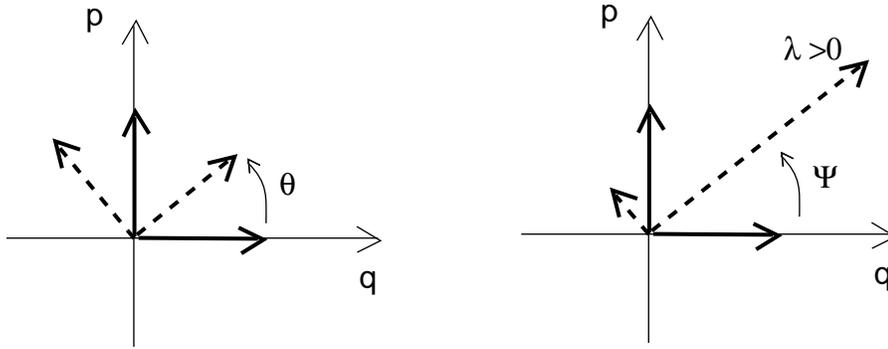


Figure A.1: Rotation R_θ et dilatation S_λ^Ψ qui sont les opérations de base du groupe symplectique $Sp(2, \mathbb{R})$.

La dilatation est caractérisée par $R = \frac{\lambda^2 - 1}{\lambda^2 + 1} e^{2i\Psi} \in D_1$.

3. Une matrice symplectique quelconque $M \in G$, peut se décomposer sous les formes

:

$$M = R_\theta S_{\lambda^{-1}}^\Psi = S_{\lambda^{-1}}^{\Psi+\theta} R_\theta \quad (\text{A.18})$$

Et alors :

$$U = \frac{1}{\sqrt{\Upsilon}} e^{i\theta} \quad V = \frac{R}{\sqrt{\Upsilon}} e^{i(\theta+\pi)} \quad (\text{A.19})$$

et :

$$R = -\frac{V}{U} \quad (\text{A.20})$$

La matrice inverse est :

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} \bar{U} & -V \\ -\bar{V} & U \end{pmatrix} = S_\lambda^\Psi R_{-\theta} \quad (\text{A.21})$$

Le couple $(R, \theta) \in (D_1 \times U(1))$ constitue une paramétrisation des matrices symplectiques $M \in G$. (Alors que le couple (U, V) est contraint à la condition (A.6)).

c) Sous groupe maximal K et action de G sur G/K .

Les matrices M_{R_θ} forment un sous groupe de G , noté K . (En général $U(N)$ est un sous groupe maximal non invariant de $Sp(2N, \mathbb{R})$, [26]). L'espace quotient G/K obtenu en identifiant deux matrices $R_\theta S$ et $R_{\theta'} S$, est un espace symétrique de type non compact ($\cong \mathbb{R}^2$).

D'après la décomposition (A.18), G/K est paramétrisé par les matrices S_λ^Ψ , soit par le couple $(\Psi, \lambda) \equiv R \in D_1$.

Afin d'avoir une interprétation graphique de cet espace quotient, on part des vecteurs de base (e_q, e_p) du plan \mathbb{R}^2 , sur lesquels on fait agir la matrice $M^{-1} = S_\lambda^\Psi R_{-\theta}$, pour obtenir leur image $(v_1, v_2) = M^{-1}(e_q, e_p)$. lorsque les matrices de rotation $R_{-\theta}$, $\theta \in [0, 2\pi]$ agissent seules, les extrémités des vecteurs (v_1, v_2) décrivent le cercle de rayon un. Si maintenant les matrices $M^{-1} = S_\lambda^\Psi R_{-\theta}$, $\theta \in [0, 2\pi]$ agissent avec λ, Ψ fixés, les extrémités des vecteurs (v_1, v_2) décrivent cette fois-ci l'image du cercle de rayon un par la transformation symplectique S_λ^Ψ , à savoir une ellipse \mathcal{E} de surface π , de demi petit axe b , de demi grand axe a , orientée par l'angle Ψ , et dont le paramètre est :

$$\begin{aligned} p = \frac{a}{b} = \lambda^2 &\geq 1 \\ ab &= 1 \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Une ellipse \mathcal{E} de centre 0 et de surface π est donc de cette façon associée à un point de l'espace quotient G/K , et est donc caractérisée par le nombre complexe $R \in D_1$.

Cette ellipse est aussi l'ellipse inscrite dans le parallélogramme d'aire 4 défini par les vecteurs v_1, v_2 , et tangente aux milieux des côtés.

Remarque : Le couple de vecteurs (v_1, v_2) peut aussi être représenté par le vecteur $V_c = v_1 + iv_2$ appartenant à l'espace vectoriel complexifié [20]. Dans la base complexe $e_z = \frac{1}{2}(e_q - ie_p)$, $e_{\bar{z}} = \frac{1}{2}(e_q + ie_p)$, le vecteur V_c s'écrit : $V_c = V e_z - U e_{\bar{z}}$.

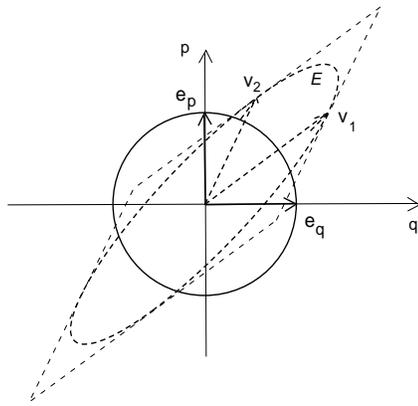


Figure A.2: L'ellipse \mathcal{E} s'obtient par l'action du groupe symplectique sur le cercle de rayon 1. Ce sont les dilatations S_λ^Ψ qui produisent effectivement la déformation elliptique.
 $(v_1, v_2) = M^{-1}(e_q, e_p)$. avec $M^{-1} = S_\lambda^\Psi R_{-\theta}$.

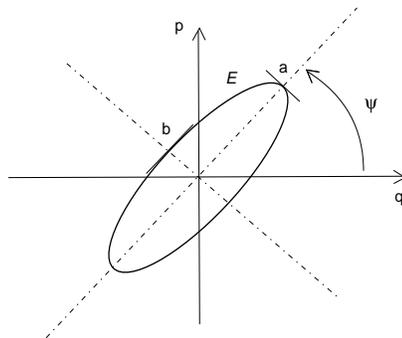


Figure A.3: Ellipse \mathcal{E} caractérisée par $R \in D_1$.
 $p = \frac{a}{b} = \left(\frac{1+|R|}{1-|R|} \right)$: amplitude de la déformation.
 $\Psi = \frac{1}{2} \arg(R)$: direction de la déformation.

Notons les relations suivantes entre les coordonnées des vecteurs $v_1 = (v_{1q}, v_{1p})$, $v_2 = (v_{2q}, v_{2p})$, et les coefficients U, V , de la matrice symplectique M (A.6). A l'aide de (A.9) :

$$\begin{aligned} v_{1q} &= D &= Re(U) - Re(V) \\ v_{1p} &= -C &= -Im(U) - Im(V) \\ v_{2q} &= -B &= Im(U) - Im(V) \\ v_{2p} &= A &= Re(U) + Re(V) \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

d) Représentation unitaire du groupe G . Groupe métaplectique.

D'après le théorème de Stone von Neumann [26], il existe un opérateur unitaire $S(M)$ tel que :

$$\tilde{a} = S(M)aS(M)^{-1} \quad (\text{A.24})$$

$S(M)$ est donc une représentation unitaire du groupe $G = Sp(2, \mathbb{R})$, et deux valeurs : à $S = \pm 1$, correspond $M = 1$. Le groupe d'opérateurs obtenu est appelé le groupe métaplectique, noté $Mp(2, \mathbb{R})$. Il recouvre deux fois le groupe G .

Pour connaître la représentation des générateurs, considérons un élément proche de l'identité : $S = 1 + i\epsilon\hat{H}$, $\epsilon \rightarrow 0$. \hat{H} est un opérateur hermitique, et $\tilde{a} = a + i\epsilon[\hat{H}, a]$. D'après (A.5), $[\hat{H}, a]$ est donc linéaire en (a, a^+) . \hat{H} est donc quadratique en a et a^+ . Une base de cette algèbre est par exemple composée des trois opérateurs :

$$n = a^+a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}(a^+a + aa^+), \quad a^{+2}, \quad a^2 \quad (\text{A.25})$$

vérifiant les relations de commutation :

$$[n, a^{+2}] = 2a^{+2}, \quad [n, a^2] = -2a^2, \quad [a^{+2}, a^2] = -4n \quad (\text{A.26})$$

Un opérateur unitaire $S \in Mp(2, \mathbb{R})$ peut donc s'écrire sous les formes :

$$S^{-1} = e^{Xa^{+2} - \bar{X}a^2 + \xi n} = e^{\frac{R}{2}a^{+2}} e^{\eta n} e^{-\frac{\bar{R}}{2}a^2}, \quad X, R \in \mathbb{C}, \quad \xi, \eta \in \mathbb{R} \quad (\text{A.27})$$

(Le paramètre R va s'identifier avec le paramètre R déjà introduit.)

D'après (A.3), (A.24) et (2.10), on déduit une expression du vecteur $|\widetilde{0}\rangle_n$:

$$|\widetilde{0}\rangle_n = S(M)^{-1}|0\rangle_n$$

Le groupe métaplectique permet donc d'engendrer les différents vecteurs $|\widetilde{0}\rangle_n$ (aussi appelés vide de quasi particules bosoniques en physique nucléaire) par action sur le vecteur

$|0\rangle_n$.

A l'aide de (A.27), on obtient :

$$|\widetilde{0}\rangle = e^{\frac{n}{2}} e^{\frac{R}{2}a^+} |0\rangle \quad (\text{A.28})$$

Le sous groupe d'isotropie de cette action est donc engendré par l'opérateur $n = a^+a + \frac{1}{2}$. Il s'agit donc du sous groupe des rotations $K \cong U(1)$.

Et donc un état $[[\widetilde{0}\rangle]$ correspond à un point de l'espace quotient G/K , ou encore à une ellipse de centre 0 et de surface π . Autrement dit, l'action du groupe métaplectique sur l'état $[[0\rangle]$ s'identifie à l'action du groupe symplectique sur le cercle de centre 0 et de rayon un.

Par ailleurs, l'équation $\tilde{a}|\widetilde{0}\rangle = 0$ s'écrit aussi :

$$(a + \xi a^+) e^{\frac{R}{2}a^+} |0\rangle = 0 \quad (\text{A.29})$$

avec $\xi = \frac{V}{U}$.

$\xi(R)$ est une fonction inconnue que l'on recherche. En différentiant (A.29), il vient :

$$\left[\frac{a^+}{2} (a + \xi a^+) + (1 + \partial_R \xi) a^+ \right] e^{\frac{R}{2}a^+} |0\rangle = 0$$

une solution est donc $\partial_R \xi = -1$, c'est à dire :

$$R = -\frac{V}{U} \quad (\text{A.30})$$

ce qui l'identifie avec le coefficient R introduit plus haut (A.20).

Pour obtenir les états cohérents $|\widetilde{z}\rangle_n$ (A.3), il faut ensuite appliquer les opérateurs de translation $\widetilde{D}(\widetilde{z}) = D(z)$ (A.12), qui forment le groupe de Weyl (2.4). Au paragraphe suivant, nous allons établir des relations de commutation utiles pour les opérateurs engendrés par les générateurs : $(1, a, a^+, n, a^+, a^2)$.

On peut déjà remarquer que de part leur construction, la famille des états cohérents déformés est invariante par une dynamique engendrée par un Hamiltonien quadratique en (a, a^+) ou (q, p) .

e) Algèbre à "deux photons" engendrée par $(1, a, a^+, n, a^+, a^2)$.

Outre les relations de commutation (A.26) et (2.4), il faut ajouter :

$$[a^2, a^+] = 2a, \quad [a^+, a] = -2a^+, \quad [n, a] = -a, \quad [n, a^+] = a^+ \quad (\text{A.31})$$

En optique, cette algèbre est appelée l'algèbre à "deux photons", $h6$, [8], car elle permet d'expliquer des processus d'émission à deux photons.

Ses sous algèbres sont :

$$sp(2, \mathbb{R}) = \{n, a^{+2}, a^2\}, \quad h4 = \{n, a^+, a, 1\} : \text{"algèbre à un photon"}, \quad \mathcal{W}_1 = \{a^+, a, 1\} \quad (\text{A.32})$$

Dans l'article de référence sur les états cohérents [8], W.M. Zhang et al. présentent une méthode pour calculer les propriétés de commutation du groupe, au moyen d'une représentation fidèle de l'algèbre $h6$ par des matrices 4×4 . (Représentation non hermitienne). Un élément quelconque de l'algèbre :

$$\eta n + \delta 1 + \frac{R}{2} a^{+2} + \frac{L}{2} a^2 + r a^+ + l a \quad (\text{A.33})$$

est représenté par la matrice :

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ r & \eta & R & 0 \\ -l & -L & -\eta & 0 \\ -2\delta & -l & -r & 0 \end{pmatrix}$$

Par exponentiation (fait à l'aide d'un logiciel de calcul formel par exemple), on obtient des représentations matricielles pour différentes expressions, et par identification des matrices, on déduit les changements de variables qui conviennent. Ces relations sont appelées relations de débrouillage (disentangling). Ainsi, un opérateur peut s'écrire sous les diverses formes :

$$\begin{aligned} T &= e^{\frac{R}{2} a^{+2} + r a^+} e^{\eta n + \delta 1} e^{\frac{L}{2} a^2 + l a} \\ &= e^{\frac{L'}{2} a^2 + l' a} e^{\eta' n + \delta' 1} e^{\frac{R'}{2} a^{+2} + r' a^+} \\ &= e^{\eta_0 n + \delta_0 1} e^{\frac{L_0}{2} a^2 + l_0 a} e^{\frac{R_0}{2} a^{+2} + r_0 a^+} \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Les relations de passage sont :

$$\begin{aligned} e^{-\eta} &= e^{-\eta'} - R' L' e^{\eta'} &= e^{-\eta_0} (1 - R_0 L_0) \\ R &= R' e^{\eta'} e^{\eta} &= e^{\eta} e^{\eta_0} R_0 \\ L &= L' e^{\eta'} e^{\eta} &= e^{\eta} e^{-\eta_0} L_0 \\ l &= (r' L' e^{\eta'} + l') e^{\eta} &= e^{\eta} e^{-\eta_0} (l_0 + r_0 L_0) \\ r &= (R' l' e^{\eta'} + r') e^{\eta} &= e^{\eta} (l_0 R_0 + r_0) \\ \delta &= \delta' + \frac{1}{2} (e^{\eta'} l' r' + e^{-\eta} l r) &= \delta_0 + \frac{1}{2} (l_0 r_0 + r l e^{-\eta}) \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

De plus, pour les opérateurs unitaires de la forme :

$$T = D(z) S(X), \quad z, X \in \mathbb{C} \quad (\text{A.36})$$

avec :

$$D(z) = e^{za^+ - \bar{z}a}, \quad S(X) = e^{Xa^+2 - \bar{X}a^2}$$

On pose

$$X = \rho e^{2i\Psi}, \quad \rho \in \mathbb{R}^+, \quad \Psi \in [0, \pi[$$

Alors :

$$\begin{aligned} R &= e^{2i\Psi} \tanh(2\rho) \\ r &= z - R\bar{z} \\ e^\eta &= \sqrt{\Upsilon} \\ \delta &= -\frac{1}{2}r\bar{z} \\ L &= -\bar{R} \\ l &= -\bar{z}\sqrt{\Upsilon} \end{aligned} \tag{A.37}$$

avec $\Upsilon = 1 - R\bar{R}$.

Inversement,

$$z = \frac{r + R\bar{r}}{\Upsilon}, \quad \cosh(2\rho) = \frac{1}{\sqrt{\Upsilon}}, \quad \sinh(2\rho) = \frac{|R|}{\sqrt{\Upsilon}} \tag{A.38}$$

L'intérêt de ces variables, est que le nouveau vide $|\widetilde{0}\rangle$ est caractérisé par la variable X ou R , alors que la variable de translation z correspond à la position dans l'espace de phase. Pour N degrés de libertés, on peut trouver les relations analogues dans [8].

f) Section holomorphe des états déformés

D'après la définition (A.3), un état déformé $|\widetilde{z}\rangle_n$, s'écrit :

$$|\widetilde{z}\rangle_n = D(z)S(X)|0\rangle, \quad z, X \in \mathbb{C} \tag{A.39}$$

Les états cohérents déformés s'obtiennent donc par l'action du groupe $h\mathfrak{b}$ sur l'état $|0\rangle$: $|\widetilde{z}\rangle_n = T|0\rangle$. Le sous groupe d'isotropie est $U(1) \times U(1)$. Les variables de déformation X et R sont reliées par (A.37) et (A.38). Comme nous venons de le voir, l'opérateur unitaire $S(X)$ a pour action de déformer elliptiquement l'état $|0\rangle$, et $D(z)$ de translater le résultat dans l'espace de phase.

A l'aide de la décomposition (A.34), l'état cohérent déformé s'écrit aussi :

$$|\widetilde{z}\rangle_n = e^{(\frac{\eta}{2} + \delta)} e^{\frac{R}{2}a^+2 + ra^+} |0\rangle \tag{A.40}$$

On déduit donc que la famille des états déformés est paramétrisée par le couple $(r, R) \in \mathbb{C}^2$ ou le couple $(z, R) \in \mathbb{C}^2$. z et r sont reliés par (A.37) et (A.38), mais remarquons que la

variable r mélange la position dans l'espace de phase z et la deformation R .

Une section holomorphe est donnée par les vecteurs non normalisés :

$$|R, r \rangle = |R, z \rangle = e^{\frac{R}{2}a^{+2} + ra^{+}} |0 \rangle \quad (\text{A.41})$$

Cette section holomorphe est utile, rappelons le, pour exprimer les structures géométriques des états cohérents déformés.

Les états cohérents standard correspondent à la sous famille $R = 0$:

$$|z \rangle = |r = z, R = 0 \rangle = e^{za^{+}} |0 \rangle$$

.

A.2 Géométrie des états cohérents déformés.

a) Structures géométriques

Avec le choix de la section holomorphe (A.41), et à l'aide des relations (A.35), on obtient :

$$\begin{aligned} \langle R, r | R, r \rangle &= (1 - R\bar{R})^{-1/2} \exp\left[\frac{r^2 \frac{\bar{R}}{2} + \bar{r}^2 \frac{R}{2} + r\bar{r}}{1 - R\bar{R}}\right] \\ &= \Upsilon^{-1/2} \exp\left[-z^2 \frac{\bar{R}}{2} - \bar{z}^2 \frac{R}{2} + z\bar{z}\right] \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

$\langle R', r' | R, r \rangle$ s'en déduit en remplaçant \bar{R} et \bar{r} par \bar{R}' et \bar{r}' . Par exemple,

$$\langle z' | R, z \rangle = \exp\left[\bar{z}'^2 \frac{R}{2} + \bar{z}'(z - R\bar{z})\right] \quad (\text{A.43})$$

Et alors :

$$\begin{cases} \partial_r \ln \langle Rr | Rr \rangle = \bar{z}_0 \\ \partial_R \ln \langle Rr | Rr \rangle = \frac{1}{2} \bar{z}^2 + \frac{\bar{R}}{2\Upsilon} \end{cases} \quad (\text{A.44})$$

$$\begin{cases} \partial_r \partial_{\bar{r}} \ln \langle Rr | Rr \rangle = \frac{1}{\Upsilon} \\ \partial_r \partial_{\bar{R}} \ln \langle Rr | Rr \rangle = \frac{z}{\Upsilon} \\ \partial_R \partial_{\bar{R}} \ln \langle Rr | Rr \rangle = \frac{1}{2\Upsilon^2} [1 + 2\Upsilon z\bar{z}] \end{cases} \quad (\text{A.45})$$

D'après (1.26), la forme symplectique peut s'écrire en variables (r, R) :

$$\begin{aligned} \Omega &= i(\partial_r \partial_{\bar{r}} \ln \langle Rr | Rr \rangle) dr \wedge d\bar{r} + i(\partial_r \partial_{\bar{R}} \ln \langle Rr | Rr \rangle) dr \wedge d\bar{R} \\ &\quad + i(\partial_R \partial_{\bar{r}} \ln \langle Rr | Rr \rangle) dR \wedge d\bar{r} + i(\partial_R \partial_{\bar{R}} \ln \langle Rr | Rr \rangle) dR \wedge d\bar{R} \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

sachant que : $(\partial_R \partial_{\bar{r}} \ln \langle Rr | Rr \rangle) = \overline{(\partial_r \partial_{\bar{R}} \ln \langle Rr | Rr \rangle)}$.

Exprimée en variable (z, R) où z est défini par (A.38), Ω s'écrit comme :

$$\Omega = i(dz \wedge d\bar{z}) + \frac{i}{2\Upsilon^2} (dR \wedge d\bar{R}) \quad (\text{A.47})$$

Cette écriture "presque canonique" fait que nous choisissons dans la suite de travailler avec le système de coordonnées (z, R) , (bien que ce ne soit pas un système de coordonnées holomorphes).

A R fixé, le sous espace $\{R, z\}_{z \in \mathbb{C}}$ constitue un espace de phase qui est isométrique au plan Euclidien. A z fixé, le sous espace $\{R, z\}_{R \in \mathbb{R}}$ est isométrique au disque de Poincaré. En posant :

$$\vartheta = \sqrt{\frac{1}{2\Upsilon}} R \quad (\text{A.48})$$

Il vient :

$$\Omega = i(dz \wedge d\bar{z}) + i(d\vartheta \wedge d\bar{\vartheta}) \quad (\text{A.49})$$

(z, ϑ) est donc un système de variables canoniques.

La un-forme \mathcal{A} , connexion de Berry s'écrit d'après (1.28) :

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \frac{1}{2}\bar{z}dr - \frac{1}{2}zd\bar{r} + \frac{1}{4}(\bar{z}^2 + \frac{\bar{R}}{\Upsilon})dR - \frac{1}{4}(z^2 + \frac{R}{\Upsilon})d\bar{R} \\ &= \frac{\bar{z}}{2}dz - \frac{z}{2}d\bar{z} + \frac{1}{4\Upsilon}(\bar{R}dR - Rd\bar{R}) + \frac{1}{4}d(z^2\bar{R} - \bar{z}^2R) \\ &= \frac{i}{2\hbar}(qdp - pdq) + \frac{1}{4\Upsilon}(\bar{R}dR - Rd\bar{R}) + \frac{1}{4}d(z^2\bar{R} - \bar{z}^2R) \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

La courbure de Berry est d'après (1.29) :

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = i\Omega &= -(dz \wedge d\bar{z}) - \frac{1}{2\Upsilon^2}(dR \wedge d\bar{R}) \\ &= \frac{i}{\hbar}(dq \wedge dp) - \frac{1}{2\Upsilon^2}(dR \wedge d\bar{R}) \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

On retrouve donc les formes géométriques en variables z , des états cohérents standard (2.20,2.22), auxquelles s'ajoutent des termes propres à la géométrie de la variable R , caractérisant le "nouveau vide" $|\widetilde{0}\rangle$, et la déformation d'un état cohérent, comme nous allons le voir.

b) Distribution de Husimi d'un état cohérent déformé.

La distribution de Husimi d'un état cohérent déformé $|R, z\rangle$, caractérise cet état, et est d'après (2.24) :

$$\mathcal{H}_{(R,z)}(z') = |\langle n|z'\rangle\langle R, z|n\rangle|^2 \quad (\text{A.52})$$

or d'après (A.42), on a :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{(R,z)}(z') &= \frac{\langle R, z|z'\rangle\langle z'|R, z\rangle}{\langle z'|z'\rangle\langle R, z|R, z\rangle} \\ &= \Upsilon^{1/2} \exp[\bar{z}'^2\frac{R}{2} + \bar{z}'z + z'^2\frac{\bar{R}}{2} - \bar{R}zz' - R\bar{z}\bar{z}' + z'\bar{z} - \bar{z}'z' + z^2\frac{\bar{R}}{2} + \bar{z}^2\frac{R}{2} - z\bar{z}] \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

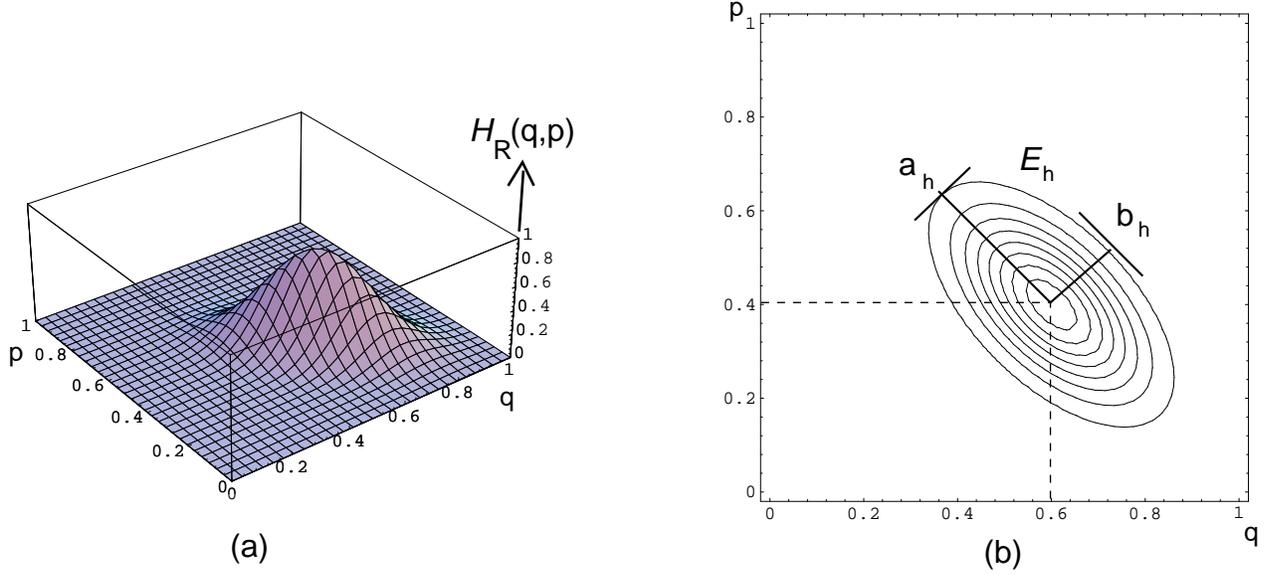


Figure A.4: Distribution de Husimi d'un état déformé $|R, z \rangle$. $(q, p) = (0.6, 0.4)$, $R = 0.6e^{i\frac{3\pi}{2}}$.
 (a) en perspective, (b) lignes de niveaux.

or la distribution de Husimi de l'état $[|R, z \rangle]$ est la translation de z de la distribution de Husimi de l'état nouveau vide : $[|\widetilde{0} \rangle] = [|R, z = 0 \rangle]$ noté $[|R \rangle]$, d'après (A.39) :

$$\mathcal{H}_{(R,z)}(z') = |{}_n\langle z' | R, z \rangle_n|^2 = |{}_n\langle z' | D(z) | R \rangle_n|^2 = |{}_n\langle z' - z | R \rangle_n|^2$$

La distribution de Husimi de cet état $[|R \rangle]$, est d'après (A.53) :

$$\mathcal{H}_R(z') = |{}_n\langle z' | R \rangle_n|^2 = \Upsilon^{1/2} \exp[\bar{z}'^2 \frac{R}{2} + z'^2 \frac{\bar{R}}{2} - \bar{z}' z'] \quad (\text{A.54})$$

Il s'agit de l'exponentielle d'une forme quadratique en z' . Cherchons à effectuer une transformation linéaire symplectique du plan, exprimée comme (A.11), en variables complexes :

$$z' \mapsto \tilde{z}'_h = z' U_h + \bar{z}' V_h, \quad U_h \bar{U}_h - V_h \bar{V}_h = 1 \quad (\text{A.55})$$

qui amènerait à la forme :

$$\mathcal{H}_R(z') = \Upsilon^{1/2} \exp(-\mu_h |\tilde{z}'_h|^2) = \Upsilon^{1/2} \exp\left\{-\mu_h \left[\left(\frac{2 - \Upsilon_h}{\Upsilon_h} \right) \bar{z}' z' - \frac{R_h}{\Upsilon_h} \bar{z}'^2 - \frac{\bar{R}_h}{\Upsilon_h} z'^2 \right]\right\}, \quad \mu_h \in \mathbb{R} \quad (\text{A.56})$$

C'est à dire que l'on veut diagonaliser la forme quadratique. U_h, V_h caractérisent la transformation symplectique (A.55). Et (R_h, Υ_h) leur sont associés au moyen de (A.20) et sont différents a priori de R et Υ . On s'aperçoit par identification avec (A.54), qu'il convient de prendre :

$$R_h = \frac{R}{1 + \sqrt{\Upsilon}}, \quad \mu_h = \sqrt{\Upsilon} > 0 \quad (\text{A.57})$$

En coordonnées \tilde{z}'_h , la distribution de Husimi est une gaussienne circulaire de centre 0, et en coordonnées initiales z , la distribution de Husimi est une gaussienne elliptique. Les lignes de niveaux sont des ellipses \mathcal{E}_h , images réciproques de cercles par la transformation (A.55). Nous avons vu qu'il s'agit d'ellipses de centre 0 et de paramètre de déformation p_h donné par (A.22).

Si l'on note a_h, b_h les demi-grands axes et demi petits axes de ces ellipses, on a d'après (A.22), et (A.16) :

$$p_h = \frac{a_h}{b_h} = \lambda_h^2 = \left(\frac{1 + |R_h|}{1 - |R_h|} \right) = \left(\frac{1 + |R|}{1 - |R|} \right)^{1/2} = \lambda = \sqrt{\frac{a}{b}} = \sqrt{p} \quad (\text{A.58})$$

et $\Psi_h = \Psi$.

Comparons l'ellipse, \mathcal{E}_h , ligne de niveau de la distributions de Husimi d'un état déformé $[R, z >]$, par rapport à l'ellipse \mathcal{E} représentée à la figure (A.3), qui est l'image d'un cercle par la transformation symplectique qui sert à construire l'état $[|R, z >]$.

D'après (A.58), l'ellipse \mathcal{E}_h de paramètre p_h est moins excentrique que l'ellipse \mathcal{E} de paramètre p . Et ces deux ellipses ont même orientation. Voir la figure A.5.

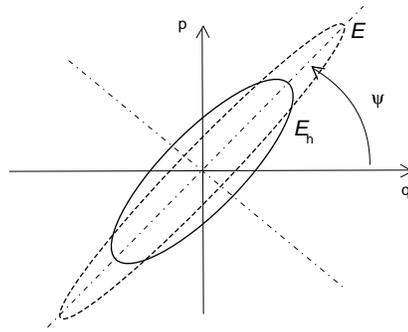


Figure A.5: Ellipse \mathcal{E}_h , ligne de niveau de la distribution de Husimi de l'état $[R, z >]$, comparée à l'ellipse classique \mathcal{E} de la figure A.3.

Cette différence peut s'interpréter par le fait que d'une part la distribution de Wigner d'un état cohérent déformé est une gaussienne elliptique, les lignes de niveau étant les ellipses \mathcal{E} , (du fait que la distribution de Wigner est invariante sous les transformations symplectiques (A.79)). Et d'autre part la distribution de Husimi s'obtient à partir de la distribution de Wigner au moyen d'une convolution avec des gaussiennes circulaires (A.64). Et c'est cette convolution qui diminue l'excentricité de la distribution.

En définitive, la distribution de Husimi de l'état cohérent déformé $[|R, z >]$ est une gaussienne elliptique centrée en z et de déformation elliptique caractérisée par R . Les variables

z et R sont donc particulièrement bien adaptées pour paramétriser la famille des états cohérents déformés.

Remarquons que si R tend vers -1 , la distribution de Husimi de l'état $|R, z\rangle$ tend vers une bande verticale passant par z . L'état $|R, z\rangle$ tend vers un état de position $|q\rangle$.

c) Valeurs moyennes d'opérateurs.

Il sera utile dans la suite de connaître la valeur moyenne d'opérateurs sur les états cohérents déformés. Nous allons tout d'abord faire ce calcul pour des opérateurs qui sont des polynômes en (a, a^+) , à l'aide d'une fonction génératrice, méthode que l'on trouve dans [8].

Considérons la fonction génératrice :

$$\begin{aligned} g(\gamma, \bar{\gamma}) &= {}_n\langle R, r | e^{\gamma a^+} e^{\bar{\gamma} a} | R, r \rangle_n \\ &= {}_n\langle 0 | e^{\frac{\bar{R}}{2} a^2 + \bar{r} a} e^{\gamma a^+} e^{\bar{\gamma} a} e^{\frac{R}{2} a^2 + r a^+} | 0 \rangle / \langle R, r | R, r \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.59})$$

Les relations (A.34) permettent d'obtenir :

$$g(\gamma, \bar{\gamma}) = \exp\left(\gamma \bar{z} + \bar{\gamma} z + \gamma \bar{\gamma} \left(\frac{1 - \Upsilon}{\Upsilon}\right) + \gamma^2 \frac{\bar{R}}{2\Upsilon} + \bar{\gamma}^2 \frac{R}{2\Upsilon}\right) \quad (\text{A.60})$$

La valeur moyenne de l'opérateur $a^{+m} a^n$, $m, n \in \mathbb{N}^2$ sur les états $|Rz\rangle_n$ s'obtient alors par :

$${}_n\langle R, z | a^{+m} a^n | R, z \rangle_n = \partial_\gamma^m \partial_{\bar{\gamma}}^n g(\gamma, \bar{\gamma}) \quad (\text{A.61})$$

Par exemple :

$$\langle a^+ \rangle = \bar{z}, \quad \langle a \rangle = z, \quad \langle a^{+2} \rangle = \bar{z}^2 + \frac{\bar{R}}{\Upsilon}, \quad \langle a^2 \rangle = z^2 + \frac{R}{\Upsilon}, \quad \langle a^+ a \rangle = z \bar{z} - 1 + \frac{1}{\Upsilon} \quad (\text{A.62})$$

En particulier si $R = 0$, on retrouve le symbole normal de ces opérateurs. On retrouvera ces résultats dans une expression plus générale, au paragraphe suivant.

d) Symbole de Weyl, symbole anti-normal, et autres représentations de Husimi.

Les développements qui vont suivre sont basés sur la formule suivante. Pour une fonction $V(x)$, C^∞ , on a :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-q)^2}{\chi}} V(x) dx = \sqrt{\pi \chi} e^{\frac{\chi}{4} \partial_{q'}^2} V(q')_{|q'=q} \quad (\text{A.63})$$

l'exponentielle est définie par sa série. Cette formule qui est linéaire se démontre en considérant les fonctions $V(x) = x^n$, et par récurrence sur n , ou en l'interprétant comme

l'équation de propagation d'une particule libre. Cette formule peut ensuite être facilement généralisée à plusieurs dimensions, avec l'exponentielle d'une forme quadratique.

Le symbole normal d'un opérateur \hat{O} est défini comme étant sa valeur moyenne sur les états cohérents standard :

$$\mathcal{O}_N(q, p) = {}_n\langle q, p | \hat{O} | q, p \rangle_n$$

Le symbole normal est relié au symbole de Weyl $\mathcal{O}_W(q, p)$ par l'expression [52, 53] :

$$\mathcal{O}_N(q', p') = \frac{1}{\pi\hbar} \iint \mathcal{O}_W(q, p) e^{-\frac{1}{\hbar}[(q-q')^2 + (p-p')^2]} dq dp \quad (\text{A.64})$$

A l'aide de la formule (A.63), on déduit que :

$$\mathcal{O}_N(q', p') = e^{\frac{\hbar}{4}(\partial_q^2 + \partial_p^2)} \mathcal{O}_W(q, p)_{(q,p)=(q',p')} \quad (\text{A.65})$$

inversement :

$$\mathcal{O}_W(q', p') = e^{-\frac{\hbar}{4}(\partial_q^2 + \partial_p^2)} \mathcal{O}_N(q, p)_{(q,p)=(q',p')} \quad (\text{A.66})$$

Le symbole P , ou symbole anti-normal d'un opérateur \hat{O} , noté \mathcal{O}_P , est défini (quand il existe, voir discussion dans [88]) par :

$$\hat{O} = \int d\mu(z) |z\rangle_n {}_n\langle z | \mathcal{O}_P(z, \bar{z}) \quad (\text{A.67})$$

Il nous sera utile plus loin. On peut le relier au symbole normal de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_N(q', p') &= {}_n\langle q', p' | \hat{O} | q', p' \rangle_n = \iint \frac{dq dp}{2\pi\hbar} |{}_n\langle q', p' | q, p \rangle_n|^2 \mathcal{O}_P(q, p) \\ &= \iint \frac{dq dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{1}{2\hbar}[(q-q')^2 + (p-p')^2]} \mathcal{O}_P(q, p) \\ &= e^{-\frac{\hbar}{2}(\partial_q^2 + \partial_p^2)} \mathcal{O}_P(q, p)_{(q,p)=(q',p')} \end{aligned} \quad (\text{A.68})$$

En définitive, on déduit les relations suivantes entre les trois symboles que nous venons de considérer :

1. En variable réelles (q, p) :

$$\mathcal{O}_P(q, p) \xrightarrow{e^{\frac{\hbar}{4}(\partial_q^2 + \partial_p^2)}} \mathcal{O}_W(q, p) \xrightarrow{e^{\frac{\hbar}{4}(\partial_q^2 + \partial_p^2)}} \mathcal{O}_N(q, p) \quad (\text{A.69})$$

2. En variables complexes (z, \bar{z}) :

$$\mathcal{O}_P(z, \bar{z}) \xrightarrow{e^{\frac{1}{2}\partial_z\partial_{\bar{z}}}} \mathcal{O}_W(z, \bar{z}) \xrightarrow{e^{\frac{1}{2}\partial_z\partial_{\bar{z}}}} \mathcal{O}_N(z, \bar{z}) \quad (\text{A.70})$$

Nous avons vu que d'une certaine manière, la famille des états cohérents standard est arbitraire. Une autre famille est obtenue en fixant $R \in D_1$, et en considérant $(|z, R \rangle$

), $z \in \mathbb{C}$. Nous avons aussi noté cette famille $|z\rangle$ (A.3). \tilde{z} et z étant reliés par (A.11). Le symbole normal d'un opérateur \hat{O} qui correspond à cette famille, et que nous noterons \mathcal{O}_R est défini par :

$$\mathcal{O}_R(z, \bar{z}) = {}_n\langle \tilde{z} | \hat{O} | \tilde{z} \rangle_n = {}_n\langle z, R | \hat{O} | z, R \rangle_n \quad (\text{A.71})$$

(Remarque : $\mathcal{O}_N = \mathcal{O}_{R=0}$).

Avec (A.67), on déduit que :

$$\mathcal{O}_R(z, \bar{z}) = \int d\mu(z') |{}_n\langle R, z | z' \rangle_n|^2 \mathcal{O}_P(z', \bar{z}') \quad (\text{A.72})$$

or avec (A.56), et (A.57), on a :

$$|{}_n\langle R, z | z' \rangle_n|^2 = |{}_n\langle z' - z | R \rangle_n|^2 = \Upsilon^{1/2} \exp(-\mu_h |\tilde{z}_h|^2) \quad (\text{A.73})$$

et avec (A.55) :

$$\tilde{z}_h = U_h(z' - z) + V_h(\bar{z}' - \bar{z}) = M(z' - z) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\tilde{q}_h + i\tilde{p}_h) \quad (\text{A.74})$$

Alors, en faisant le changement de variable $z' \mapsto \tilde{z}_h$ dans l'intégrale (A.72), on obtient :

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_R(z) &= \iint \frac{dq' dp'}{2\pi\hbar} \Upsilon^{1/2} e^{-\mu_h |\tilde{z}_h(q', p')|^2} \mathcal{O}_P(q', p') \\ &= \iint \frac{d\tilde{q}_h d\tilde{p}_h}{2\pi\hbar} \Upsilon^{1/2} e^{-\frac{\mu_h}{2\hbar}(\tilde{q}_h^2 + \tilde{p}_h^2)} \mathcal{O}_P(z'(\tilde{q}_h, \tilde{p}_h)) \end{aligned}$$

et toujours d'après (A.63), il vient :

$$\mathcal{O}_R(z) = e^{\frac{\hbar}{2\sqrt{\Upsilon}}(\partial_{\tilde{q}_h}^2 + \partial_{\tilde{p}_h}^2)} \mathcal{O}_P(z'(\tilde{q}_h, \tilde{p}_h))_{|z'=z} \quad (\text{A.75})$$

et d'après (A.70), on a finalement en variables complexes :

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_R(z) &= e^{\frac{1}{\sqrt{\Upsilon}}\partial_{z_h}\partial_{\bar{z}_h}} e^{-\partial_{z'}\partial_{\bar{z}'}} \mathcal{O}_N(z')_{|z'=z} \\ &= e^{\frac{1}{\Upsilon}\{\frac{\hbar}{2}\partial_{z'}\partial_{z'} + \frac{\hbar}{2}\partial_{\bar{z}'}\partial_{\bar{z}'} + (1-\Upsilon)\partial_{z'}\partial_{\bar{z}'}\}} \mathcal{O}_N(z')_{|z'=z} \end{aligned} \quad (\text{A.76})$$

ou en "variables classiques" (2.14) :

$$\mathcal{O}_R(\mathcal{Z}) = e^{\frac{\hbar}{\Upsilon}\{\frac{\hbar}{2}\partial_{\mathcal{Z}}\partial_{\mathcal{Z}} + \frac{\hbar}{2}\partial_{\bar{\mathcal{Z}}}\partial_{\bar{\mathcal{Z}}} + (1-\Upsilon)\partial_{\mathcal{Z}}\partial_{\bar{\mathcal{Z}}}\}} \mathcal{O}_N(\mathcal{Z}')_{|\mathcal{Z}'=\mathcal{Z}} \quad (\text{A.77})$$

Ainsi la valeur moyenne d'un opérateur sur les états cohérents déformés, $\mathcal{O}_R(z)$ qui dépend de deux paramètres (R, z) , est largement déterminée par sa restriction aux états cohérents standard ($R = 0$) : $\mathcal{O}_N(z)$. L'existence de cette relation est en fait liée à la relation suivante qui découle de (A.41) :

$$\partial_r^2 |R, r\rangle = 2\partial_R |R, r\rangle \quad (\text{A.78})$$

et qui montre une certaine dépendance entre les variables r et R .

En particulier, étant donné un vecteur quantique $|\Psi\rangle$, on peut appliquer les relations ci-dessus pour l'opérateur densité $\hat{O} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, ce qui donne des relations entre la distribution de Wigner $W_\Psi(q, p) = \mathcal{O}_W(q, p)$, la distribution de Husimi

$\mathcal{H}_\Psi(q, p) = |\langle n|q, p|\Psi\rangle|^2 = \mathcal{O}_N(q, p)$ et les fonctions : $|\langle n|R, z|\Psi\rangle|^2 = \mathcal{O}_R(q, p)$. A R fixé, la fonction $\mathcal{O}_R(z) = |\langle n|R, z|\Psi\rangle|^2$ peut être considérée comme la distribution de Husimi de l'état $|\Psi\rangle$, relativement à la famille d'états cohérents $|\tilde{z}\rangle_{\tilde{z}\in\mathbb{C}}$ (A.3).

Etant donné que changer de famille d'états cohérents revient à effectuer une transformation symplectique (ou transformation canonique linéaire) d'après (A.8), on déduit de (A.76) que le symbole normal ne se transforme pas de façon covariante sous ces transformations (sauf sous les rotations, pour lesquelles $R = 0$). Mentionnons à ce propos, qu'il est aussi connu [52], que seul le symbole de Wigner possède une telle propriété de covariance. On peut le vérifier ici. Si l'on note $\widetilde{\mathcal{O}}_W(z)$ le symbole de Wigner transformé, on a avec (A.76) :

$$\widetilde{\mathcal{O}}_W(\tilde{z}) = e^{-\frac{1}{2}\partial_z\partial_{\tilde{z}}}\mathcal{O}_R(\tilde{z}) = e^{-\frac{1}{2}\partial_z\partial_{\tilde{z}}}e^{\frac{1}{\sqrt{4}\hbar}\partial_{z_h}\partial_{\tilde{z}_h}}e^{-\frac{1}{2}\partial_z\partial_{\tilde{z}}}\mathcal{O}_W(z) = \mathcal{O}_W(z) \quad (\text{A.79})$$

(il ne faut pas confondre les variables z , \tilde{z} (A.11) et \tilde{z}_h (A.74)). On vérifie de la même façon l'unicité.

Dans la deuxième partie, nous utiliserons la caractérisation d'un état quantique par les zéros de la fonction de Bargmann ou de Husimi. La non covariance de ces fonctions sous les transformations symplectiques montre que la position relative des zéros dépend en fait du choix de la famille d'états cohérents qui sert à définir la représentation de Bargmann. Il serait donc intéressant d'étudier cette dépendance, et une relation analogue à (A.75), mais pour la fonction de Bargmann, serait un point de départ.

Dans la suite, il nous faudra utiliser la valeur moyenne de l'Hamiltonien sur les états cohérents déformés, que nous noterons :

$$\mathcal{H}_D(R, z) = \langle n|z, R|\hat{H}|z, R\rangle_n = \mathcal{H}_R(z) \quad (\text{A.80})$$

Le développement de (A.77) pour $\hbar \rightarrow 0$, nous sera utile, et en reprenant la notation de Y. Tsue [33], et le développement de (2.32), on pose :

$$\mathcal{H}_{qu}(R, \mathcal{Z}) = \frac{1}{\Upsilon} \left(\frac{R}{2}\partial_{\mathcal{Z}}^2\mathcal{H}_{cl} + \frac{\bar{R}}{2}\partial_{\bar{\mathcal{Z}}}^2\mathcal{H}_{cl} + R\bar{R}\partial_{\mathcal{Z}}\partial_{\bar{\mathcal{Z}}}\mathcal{H}_{cl} \right) + \mathcal{H}_{N_1}(\mathcal{Z}) \quad (\text{A.81})$$

qui est un terme "quantique" car faisant intervenir la déformation R du paquet d'onde et le sous symbole \mathcal{H}_{N_1} . On a alors :

$$\mathcal{H}_D(R, \mathcal{Z}) = \mathcal{H}_{cl}(\mathcal{Z}) + \hbar\mathcal{H}_{qu}(R, \mathcal{Z}) + o(\hbar) \quad (\text{A.82})$$

A.3 Calcul de l'angle de projection

Pour calculer l'angle de projection α_D , il nous faut d'abord évaluer l'incertitude en énergie ΔE d'un état cohérent déformé $|R, z\rangle_n$. La démarche est identique à celle pour obtenir (2.42) quoique plus calculatoire.

Comme $|R, z\rangle = e^{\frac{R}{2}a^{+2}+ra^+}|0\rangle$, (A.41), on a donc :

$$\begin{aligned}\partial_r |R, r\rangle &= a^+ |R, r\rangle \\ \partial_R |R, r\rangle &= \frac{1}{2}a^{+2} |R, r\rangle\end{aligned}\quad (\text{A.83})$$

Ainsi :

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{H}^2|0\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle 0|\hat{H}|n\rangle \langle n|\hat{H}|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} |\langle 0|\hat{H}a^{+n}|0\rangle|^2 \\ &= \langle 0|\hat{H}|0\rangle^2 + |\partial_{r'} \langle R', r'|\hat{H}|R', r'\rangle|_{(R', r')=(0,0)}^2 \\ &\quad + 2|\partial_{R'} \langle R', r'|\hat{H}|R', r'\rangle|_{(R', r')=(0,0)}^2 \\ &= + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} |\partial_r^n \langle R', r'|\hat{H}|R', r'\rangle|_{(R', r')=(0,0)}^2\end{aligned}\quad (\text{A.84})$$

Or on peut montrer à l'aide de (A.42), que :

$$\begin{aligned}\partial_r^n \langle R, r|\hat{H}|R, r\rangle_{/Rr=0} &= \partial_r^n \langle n\langle R, r|\hat{H}|R, r\rangle_n /_{Rr=0} \\ \partial_R \langle R, r|\hat{H}|R, r\rangle_{/Rr=0} &= \partial_R \langle n\langle R, r|\hat{H}|R, r\rangle_n /_{Rr=0}\end{aligned}\quad (\text{A.85})$$

Appliquons la relation (A.84) à l'opérateur : $\hat{H}' = T^+(z, R)\hat{H}T(z, R)$, où l'opérateur unitaire $T(z, R) = D(z)S(X)$, (A.39),(A.36), permet de créer un vecteur normalisé $|R, z\rangle_n$ à partir de $|0\rangle$: $|R, z\rangle_n \propto T(z, R)|0\rangle$ (égalité à une phase près).

L'action de $T(z, R)$ est invariante dans les vecteurs cohérents déformés normalisés, et l'on pose :

$$|R'', z''\rangle_n \propto T(R, z)|R', z'\rangle_n \quad (\text{A.86})$$

Il conviendra d'exprimer R'', z'' à partir de R, z, R', z' . (A.86) peut s'écrire :

$$|R'', z''\rangle_n \propto T(R, z)T(R', z')|0\rangle$$

En cherchant comme d'habitude par permutation à placer les opérateurs a à droite, à l'aide des relations (A.37), et (A.35), on obtient après plusieurs manipulations :

$$\begin{cases} R'' = R + \frac{\Upsilon R'}{(1+R'R)} \\ r'' = r + \left(\frac{\sqrt{\Upsilon} r' - R' \Upsilon \bar{z}}{1+R'R} \right)\end{cases}\quad (\text{A.87})$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned}{}_n\langle R, z|\hat{H}^2|R, z\rangle_n &= \left({}_n\langle R, z|\hat{H}|R, z\rangle_n \right)^2 + |\partial_{r'} {}_n\langle R'', r''|\hat{H}|R'', r''\rangle_n|_{R'r'=0}^2 \\ &\quad + 2|\partial_{R'} {}_n\langle R'', r''|\hat{H}|R'', r''\rangle_n|_{R'r'=0}^2 \\ &\quad + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} |\partial_{r'}^n {}_n\langle R'', r''|\hat{H}|R'', r''\rangle_n|_{(R', r')=(0,0)}^2\end{aligned}\quad (\text{A.88})$$

Et à l'aide de (A.87), on obtient :

$$|\partial_{r'} \langle R'', r'' | \hat{H} | R'', r'' \rangle_n |_{R', r'=0}^2 + 2|\partial_{R'} \langle R'', r'' | \hat{H} | R'', r'' \rangle_n |_{R', r'=0}^2 = (\partial_{\mathcal{D}^t} \mathcal{H}_D) \mathcal{M} (\partial_{\bar{\mathcal{D}}} \mathcal{H}_D) \quad (\text{A.89})$$

où l'on pose :

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} R \\ r \end{pmatrix} \quad \mathcal{M} = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_{R\bar{R}} & \mathcal{M}_{R\bar{r}} \\ \mathcal{M}_{r\bar{R}} & \mathcal{M}_{r\bar{r}} \end{pmatrix} \quad (\text{A.90})$$

$$\begin{cases} \mathcal{M}_{R\bar{R}} = \left(\frac{\partial R''}{\partial r'} \right) \left(\frac{\partial \bar{R}''}{\partial \bar{r}'} \right) + 2 \left(\frac{\partial R''}{\partial R'} \right) \left(\frac{\partial \bar{R}''}{\partial R'} \right) = 2\Upsilon^2 \\ \mathcal{M}_{R\bar{r}} = \left(\frac{\partial R''}{\partial r'} \right) \left(\frac{\partial \bar{r}''}{\partial \bar{r}'} \right) + \left(\frac{\partial R''}{\partial R'} \right) \left(\frac{\partial \bar{r}''}{\partial R'} \right) = -2\Upsilon^2 z \\ \mathcal{M}_{r\bar{R}} = \overline{\mathcal{M}_{R\bar{r}}} = -2\Upsilon \bar{z} \\ \mathcal{M}_{r\bar{r}} = \left(\frac{\partial r''}{\partial r'} \right) \left(\frac{\partial \bar{r}''}{\partial \bar{r}'} \right) + 2 \left(\frac{\partial r''}{\partial R'} \right) \left(\frac{\partial \bar{r}''}{\partial R'} \right) = \Upsilon + 2\Upsilon z \bar{z} \end{cases}$$

Et on déduit que :

$$\begin{aligned} \Delta E^2 &= \langle R, z | \hat{H}^2 | R, z \rangle_n - \langle R, z | \hat{H} | R, z \rangle_n^2 \\ &= (\partial_{\mathcal{D}^t} \mathcal{H}_D) \mathcal{M} (\partial_{\bar{\mathcal{D}}} \mathcal{H}_D) + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} |\partial_{r'}^n \langle R'', r'' | \hat{H} | R'', r'' \rangle_n |_{(R', r')=(0,0)}^2 \end{aligned} \quad (\text{A.91})$$

Les termes de la série peuvent aussi s'écrire :

$$|\partial_{r'}^n \langle R'', r'' | \hat{H} | R'', r'' \rangle_n |_{(R', r')=(0,0)}^2 = \frac{\hbar^n}{\Upsilon^n} |(\partial_{\mathcal{Z}} + \bar{R} \partial_{\bar{\mathcal{Z}}})^n \mathcal{H}_D(R, \mathcal{Z})|^2 \quad (\text{A.92})$$

L'expression de l'angle de projection α_D (1.37) est (exprimé ici pour deux variables (R, z))

:

$$\cos^2(\alpha_D) = \frac{1}{\Delta E} [(\partial_{\mathcal{D}^t} \mathcal{H}_D) (\partial_{\bar{\mathcal{D}}} \partial_{\mathcal{D}^t} \ln \langle R, r | R, r \rangle)^{-1} (\partial_{\bar{\mathcal{D}}} \mathcal{H}_D)] \quad (\text{A.93})$$

où la matrice centrale est à l'aide de (A.45) :

$$\begin{aligned} (\partial_{\bar{\mathcal{D}}} \partial_{\mathcal{D}^t} \ln \langle R, r | R, r \rangle)^{-1} &= \begin{pmatrix} \partial_{\bar{R}} \partial_R \ln \langle Rr | Rr \rangle & \partial_{\bar{R}} \partial_r \ln \langle Rr | Rr \rangle \\ \partial_{\bar{r}} \partial_R \ln \langle Rr | Rr \rangle & \partial_{\bar{r}} \partial_r \ln \langle Rr | Rr \rangle \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} 2\Upsilon^2 & -2z\Upsilon^2 \\ -2\bar{z}\Upsilon^2 & \Upsilon + 2\Upsilon^2 z \bar{z} \end{pmatrix} = \mathcal{M} \end{aligned} \quad (\text{A.94})$$

qui s'identifie à \mathcal{M} (A.90). Cette identification paraît assez mystérieuse avec ces calculs, il devrait y avoir une justification plus claire.

L'angle α_D devient alors :

$$\cos^2(\alpha_D) = \left[1 + \frac{1}{(\partial_{\mathcal{D}^t} \mathcal{H}_D \mathcal{M} \partial_{\bar{\mathcal{D}}} \mathcal{H}_D)} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} |\partial_{r'}^n \langle \hat{H} \rangle|^2 \right]^{-1}$$

ou encore :

$$\alpha_D = \arctan\left\{\left(\frac{1}{(\partial_{\mathcal{D}^t} \mathcal{H}_D \mathcal{M} \partial_{\bar{\mathcal{D}}} \mathcal{H}_D)} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} |\partial_{r'}^n \langle \hat{H} \rangle|^2\right)^{1/2}\right\} \quad (\text{A.95})$$

En terme de variables classiques (R, \mathcal{Z}) , on a :

$$(\partial_{\mathcal{D}^t} \mathcal{H}_D) \mathcal{M} (\partial_{\bar{\mathcal{D}}} \mathcal{H}_D) = \frac{\hbar}{2\Upsilon} [\Upsilon^3 \hbar |\partial_R (\frac{\mathcal{H}_D}{\hbar})|^2 + 2R (\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_D)^2 + 2\bar{R} (\partial_{\bar{\mathcal{Z}}} \mathcal{H}_D)^2 + 2(1 + R\bar{R}) |\partial_{\bar{\mathcal{Z}}} \mathcal{H}_D|^2] \quad (\text{A.96})$$

où le premier terme disparaît pour $\hbar \rightarrow 0$. Finalement, pour $\hbar \rightarrow 0$, l'angle est :

$$\alpha_D = \hbar \left(\frac{|(\partial_{\mathcal{Z}} + \bar{R} \partial_{\bar{\mathcal{Z}}})^3 \mathcal{H}_{cl}(\mathcal{Z})|^2}{\Upsilon^2 6 [R ((\partial_{\mathcal{Z}} \mathcal{H}_{cl})^2 + \bar{R} (\partial_{\bar{\mathcal{Z}}} \mathcal{H}_{cl})^2 + (1 + R\bar{R}) |\partial_{\bar{\mathcal{Z}}} \mathcal{H}_{cl}|^2)]} \right)^{1/2} + o(\hbar) \quad (\text{A.97})$$

Appendice B

Propriétés d'une dynamique classique intégrable sur le tore.

(Voir le paragraphe 7.1, page 75)

Dans cet appendice, nous considérerons une dynamique à un degré de liberté définie par un Hamiltonien $\mathcal{H}(q, p)$ périodique en position q et en impulsion p .

Il se trouve qu'il y a de fortes restrictions sur les valeurs possibles d'un couple (n_1, n_2) (classe d'homotopie) associé à une trajectoire. Cela est lié au fait que les trajectoires dans l'espace de phase ne se coupent pas (par un point passe une trajectoire unique) et au fait que dans notre cas à un degré de liberté, les trajectoires sont les lignes de niveau de la fonction \mathcal{H} .

1. Il ne peut pas y avoir que des trajectoires contractibles (le modèle de Haper (7.3) avec $V_1 = V_2$ et une séparatrice non contractible, est un cas extrême).
2. Ensuite, n_1 et n_2 sont premiers entre eux. Avec la condition supplémentaire que si $n_1 = 0$, alors $n_2 = -1, 0$ ou 1 . (Et de même, si $n_2 = 0$, alors $n_1 = -1, 0$ ou 1). Voir la figure (B.2).
3. Si il y a une trajectoire de type (n_1, n_2) alors il y a aussi une trajectoire de type $(-n_1, -n_2)$ de même énergie.
4. La condition la plus restrictive et qui est globale à toutes les trajectoires, est que pour un Hamiltonien donné \mathcal{H} , si il y a une trajectoire de type $(n_1, n_2) \neq (0, 0)$, alors le type des autres trajectoires est soit $(0, 0)$, soit (n_1, n_2) , soit $(-n_1, -n_2)$.

5. Pour tout couple (n_1, n_2) donné et vérifiant les conditions ci-dessus, il existe un Hamiltonien générant une trajectoire de ce type. Par exemple : $\mathcal{H}(q, p) = \cos(n_2q - n_1p)$.

Esquisse de démonstration :

La propriété qu'il n'y ait pas que des trajectoires contractibles peut se justifier par la théorie de Morse [89]. Soit le domaine $D_E = \{(q, p) \text{ t.q. } \mathcal{H}(q, p) < E\}$. Pour $E_{min} = \min_{q,p} \mathcal{H}(q, p)$, $D_{E_{min}}$ est un point (cas générique), donc $D_{E_{min}}$ est contractible. De plus le bord de D_E : $\partial D_E = \{(q, p) \text{ t.q. } \mathcal{H}(q, p) = E\}$ est un ensemble fini de trajectoires. Si toutes les trajectoires étaient contractibles, D_E serait contractible pour toute valeur de E . Or $D_{E_{max}} = T^2$ est non contractible pour $E_{max} = \max_{q,p} \mathcal{H}(q, p)$.

Les trajectoires ne se coupent pas, si bien que le type non contractible $(0, n)$ est impossible sauf si $n = \pm 1$; voir la figure B.2. Dans ce cas, une telle trajectoire (disons de type $(0, +1)$) "découpe" le tore en un cylindre, voir figure B.1. Les autres trajectoires non contractibles sont alors de type $(0, \pm 1)$. D'autre part, si cette trajectoire est d'énergie $E = 0$, de part et d'autre, l'énergie change de signe, les trajectoires d'énergie positive se situant à gauche de la trajectoire. Il y a donc ailleurs sur le tore au moins une autre trajectoire de même énergie $E = 0$, de type $(0, -1)$; voir la figure B.1.

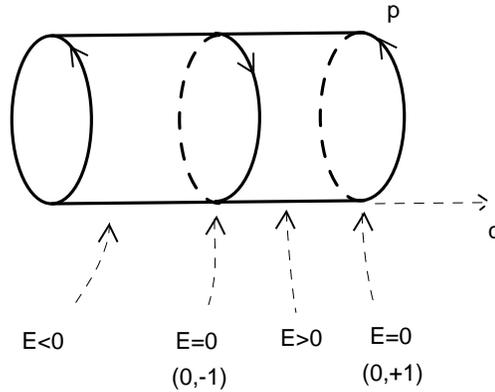


Figure B.1: Une trajectoire de type $(0, +1)$ découpe le tore en un cylindre.

D'autres cas où les trajectoires sont de type $(\pm n_1, \pm n_2)$ s'obtiennent par changement de réseau avec la relation (B.2) ci-dessous (avec $n_1 = b$; $n_2 = d$). Or $ad - bc = 1$ donc n_1 et n_2 sont premiers entre eux d'après le théorème de Bezou.

Remarque : Le tore est une surface non simplement connexe, c'est à dire qu'il existe des lacets non réductibles à un point. Il en résulte qu'il existe des champs de vecteurs,

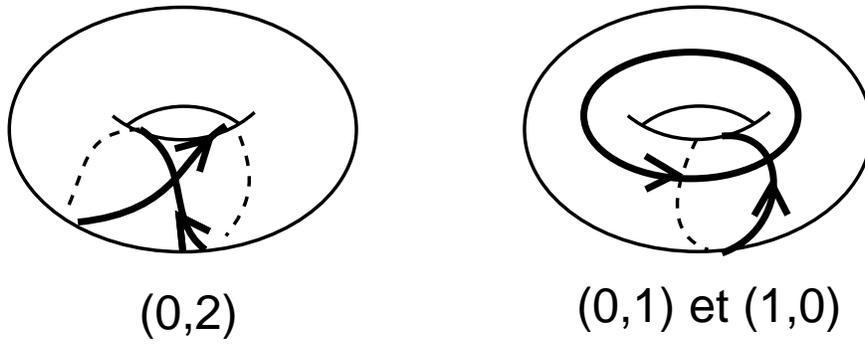


Figure B.2: *Illustration de trajectoires non critiques impossibles, car se coupant.*

générateurs de transformation canonique, mais qui ne sont pas des gradients symplectiques d'une fonction de Hamilton \mathcal{H} définie globalement, mais seulement localement. C'est le cas par exemple du champ générateur des translations $\dot{q} = 0 \quad \dot{p} = 1$. Voir [21] page 217. Dans cet exemple, il n'y a que des trajectoires de type $(0, 1)$ et pas $(0, -1)$. Cela ne pourrait pas être le cas pour des trajectoires générées par une fonction de Hamilton.

Remarque : Supposons que un Hamiltonien donné engendre des trajectoires non contractibles de type (n_1, n_2) et $(-n_1, -n_2)$. Alors il est possible de d'effectuer le quotient du plan par un autre réseau $\Gamma' = (m'\vec{Q}' + n'\vec{P}')_{m',n' \in \mathbb{Z}^2}$, de façon à ce que les réseaux Γ' et $\Gamma = (m\vec{Q} + n\vec{P})_{m,n \in \mathbb{Z}^2}$ coïncident, et que sur le tore \mathbb{R}^2/Γ' , les trajectoires non contractibles soient simplement de type $(0, 1)$ ou $(0, -1)$. Cette deuxième condition est vérifiée si l'on choisit : $\vec{P}' = n_1\vec{Q} + n_2\vec{P}$.

Et les deux réseaux coïncident si et seulement si il existe une matrice :

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in \text{SL}(2, \mathbb{Z}) \quad (\text{B.1})$$

(i.e. M est à coefficient entiers, et tels que $ad - bc = 1$), telle que :

$$\begin{pmatrix} \vec{Q}' \\ \vec{P}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{Q} \\ \vec{P} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

(la démonstration peut se trouver dans [20], page 267).

Ici, on choisit donc de prendre $c = n_1$; $d = n_2$. Ensuite $a, b \in \mathbb{Z}^2$ tels que $an_2 - bn_1 = 1$ existent du fait que n_1 et n_2 sont premiers entre eux, et d'après le théorème d'arithmétique de Bezou.

Notons aussi que la matrice M est inversible, et :

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} n_2 & -b \\ -n_1 & a \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

Cette remarque fait que en toute généralité, pour l'étude de trajectoires non-contractibles, il suffit d'étudier des trajectoires de type $(0, 1)$ et $(0, -1)$, et savoir transposer les résultats. Au niveau quantique, une telle équivalence existe, nous y reviendrons dans l'appendice C. Il y a une autre particularité propre aux trajectoires Hamiltoniennes sur le tore, qu'il est intéressant de noter. Elle concerne le nombre et la nature des points fixes de la dynamique. Un point fixe (q_0, p_0) vérifie par définition, d'après (7.2) :

$$0 = \partial_t q_0 = \partial_p \mathcal{H} \quad 0 = \partial_t p_0 = -\partial_q \mathcal{H} \quad (\text{B.4})$$

et donc les points fixes sont les points singuliers de la fonction $\mathcal{H}(q, p)$.

Nous pouvons différencier ces points fixes selon la nature des trajectoires linéarisées à leur voisinage (elliptique ou hyperbolique). Elle est caractérisée par le signe des valeurs propres λ_1, λ_2 de la matrice des dérivées deuxièmes de \mathcal{H} , aussi appelée Hessien [89]. Voir la figure (B.3)

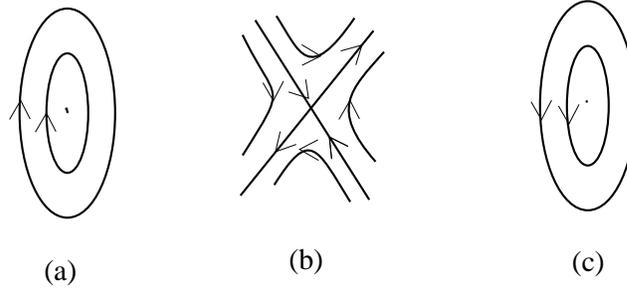


Figure B.3: *Différentes natures de points fixes.*

- (a) *Point fixe stable. Minimum local de \mathcal{H} . $\lambda_1, \lambda_2 > 0$.*
- (b) *Point fixe instable. Point selle de \mathcal{H} . $\lambda_1 > 0, \lambda_2 < 0$.*
- (c) *Point fixe stable. Maximum local de \mathcal{H} . $\lambda_1, \lambda_2 < 0$.*

La théorie de Morse [89] permet d'établir que : $n_s - n_i = 0$ ($0 =$ caractéristique d'Euler du tore) ,

avec : $n_s =$ nombre de points stables

$n_i =$ nombre de points instables

Par exemple pour le modèle de Harper de la figure (7.1), $n_s = n_i = 2$.

Ces différentes remarques d'ordre topologique sur la dynamique classique, ont une im-

portance dans la dynamique quantique, et cela est mit en évidence au chapitre 9 " Distribution de Husimi" où l'on présente un traitement semi-classique des états stationnaires.

Appendice C

Remarque sur le réseau dual.

(Voir le paragraphe 7.2, page 79)

Dans une remarque de l'appendice B, nous avons évoqué le fait que effectuer le quotient du plan par un réseau particulier Γ' permet d'obtenir une dynamique classique sur le tore où les seules trajectoires non contractibles sont de type $(0, \pm 1)$. Voyons comment cela est transposé au niveau quantique, en reprenant les notations déjà utilisées.

Tout d'abord, les opérateurs de translation élémentaire associés au nouveau réseau sont d'après (B.2) :

$$\begin{cases} \hat{T}_{\vec{Q}'} = \hat{T}_{\vec{Q}}^a \hat{T}_{\vec{P}}^b (-1)^{Nab} \\ \hat{T}_{\vec{P}'} = \hat{T}_{\vec{Q}}^{n_1} \hat{T}_{\vec{P}}^{n_2} (-1)^{Nn_1n_2} \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

inversement d'après (B.3) :

$$\begin{cases} \hat{T}_{\vec{Q}} = \hat{T}_{\vec{Q}'}^{n_2} \hat{T}_{\vec{P}'}^{-b} (-1)^{Nn_2b} \\ \hat{T}_{\vec{P}} = \hat{T}_{\vec{Q}'}^{-n_1} \hat{T}_{\vec{P}'}^a (-1)^{Nn_1a} \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

On en déduit alors que :

$$[\hat{T}_{\vec{Q}}, \hat{T}_{\vec{P}}] = 0 \Leftrightarrow [\hat{T}_{\vec{Q}'}, \hat{T}_{\vec{P}'}] = 0 \quad (\text{C.3})$$

$$[\hat{H}, \hat{T}_{\vec{Q}}] = [\hat{H}, \hat{T}_{\vec{P}}] = 0 \Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{T}_{\vec{Q}'}] = [\hat{H}, \hat{T}_{\vec{P}'}] = 0 \quad (\text{C.4})$$

La diagonalisation peut donc se faire dans les sous-espaces propres $\mathcal{H}'_N(\theta'_1, \theta'_2)$ de $\hat{T}_{\vec{Q}'}$ et $\hat{T}_{\vec{P}'}$, et on obtient l'identité :

$$\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2) = \mathcal{H}'_N(\theta'_1, \theta'_2) \quad (\text{C.5})$$

avec :

$$\begin{cases} \theta'_1 = a\theta_1 + b\theta_2 \\ \theta'_2 = n_1\theta_1 + n_2\theta_2 \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

Cette équivalence tant au niveau classique que quantique fait que l'étude des trajectoires non contractibles sur le tore et leur quantification, pour une dynamique intégrable, se ramène à l'étude des trajectoires non contractibles de type $(0, \pm 1)$. Il apparait aussi que de changer de réseau périodique Γ sur le plan, revient à changer de systèmes de coordonnées pour (θ_1, θ_2) , ou encore à passer au réseau dual Γ^* .

Appendice D

Etats de base de position et d'impulsion

(Voir le paragraphe 7.2, page 79)

Regardons l'action particulière de l'opérateur de projection $P_{(\theta_1, \theta_2)}$ sur les états propres de position $|q\rangle$. (Par définition, $\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$ et $\hat{T}_Q|q\rangle = |q+Q\rangle$).

Tout d'abord rendons périodique l'état $|q\rangle$ en impulsion avec la phase $\theta_2 \in [0; 2\pi]$. A l'aide de (7.25) et (7.23), nous trouvons :

$$P_{\theta_2}|q\rangle = |q\rangle \frac{1}{\mathcal{N}} \left(\sum_{n_2 \in \mathbb{Z}} e^{i(2\pi N \frac{q}{Q} - n_2 \theta_2)} \right) \quad (\text{D.1})$$

Donc $P_{\theta_2}|q\rangle \neq 0$ si et seulement si il existe $n \in \mathbb{Z}$ tel que $\frac{2\pi N q}{Q} - n_2 \theta_2 = 2\pi n$, c'est à dire : $\frac{q_n}{Q} = \frac{1}{N} \left(n + \frac{\theta_2}{2\pi} \right)$.

Dans ce cas $P_{\theta_2}|q_n\rangle = |q_n\rangle$. Donc seul un ensemble discret d'états de position $|q_n\rangle$ ont une projection non nulle sous P_{θ_2} .

L'action de l'opérateur P_{θ_1} donne pour sa part :

$$P_{\theta_1}|q\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \left(\sum_{n_1 \in \mathbb{Z}} e^{-in_1 \theta_1} |q + n_1 Q\rangle \right) \quad (\text{D.2})$$

Finalement la projection par $P_{(\theta_1, \theta_2)} = P_{\theta_1} P_{\theta_2}$ d'un état de position $|q\rangle$ est non nulle si q est de la forme :

$$q_n = \frac{Q}{N} \left(n + \frac{\theta_2}{2\pi} \right) \quad n \in \mathbb{Z} \quad (\text{D.3})$$

et la projection est alors :

$$|n; \vec{\theta}\rangle \equiv P_{(\theta_1, \theta_2)} |q_n\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}} e^{-in_1 \theta_1} |q_n + n_1 Q\rangle \quad (\text{D.4})$$

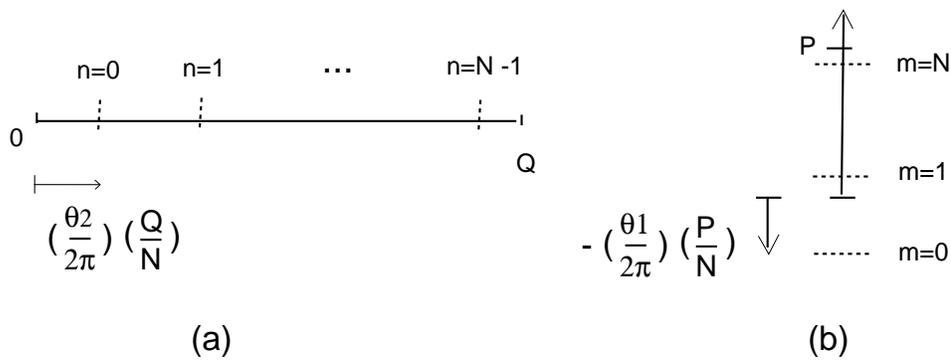


Figure D.1: Représentation des valeurs de position possibles q_n (a) , et impulsion p_m (b).

Ces vecteurs "de position sur le tore" $|n; \vec{\theta}\rangle \in \mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ vérifient :

$$\begin{cases} |(n+N); \vec{\theta}\rangle = e^{i\theta_1} |n; \vec{\theta}\rangle \\ |n; (\theta_1 + 2\pi, \theta_2)\rangle = |n; (\theta_1, \theta_2)\rangle \\ |n; (\theta_1, \theta_2 + 2\pi)\rangle = |(n+1); (\theta_1, \theta_2)\rangle . \end{cases} \quad (\text{D.5})$$

Il n'y a donc en fait , à (θ_1, θ_2) fixé, que N états différents, par exemple la série $|n; \vec{\theta}\rangle$ pour $n = 0 \rightarrow (N-1)$.

A partir de la relation de fermeture $I_{\mathcal{H}} = \int dq |q\rangle \langle q|$, nous déduisons que :

$$P_{(\theta_1, \theta_2)} \equiv \sum_{n=0}^{N-1} |n; \vec{\theta}\rangle \langle n; \vec{\theta}| = I_{\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)} \quad (\text{D.6})$$

Et les vecteurs $|n; \vec{\theta}\rangle$ pour $n = 0 \rightarrow (N-1)$ sont linéairement indépendants et sont obtenus par projection de la base $|q\rangle$ de \mathcal{H} . Ils forment donc une base du sous-espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$. Nous déduisons donc que les sous-espaces $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ sont de dimension N (7.13).

La figure (D.1) représente les valeurs possibles de position $q_n \in [0, Q]$.

Les états de position $|n, \vec{\theta}\rangle$ forment comme un peigne en position, également espacé, et dont le décalage à l'origine est lié à la valeur de θ_2 . L'effet de la phase θ_1 ne se voit pas sur cette figure, elle change la structure de chaque vecteur $|n, \vec{\theta}\rangle$, (D.4).

Cette figure illustre aussi les relations (D.5).

Nous pouvons procéder de la même façon, en projetant les états propres d'impulsion :

$$(\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle ; \hat{T}_P|p\rangle = |p+P\rangle)$$

Cette fois-ci $P_{\theta_1}|p\rangle = 0$ sauf si :

$$p = p_m = \frac{P}{N} \left(m - \frac{\theta_1}{2\pi} \right) \text{ avec } m \in \mathbb{Z} \quad (\text{D.7})$$

et l'on pose :

$$|m; \vec{\theta}\rangle \equiv P_{(\theta_1, \theta_2)} |p_m\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n_2 \in \mathbb{Z}} e^{-in_2 \theta_2} |p_m + n_2 P\rangle \quad (\text{D.8})$$

La relation de fermeture sur $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$ s'écrit :

$$P_{(\theta_1, \theta_2)} = \sum_{m=0}^{N-1} |m; \vec{\theta}\rangle \langle m; \vec{\theta}| = I_{\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)} \quad (\text{D.9})$$

Ces vecteurs "d'impulsion sur le tore" $|m; \vec{\theta}\rangle$, pour $m = 0 \rightarrow (N-1)$ forment aussi une base de $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$, et sont représentés sur l'axe des impulsions par les valeurs de p_m . Cette fois-ci, c'est θ_1 qui correspond au décalage du "peigne" avec l'origine. Voir la figure (D.1)

Finalement, de même que : $\langle q|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{i\frac{qp}{\hbar}}$, nous avons ici le produit scalaire :

$$\begin{aligned} \langle n, \vec{\theta} | m, \vec{\theta} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\frac{2\pi N}{QP} q_n p_m} \\ &= \frac{\sqrt{QP}}{N} \langle q_n | p_m \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\frac{2\pi}{N} \left(n + \frac{\theta_2}{2\pi} \right) \left(m - \frac{\theta_1}{2\pi} \right)} \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

Le coefficient $\frac{1}{\sqrt{N}}$ est choisi tel que les états $|n, \vec{\theta}\rangle$ et $|m, \vec{\theta}\rangle$ soient normalisés par les relations de fermeture (D.6) et (D.9). Maintenant que nous avons obtenu des bases finies pour chaque sous-espace $\mathcal{H}_N(\theta_1, \theta_2)$, il nous reste à diagonaliser l'opérateur \hat{H} dans chacun de ces sous-espaces, afin de trouver les vecteurs propres et valeurs propres correspondantes (7.14).

Voici comment calculer les éléments de matrice de l'opérateur particulier $\hat{H} = \mathcal{H}(\hat{q})$, ne dépendant pas de \hat{p} , dans la base $|n, \vec{\theta}\rangle$. D'après les équations (7.6, 7.27), nous avons $[\mathcal{H}(\hat{q}), P_{\vec{\theta}}] = 0$, et donc :

$$\begin{aligned} \langle n, \vec{\theta} | \mathcal{H}(\hat{q}) | n, \vec{\theta} \rangle &= \langle q_n | P_{\vec{\theta}}^+ \mathcal{H}(\hat{q}) P_{\vec{\theta}} | q_n \rangle \\ &= \langle q_n | P_{\vec{\theta}}^+ \mathcal{H}(\hat{q}) | q_n \rangle = \langle n, \vec{\theta} | n, \vec{\theta} \rangle \mathcal{H}(q_n) \\ &= \mathcal{H}(q_n) \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

Pour des termes contenant l'opérateur \hat{p} , il nous faudra introduire les états d'impulsion à l'aide de l'identité (D.9).

Appendice E

Eléments de matrice d'un Hamiltonien indépendant du temps.

(Voir le paragraphe 7.2, page 79)

Comme nous l'avons vu au paragraphe 7.1, un Hamiltonien $\mathcal{H}(q, p)$ générateur de trajectoires sur l'espace de phase T^2 , est une fonction périodique en q et p .

La fonction $\mathcal{H}(q, p)$ peut se décomposer en séries de Fourier :

$$\mathcal{H}(q, p) = \sum_{n, m \in \mathbb{N}} b_{n, m} \cos\left(n2\pi\frac{q}{Q} + u_n\right) \cos\left(m2\pi\frac{p}{P} + v_m\right) \quad (\text{E.1})$$

C'est pourquoi nous décidons d'étudier un Hamiltonien d'expression :

$$\mathcal{H}_1(q, p) = -V_q \cos\left(t_q 2\pi\frac{q}{Q} + u_q\right) - V_p \cos\left(t_p 2\pi\frac{p}{P} + u_p\right) \quad (\text{E.2})$$

avec $t_q, t_p \in \mathbb{N}^*$, $V_q, V_p, u_q, u_p \in \mathbb{R}$.

Les différents Hamiltoniens qui seront traités dans les études numériques, seront composés comme des combinaisons linéaires de termes de la forme \mathcal{H}_1 (E.2), ou \mathcal{H}_2 (E.5). (Le modèle de Harper (7.3) est un exemple).

Nous obtenons l'Hamiltonien quantique par la procédure de quantification de Weyl :

$$\hat{H}_1 = -V_q \cos\left(t_q 2\pi\frac{\hat{q}}{Q} + u_q\right) - V_p \cos\left(t_p 2\pi\frac{\hat{p}}{P} + u_p\right) \quad (\text{E.3})$$

On en déduit alors les éléments de matrice de \hat{H}_1 dans la base $|n, \vec{\theta}\rangle$ de dimension N , pour $n = 0 \rightarrow N - 1$, en utilisant les relations (D.11) :

$$\begin{aligned} \langle n', \vec{\theta} | \hat{H}_1 | n, \vec{\theta} \rangle &= -V_q \cos\left[\frac{t_q}{N}(2\pi n + \theta_2) + u_q\right] \delta(n' - n) & (a) \\ &- \frac{V_p}{2} e^{-i\frac{\theta_1}{N}(t_p + n' - n) + iu_p} \sum_k \delta(n' - n + t_p + kN) & (b) \\ &- \frac{V_p}{2} e^{-i\frac{\theta_1}{N}(-t_p + n' - n) - iu_p} \sum_k \delta(n' - n - t_p + kN) & (c) \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

et dont la répartition est schématisée sur la figure E.1 :

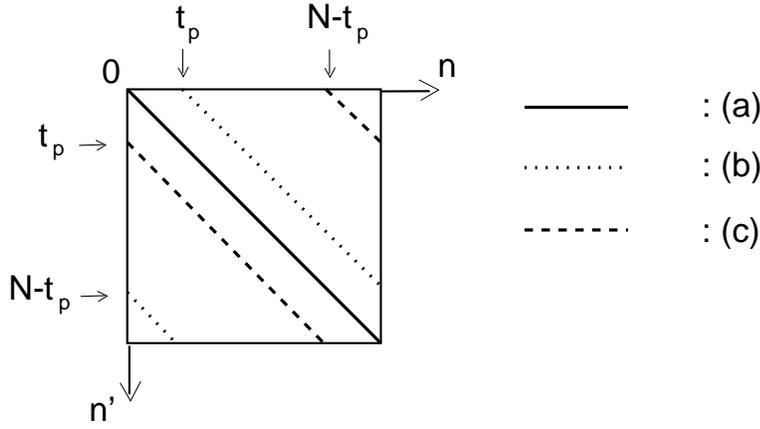


Figure E.1: Eléments de matrice de \hat{H}_1 dans la base $|n, \vec{\theta}\rangle$

Il sera utile dans l'étude de l'indice de Chern associé à une séparatrice, de considérer un Hamiltonien contenant des termes de la forme :

$$\mathcal{H}_2(q, p) = -A \cos\left(2\pi a_q \frac{q}{Q} + aa_q\right) \cos\left(2\pi a_p \frac{p}{P} + aa_p\right) \quad (\text{E.5})$$

L'opérateur quantique correspondant par la quantification symétrique de Weyl est :

$$\begin{aligned} \hat{H}_2 = & -\frac{A}{2} \cos\left(a_q 2\pi \frac{\hat{q}}{Q} + aa_q\right) \cos\left(a_p 2\pi \frac{\hat{p}}{P} + aa_p\right) \\ & -\frac{A}{2} \cos\left(a_p 2\pi \frac{\hat{p}}{P} + aa_p\right) \cos\left(a_q 2\pi \frac{\hat{q}}{Q} + aa_q\right) \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

(Les deux termes font que \hat{H}_2 est hermitique.)

Et les éléments de matrice sont :

$$\begin{aligned} \langle n', \vec{\theta} | \hat{H}_2 | n, \vec{\theta} \rangle = & -A \left(\cos\left[\frac{a_q}{N}(2\pi n' + \theta_2) + aa_q\right] + \cos\left[\frac{a_q}{N}(2\pi n + \theta_2) + aa_q\right] \right) \\ & \left(\frac{1}{2} e^{-i\frac{\theta_1}{N}(a_p + n' - n) + ia_a p} \sum_k \delta(n' - n + t_p + kN) \right) \quad (\text{b}) \\ & + \frac{1}{2} e^{-i\frac{\theta_1}{N}(-a_p + n' - n) - ia_a p} \sum_k \delta(n' - n - t_p + kN) \quad (\text{c}) \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

Appendice F

Structure géométrique de la famille des états cohérents du tore.

(Voir le paragraphe 8.1, page 90)

En envisageant la limite semi-classique par l'approche géométrique décrite dans la partie 1, l'espace de phase toroïdal est constitué des états cohérents du tore, et est inclu dans l'espace projectif.

La section holomorphe locale du fibré en droite, utile dans les différentes formules, est ici donnée par (8.1). Globalement, il s'agit d'un relèvement holomorphe multivalué du tore (recouvrement universel, simplement connexe). On remarque aussi qu'il y a un "espace de phase" pour chaque valeur de (θ_1, θ_2) .

La forme symplectique Ω qui permet d'écrire les équations de Hamilton, et la connexion de Berry \mathcal{A} qui intervient dans la quantification de trajectoires périodiques sont d'après (1.28) et (1.29) :

$$\begin{aligned}\Omega &= i(\partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \langle z, \vec{\theta} | z, \vec{\theta} \rangle) dz \wedge d\bar{z} \\ \mathcal{A} &= \frac{1}{2}(\partial_z \ln \langle z, \vec{\theta} | z, \vec{\theta} \rangle) dz - \frac{1}{2}(\partial_{\bar{z}} \ln \langle z, \vec{\theta} | z, \vec{\theta} \rangle) d\bar{z}\end{aligned}\tag{F.1}$$

Or d'après (8.8) :

$$\begin{aligned}\ln \langle z, \vec{\theta} | z, \vec{\theta} \rangle &= \ln \langle z | z \rangle + \ln {}_n \langle 0 | P_{\vec{\theta}+\vec{\theta}'} | 0 \rangle_n \\ &= z\bar{z} + \ln {}_n \langle 0 | P_{\vec{\theta}+\vec{\theta}'} | 0 \rangle_n\end{aligned}\tag{F.2}$$

d'après l'expression asymptotique (8.12), le deuxième terme, ainsi que ses dérivées tendent exponentiellement vite vers 0, pour $N \rightarrow +\infty$. Donc :

$$\begin{aligned}\Omega &= idz \wedge d\bar{z} + o(N^{-\infty}) = \frac{1}{\hbar} dq \wedge dp + o(N^{-\infty}) \\ \mathcal{A} &= \frac{1}{2}\bar{z}dz - \frac{1}{2}z d\bar{z} + o(N^{-\infty}) = \frac{i}{2\hbar}(qdp - pdq) + o(N^{-\infty})\end{aligned}\tag{F.3}$$

Les expressions de \mathcal{A} et Ω deviennent donc indépendantes de (θ_1, θ_2) , et s'identifient à celles des états cohérents standard (2.20). La forme symplectique Ω est réellement indépendante de (θ_1, θ_2) , et l'on retrouve que la limite classique est indépendante de (θ_1, θ_2) . Néanmoins, la connexion est exprimée par \mathcal{A} , relativement à la section multivaluée $|z, \vec{\theta}\rangle$, et d'après la relation (8.4), (θ_1, θ_2) interviennent pour le passage d'un relèvement local à un autre. Par conséquent, (θ_1, θ_2) interviennent dans l'expression de la phase de Berry d'une trajectoire non contractible, et cela joue lors de la quantification semi-classique de telles trajectoires, au paragraphe 9.2.

Bibliographie

- [1] M. Gutzwiller "*Chaos in classical and quantum mechanics*" (Springer- Verlag) (1990).
- [2] J.P. Blaizot and G. Ripka "*Quantum theory of finite systems*" MIT Press (1986).
- [3] K. Hepp *Comm. Math. Phys.* **35**, 265 (1974).
- [4] G.A. Hagedorn *Ann. of Phys. (N.Y.)* **135** , 58 (1981). "*semi-classical quantum mechanics III. The large order asymptotics and more general states*".
- [5] "*Chaos and Quantum Physics*", edited by M.J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin, Les Houches Session LII, 1989 (Elsevier, Amsterdam,1991).
- [6] R.G. Littlejohn, "*The semiclassical evolution of wave-packets*" *Phys. Rep.* **138**, 193 (1986).
- [7] M. Combescure *J. Math. Phys.* **33**, 3870 (1992) "*The squeezed state approach of the semi-classical limit of the time-dependent Schrödinger equation*".
- [8] W. M. Zhang, D. H. Feng and R. Gilmore, "*Coherent states: theory and some applications*" *Rev. of Modern Phys.* **62**, 867 (1990).
- [9] K.V. Klitzing, G. Dorda, M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980). "*New method for high-Accuracy Determination of the fine structure constant based on quantized Hall resistance*".
- [10] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982). "*Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential*".

- [11] D. P. Arovas, P. N. Bhatt, F. D. M. Haldane, P. B. Littlewood and R. Rammal, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 619 (1988). "*Localization, Wave function topology, and the integer quantized Hall effect*".
- [12] D. J. Thouless, "*Electrons in disordered systems and the theory of localization*" *Phys. Rep.* **13**, 93 (1974).
- [13] G. Petschel and T. Geisel "*Bloch electrons in magnetic Fields: Classical chaos and Hofstadter's Butterfly*" *Phys. Rev. Lett.* **71**, 239 (1993).
- [14] P. Leboeuf, J. Kurchan, M. Feingold and D. P. Arovas, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3076 (1990); *Chaos* **2** 125 (1992). "*Phase-space localization: topological aspects of quantum chaos*".
- [15] P. Leboeuf, A. Voros, "*Quantum nodal points as fingerprints of classical chaos*" Preprint.
- [16] M.V. Berry "*Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*" *Proc. Roy. Soc. Lond.* 392, 45 (1984).
- [17] V.B. Pavlov-Verevkin, D.A. Sadovskii, B.I. Zhilinskii *Euro-Physics Letters* **6**, 573 (1988) "*On the dynamical meaning of the diabolic points*".
- [18] D. Bicout, P.A. Hervieux, J. Riess, *Phys. Rev. B* **46**, 9577 (1992). "*Time evolution of perturbed Landau functions and quantization of the Hall conductance*".
- [19] J. Anandan and Y. Aharonov, "*Geometry of quantum evolution*" *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1697 (1990).
- [20] M. Nakahara, "*Geometry, topology and physics*", graduate students series in physics, Adam Hilger, Bristol and N.Y.
- [21] V. Arnold "*Les méthodes mathématiques de la mécanique classique*" Ed. Mir. Moscou (1976).
- [22] A.K. Pati, A. Joshi "*A geometric meaning to the probabilities of two-state quantum systems*", *Euro-Physics Letters* **21**, 723 (1993).
- [23] B. Simon, "*Holonomy, the quantum adiabatic theorem and Berry's phase*" *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2167 (1983).

- [24] Y. Aharonov and J. Anandan, "Phase change during a cyclic quantum evolution" *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1593 (1987).
- [25] C. Cohen Tanoudji et al. , "Mécanique quantique".
- [26] A. M. Perelomov, "Generalized coherent states and their applications" (Springer, Berlin) 1986.
- [27] J.R. Klauder and B.S. Skagerstam *Coherent states, Applications in physics and mathematical physics*, World Scientific (1984).
- [28] R. Omnès "A consistent interpretation of quantum theory" *Rev. of Modern Phys.* **64**, 339 (1992).
- [29] K. Takahashi, "Chaos and time development of quantum wave packet in Husimi representation" *J. of the Phys. Soc. of Japan* **55**, 1443, (1986).
- [30] , S. Adachi, "A numerical evaluation of the semi-classical coherent state path integral" *Ann. of Phys. (N.Y.)* **195** , 45, (1989).
- [31] K. Takahashi, *Progress of Theor. Phys.* **98**, 109 (1989) "Distribution functions in classical and quantum mechanics".
- [32] E.J. Heller *Frozen gaussians : a very simple semi-classical approximation* *J. of chemical phys.* vol. 75, no 6 , 2923 (1981).
- [33] Y. Tsue, "Maslov phase as geometric phase in the time-dependent variational approach with squeezed coherent states" *Progress of Theor. Phys.* **88**, 911 (1992).
- [34] A.M. Ozorio de Almeida "Hamiltonian systems, chaos and quantization" Cambridge university press 1988.
- [35] R.G. Littlejohn, " Wave-Packet Evolution and quantization" *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2000 (1986).
- [36] R.G. Littlejohn, "Cyclic evolution in quantum mechanics and Phases of Bohr-Sommerfeld and Maslov", *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2159 (1988).
- [37] F. Faure and P. Leboeuf "Structure of wave functions on the torus characterized by a topological Chern index" in conference Proceedings Vol. 41 " from Classical to Quantum chaos" G.F. Dell'Antonio, S. Fantoni and V.R. Manfredi (Eds.) SIF Bologna 1993.

- [38] D.R. Hofstadter, " *Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields*" *Phys. Rev. B* **14**, 6 , 2239 (1976).
- [39] " *L'avènement de la nano-électronique*" *La recherche* 237, Nov. 1991, 1298.
- [40] Y.S. Wu " *Topological aspects of the quantum Hall effect*" Proceedings at NATO Advanced Summer institute " *Physics, Geometry and topology*" at Banff, Alberta, Canada, August 14-25,1989.
- [41] Cours de Yves Colin de Verdière, " *Analyse semi-classique*" à l'institut Fourier.
- [42] B. Simon, " *Holonomy, the quantum adiabatic theorem and Berry's phase*" *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2167 (1983).
- [43] M. Wilkinson, " *Critical properties of electron eigenstates in incommensurate systems*" *Proc. R. Soc. Lond. A* **391**, 305 (1984).
- [44] A. Barelly, C. Kreft, " *Braid structure in a Harper model as an example of phase space tunneling*" *J. Phys. I France* **1** 1229 (1991).
- [45] T. Geisel, R. Ketzmerick and G. Petschel " *Unbounded quantum diffusion and a new class of level statistics*" in Proceedings of " *Quantum chaos - Quantum measurement*" P. Cvitanovic et al. (eds.), 43 (1991).
- [46] Thèse de Armelle Barelly " *Approche algébrique de la limite semi-classique. Electrons bidimensionnels en champs magnétique et localisation dynamique*". Université Paul Sabatier de Toulouse n° 1250.
- [47] S. Tomsovic and E.J. Heller, *Phys. Rev. E* **47**, 282 (1993). " *Long-time semi-classical dynamics of chaos: the stadium billiard*".
- [48] P. Leboeuf and A. Voros " *Chaos-revealing multiplicative representation of quantum eigenstates*" *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, 1765 (1990).
- [49] A. Voros, P. Leboeuf, " *Multiplicative formulation of quantum mechanics*" Preprint Saclay Spht /91-179.
- [50] P. Leboeuf " *Phase space approach to quantum dynamics*" *J. Phys. A: Math. Gen.* **24**, 4575 (1991).
- [51] P. Leboeuf, M. Saraceno, *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, 1745, (1990).

- [52] A. Voros "Wentzel-Kramers-Brillouin method in the Bargmann representation" *Phys. Rev. A* **40**, 6814 (1989).
- [53] J. Kurchan, P. Leboeuf, M. Saraceno "Semiclassical approximation in the coherent state representation" *Phys. Rev. A* **40**, 6800 (1989).
- [54] T. Paul, A Uribe "A construction of quasi-modes using coherent states" to appear in *Ann. Inst. H. Poincaré, Phys. théor.*
- [55] K. Takahashi, "Husimi functions around hyperbolic point" *J. of the Phys. Soc. of Japan* **55**, 1783, (1986).
- [56] B. Parisse and Y. Colin de Verdière, Preprint.
- [57] J.R. Cary, P. Rusu, "Separatrix eigenfunctions" *Phys. Rev. A* **45**, 8501 (1992).
- [58] R. Scharf, B. Sundaran, "Quantum signatures of homoclinic tangles and separatrices" *Phys. Rev. A* **45**, 3615 (1992).
- [59] R. Brummelhuis, T. Paul, A Uribe "Spectral estimates around a critical level" Preprint .
- [60] J. Robbins "Winding number formula for Maslov indices" *Chaos* **14**, 2 (1), (1992).
- [61] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, "Quantum Mechanics", Pergamon Press (1965).
- [62] Thèse de D. Ullmo "Manifestations quantiques de structures dans l'espace des phases classique." Université Paris 7.
- [63] O. Bohigas, S. Tomsovic and D. Ullmo "Manifestation of classical phase space structures in quantum mechanics." *phys. rep.*
- [64] O. Bohigas, D. Boosé, R. Egydio de Carvalho and V. Marvulle "Quantum tunneling and chaotic dynamics" *Nucl. Phys. A* **560** 197, (1993).
- [65] P. Kaminski, M. Płoszajczak and R. Arvieu "Quantum tunneling in the driven N-Body problem" Preprint Ganil, P93 13.
- [66] J. W. Milnor "Characteristic classes" Princeton university press 1974.
- [67] J. E. Avron, R. Seiler and B. Simon, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 51 (1983). "Homotopy and quantization in condensed matter physics".

- [68] J. W. Milnor "Topology from the differential viewpoint." Virginia university press 1965.
- [69] M. Khomoto, *Ann. of Phys. (N.Y.)* **160** , 343 (1985). "Topological invariant and the quantization of the Hall conductance".
- [70] Exposé de Yves Colin de Verdière "Fibrés en droites et valeurs propres multiples" à l'institut Fourier de Grenoble.le 17 déc. 1993.
- [71] "Geometric phases in physics" A. Shapere and F. Wilczek Advanced Series in Math. Physics Vol. 5.
- [72] J. von Neumann and E. Wigner, *Phys. Z.* 30, 467 (1929).
- [73] A. Messiah "mécanique quantique" Dunod (1964).
- [74] Y. Huo and R. N. Bhatt *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1375 (1992). "Current Carrying states in the lowest Landau Level".
- [75] M.V. Berry, N.L. Balazs, M. Tabor, A. Voros, "Quantum maps" *Ann. of Phys. (N.Y.)* **122** , 26, (1979).
- [76] F. Bensch, H.J. Korsch, B.Mirbach, V. Ben-Tal "E.B.K. quantization of quasi-energies" *J. Phys. A: Math. Gen.* **25**, 6761, (1992).
- [77] H.P. Breuer and M. Holthaus *Ann. of Phys. (N.Y.)* **211** , 249 (1991) "A semiclassical theory of quasienergies and Floquet Wave functions".
- [78] E. Bogomolny, O. Bohigas, P. Leboeuf, "Distribution of roots of random polynomials" *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2726 (1992).
- [79] Yves Colin de Verdière, *Comm. Math. Phys.*, 102, 497 (1985).
- [80] R. Aurich and F. Steiner "Quantum eigenstates of a strongly chaotic system and the scar phenomenon" Preprint desy 93-057 (1993).
- [81] O. Bohigas, S. Tomsovic, D. Ullmo *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1479 (1990) *Dynamical quasidegeneracies and separation of regular and irregular quantum levels.*
- [82] O. Bohigas, S. Tomsovic and D. Ullmo *Phys. Rev. Lett.* **65**, 5 (1990) "Classical transport effect on chaotic levels".

- [83] J.R. Klauder, "Path integrals and stationary-phase approximations" *Phys. Rev. D* **19**, 2349, (1979).
- [84] Y. Weissman, "On the stationary phase evaluation of path integrals in the coherent states representation" *J. Phys. A: Math. Gen.* **16**, 2693, (1983).
- [85] H.J. Lipkin, N. Meshkov, A.J. Glick " Validity of many body approximation methods for a solvable model." *Nucl. Phys.* **62** 188 (1965).
- [86] D. Bhaumik, A. Choudhury, M. De and B.D. Roy, "The Lipkin model and coherent states." *J. Math. Phys.* **22**, 508 (1981).
- [87] Communication privée de A. Mouchet et P. Leboeuf.
- [88] M. Hillery, R.F. O'Connell, m.O. Scully, E.P. Wigner *Phys. Rep.* **106**,3 ,121 (1984)
"Distribution functions in physics: fundamentals".
- [89] J. W. Milnor "Morse theory" Princeton university press 1969.