



**HAL**  
open science

# Marches quantiques sous champ magnétique et cages d'Aharonov-Bohm

Hugo Perrin

► **To cite this version:**

Hugo Perrin. Marches quantiques sous champ magnétique et cages d'Aharonov-Bohm. Physique Quantique [quant-ph]. Sorbonne Université, 2021. Français. NNT : 2021SORUS488 . tel-03722385

**HAL Id: tel-03722385**

**<https://theses.hal.science/tel-03722385v1>**

Submitted on 13 Jul 2022

**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.

**THÈSE DE DOCTORAT  
de Sorbonne Université**

**Spécialité : Physique**  
École doctorale n°564: Physique en Île-de-France

réalisée

au Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée

sous la direction de  
**Rémy MOSSERI**  
et Jean-Noël FUCHS

présentée par

**Hugo Perrin**

Sujet de la thèse :

**Marches quantiques sous champ magnétique  
et cages d'Aharonov-Bohm**

soutenue le Mardi 05 Octobre 2021

devant le jury composé de :

M.	ARRIGHI Pablo,	LRI Orsay	Examineur
M.	DALIBARD Jean,	LKB Paris	Examineur
M.	DELPLACE Pierre,	ENS Lyon	Rapporteur
M.	FUCHS Jean-Noël,	LPTMC Paris	Co-Directeur de thèse, Invité
M.	GEORGEOT Bertrand,	LPT Toulouse	Rapporteur
M <sup>me</sup>	MILMAN Pérola,	MPQ Paris	Examinatrice
M.	MOSSERI Rémy,	LPTMC Paris	Directeur de thèse



## Remerciements

Tout d'abord, je tiens sincèrement à remercier Rémy et Jean-Noël mes deux directeurs de thèse pour les trois superbes années que j'ai passé à leur côté à découvrir le monde de la recherche. Ils ont tous les deux été d'une incroyable gentillesse, toujours disponibles, prêts à discuter avec moi sans compter leur temps passé à m'expliquer des concepts physiques. Ils m'ont rapidement mis à l'aise et j'ai pu sans difficulté poser toutes les questions de physique (même les plus idiotes) que je voulais sans aucune retenue. Grâce à leur pédagogie, j'ai pu développer et affiner tout au long de mes trois années de thèse mon intuition physique. Les côtoyer au quotidien avec leur constante bonne humeur a rendu mon travail de thèse très agréable. La seule contre-partie était de rire à leurs nombreuses blagues dont le niveau laissait parfois à désirer. Je n'ai jamais eu le sentiment de "venir travailler" au laboratoire. Au contraire, ça a été un lieu où ma curiosité et ma passion pour la compréhension et l'apprentissage de nouveaux concepts s'en est trouvée exacerbée. Ils en sont en grande partie responsables et pour cela je leur en suis vraiment reconnaissant.

Je tiens également à remercier Bertrand Georgeot et Pierre Delplace d'avoir accepté d'être les rapporteurs de cette thèse ainsi que Jean Dalibard, Pérola Milman et Pablo Arrighi d'accepter d'être membres du jury de ma soutenance. Je remercie particulièrement Jean Dalibard pour m'avoir accueilli dans son bureau en première année de thèse et m'avoir donné l'opportunité de présenter mes travaux devant lui et son équipe. Je remercie également Pérola Milman pour avoir été ma tutrice de thèse.

J'ai aussi une pensée pour le LPTMC et ses membres. La très bonne ambiance qui règne au laboratoire a permis de m'épanouir durant ma thèse. Les différents échanges qui ont eu lieu en son sein ont stimulé ma curiosité pour d'autres domaines de la physique. Je remercie particulièrement Bertrand Delamotte, son directeur pour sa disponibilité, son écoute, ainsi que ses débats et opinions tranchées sur de nombreux sujets ayant eu lieu dans la salle café et dont la voix porte aisément jusqu'à la salle des doctorants. Je remercie aussi Nicolas Dupuis d'avoir été mon parrain de thèse. J'adresse un grand merci à mes collègues de bureau et de déjeuner en particulier à Romain, Marc, Alex, Saverio, Etienne, Jérémie, Tim, Damien et Grégoire pour leurs conversations plus ou moins délirantes. J'ai passé d'excellents moments que je ne suis pas prêt d'oublier. Plus que des collègues, ce sont maintenant des amis.

Enfin, j'aimerais exprimer ma gratitude envers mes amis et ma famille sur Paris et en Bretagne pour leur soutien sans faille. Les différents moments que j'ai pu passer avec eux hors du monde de la physique m'ont permis de prendre du recul sur ma thèse. Je remercie en particulier mes parents de m'avoir toujours soutenu dans mes études et particulièrement pendant cette étrange période de confinement. Ils m'ont accueilli de nouveau à la maison durant les différents confinements et m'ont offert un cadre idéal de travail pour poursuivre mes travaux de thèse. Pour finir, je suis également très reconnaissant du travail de relecture effectué par Morgane, Elise, Marie et Clément. Malgré le fait qu'ils ne soient pas physiciens de formation, ils se sont proposés spontanément pour corriger les nombreuses fautes d'orthographe qui s'y trouvaient. Grâce à eux la qualité du manuscrit s'en trouve nettement améliorée.



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>I Qu'est-ce qu'une marche quantique ?</b>	<b>5</b>
I.1 Marche quantique sur une chaîne . . . . .	5
I.1.1 Le protocole le plus simple . . . . .	6
I.1.2 Évolution de la marche quantique . . . . .	8
I.1.3 Transformée de Fourier de la marche quantique et quasi-énergies . . . . .	12
I.2 Marches quantiques sur un réseau carré . . . . .	18
I.2.1 Marche quantique à deux états internes . . . . .	19
I.2.2 Marches quantiques à quatre états internes . . . . .	25
a) Base tensorialisée . . . . .	25
b) Base naturelle . . . . .	31
I.3 Conclusion . . . . .	35
<b>II Effet d'un champ magnétique transverse à un réseau 2D</b>	<b>37</b>
II.1 Champ magnétique dans les hamiltoniens de liaisons fortes . . . . .	38
II.1.1 Équation dans le continu . . . . .	38
a) Niveaux de Landau . . . . .	38
b) Niveaux de Landau relativistes . . . . .	40
c) Couplage magnétique dans l'intégrale de chemin . . . . .	41
d) Phase d'Aharonov-Bohm . . . . .	43
II.1.2 Substitution de Peierls . . . . .	44
a) Approximation de Peierls . . . . .	44
b) Substitution dans l'hamiltonien de liaisons fortes sur réseau carré . . . . .	47
II.1.3 Papillon de Hofstadter . . . . .	48
a) Équation de Harper . . . . .	48
b) Conditions aux bords périodiques . . . . .	49
c) Niveau de Landau à bas flux . . . . .	51
II.1.4 Approximation semi-classique . . . . .	52
II.1.5 Conditions aux bords ouverts . . . . .	54
II.2 Papillons pour marches quantiques . . . . .	57
II.2.1 Papillons de la marche quantique bidimensionnelle à deux états internes	58
a) Equation de Harper et papillons . . . . .	58
b) Paquet d'onde . . . . .	61

c)	Conditions aux bords ouverts . . . . .	62
II.2.2	Papillons de la marche quantique pour la base tensorialisée . . . . .	66
II.2.3	Papillon de la marche quantique pour la base naturelle . . . . .	72
II.3	Conclusion . . . . .	76
<b>III</b>	<b>Cages d’Aharonov-Bohm</b>	<b>79</b>
III.1	Systèmes Hamiltoniens . . . . .	79
III.1.1	Chaîne de boucles . . . . .	79
III.1.2	Pavage $\mathcal{T}_3$ . . . . .	82
III.2	Marches quantiques sur la chaîne de boucles et le pavage $\mathcal{T}_3$ . . . . .	84
III.2.1	Protocoles pour marches quantiques . . . . .	84
III.2.2	Marches quantiques magnétiques sur la chaîne de boucles . . . . .	86
a)	Spectres . . . . .	86
b)	Cages . . . . .	88
III.2.3	Marches quantiques magnétiques sur le pavage $\mathcal{T}_3$ . . . . .	93
III.2.4	Contrôle de la taille des cages dans la chaîne de boucles . . . . .	95
III.2.5	Conclusion . . . . .	99
<b>IV</b>	<b>Déconfinement : quelques solutions pour les marcheurs quantiques</b>	<b>101</b>
IV.1	Désordre sur le dé . . . . .	102
IV.1.1	Désordre statique . . . . .	102
a)	Désordre statique sur les hubs . . . . .	103
b)	Désordre statique sur les rims . . . . .	105
IV.1.2	Désordre dynamique . . . . .	111
a)	Désordre dynamique sur les hubs . . . . .	111
b)	Désordre dynamique sur les rims . . . . .	112
c)	Mesures . . . . .	113
IV.1.3	Désordre spatial et temporel : diffusion anormale . . . . .	114
IV.2	Deux marcheurs quantiques distinguables en interaction . . . . .	117
IV.2.1	Espace de Hilbert . . . . .	117
IV.2.2	Cas sans interaction . . . . .	118
IV.2.3	Cas avec interaction . . . . .	121
IV.2.4	Entropie d’intrication . . . . .	124
IV.3	Conclusion . . . . .	128
<b>V</b>	<b>Deux particules sur une chaîne avec une interaction désordonnée</b>	<b>131</b>
V.1	Le modèle de Hubbard à deux particules . . . . .	133
V.1.1	Interaction invariante par translation : états liés et états de diffusion . . . . .	134
V.1.2	Correspondance avec un billard quantique rugueux . . . . .	137
V.1.3	États atomiques et moléculaires . . . . .	137
V.2	Les états atomiques . . . . .	138
V.2.1	Densité d’états et rapport de participation inverse . . . . .	138
V.2.2	Statistiques des écarts de niveaux . . . . .	142
V.3	Les états moléculaires . . . . .	144
V.3.1	Spectres et statistiques des écarts de niveaux . . . . .	145
V.3.2	États propres moléculaires . . . . .	146

V.4	Recouvrement de la bande moléculaire et atomique . . . . .	147
V.4.1	Analyse des états propres . . . . .	147
V.4.2	Probabilité moléculaire . . . . .	148
V.4.3	Temps de vie fini des états résonants . . . . .	150
V.5	Les états “séparatrices” . . . . .	151
V.5.1	Le sous espace d’énergie nulle du cas sans interaction . . . . .	151
V.5.2	Effets perturbatifs de l’interaction sur les états séparatrices . . . . .	153
V.5.3	Dynamiques des paquets d’onde . . . . .	155
V.6	Discussion et conclusion . . . . .	157
<b>Conclusion</b>		<b>159</b>
<b>A Symétrie</b>		<b>163</b>
A.1	Symétrie de sous-réseau . . . . .	163
A.2	Symétrie chirale . . . . .	164
A.2.1	Marche quantique à deux états internes . . . . .	164
	a) Flux magnétique nul . . . . .	164
	b) Flux magnétique non nul . . . . .	164
A.2.2	Marche quantique avec la base tensorialisée . . . . .	165
A.2.3	Marches quantiques avec la base naturelle . . . . .	166
A.2.4	Symétries du flux . . . . .	168
<b>B Jauge améliorée</b>		<b>171</b>
<b>C Equations de type Harper et papillons pour certaines marches quantiques</b>		<b>175</b>
C.1	Marche quantique utilisant le dé $D'(\pi/4)$ et la prescription retraçante . . . . .	175
C.2	Marche quantique utilisant le dé $D'(\pi/4)$ et la base tensorialisée . . . . .	177
C.3	Marche quantique utilisant le dé $D(\pi/4)$ et la prescription retraçante . . . . .	178
<b>D Origine des cages pour la marche quantique sur le pavage <math>\mathcal{T}_3</math></b>		<b>179</b>
<b>E Calcul de la variance pour un désordre dynamique sur les sites rims.</b>		<b>181</b>
<b>F Stabilités des sous-espaces pour deux marcheurs en interaction</b>		<b>185</b>
<b>G Référentiel du centre de masse sur réseau carré</b>		<b>187</b>
<b>H Comportement du rapport de participation inverse en fonction de la taille du système</b>		<b>189</b>
<b>I Perturbation à l’ordre 1 des solutions de l’ansatz de Bethe</b>		<b>191</b>
I.1	$\bar{U} = 0$ . . . . .	191
I.2	$\bar{U} \neq 0$ . . . . .	192
<b>Bibliographie</b>		<b>195</b>



# Introduction

La préhistoire des marches quantiques remonte à Feynman en 1946 lorsqu'il tenta de donner une version en intégrale de chemin de l'équation de Dirac (pour une revue historique où les notes de Feynman sont reproduites et expliquées, voir chapitre 4 section C de [1] ou dans le livre de Feynman et Hibbs [2]). Sa volonté était d'avoir une compréhension intuitive de cette équation, une interprétation physique et pas seulement une succession de symboles mathématiques que l'on tente de résoudre. Dans une lettre à Theodore A. Welton il écrit : « *The power of mathematics is terrifying-and too many physicists finding they have correct equations without understanding them have been so terrified they give up trying to understand them.[...] What do I mean by understanding them ? Nothing deep or accurate-just to be able to see some of the qualitative consequences of the equations by some method other than solving them in detail.* ». On connaît, par la suite, les talents de pédagogue dont Feynman a fait preuve tout au long de sa carrière, et notamment dans ses célèbres cours “*The Feynman Lectures on Physics*” [3–5] montrant ainsi sa détermination à expliquer le plus simplement et intuitivement possible les phénomènes physiques nous entourant. Sa tentative de reproduire l'équation de Dirac via le formalisme d'intégrale de chemin repose sur la discrétisation en temps de l'équation, elle est connue sous le nom de “*Feynman's checkerboard*”. Si elle se révéla être un succès pour la version de l'équation à une dimension d'espace (et de temps) [6], elle échoua, malheureusement, pour les dimensions d'espace supérieures.

L'histoire moderne des marches quantiques démarre en 1993. Dans un article de Y. Aharonov, L. Davidovitch et N. Zagury [7], la méthode développée par Feynman, près d'un demi-siècle auparavant réapparaît sous le nom de marches quantiques aléatoires (“*Quantum random walks*”). Elle est introduite dans l'idée de trouver un équivalent quantique aux marches classiques aléatoires. En 1996, D. Meyer [8] montre que les marches quantiques ne sont que le secteur à une particule de modèles plus généraux appelés les “automates cellulaires quantiques” [9,10]. Ces idées sont, par la suite, développées par la communauté de chercheurs en informatique quantique et ont permis de montrer que les marches quantiques peuvent reproduire les constituants élémentaires nécessaires aux algorithmes quantiques [11–16]. Il faut distinguer, en fait, deux types de marches quantiques : “à temps discret” et “à temps continu”. Le premier est dans la suite logique de l'idée originale de Feynman tandis que le second se rattache aux modèles d'hamiltonien de liaisons fortes, bien connus des physiciens du solide. Ils sont donc réutilisés à la fin des années 90 pour des problèmes d'informatique sur des graphes [11]. Des connexions entre ces deux types de marches ont également été établies [17]. Les algorithmes quantiques utilisant les marches quantiques permettent de montrer que l'on peut obtenir une accélération substantielle du temps de calcul comparé à leurs équivalents classiques dans des problèmes comme la recherche de données dans une base [18, 19] ou

bien la détermination de l'unicité d'un élément dans une liste [20]. Cependant, pour que ces algorithmes soient effectifs, ils nécessitent l'utilisation d'un ordinateur quantique : une machine permettant de réaliser des opérations sur des systèmes quantiques à deux niveaux (i.e. des qubits). En utilisant le principe de superposition d'état sur les deux niveaux de ces dernières et en intriquant les différents qubits entre eux on pourrait théoriquement implémenter ces algorithmes quantiques. Malgré tous les efforts mis dans ce sens ces dernières années, il reste encore de nombreux obstacles technologiques et conceptuels à franchir avant d'espérer pouvoir construire cette machine. On peut noter tout de même que, récemment, de belles avancées ont été réalisées dans cette course à l'ordinateur quantique et des premiers processeurs quantiques ont pu voir le jour [21, 22] mais la route reste longue avant de voir l'ordinateur quantique révolutionner notre quotidien.

Les marches quantiques et les automates cellulaires quantiques présentent également un intérêt en physique des hautes énergies. Plusieurs articles se sont penchés sur le lien entre la limite continue de la marche quantique et l'équation de Dirac pour différentes dimensions d'espace [23–34]. Dans le cas à plusieurs particules, la plupart des travaux concernant la simulation de théories quantiques de champs libres à partir d'automates cellulaires quantiques a été réalisé pour une dimension d'espace [35–39]. Des marches quantiques en interaction avec un champ de jauge Yang-Mills ont également été étudiées [40–42] ainsi que quelques travaux concernant les automates cellulaires quantiques simulant l'électrodynamique quantique à une dimension [43, 44]. Enfin, on notera qu'il existe des études simulant des marches quantiques dans des espaces-temps courbes afin de comprendre l'effet d'un champ de gravité sur ces dernières [45–48].

L'intérêt des marches quantiques ne se limite pas seulement aux algorithmes quantiques et à la physique des hautes énergies. En physique des solides les marches quantiques à temps discret constituent un nouveau terrain de jeu pour les physiciens, partageant des propriétés communes avec leur équivalent à temps continu mais exhibant également de nouvelles propriétés. Ce manuscrit tentera d'en esquisser quelques unes et plus particulièrement de comparer les résultats obtenus aux modèles d'hamiltoniens de liaisons fortes.

Parmi les nouvelles propriétés que l'on peut citer, les marches quantiques sont proches de systèmes de Floquet (systèmes dépendant du temps périodiquement), qui permettraient alors de créer de nouvelles classes d'isolants topologiques [49, 50], i.e. systèmes dont certaines propriétés ne sont pas affectées face à des perturbations locales. L'histoire des isolants topologiques a toujours été fortement liée à celles des systèmes sous champ magnétique puisqu'elles ont démarré ensemble avec l'effet Hall quantique entier. En 1976, D. R. Hofstadter trace les énergies d'un système de liaisons fortes sous champ magnétique en fonction du flux de ce dernier. Il y découvre un spectre ayant des propriétés fractales : le papillon de Hofstadter [51]. Ce spectre se trouve finalement être le diagramme de phase d'un isolant topologique. Malgré l'intérêt que présente les systèmes sous champ magnétique, peu de travaux ont été réalisés jusqu'à présent en ce qui concerne les marches quantiques à temps discret sous champ magnétique. On peut citer [40] où les auteurs montrent que dans la limite continue on retrouve l'équation de Dirac sous champ magnétique, ainsi que dans [52] où pour la première fois, on y rencontre un équivalent de papillon pour les marches quantiques.

Pour toutes les raisons évoquées plus haut, les marches quantiques se trouvent donc être à l'intersection entre différents domaines de la physique. Les réalisations expérimentales des marches quantiques ne sont d'ailleurs pas en reste puisqu'elles peuvent être implémentées

sur une grande variété de supports (que l'on détaillera rapidement à la fin du chapitre I) et amènent donc à faire se rencontrer différentes communautés de physiciens. Par ailleurs, ces dernières décennies de nouvelles techniques expérimentales pour contrôler les systèmes quantiques avec de plus en plus de précision ont vu le jour, elles rendent possible la conception de nouveaux dispositifs permettant de simuler directement des systèmes quantiques sur réseau. Les marches quantiques à temps discret apparaissent comme des candidats sérieux à la simulation de ces nouveaux systèmes.

Le présent manuscrit se concentre essentiellement sur l'étude des marches quantiques à temps discret (à l'exception du dernier chapitre). On les appellera, par souci de concision, marches quantiques. Pour se référer aux marches quantiques à temps continu, on prendra le langage des physiciens du solide : on les appellera hamiltoniens de liaisons fortes.

Le manuscrit de thèse est organisé de la manière suivante : dans le chapitre I on introduit les marches quantiques, sur une chaîne unidimensionnelle où l'on rappelle les principaux résultats. Dans un deuxième temps, on généralise de différentes façons le protocole de marche quantique au cas du réseau carré. Au chapitre II, on détaille la façon dont on prend en compte un champ magnétique transverse à un réseau 2D. On explique plus en détail le papillon de Hofstadter pour les hamiltoniens de liaisons fortes puis on étudie les marches quantiques 2D précédemment introduites sous ce champ magnétique. Dans le chapitre III, on s'intéresse à un phénomène d'extrême localisation de la particule sous champ magnétique sur certains types de réseaux connu sous le nom de cages d'Aharonov-Bohm. D'abord on redonne les résultats dans le cas des systèmes hamiltoniens puis on étend le principe de ces cages aux marches quantiques à temps discret. Le chapitre IV a pour but d'analyser la robustesse de ces cages de marche quantique face à du désordre ou à l'introduction d'un second marcheur quantique en interaction avec le premier. Enfin, le dernier chapitre est un peu à part et ne concerne plus le champ magnétique. On s'intéresse dans le chapitre V à l'effet d'un désordre dans l'interaction de contact entre deux particules sur une chaîne. Il vient d'un projet qui, initialement, devait se faire avec les marches quantiques mais s'est trouvé être plus simple tout en étant non trivial dans le cas des systèmes hamiltoniens.



# I – Qu’est-ce qu’une marche quantique ?

Dans ce chapitre, on dresse une revue des marches quantiques, d’abord, dans le cas d’une chaîne unidimensionnelle puis sur un réseau carré. On analyse les évolutions et les spectres de ces marches. Dans le cas unidimensionnel, on s’intéresse au protocole le plus simple de la marche quantique. Dans le cas bidimensionnel, on la généralise de trois façons différentes. Ce chapitre d’introduction est largement inspiré des différents articles que j’ai pu lire durant ma thèse. Pour une compréhension plus fine des marches quantiques j’invite à lire les revues de J. Kempe [53] et B. Tregenna et al. [54], pour un point de vue plus informatique celle de S.E. Venegas-Andraca [55].

Un marcheur quantique est un objet quantique se déplaçant sur les noeuds d’un graphe. C’est donc un vecteur dans un espace de Hilbert  $\mathcal{H}_{\text{graphe}}$  engendré par l’ensemble des positions qui lui sont accessibles, ici, les noeuds. Il est également muni d’un degré de liberté interne permettant d’encoder la future direction qu’il prendra. Mathématiquement, on tensorialise à l’espace de Hilbert des positions un espace de Hilbert de la variable interne que l’on nomme spin  $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ , par raccourci, mais qui n’est pas le spin physique que l’on connaît pour les particules.

## I.1 Marche quantique sur une chaîne

Prenons l’exemple d’un graphe simple, celui d’une chaîne. Une chaîne peut-être représentée par une succession de noeuds (ou sites) placés le long de l’axe des réels et indexés par un entier  $i$ , sa position dans la chaîne étant donnée par le réel  $ia$  où  $a$  est le pas du réseau que l’on prendra, dans la suite, égale à 1. Ces noeuds sont connectés seulement à leurs deux voisins, le noeud précédant et le noeud suivant. Une chaîne peut-être de taille infinie, son nombre de noeuds est alors infini mais dénombrable. Lorsque la chaîne est de taille finie  $N$ , se pose alors la question des conditions aux bords : ouverts ou périodiques. Les conditions aux bords ouverts particularisent les deux noeuds extrémaux, le noeud situé sur le bord gauche indexé par l’entier 0 et le noeud sur le bord droit indexé par l’entier  $N - 1$ . Ces deux noeuds n’ont qu’un seul voisin vers l’intérieur de la chaîne et ne sont donc reliés qu’à lui seulement. La chaîne aux conditions aux bords ouverts peut être représentée simplement sur une portion de taille finie d’une ligne contenant les  $N$  sites. Les conditions aux bords périodiques ont l’avantage de ne pas particulariser de sites. Elles connectent entre eux les deux sites extrémaux de la chaîne aux conditions aux bords ouverts. Il est alors plus

commode de représenter la chaîne non plus sur une ligne mais sur un cercle avec  $N$  noeuds où le site 0 et  $N - 1$  sont maintenant voisins.

### I.1.1 Le protocole le plus simple

Dans le cas d'une chaîne, le marcheur quantique localisé sur un site peut donc aller dans deux directions : à gauche ou à droite. Comme le spin du marcheur encode la future direction il peut prendre deux valeurs que l'on notera "+" ou "-". Un marcheur quantique sur une chaîne habite dans un espace de Hilbert  $\mathcal{H}_{\text{MQ}} = \mathcal{H}_{\text{chaîne}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$  où  $\mathcal{H}_{\text{chaîne}}$  est l'espace engendré par les  $N$  sites de la chaîne  $\{|i\rangle, i = 0, \dots, N - 1\}$ , et  $\mathcal{H}_{\text{spin}} = |+\rangle \oplus |-\rangle$  où  $|+\rangle$  (resp.  $|-\rangle$ ) est le vecteur dans l'espace de Hilbert associé à l'état "+" (resp. "-") et  $N \in \mathbb{N}$ . Cela revient à habiller les sites de la chaîne par deux états internes sur chaque site (voir Figure I.1). La dimension de l'espace de Hilbert total du marcheur est de taille  $2N$ . Soit  $|\psi\rangle$  la fonction d'onde du marcheur alors on peut écrire de manière générale :

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} c_{i,+} |i, +\rangle + c_{i,-} |i, -\rangle$$

où  $c_{i,+}$  et  $c_{i,-}$  sont des coefficients complexes appelés les amplitudes de probabilité et  $|c_{i,+}|^2$  (resp.  $|c_{i,-}|^2$ ) représente la probabilité d'être sur le site  $i$  dans l'état  $|+\rangle$  (resp.  $|-\rangle$ ). La somme de toutes les probabilités étant égale à 1, on a donc la relation  $1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{i=0}^{N-1} |c_{i,+}|^2 + |c_{i,-}|^2$  puisque  $\{|i, s\rangle\}_{i=0, s \in \{+, -\}}^{N-1}$  est une base orthonormée i.e.  $\langle i, s | j, s' \rangle = \delta_{i,j} \delta_{s,s'}$ , avec  $s, s' \in \{+, -\}$ .

Une fois l'espace défini dans lequel habite le marcheur, on s'intéresse à la façon dont l'état de ce dernier évoluera dans le temps. On met en place un protocole permettant de définir la fonction d'onde du marcheur au pas de temps suivant à partir de la simple connaissance de la fonction d'onde au temps actuel. On peut alors établir l'équation suivante :

$$|\psi(t + \delta t)\rangle = U |\psi(t)\rangle$$

où  $\delta t$  est le pas de temps que l'on prendra dans la suite égale à 1. Les amplitudes de probabilité deviennent alors dépendantes du temps  $c_{i,+}(t)$ ,  $c_{i,-}(t)$ . L'opérateur  $U$  agissant sur la fonction d'onde du marcheur est unitaire afin de conserver la normalisation de la fonction d'onde. La marche quantique est donc un processus non seulement discret en espace mais également en temps. Dans le cas le plus simple ce protocole est composé de deux opérateurs unitaires que l'on nomme le "dé"  $D$  et la "translation"  $T$ .

L'opérateur "dé" crée une superposition des états  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  au sein d'un même site. Sur chaque site du réseau, on a alors un opérateur  $C$  unitaire de dimension 2,  $C \in \text{U}(2)$ . En passant de la représentation en terme de "ket" à une représentation matricielle (plus facile à écrire), l'opérateur  $C$  est alors une matrice  $2 \times 2$  unitaire que l'on paramétrise de cette manière :

$$C(\theta, \varphi, \omega, \beta) = e^{i\varphi} \begin{pmatrix} \cos \theta e^{i\beta} & -\sin \theta e^{i\omega} \\ \sin \theta e^{-i\omega} & \cos \theta e^{-i\beta} \end{pmatrix} \text{ où } |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.1})$$

Pour l'instant, on considère que ce dé est le même pour chaque site du réseau. On tensorialise donc à cette matrice l'opérateur identité de dimension  $N$ ,  $D = \mathbb{I}_N \otimes C$ . Dans la suite, par

abus de langage, on désignera aussi bien le dé comme étant soit l'opérateur  $D$  ou  $C$  en fonction du contexte.

L'opérateur de translation déplace le marcheur quantique en fonction de la valeur de son spin. Si le spin est “+” il ira vers la droite, si le spin est “-” il ira vers la gauche.

$$T = \sum_{i=0}^{N-1} |i+1\rangle \langle i| \otimes |+\rangle \langle +| + |i-1\rangle \langle i| \otimes |-\rangle \langle -| \quad (\text{I.2})$$

$$= \sum_{i=0}^{N-1} \begin{pmatrix} |i+1\rangle \langle i| & 0 \\ 0 & |i-1\rangle \langle i| \end{pmatrix} \quad (\text{I.3})$$

Dans la définition de l'opérateur de translation (équation (I.2) et (I.3)), on prend des conditions aux bords périodiques et on définit  $i$  modulo  $N$ .

Dans l'équation (I.3) on a inversé le produit tensoriel des espaces de Hilbert,  $\mathcal{H}_{\text{spin}} \otimes \mathcal{H}_{\text{chaîne}}$ . En terme de “ket”, on a alors des états indexés comme ceci :  $|+, i\rangle$  ou  $|-, i\rangle$ . Que l'on prenne cette convention ou l'inverse n'est pas équivalent mathématiquement mais n'a, ici, pas beaucoup d'importance du moment que l'on est conscient de l'abus de notation. L'ordre des variables quantiques ne joue pas un rôle primordial si l'on sait à quelle variable correspond quel espace de Hilbert (ici “+” et “-” se réfère au spin et les entiers aux positions de la chaîne).  $|+, i\rangle$  ou  $|i, +\rangle$  désigne donc le même état. Si l'on écrivait les kets de positions sur la chaîne en représentation matricielle, cela reviendrait à faire une permutation des vecteurs de la base.

L'opérateur de marche quantique  $U = T.D$  agissant sur un ket à droite est la combinaison de l'action du dé suivie de l'action de l'opérateur de translation. Appliquer d'abord l'opérateur  $T$  puis  $D$  définit également une marche quantique équivalente à la première mais avec un référentiel temporel translaté d'un demi pas de temps. En appliquant successivement  $U$  on fait évoluer la fonction d'onde du marcheur de manière discrète dans le temps. Son évolution au temps  $t$  est donnée par  $|\psi(t)\rangle = U^t |\psi(0)\rangle$  où  $t \in \mathbb{Z}$  (on a pris le pas de temps  $\delta t = 1$ ).

Comme dit dans l'introduction, il faut souligner que dans la littérature scientifique, la marche quantique présentée ci-dessus est habituellement appelée “marche quantique à temps discret” et est à distinguer “des marches quantiques à temps continu” qui correspondent à l'évolution quantique d'états dans des modèles de liaisons fortes, n'utilisant pas nécessairement de variable interne et gouvernés par l'équation de Schrödinger  $H |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}$ . L'hamiltonien est alors la matrice d'adjacence du graphe (il spécifie les voisins de chaque noeud). L'opérateur d'évolution est obtenu en exponentiant l'hamiltonien,  $U_{\text{Schro.}}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$ . Dès les premiers instants, l'évolution d'une particule quantique suivant l'équation de Schrödinger initialement localisée sur un site est sensible à tous les noeuds du graphe (cette sensibilité est exponentiellement atténuée avec la distance).

Dans la marche à temps discret, on définit directement l'opérateur d'évolution sans passer par l'hamiltonien et c'est à ce niveau qu'est directement encodée la matrice d'adjacence du graphe. L'évolution d'un marcheur quantique est donc naturellement bornée par une vitesse limite. Son exploration est limité au pas de temps suivant aux voisins des sites sur lequel il

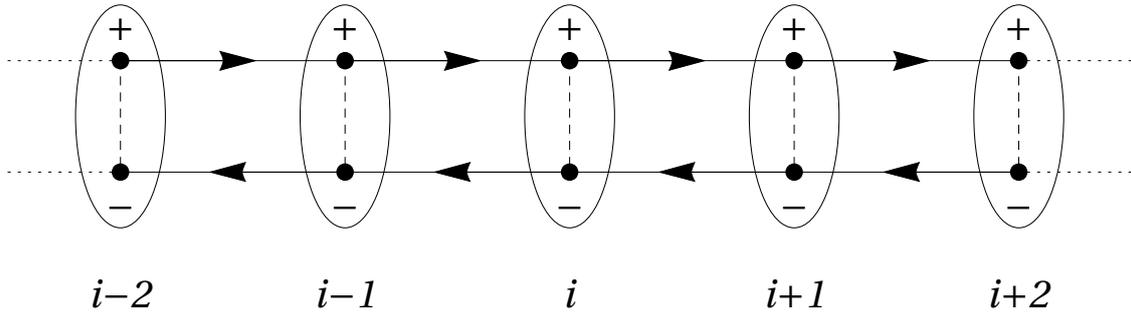


Fig. I.1 Représentation d'une portion de la chaîne sur laquelle évolue un marcheur quantique. Les sites de la chaîne sont représentés par les ellipses, chacune ayant 2 états internes “+” et “-”. Les liens verticaux en pointillés représentent l'action du dé et les liens continus fléchés l'action de la translation, les flèches indiquant le sens du mouvement du marcheur.

se trouve. L'opérateur d'évolution étant unitaire et donc inversible (ce qui n'est pas le cas de l'hamiltonien), cela permet en connaissant la fonction d'onde à un certain temps d'en déduire la fonction d'onde au pas de temps précédent sans ambiguïté. Lorsque la fonction d'onde est transférée après une opération de translation sur un site du réseau il faut alors pouvoir distinguer de quel site elle provient. Utiliser une variable interne permet de faire cette distinction et donc de rendre l'opération inversible. Dans le cas de la chaîne, si le marcheur est dans l'état  $|+\rangle$  après une opération de translation c'est qu'il provient du site à gauche sinon, dans l'état  $|-\rangle$ , du site de droite.

Dans la littérature on trouve également la dénomination de “marches quantiques aléatoires” pour insister sur la comparaison avec les marches classiques aléatoires. Cependant, le terme “aléatoire” n'a pas la même signification dans la version classique ou quantique.

En marche classique, la position finale du marcheur dépend des différents tirages de dé obtenus. On a véritablement un processus aléatoire, le dé. Pour construire la distribution statistique à un instant donné, il faudra alors effectuer plusieurs essais et accumuler les résultats des positions finales.

Pour les marches quantiques, la fonction d'onde finale sera toujours la même, elle est calculée par une équation d'évolution déterministe. Ce qui est aléatoire est la mesure de la position du marcheur. La probabilité qu'il soit sur un site du réseau est alors donnée par la distribution de probabilité de sa fonction d'onde. Expérimentalement, puisque l'on a accès à la fonction d'onde que par des mesures, il faut donc effectuer un grand nombre d'essais pour reconstruire la distribution de probabilité de la fonction d'onde d'un objet quantique mais analytiquement (ou numériquement) les équations donnent directement sa distribution.

### I.1.2 Évolution de la marche quantique

Afin d'illustrer ce qui vient d'être dit de manière plus concrète, construisons la marche quantique pour les deux premiers pas de temps. Prenons comme dé, la matrice de Hadamard

$H_2$ , une porte couramment utilisée en informatique quantique :

$$H_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = C(\pi/4, \pi/2, \pi/2, -\pi/2).$$

Supposons que le marcheur soit initialement localisé sur un site  $i$  dans l'état "+", alors les deux premiers pas de temps donnent :

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= |i, +\rangle \xrightarrow{D} \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, i\rangle + |-, i\rangle) \xrightarrow{T} \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, i+1\rangle + |-, i-1\rangle) = |\psi(1)\rangle \xrightarrow{D} \\ &\frac{1}{2} (|+, i+1\rangle + |-, i+1\rangle + |+, i-1\rangle - |-, i-1\rangle) \xrightarrow{T} \frac{1}{2} (|+, i+2\rangle + |+, i\rangle + |-, i\rangle - |-, i-2\rangle) = |\psi(2)\rangle \end{aligned}$$

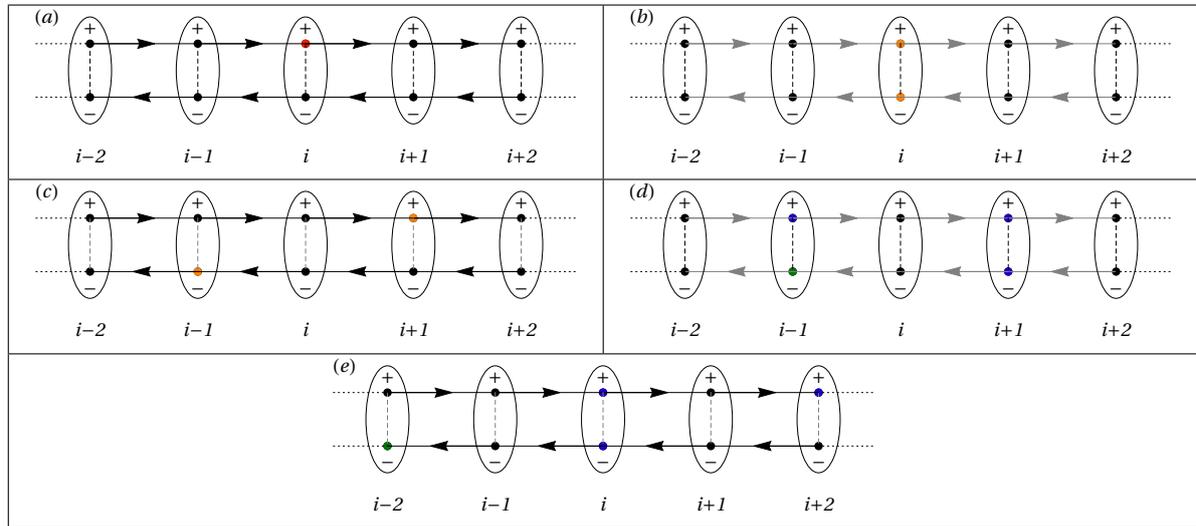


Fig. I.2 Illustration de l'évolution du marcheur quantique sur les deux premiers pas de temps pour un état initialement localisé sur le site  $i$  dans l'état "+" (a) et en utilisant un dé de Hadamard (equation I.1.2). Pour la Figure (b) (resp.(d)), l'état obtenu est réalisé à partir de l'action du dé sur l'état représenté Figure (a) (resp. (c)). Pour la Figure (c) (resp.(e)), l'état obtenu est réalisé à partir de l'action de la translation sur l'état représenté Figure (b) (resp. (d)). Les liens grisés sur les figures (b) à (e) sont les liens non utilisés pendant l'action de l'opérateur correspondant. La couleur rouge représente une amplitude de probabilité de 1, orange de  $1/\sqrt{2}$ , bleu de  $1/2$ , vert de  $-1/2$  et noir de 0. Lorsque le dé est utilisé, une partie de l'état interne peuplé est transférée vers l'état interne du même site. Tandis que l'opération de translation transfèrent entièrement le poids d'un noeud vers son voisin relié par le lien fléché. La Figure (a) représente  $|\psi(0)\rangle$ , la Figure (c)  $|\psi(1)\rangle$  et la Figure (e)  $|\psi(2)\rangle$ .

Ces deux premiers pas de temps sont également illustrés Figure I.2. Pour un marcheur initialement localisé sur un seul site, tous les pas de temps pairs le marcheur quantique atteint des sites de même parité que le site initial et tous les pas de temps impairs des sites de parité opposée.

Le nombre de site visité augmentant linéairement avec le nombre de pas de temps, il devient rapidement très difficile de calculer l'évolution d'un marcheur quantique à la main.

Pour pouvoir atteindre des temps plus grands on calcule alors l'évolution d'un marcheur quantique à l'aide d'un ordinateur (classique). Pour l'instant on ne se préoccupe pas des conditions aux bords sur la chaîne. Pour cela, on prend des systèmes de taille plus grands que le nombre de sites visités par le marcheur de manière à ce qu'il ne voit jamais les bords.

On utilise la même condition initiale que précédemment  $|\psi_{\text{asym}}(0)\rangle = |100, +\rangle$  en commençant au milieu d'une chaîne de taille 201 (i.e. sur le site 100) et en utilisant une porte de Hadamard  $H_2$  comme dé sur tous les sites de la chaîne. L'évolution au bout de 100 pas de temps est représentée Figure I.3-a. Ce que l'on remarque c'est que la distribution est asymétrique. En fait, la forme de la distribution de la fonction d'onde du marcheur dépend fortement de l'état initial que l'on considère.

Pour symétriser cette distribution il suffit de modifier l'état initial comme ceci :  $|\psi_{\text{sym}}(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|100, +\rangle + i|100, -\rangle)$ . Le facteur  $1/\sqrt{2}$  normalise la fonction d'onde. L'évolution après 100 pas de temps est tracée Figure I.3-b. Pour comprendre pourquoi cet état initial symétrise la fonction d'onde, notons d'abord que l'évolution de la distribution de probabilité de l'état initial  $|100, -\rangle$  donne le miroir (par rapport au site initial) de celle commençant dans l'état initial  $|100, +\rangle$ . Pour être exact, on aura un signe moins supplémentaire dans l'amplitude de probabilité mais cela ne se voit pas lorsque l'on regarde la probabilité qui est le module au carré. Ensuite, pour avoir la distribution symétrique il faudrait donc sommer les deux distributions de probabilité asymétriques miroir l'une de l'autre. Cependant, ce que l'on somme simplement en mécanique quantique sont les amplitudes de probabilité et non les probabilités. Si l'on appelle  $c_{i,s}^1(t)$  (resp.  $c_{i,s}^2(t)$ ), l'amplitude de probabilité au temps  $t$  au site  $i$  dans l'état  $s$  en partant de l'état initial  $|100, +\rangle$  (resp.  $|100, -\rangle$ ), on demande donc que  $|c_{i,s}^1(t) + c_{i,s}^2(t)|^2 = |c_{i,s}^1(t)|^2 + |c_{i,s}^2(t)|^2$ . Il faut alors que  $\text{Re}(c_{i,s}^1(t)c_{i,s}^2(t)) = 0$ , c'est à dire que l'un des deux coefficients soit réel et l'autre imaginaire pur. Sachant que le dé de Hadamard et la translation ne font intervenir que des coefficients réels, si l'on démarre avec un état initial réel (resp. imaginaire pur), l'évolution du marcheur quantique restera dans le domaine des réels (resp. imaginaires purs). Pour l'état initial  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|100, +\rangle + i|100, -\rangle)$ , l'état  $|100, +\rangle$  reste dans le domaine des réels et l'état  $i|100, -\rangle$  dans le domaine des imaginaires purs, ce qui symétrise la distribution.

Une autre façon de symétriser la distribution est de modifier le dé. Par exemple en utilisant :

$$C(\pi/4, 0, -\pi/2, 0) = Y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}$$

On considère l'état initial  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|100, +\rangle + |100, -\rangle)$  dont l'évolution, en utilisant un dé de Hadamard, donne une distribution asymétrique représentée Figure I.4-a après 100 pas de temps. En remplaçant la porte de Hadamard par le dé  $Y$ , tout en conservant l'état initial  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+, 0\rangle + |-, 0\rangle)$ , la distribution devient alors symétrique. Cela vient du fait que le dé  $Y$  traite le spin "+" et "-" de manière symétrique. Si l'on échange le spin "+" avec le spin "-" alors il suffit de changer la droite avec la gauche i.e. de renverser l'axe de la chaîne, pour avoir un système totalement équivalent. On appelle  $c_{i,s}^+(t)$  (resp.  $c_{i,s}^-(t)$ ) l'amplitude de probabilité au temps  $t$  au site  $i$  dans l'état  $s$  en partant de l'état initial  $|i_0, +\rangle$  (resp.  $|i_0, -\rangle$ ) lorsque le dé utilisé est  $Y$ . D'après cette symétrie, on alors que  $c_{i_0+i,s}^+(t) = c_{i_0-i,s'}^-(t)$  où  $s \neq s'$ . La probabilité au site  $i + i_0$  de l'état initial  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|i_0, +\rangle + |i_0, -\rangle)$  s'écrit donc (en omettant la

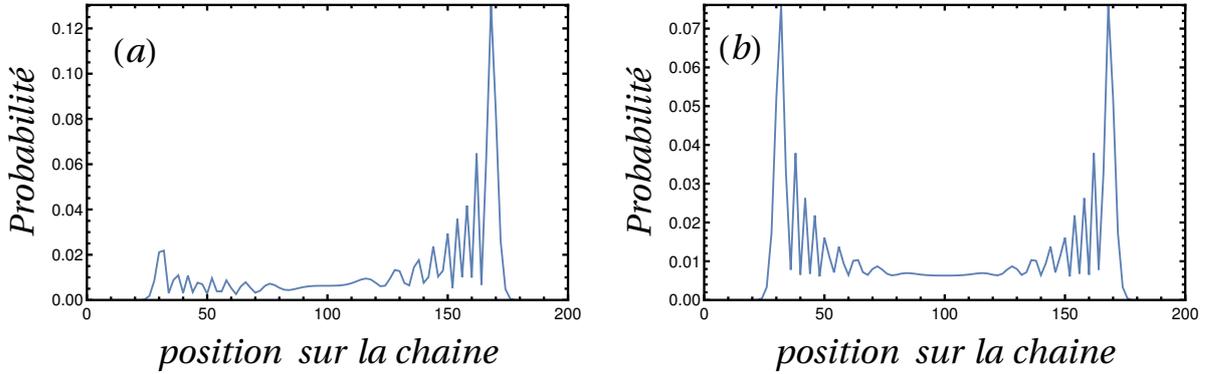


Fig. I.3 Distribution de la probabilité du marcheur quantique obtenue après simulation numérique au bout de 100 pas de temps en utilisant une porte de Hadamard comme dé sur chaque site de la chaîne. (a) : L'état initial  $|\psi_{\text{asym}}(0)\rangle = |100, +\rangle$  conduit à une distribution asymétrique. (b) : L'état initial  $|\psi_{\text{sym}}(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|100, +\rangle + i|100, -\rangle)$  permet de rendre la distribution symétrique. La probabilité sur chaque site du réseau est obtenue en sommant le module au carré des amplitudes de probabilité correspondant aux deux états de spin du même site. Seulement les probabilités aux positions pairs de la chaîne sont tracées puisque les positions impaires ont une probabilité 0.

variable  $t$ ) :

$$\begin{aligned} |c_{i_0+i}|^2 &= |c_{i_0+i,+}|^2 + |c_{i_0+i,-}|^2 = |c_{i_0+i,+}^+ + c_{i_0+i,+}^-|^2 + |c_{i_0+i,-}^+ + c_{i_0+i,-}^-|^2 \\ &= |c_{i_0-i,-}^- + c_{i_0-i,-}^+|^2 + |c_{i_0-i,+}^- + c_{i_0-i,+}^+|^2 \\ &= |c_{i_0-i}|^2 \end{aligned}$$

On a alors bien une distribution symétrique représentée Figure I.4-b. Qualitativement les Figures I.3 et I.4 se ressemblent mais elles ne sont pas exactement les mêmes a priori.

On observe lors de l'évolution de la marche quantique une forme très différente des marches classiques aléatoires. Les marches classiques aléatoires présentent une distribution gaussienne dont l'écart-type varie en racine du temps (voir courbe jaune Figure I.5-a). Ici, les marches quantiques (quelles soient à temps continu ou discret) sont formées de deux fronts d'ondes qui explorent l'espace de manière balistique. Pour être plus précis, l'écart-type de la distribution de probabilité des marches quantiques augmente de manière linéaire dans le temps (voir courbe bleu Figure I.5-a). L'écart-type  $\sigma$  de la distribution de probabilité de la fonction d'onde du marcheur quantique est défini comme :

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_{j=0}^{N-1} j^2 P(j, t) - \left[ \sum_{j=0}^{N-1} j P(j, t) \right]^2} \quad \text{avec } P(j, t) = |\langle j, + | \psi(t) \rangle|^2 + |\langle j, - | \psi(t) \rangle|^2$$

On peut également vérifier que l'écart-type est linéaire dans le temps pour tous les dés

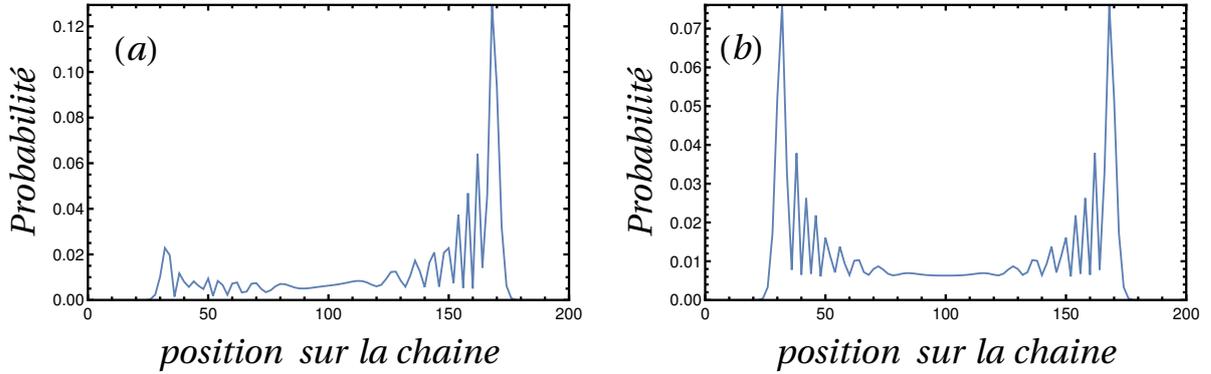


Fig. I.4 Distribution de la probabilité du marcheur quantique obtenue après simulation numérique au bout de 100 pas de temps en partant de l'état initial  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|100+\rangle + |100,-\rangle)$ . (a) : En utilisant un dé de Hadamard on obtient une distribution asymétrique. (b) : En utilisant le dé  $Y$ , défini équation (I.1.2).

ayant la forme d'une matrice de rotation :

$$C(\theta, 0, 0, 0) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}.$$

On trace alors la pente de l'écart-type i.e. la vitesse d'étalement en fonction de l'angle de mélange  $\theta$  (voir Figure I.5-b). Pour l'angle  $\theta = 0$ , le dé ne mélange pas les composantes du spin. Chaque spin va dans la direction donnée par l'opérateur de translation. Ainsi le marcheur a la vitesse maximum normalisée à 1 (car le pas du réseau et le pas de temps sont égaux à 1). Dans le cas opposé, lorsque  $\theta = \pi/2$ , les composantes du spin sous l'action du dé s'échangent constamment et la marche ne s'étale pas, elle reste bloquée entre  $i_0 - 1$  et  $i_0 + 1$  avec  $i_0$  l'indice du site initial, la vitesse est donc nulle. L'angle de mélange du dé permet alors de contrôler de manière précise la vitesse du marcheur. La Figure I.5-b montre la correspondance univoque entre l'angle de mélange  $\theta$  pris entre 0 et  $\pi/2$  et la vitesse d'étalement. De ce point de vue, le paramètre  $\theta$  joue un rôle similaire au paramètre de saut dans les hamiltoniens de liaisons fortes. La courbe semble proche de la droite d'équation  $1 - 2\theta/\pi$ . On expliquera dans la section suivante comment on peut obtenir cette droite dans une certaine approximation.

### I.1.3 Transformée de Fourier de la marche quantique et quasi-énergies

Dans cette section, on s'intéresse aux résultats analytiques que l'on peut obtenir de la marche quantique.

En définissant, la marche quantique avec des conditions aux bords périodiques, on a alors une invariance par translation du système. On peut donc, par une transformée de Fourier de la base des positions, diagonaliser entièrement l'opérateur de translation  $T$  (puisque'il est déjà diagonal dans l'espace du spin (équation (I.3)).

Le cas de la chaîne infinie présente également une invariance par translation, et une même opération est possible. C'est en revanche plus compliqué pour une chaîne de taille finie  $N$  aux

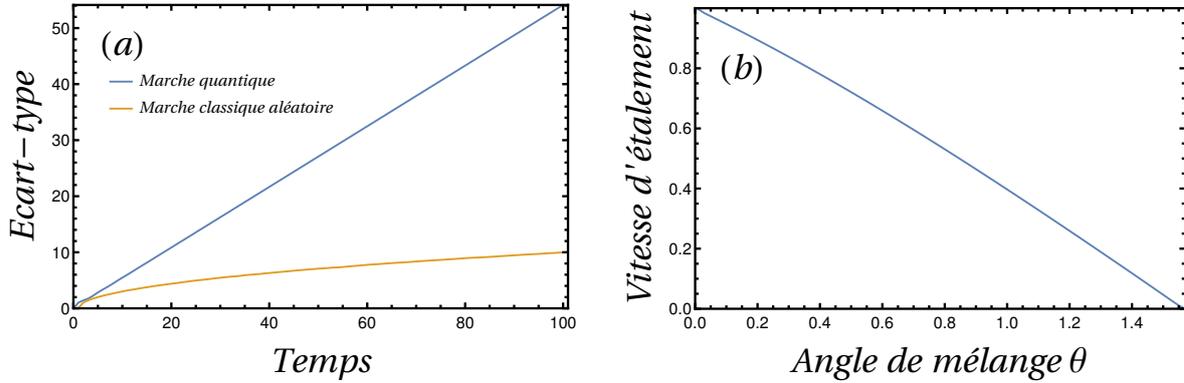


Fig. I.5 (a) : Tracé de l'écart-type de marche quantique (en bleu) et de la marche classique aléatoire (en jaune) par rapport au temps. Pour la marche classique, l'écart-type a été calculé sur 10000 tirages de marcheurs classiques. Pour la marche quantique, on a utilisé la matrice de rotation à un angle  $\theta = \pi/4$  comme dé et un état initial symétrique  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+, 100\rangle + i|-, 100\rangle)$  au milieu d'une chaîne de taille 201. La vitesse d'étalement est  $\sim 0.45$ . (b) : Tracé de la vitesse d'étalement d'un marcheur quantique en fonction de l'angle de mélange  $\theta$  de la matrice de rotation entre 0 et  $\pi/2$ . La vitesse d'étalement est obtenue par régression linéaire de l'écart-type sur 100 pas de temps. Le marcheur quantique est initialement dans l'état  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+, 100\rangle + i|-, 100\rangle)$ .

conditions aux bords ouverts. Il existe, cependant, une astuce qui consiste à créer une chaîne de taille  $2N+2$  avec des conditions aux bords périodiques. En s'intéressant exclusivement aux solutions analytiques antisymétriques par rapport au site  $N$  (et au site  $2N+1$ , conséquence des conditions aux bords périodiques) de cette nouvelle chaîne, on a alors les solutions de la chaîne de taille  $N$  aux conditions aux bords ouverts (en se restreignant à la portion de chaîne comprise entre les sites 0 et  $N-1$ ).

On restreint, ici, notre analyse au cas d'une chaîne de taille finie aux conditions aux bords périodiques. Pour une analyse sur une taille infinie on peut se référer à la revue [54].

On parle de quasi-moments (et non de moments) car il est impossible de différencier deux moments séparés de  $2\pi n/a$  où  $n$  est un entier et  $a=1$  le pas du réseau (conséquence du théorème de Bloch). L'étude des moments dans un intervalle de longueur  $2\pi$  est donc suffisante. Cette particularité est due à l'effet du réseau qui joue, en quelque sorte, un rôle stroboscopique.

On définit les quasi-moments comme la transformée de Fourier des positions

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-\frac{2i\pi k j}{N}} |j\rangle \text{ avec } k \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket$$

où  $\llbracket a, b \rrbracket$  désigne l'ensemble des entiers compris entre  $a$  et  $b$  inclus. La transformée de Fourier inverse redonne :

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{\frac{2i\pi k j}{N}} |k\rangle.$$

Ainsi, l'opérateur de translation  $T$  dans la nouvelle base s'écrit :

$$T = \sum_{k=0}^{N-1} \begin{pmatrix} e^{-\frac{2i\pi k}{N}} |k\rangle \langle k| & 0 \\ 0 & e^{\frac{2i\pi k}{N}} |k\rangle \langle k| \end{pmatrix}$$

$T$  est maintenant diagonal dans l'espace de Hilbert total du marcheur  $\mathcal{H}_{MQ}$ . L'opérateur de marche quantique  $U$  devient alors :

$$U = \sum_{k=0}^{N-1} |k\rangle \langle k| \otimes e^{i\varphi} \begin{pmatrix} \cos(\theta)e^{i\beta}e^{-\frac{2i\pi k}{N}} & -\sin(\theta)e^{i\omega}e^{-\frac{2i\pi k}{N}} \\ \sin(\theta)e^{-i\omega}e^{\frac{2i\pi k}{N}} & \cos(\theta)e^{-i\beta}e^{\frac{2i\pi k}{N}} \end{pmatrix} \quad (\text{I.4})$$

On doit donc diagonaliser une matrice  $2 \times 2$  indexée par les quasi-moments  $k$ . Les deux valeurs propres de cette matrice sont :

$$\lambda_k^\pm = e^{i\varphi} e^{\mp i\alpha_k} \text{ avec } \alpha_k = \cos^{-1} \left( \cos(\theta) \cos \left( \frac{2\pi k}{N} - \beta \right) \right). \quad (\text{I.5})$$

Les deux vecteurs propres associés sont :

$$|\Phi_k^\pm\rangle = \frac{1}{N_k^\pm} \begin{pmatrix} \cos \theta \sin \left( \frac{2\pi k}{N} - \beta \right) \pm \sin \alpha_k \\ i \sin \theta e^{\frac{2i\pi k}{N} - i\omega} \end{pmatrix}$$

avec  $(N_k^\pm)^2 = \sin^2 \theta + (\cos \theta \sin \left( \frac{2\pi k}{N} - \beta \right) \mp \sin \alpha_k)^2$ , la normalisation du vecteur propre. L'opérateur de marche quantique après  $n$  pas de temps s'écrit (relativement) simplement :

$$U^n = \sum_{k=0}^{N-1} |k\rangle \langle k| \otimes \left( (\lambda_k^+)^n |\Phi_k^+\rangle \langle \Phi_k^+| + (\lambda_k^-)^n |\Phi_k^-\rangle \langle \Phi_k^-| \right) \quad (\text{I.6})$$

Il est maintenant suffisant d'exprimer l'état initial sur la base des vecteurs propres d'appliquer l'équation (I.6) puis de revenir dans la base des positions et du spin pour déterminer l'évolution du marcheur quantique.

Les valeurs propres de la marche quantique sont situées sur le cercle unité 1 du plan complexe, ce sont des exponentielles imaginaires et sont donc de module 1 (voir équation (I.5)). Cette particularité est due à l'unitarité de l'opérateur de marche quantique. On peut définir un Hamiltonien effectif  $H_{\text{eff}}$  tel que  $U = e^{-i\frac{H_{\text{eff}}\delta t}{\hbar}}$  (ici  $\delta t = 1$  et on mettra dans la suite  $\hbar = 1$ ). Les valeurs propres de cet hamiltonien sont alors les phases de ces exponentielles que l'on appellera des **quasi-énergies** :

$$\varepsilon^\pm(k) = \pm \cos^{-1} \left( \cos(\theta) \cos \left( \frac{2\pi k}{N} - \beta \right) \right) - \varphi. \quad (\text{I.7})$$

Le "quasi" du quasi-énergie est à prendre au même sens que celui intervenant dans le quasi-moment. La discrétisation de la dynamique en temps a un effet stroboscopique sur les fréquences propres du système, on ne peut différencier deux fréquences séparées de  $2\pi n/\delta t$  avec  $n$  un entier et  $\delta t$  le pas de temps, c'est l'équivalent de la conséquence du théorème de Bloch dans le domaine temporel i.e. le théorème de Floquet. Les quasi-énergies sont définies

modulo  $2\pi$  (tout comme les quasi-moments), on peut donc se restreindre à l'intervalle  $[-\pi, \pi[$ , on parle de zone de Floquet.

Ici, puisque la matrice de l'équation (I.4) est une matrice unitaire  $2 \times 2$  elle peut être réécrite simplement avec les matrices de Pauli :

$$\begin{aligned} \tilde{U}(k) &= e^{i\varphi} \left( \cos \theta \cos \left( \frac{2\pi k}{N} - \beta \right) \mathbb{I}_2 - i \begin{pmatrix} -\sin \theta \sin \left( \frac{2\pi k}{N} - \omega \right) \\ \sin \theta \cos \left( \frac{2\pi k}{N} - \omega \right) \\ \cos \theta \sin \left( \frac{2\pi k}{N} - \beta \right) \end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \right) \\ \text{avec } \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \text{et } \begin{pmatrix} \dots \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix}^T &\text{ désigne le vecteur transposé de } \begin{pmatrix} \dots \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

En mettant  $\varphi = 0$ ,  $\tilde{U}(k)$  est une matrice  $SU(2)$ . Grâce à la structure simple des matrices de Pauli on peut facilement trouver la forme exponentielle des matrices  $SU(2)$  (leur algèbre de Lie) :

$$e^{-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma}} = \cos |\alpha| \mathbb{I}_2 - i \sin |\alpha| \frac{\vec{\alpha}}{|\alpha|} \cdot \vec{\sigma}$$

Dans notre cas cela nous permet de trouver facilement l'hamiltonien effectif

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= -\varphi \mathbb{I}_2 + \frac{|\alpha|}{\sin |\alpha|} \begin{pmatrix} -\sin \theta \sin \left( \frac{2\pi k}{N} - \omega \right) \\ \sin \theta \cos \left( \frac{2\pi k}{N} - \omega \right) \\ \cos \theta \sin \left( \frac{2\pi k}{N} - \beta \right) \end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \\ &= -\varphi \mathbb{I}_2 + \frac{\alpha_k}{\sin \alpha_k} \begin{pmatrix} \cos \theta \sin \left( \frac{2\pi k}{N} - \beta \right) & -i \sin \theta e^{-i \left( \frac{2\pi k}{N} - \omega \right)} \\ i \sin \theta e^{i \left( \frac{2\pi k}{N} - \omega \right)} & -\cos \theta \sin \left( \frac{2\pi k}{N} - \beta \right) \end{pmatrix} \quad (\text{I.8}) \\ \text{avec } \alpha_k &= \cos^{-1} \left( \cos \theta \cos \left( \frac{2\pi k}{N} - \beta \right) \right). \end{aligned}$$

On remarque tout d'abord que les quasi-énergies sont indépendantes du paramètre  $\omega$ . Par ailleurs, les deux autres paramètres  $\varphi$  et  $\beta$  ont pour seul effet de translater le spectre. On le déplace verticalement (dans la direction des quasi-énergies) avec  $\varphi$  et horizontalement (dans le sens des quasi-moments) avec  $\beta$ .

On peut donc sans pertes de généralité se restreindre, pour le dé, à la matrice de rotation  $C(\theta, 0, 0, 0)$  pour l'étude du spectre. Grâce au travail précédent, on trace la relation de dispersion de la marche quantique i.e. les quasi-énergies en fonction des quasi-moments (voir Figure I.6). On notera tout d'abord que ces relations de dispersion sont définies sur un tore car la zone de Brillouin et la zone de Floquet sont périodiques. La Figure I.6 montre les relations de dispersion pour différentes valeurs de  $\theta$ . On observe bien deux bandes correspondant aux deux valeurs propres possibles pour chaque quasi-moment, dans ce cas précis,  $\varepsilon^\pm(k) = \pm \cos^{-1} \left( \cos(\theta) \cos \frac{2\pi k}{N} \right)$ . En regardant l'évolution de la relation de dispersion en fonction de l'angle  $\theta$ , on peut se limiter au cas entre  $0 \leq \theta \leq \pi/2$ . D'abord, car  $\theta$  apparaît

seulement dans un cosinus, on peut limiter alors l'analyse à l'intervalle  $[0, \pi]$  et puis en changeant  $\theta \rightarrow \pi - \theta$ , on remarque que  $\alpha_k(\theta) \rightarrow \alpha_k(\pi - \theta) = \alpha_k(\theta) \pm \pi$ .

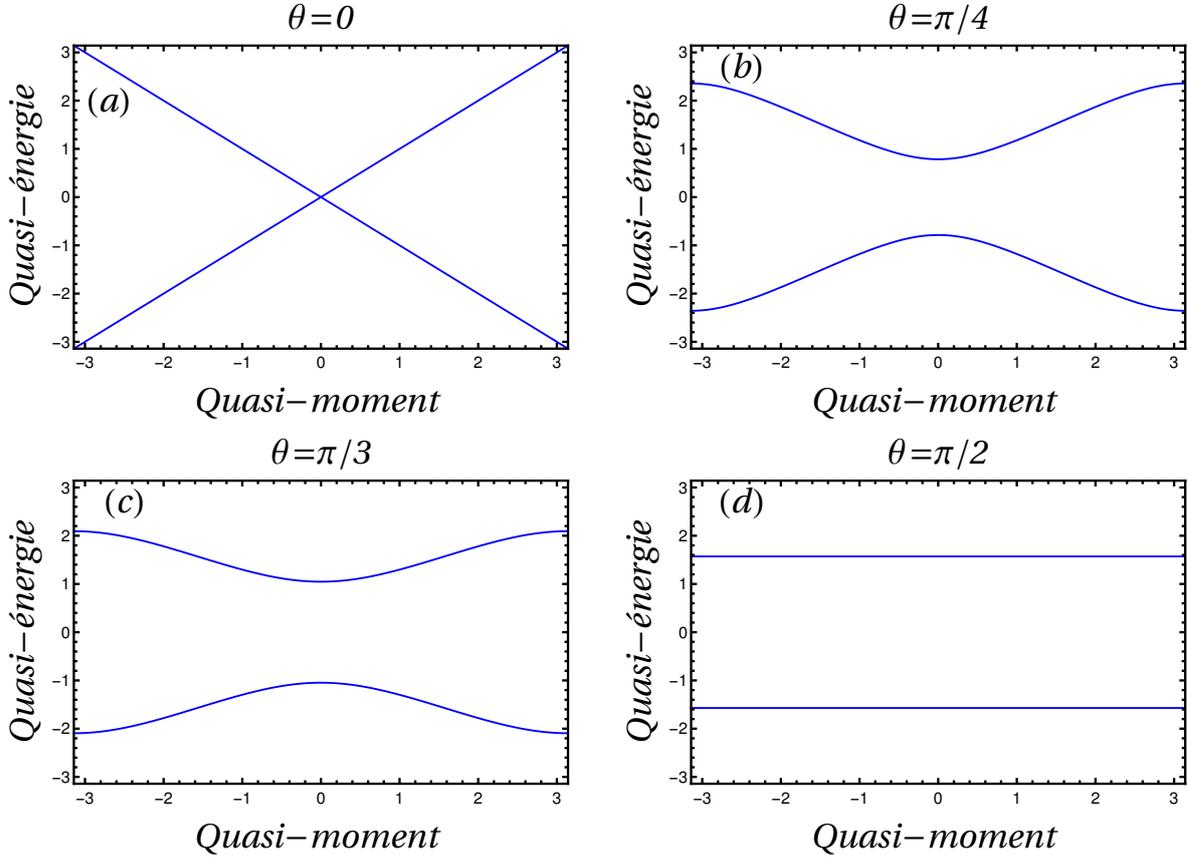


Fig. I.6 Tracé des relations de dispersion de la marche quantique i.e. des quasi-énergies en fonction des quasi-moments pour différentes valeurs  $\theta$  du dé de rotation  $C(\theta, 0, 0, 0)$ . On translate l'intervalle de définition du quasi-moment entre  $-\pi$  et  $\pi$  contrairement à l'analyse de Fourier qui avait été conduite entre 0 et  $2\pi$ . (a) :  $\theta = 0$ . La relation de dispersion est linéaire, il n'y pas de gaps. (b) :  $\theta = \pi/4$ . (c) :  $\theta = \pi/3$ . (d) :  $\theta = \pi/2$ . On a des bandes plates séparées de  $\pi$  en quasi-énergie.

Lorsque  $\theta = 0$ , Figure I.6-a, les deux bandes sont des droites de pente  $\pm 1$  qui s'intersectent à la quasi-énergie 0, tandis qu'à  $\theta = \pi/2$ , Figure I.6-d, les deux bandes sont de quasi-énergies constantes  $\pm\pi/2$  sur toute la zone de Brillouin. La pente de la relation de dispersion nous indique la vitesse de groupe d'un paquet d'onde gaussien préparé autour d'un certain quasi-moment dans la zone de Brillouin :  $v_g^\pm = \frac{N}{2\pi} \frac{d\varepsilon^\pm(k)}{dk}$ . C'est alors une façon de retrouver le résultat de la Figure I.5-b sur les vitesses d'étalement dans une approche semi-classique. À  $\theta = 0$ , on a une pente  $\pm 1$  correspondant à un marcheur allant à la vitesse maximum vers la droite (+1) ou vers la gauche (-1). À  $\theta = \pi/2$ , la vitesse est nulle, le paquet d'onde ne bouge pas. Pour les cas intermédiaires, on trouve différentes valeurs de vitesse en fonction de l'endroit où l'on a centré le paquet d'onde dans la zone de Brillouin. Par exemple, la vitesse

maximale est atteinte aux quasi-moments  $\pm\pi/2$  et vaut  $\pm \cos \theta$ .

Un marcheur initialement localisé sur un site de la chaîne est délocalisé dans l'espace des impulsions. Sa densité d'état locale est répartie de manière homogène sur tout le spectre. On peut alors calculer sa vitesse d'étalement en intégrant la valeur absolue de la vitesse de groupe sur toute la zone de Brillouin. L'approximation consiste à considérer que le marcheur possède un poids symétrique sur les deux bandes du spectre pour toutes les valeurs du quasi-moment  $k$  :

$$\begin{aligned} v_e(\theta) &= \int_{\text{spectre}} \frac{v_g(k)}{2N} dk = \frac{1}{2N} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{N}{2\pi} \left( \left| \frac{d\varepsilon^+(k)}{dk} \right| + \left| \frac{d\varepsilon^-(k)}{dk} \right| \right) dk \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \left| \frac{d\varepsilon^+(k)}{dk} \right| dk = \frac{1}{\pi} \left( \cos^{-1}(-\cos \theta) - \cos^{-1} \cos \theta \right) \\ &= 1 - \frac{2\theta}{\pi} \end{aligned}$$

où l'on a mis  $\beta = \varphi = 0$  pour retrouver le résultat de la Figure I.5-b.

Lorsque  $\theta \neq 0$ , le système contient des "gaps" i.e. des plages de fréquence qui ne correspondent à aucune quasi-énergies. Ces gaps sont d'autant plus grands que  $\theta$  est grand et deviennent maximaux à  $\theta = \pi/2$ , le gap est alors de  $\pi$ .

Contrairement à l'équation de Schrödinger qui donne une relation de dispersion parabolique, la marche quantique donne une relation de dispersion de type relativiste  $E = \pm\sqrt{p^2 + m^2}$  où l'on a mis  $c = 1$ , comme un électron dans le graphène préparé autour d'un des points de contact inter-bandes. C'est une autre raison de l'intérêt de ces marches, elle discrétise (dans le temps et l'espace) de manière fidèle l'équation de Dirac [8, 28, 56, 57]. La présence des deux bandes simule la chiralité de la particule. Si l'on pousse l'analogie avec le graphène et les particules relativistes plus loin l'ouverture du saut en énergie lorsque  $\theta$  est non nul est équivalent à une masse non nulle de la particule. À  $\theta = 0$ , la masse étant nulle, on a bien une particule se déplaçant à une vitesse maximale  $\pm 1$  correspondant à un photon. À  $\theta = \pi/2$ , on a une masse infinie. En développant, l'opérateur de marche quantique dans la base de Fourier (équation (I.4)) pour une faible impulsion  $\delta k$  autour des points de contact et un faible angle  $\delta\theta \ll 1$ , on trouve alors un hamiltonien effectif de la forme :

$$H_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \delta k & -i\delta\theta \\ +i\delta\theta & -\delta k \end{pmatrix}$$

ayant pour énergies propres  $\varepsilon^{\pm}(\delta k) = \pm\sqrt{\delta k^2 + \delta\theta^2}$ . Ici, on a utilisé le fait que les quasi-énergies propres du système étaient petites devant la zone de Floquet i.e.  $2\pi/\delta t \gg \varepsilon$  pour pouvoir écrire  $U \simeq \mathbb{I}_2 - iH_{\text{eff}}\delta t$ . Ainsi, pour un faible angle de mélange  $\theta$ , la limite continue de la marche quantique, c'est à dire une faible impulsion i.e. un pas du réseau petit devant la longueur d'onde du marcheur et un pas de temps faible i.e. une zone de Floquet grande devant les quasi-énergies considérées, redonne bien l'équation de Dirac.

Lorsque l'angle  $\theta \sim 1$ , l'approximation faite pour trouver l'hamiltonien effectif n'est plus valable. Pour la marche quantique sur une chaîne, on a obtenu équation (I.8), l'hamiltonien effectif explicitement. Soit on développe cet hamiltonien autour des extrema de bandes ou bien on développe directement la relation de dispersion (équation (I.7)). Dans tous les cas,

cela donne des quasi-énergies de la forme  $\varepsilon^\pm(\delta k) \simeq \pm(\theta + \frac{\delta k^2}{2 \tan \theta})$ . On retrouve alors la formule classique de l'énergie lorsque la masse est grande devant l'impulsion, la relation de dispersion parabolique  $E \simeq \pm(m + \frac{p^2}{2m})$  à la différence qu'ici lorsque  $\theta \sim 1$  la masse de l'énergie cinétique classique  $\tan \theta$  (que l'on appellera la masse effective) est différente de la masse de la relation d'Einstein  $\theta$  ( $E = mc^2$ ).

Dans l'analyse précédente, on a utilisé la matrice de rotation comme dé. Dans les sections suivantes, on utilisera plutôt le dé  $C(\theta, \pi/2, \pi/2, -\pi/2)$ , défini explicitement équation (I.11) qui a l'avantage de retrouver la porte de Hadamard à  $\theta = \pi/4$ . Si l'on reprend la formule des quasi-énergies (équation (I.7)), cela revient seulement à traduire le spectre de  $\pi/2$  dans la direction des quasi-énergies et de  $-\pi/2$  dans la direction des quasi-moments. La relation de dispersion utilisant le dé de Hadamard est tracée Figure I.7.

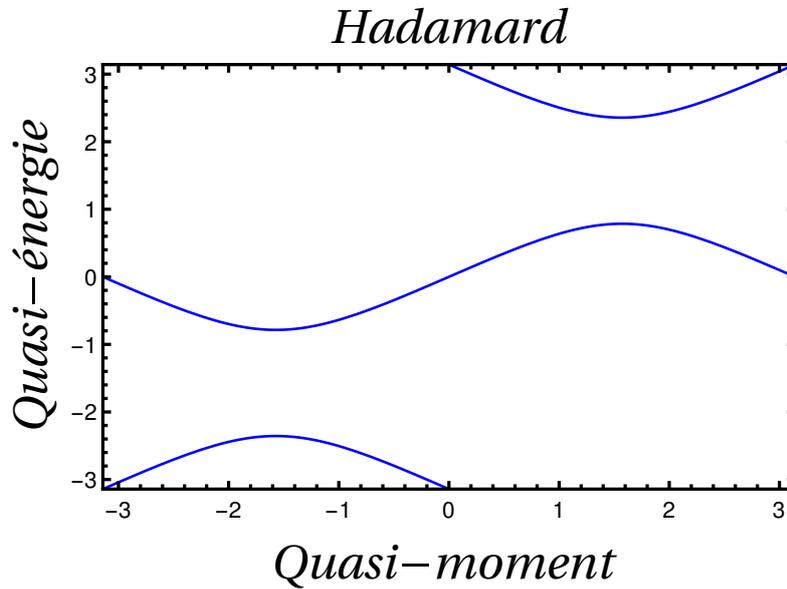


Fig. I.7 Tracé de la relation de dispersion de la marche quantique utilisant un dé de Hadamard. Elle est similaire par une translation de  $\pi/2$  en quasi-énergie et de  $-\pi/2$  en quasi-moment à la relation de dispersion du dé de rotation à  $\theta = \pi/4$ .

## I.2 Marches quantiques sur un réseau carré

La section précédente a permis d'introduire la marche quantique sur un graphe simple, celui de la chaîne, une structure unidimensionnelle. On peut chercher à généraliser la marche quantique pour des réseaux de plus hautes dimensions. Dans ce manuscrit, nous nous intéresserons seulement à des graphes bidimensionnels (2D). L'extension naturelle de la chaîne au cas d'un réseau 2D est le réseau carré. L'espace de Hilbert correspondant est le produit tensoriel de deux espaces de Hilbert d'une chaîne  $\mathcal{H}_{\text{carré}} = \mathcal{H}_{\text{chaîne}} \otimes \mathcal{H}_{\text{chaîne}}$ . Les différentes positions accessibles sont les couples  $(la, mb)$  où  $a$  et  $b$  sont respectivement le pas du réseau dans la première direction, que l'on appelle  $x$  par convention, et la direction  $y$  (la direction orthogonale à  $x$ ).  $a$  et  $b$  seront pris égaux à 1 dans la suite.  $l$  et  $m$  sont des entiers. La question des conditions aux bords se pose également pour les simulations numériques.

Sauf mention contraire, les simulations seront effectuées avec des conditions périodiques aux bords. Tout comme il est commode de représenter la chaîne périodisée sur un cercle, son équivalent bidimensionnel habite sur un tore (topologiquement le produit de deux cercles).

Le graphe sur lequel se déplace le marcheur étant fixé, il reste à déterminer quel espace de spin prendre et quel protocole utiliser. Il existe beaucoup de façons de généraliser la marche quantique à deux dimensions (tout comme il existe d'autres protocoles de marches quantiques sur la chaîne unidimensionnelle que nous n'avons pas présentés [49,58]). Ici, le but n'est pas de faire une revue exhaustive de toutes ces marches. Nous allons d'abord présenter la plus connue d'entre elles : “*the split-step quantum walk*” [59,60]. Nous l'appellerons, dans le manuscrit, la “marche quantique à deux états internes” car malgré les 4 directions possibles du marcheur sur le réseau carré elle n'utilise qu'un espace de spin bidimensionnel. Nous présenterons ensuite d'autres marches utilisant un espace de spin de dimension 4.

### I.2.1 Marche quantique à deux états internes

Tout d'abord, comme son nom l'indique, la marche quantique à deux états internes (ou 2 niveaux de spin) à l'avantage d'utiliser un espace de Hilbert pour le spin à deux dimensions comme dans le cas d'une chaîne. On pourra donc reprendre le même dé  $C(\theta, \varphi, \omega, \beta)$  (voir équation (I.1)). Cependant ce que l'on gagne au niveau de la simplicité de l'espace de spin on le perd dans le protocole. L'opérateur de marche quantique est maintenant composé de 4 opérations unitaires :

$$U = T_y \cdot D_y \cdot T_x \cdot D_x$$

où  $D_s = \mathbb{I}_{\text{carré}} \otimes C_s(\theta_s, \varphi_s, \omega_s, \beta_s)$  sont deux dés utilisés dans le protocole que l'on pourra prendre ou non égaux.  $T_x$  (resp.  $T_y$ ) désigne l'opérateur de translation suivant la direction  $x$  (resp.  $y$ ) :

$$\begin{aligned} T_x &= \sum_{l,m} |l+1, m\rangle \langle l, m| \otimes |+\rangle \langle +| + |l-1, m\rangle \langle l, m| \otimes |-\rangle \langle -| \\ &= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l+1, m\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & |l-1, m\rangle \langle l, m| \end{pmatrix} \\ T_y &= \sum_{l,m} |l, m+1\rangle \langle l, m| \otimes |+\rangle \langle +| + |l, m-1\rangle \langle l, m| \otimes |-\rangle \langle -| \\ &= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l, m+1\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & |l, m-1\rangle \langle l, m| \end{pmatrix} \end{aligned}$$

L'opération de marche quantique consiste donc d'abord à mélanger une première fois la variable interne du marcheur grâce au dé  $D_x$  puis à se déplacer suivant la direction  $x$  du réseau suivant la valeur de spin (pour l'instant tout est similaire au cas de la chaîne). Ensuite on mélange une seconde fois le spin obtenu via le dé  $D_y$  et cette fois on translate le marcheur suivant la direction  $y$  du réseau (toujours en fonction de la valeur du spin).

Une illustration de cette marche est donnée Figure I.8 et la première étape d'un marcheur initialement localisé sur un site dans l'état interne  $|+\rangle$  est représentée Figure I.9. On remarque d'abord que si le marcheur est initialement localisé sur un site de coordonnée  $(x_0, y_0)$  alors

à chaque pas de temps il n'habitera que sur les sites  $(x, y)$  tels que  $x + y$  ait la même parité que  $x_0 + y_0$ . Le marcheur se déplace donc sur les diagonales du réseau carré. Il y a alors deux réseaux sous-jacents qui ne se voient pas (Annexe A.1). Ces deux sous-réseaux sont également des réseaux carrés mais tournés de  $45^\circ$  par rapport au réseau initial et dont les arêtes ont été dilatées de  $\sqrt{2}$ .

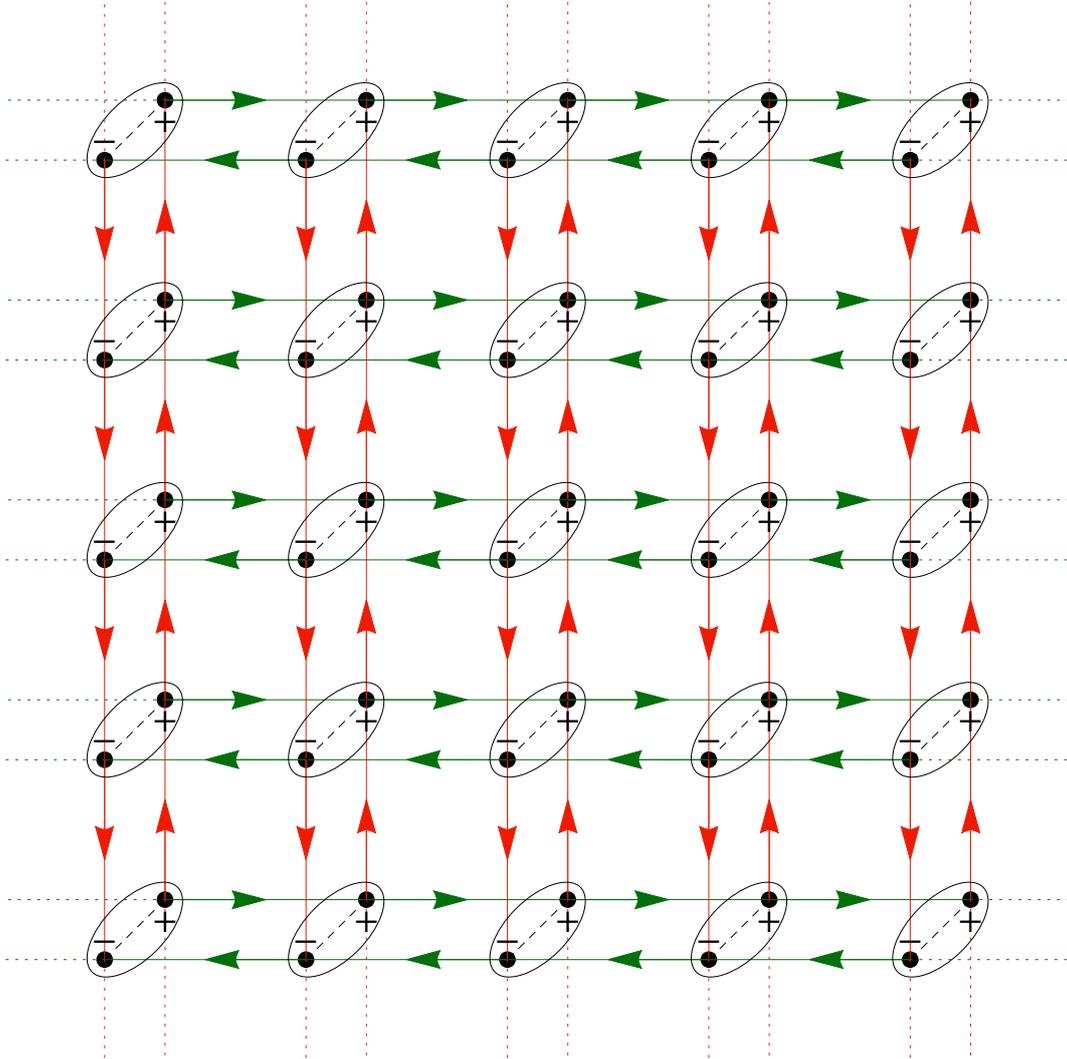


Fig. I.8 Représentation d'une portion du réseau sur laquelle le marcheur évolue avec ses états internes. Les liens diagonaux en pointillés représentent l'action des dés. Les liens fléchés verts (resp. rouges) l'opérateur de translation suivant  $x$  (resp.  $y$ ),  $T_x$  (resp.  $T_y$ ). Les ellipses sont les sites où se trouvent à l'intérieur les deux états internes “+” et “-”.

Comme dans le cas de la chaîne, on peut simuler numériquement l'évolution du marcheur pour des temps plus grands. Il existe un large choix de dés possibles, par exemple, dans

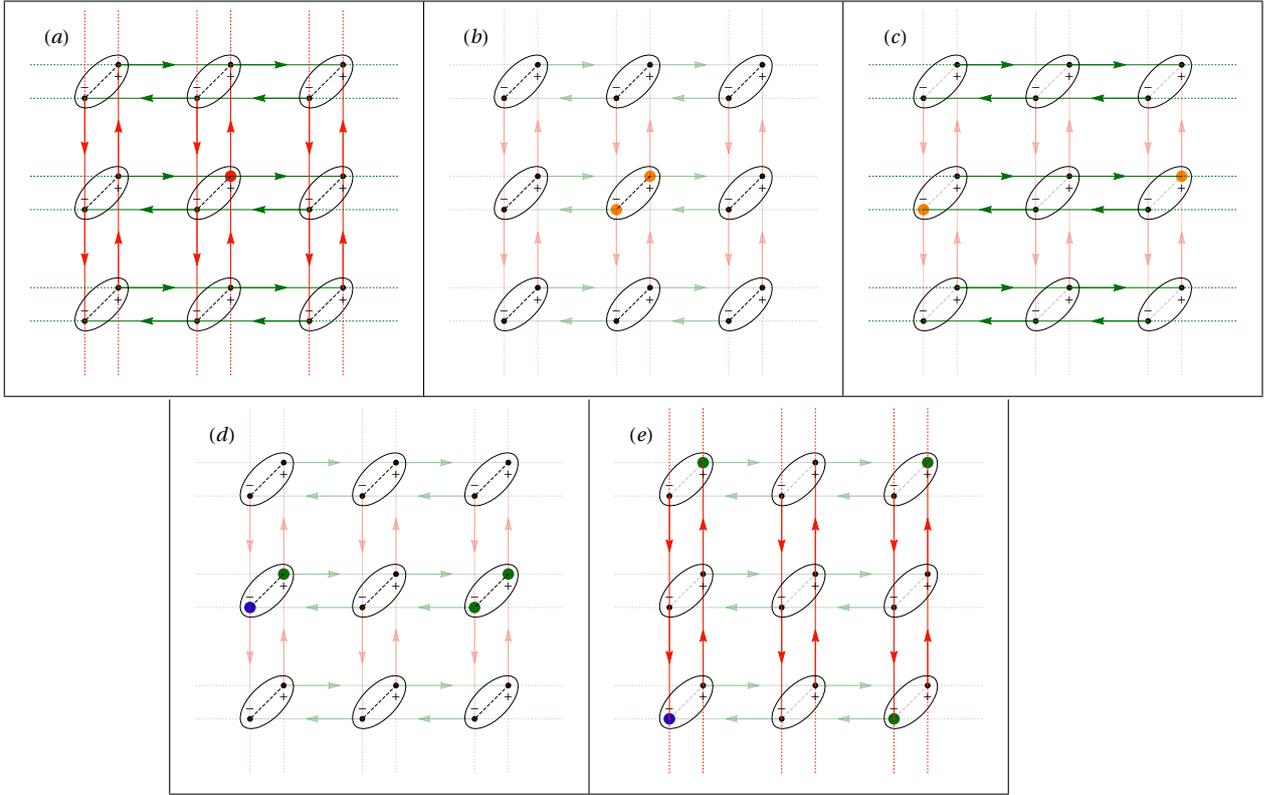


Fig. 1.9 Illustration du protocole de la marche à deux états internes pour un état initial localisé sur le site du milieu dans l'état de spin  $|+\rangle$  (Figure (a)). Les Figures (b) à (e) illustrent l'action successive des différents opérateurs composant la marche pour un pas de temps. Les liens non utilisés par l'opérateur sont mis en transparent. Le dé utilisé pour  $C_x$  et  $C_y$  est la porte de Hadamard. Un état interne colorié en rouge signifie que l'amplitude de probabilité est égale à 1, en orange à  $1/\sqrt{2}$ , en vert à  $1/2$ , en bleu à  $-1/2$  et en noir est nulle.

[24, 26, 40], les dés utilisés sont :

$$C(\pm\pi/4 + \alpha, 0, -\pi/2, 0) = \begin{pmatrix} \cos(\pm\pi/4 + \alpha) & i \sin(\pm\pi/4 + \alpha) \\ i \sin(\pm\pi/4 + \alpha) & \cos(\pm\pi/4 + \alpha) \end{pmatrix}. \quad (\text{I.10})$$

L'un est utilisé pour la direction  $x$  et l'autre pour la direction  $y$ . Ces deux dés permettent de reproduire alors l'équation de Dirac 2D discrétisée en temps et en espace où le paramètre  $\alpha$  joue le rôle de la masse.

Dans ce travail, nous allons étudier un autre type de dé :

$$C(\theta, \pi/2, \pi/2, -\pi/2) = H_2(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (\text{I.11})$$

À  $\theta = \pi/4$ , on retrouve la porte de Hadamard  $H_2(\pi/4) = H_2$ . De plus, nous allons également asymétriser les deux directions. Suivant la direction  $x$  le dé utilisé sera toujours la porte de Hadamard tandis que dans la direction  $y$  nous ferons varier l'angle  $\theta$ . L'opérateur de marche

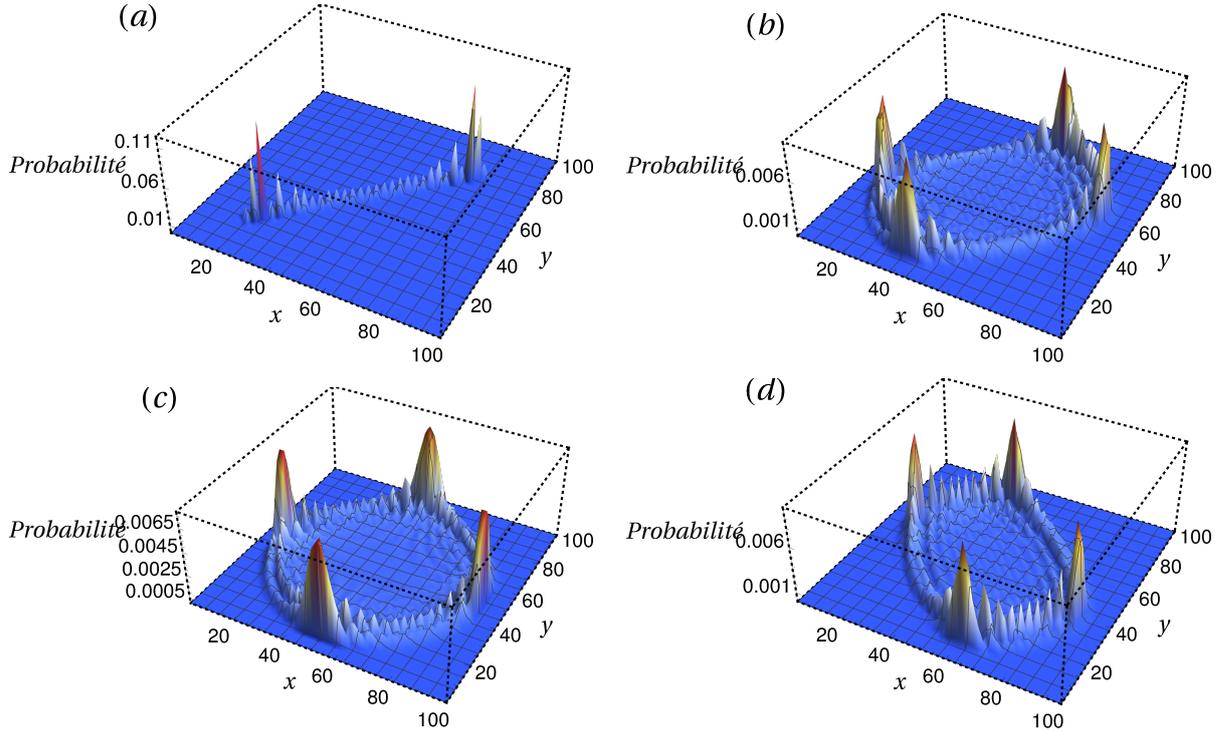


Fig. I.10 Évolution d'un marcheur quantique sur réseau carré à deux niveaux de spin initialement dans l'état symétrique  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|50, 50, +\rangle + i|50, 50, -\rangle)$  pour différentes valeurs de l'angle de mélange  $\theta$  du dé  $C_y = H_2(\theta)$  (équation (I.11)). Le dé  $C_x$  est la porte de Hadamard. L'évolution est simulée jusqu'au pas de temps  $t = 40$ . (a) :  $\theta = 0$ . (b) :  $\theta = \pi/6$ . (c) :  $\theta = \pi/4$ . (d) :  $\theta = \pi/3$ .

quantique total s'écrit alors :

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{l,m} \begin{pmatrix} c_\theta |l+1, m+1\rangle + s_\theta |l-1, m+1\rangle & c_\theta |l+1, m+1\rangle - s_\theta |l-1, m+1\rangle \\ s_\theta |l+1, m-1\rangle - c_\theta |l-1, m-1\rangle & s_\theta |l+1, m-1\rangle + c_\theta |l-1, m-1\rangle \end{pmatrix} \mathbb{I}_2 \otimes \langle l, m| \quad (\text{I.12})$$

où  $c_\theta = \cos \theta$  et  $s_\theta = \sin \theta$ .

Dans le cas extrême où  $\theta = 0$  alors le dé  $D_y$  ne mélange pas. L'état "+" (resp. "-") qui est translaté vers la droite (resp. gauche) par application de  $T_x$  se retrouve également translaté vers le haut (resp. bas), les deux directions sont totalement corrélées. Le marcheur se retrouve alors à faire une marche quantique unidimensionnelle localisée sur la diagonale du réseau carré (voir Figure I.10-a). Lorsque l'on augmente  $\theta$ , le marcheur s'écarte alors de la diagonale, la direction droite (resp. gauche) se couple de plus en plus à la direction basse (resp. haute) (voir Figure I.10-b). À  $\theta = \pi/4$ , on est dans la situation symétrique entre les deux directions (voir Figure I.10-c), aucune des deux diagonales du réseau n'est préférées. Pour  $\theta > \pi/4$ , le marcheur se localise préférentiellement sur l'antidiagonale du réseau, (voir Figure I.10-d) puisque à  $\theta = \pi/2$ , la direction droite (resp. gauche) est totalement corrélée à la direction basse (resp. haute) (non représentée ici).

L'étude analytique qui suit est largement reprise de l'article [52] et adaptée au cas du dé

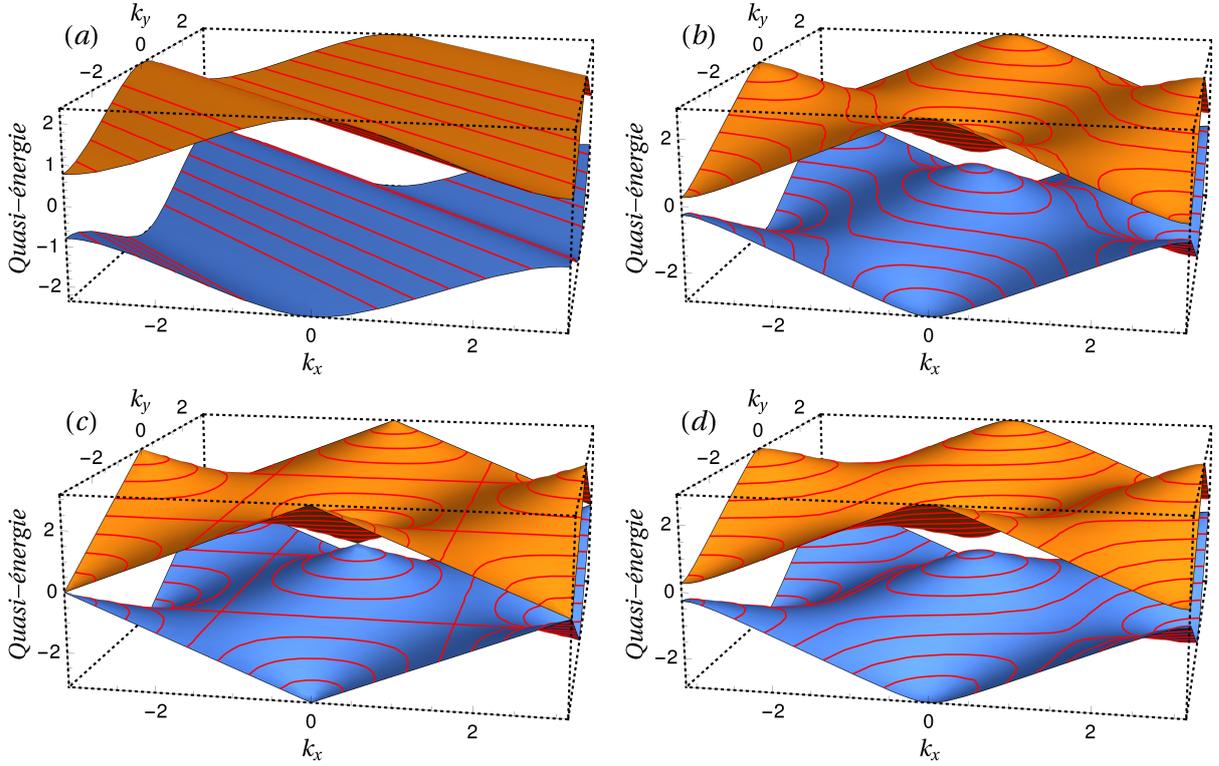


Fig. I.11 Relation de dispersion de la marche quantique sur réseau carré pour le spin à deux niveaux et pour différentes valeurs de l'angle de mélange  $\theta$  du dé  $C_y = H_2(\theta)$  (équation (I.11)). Le dé  $C_x$  est la porte de Hadamard. (a) :  $\theta = 0$ . (b) :  $\theta = \pi/6$ . (c) :  $\theta = \pi/4$ . (d) :  $\theta = \pi/3$ . Les lignes rouges tracées sur les relations de dispersion sont les iso-quasi-énergies.

$H(\theta)$  (l'article utilise la matrice de rotation d'angle  $\pi/4$ ).

L'opération de marche quantique étant invariante par translation (car on est en condition aux bords périodiques), on peut également obtenir les quasi-énergies du système grâce à une analyse en transformée de Fourier. L'opérateur étant diagonal dans la base de Fourier, on a une matrice  $2 \times 2$  indexée par les quasi-moments  $k_x$  et  $k_y$  à diagonaliser avec  $|k_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} e^{-\frac{2i\pi k_x x}{N}} |x\rangle$  et  $|k_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} e^{-\frac{2i\pi k_y y}{N}} |y\rangle$ .

$$\tilde{U}(\theta, k_x, k_y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-\frac{2i\pi k_y}{N}} (\cos \theta e^{-\frac{2i\pi k_x}{N}} + \sin \theta e^{\frac{2i\pi k_x}{N}}) & e^{-\frac{2i\pi k_y}{N}} (\cos \theta e^{-\frac{2i\pi k_x}{N}} - \sin \theta e^{\frac{2i\pi k_x}{N}}) \\ e^{\frac{2i\pi k_y}{N}} (\sin \theta e^{-\frac{2i\pi k_x}{N}} - \cos \theta e^{\frac{2i\pi k_x}{N}}) & e^{\frac{2i\pi k_y}{N}} (\sin \theta e^{-\frac{2i\pi k_x}{N}} + \cos \theta e^{\frac{2i\pi k_x}{N}}) \end{pmatrix} \quad (\text{I.13})$$

On déduit alors l'expression des quasi-énergies :

$$\varepsilon^\pm(\theta, k_x, k_y) = \pm \cos^{-1} \left( \cos k_x \cos k_y \frac{\cos \theta + \sin \theta}{\sqrt{2}} - \sin k_x \sin k_y \frac{\cos \theta - \sin \theta}{\sqrt{2}} \right)$$

où l'on a absorbé dans la définition de  $k_x$  et  $k_y$  le facteur de  $2\pi/N$  pour plus de concision.

On trace, Figure I.11, les relations de dispersion pour différentes valeurs de  $\theta$ . Quand  $\theta = \frac{\pi}{4}$ ,  $\varepsilon^\pm(\pi/4, k_x, k_y) = \pm \cos^{-1}(\cos k_x \cos k_y)$ , on a alors 4 points de contact, 2 à la quasi-

énergie  $\varepsilon = 0$  en  $\mathbf{K}_{0,0} = (0, 0)$  et  $\mathbf{K}_{1,1} = (-\pi, -\pi)$  et 2 à la quasi-énergie  $\varepsilon = -\pi$  en  $\mathbf{K}_{1,0} = (\pi, 0)$  et  $\mathbf{K}_{0,1} = (0, -\pi)$  (voir Figure I.11-c). Ces points de contact ont des relations de dispersion linéaires, on les appelle points de Dirac.

L'opérateur de marche quantique s'écrit :

$$\tilde{U}(\pi/4, k_x, k_y) = \begin{pmatrix} e^{-ik_y} \cos k_x & -ie^{-ik_y} \sin k_x \\ -ie^{ik_y} \sin k_x & e^{ik_y} \cos k_x \end{pmatrix}$$

En développant autour des points de contact  $\mathbf{K}_{\xi_1, \xi_2}$  ( $\delta \mathbf{k}_{\xi_1, \xi_2} = \mathbf{k} - \mathbf{K}_{\xi_1, \xi_2} \ll 1$  et  $\xi_{1,2} = 0, 1$ ), on obtient :

$$\begin{aligned} \tilde{U}(\pi/4, \delta \mathbf{k}_{\xi_1, \xi_2}) &= (1 - 2\xi_1)(1 - 2\xi_2) \begin{pmatrix} 1 - i\delta k_y & -i\delta k_x \\ -i\delta k_x & 1 + i\delta k_y \end{pmatrix} + o(\delta \mathbf{k}_{\xi_1, \xi_2}) \\ &= (1 - 2\xi_1)(1 - 2\xi_2) (\mathbb{I}_2 - i\delta k_y \sigma_z - i\delta k_x \sigma_x) + o(\delta \mathbf{k}_{\xi_1, \xi_2}) \end{aligned}$$

Ainsi,

$$\hat{H}_{\text{eff}}(\pi/4, \delta \mathbf{k}_{\xi_1, \xi_2}) = \pm |\xi_1 - \xi_2| \pi + \delta k_y \sigma_z + \delta k_x \sigma_x + o(\delta \mathbf{k}_{\xi_1, \xi_2}) \quad (\text{I.14})$$

Par conséquent,

$$\varepsilon^\pm(\pi/4, \delta \mathbf{k}_{\xi_1, \xi_2}) = \mp |\xi_1 - \xi_2| \pi \pm \sqrt{(\delta k_x)^2 + (\delta k_y)^2} + o(\delta \mathbf{k}_{\xi_1, \xi_2})$$

On a bien une relation de dispersion linéaire avec un hamiltonien effectif similaire à celui de l'équation de Dirac 2D de masse nulle.

À  $\theta \neq \pi/4$ , ces 4 points de contact ne se touchent plus (Figure I.11-b,d). Analytiquement, si  $\theta = \pi/4 + \alpha$ , cela se traduit par l'ajout d'un terme en  $\alpha \sigma_y$  au premier ordre en  $\alpha$  pour l'hamiltonien effectif développé autour des points de contact. Cela correspond à l'ajout d'une masse qui ouvre un gap autour des points de Dirac. On retrouve alors un hamiltonien de Dirac 2D massif.

Pour le cas extrême  $\theta = 0$ , la relation de dispersion est invariante suivant la direction  $k_- = \frac{k_x - k_y}{2}$  (voir Figure I.11-a). En effet, le marcheur quantique reste sur la même diagonale que son état initial durant toute l'évolution donc la valeur de sa position réduite  $x_- = x - y$  ne change pas au cours du temps. De plus, l'opérateur est invariant par translation donc il ne dépend pas de  $x_-$ . Ainsi il peut être réécrit comme le produit tensoriel de l'identité suivant la direction  $x_-$  et d'un marcheur quantique sur une chaîne suivant la direction du centre de masse  $x_+ = \frac{x+y}{2}$ . Le raisonnement est le même pour l'autre cas extrême  $\theta = \pi/2$  en inversant le rôle de  $x_+$  et de  $x_-$ .

On trace en rouge sur la Figure I.11 les iso-quasi-énergies des relations de dispersion. À  $\theta = \pi/4$ , les iso-quasi-énergies sont des cercles qui se déforment continûment en des carrés jusqu'aux quasi-énergies  $\pm\pi/2$ . On retrouve cette propriété également dans les systèmes hamiltoniens de liaisons fortes, par exemple le réseau carré à l'iso-énergie 0 (singularité de van Hove). Lorsque  $\theta \neq \pi/4$ , proche des extrema de bandes, les cercles se déforment en ellipses. En milieu de bande, les iso-quasi-énergies deviennent des lignes ouvertes oscillantes. C'est un effet qui existe également dans les systèmes hamiltoniens lorsque l'on se met à asymétriser le paramètre de saut entre la direction  $x$  et  $y$ . On a alors deux types d'iso-énergies, celles fermées les ellipses aux extrema de bande et celles ouvertes, ces lignes oscillantes en milieu

de bande. Aux cas extrêmes  $\theta = 0, \pi/2$ , toutes les lignes d'iso-quasi-énergies sont des lignes droites puisque la relation de dispersion est invariante dans une direction. Cette étude sur les iso-énergies sera utile pour le chapitre suivant lorsque l'on étudiera les systèmes sous champ magnétique.

Ces relations de dispersion possèdent deux symétries. Une symétrie de translation tel que  $(\varepsilon, k_y) \leftrightarrow (\pi + \varepsilon, \pi + k_y)$ . C'est la symétrie de sous-réseau, elle est expliquée plus en détail en Annexe A.1. Une symétrie miroir  $\varepsilon \leftrightarrow -\varepsilon$  que l'on appelle symétrie chirale, détaillée en Annexe A.2.1.

## I.2.2 Marches quantiques à quatre états internes

N'utiliser qu'un spin à deux niveaux pour le réseau carré est une astuce qui permet de garder un espace interne relativement simple. Cependant, son protocole, plus compliqué, n'est pas vraiment une généralisation évidente du marcheur sur la chaîne. Le fait que dans le réseau carré chaque site possède quatre voisins suggère plutôt d'utiliser un spin à 4 niveaux [54,61].

### a) Base tensorialisée

De la même manière que le réseau carré se construit par produit tensoriel de deux chaînes (du point de vue de l'espace de Hilbert sur lequel vit une particule quantique), on peut construire l'espace de Hilbert de la variable interne pour le réseau carré comme étant le produit tensoriel de deux espaces de Hilbert de spin de la chaîne,  $\mathcal{H}_{\text{spin4D}} = \mathcal{H}_{\text{spin2D}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin2D}}$  où le premier espace de Hilbert est noté  $|R\rangle \oplus |L\rangle$  et le second espace de Hilbert  $|U\rangle \oplus |D\rangle$ .  $|R\rangle$  et  $|U\rangle$  font référence à l'état "+" et  $|L\rangle$  et  $|D\rangle$  à l'état "-". Les états  $|R\rangle$  et  $|L\rangle$  correspondent à une chaîne dirigée dans la direction  $x$  avec l'état  $|R\rangle$  (resp.  $|L\rangle$ ) qui translate le marcheur sur la droite (*right* en anglais) (resp. gauche (*left* en anglais)). De la même manière, les états  $|U\rangle$  et  $|D\rangle$  correspondent à une chaîne dirigée dans la direction  $y$  avec l'état  $|U\rangle$  (resp.  $|D\rangle$ ) qui translate le marcheur vers le haut (*up* en anglais) (resp. bas (*down* en anglais)). L'espace de Hilbert total pour la variable interne s'écrit  $\mathcal{H}_{\text{spin4D}} = (|R\rangle \oplus |L\rangle) \otimes (|U\rangle \oplus |D\rangle) = |RU\rangle \oplus |RD\rangle \oplus |LU\rangle \oplus |LD\rangle$ . Le protocole de marche quantique le plus évident serait alors de tensorialiser les opérateurs de marche quantique des deux chaînes l'une suivant  $x$ , l'autre suivant  $y$  :

$$\begin{aligned} U_{\text{carré}} &= U_{\text{chaîne } x} \otimes U_{\text{chaîne } y} \\ &= (T_{\text{chaîne } x} \cdot D_{\text{chaîne } x}) \otimes (T_{\text{chaîne } y} \cdot D_{\text{chaîne } y}) \\ &= (T_{\text{chaîne } x} \otimes T_{\text{chaîne } y}) \cdot (D_{\text{chaîne } x} \otimes D_{\text{chaîne } y}) \\ &= T_{\text{carré}} \cdot D_{\text{carré}} \end{aligned}$$

On choisira comme dans le cas de la marche quantique à deux états internes d'asymétriser la direction  $y$  par rapport à  $x$  via le dé, en choisissant  $D_{\text{chaîne } x} = \mathbb{I}_{\text{chaîne } x} \otimes H_2(\pi/4)$  et

$D_{\text{chaîne } y} = \mathbb{I}_{\text{chaîne } y} \otimes H_2(\theta)$ . On a alors :

$$D_{\text{carré}} = \mathbb{I}_{\text{carré}} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta & \sin \theta & -\cos \theta \\ \cos \theta & \sin \theta & -\cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{I.15})$$

$$T_{\text{carré}} = \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l+1, m+1\rangle \langle l, m| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |l+1, m-1\rangle \langle l, m| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |l-1, m+1\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |l-1, m-1\rangle \langle l, m| \end{pmatrix} \quad (\text{I.16})$$

avec comme convention pour la représentation matricielle :

$$|RU\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |RD\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |LU\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |LD\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.17})$$

et  $\mathbb{I}_{\text{carré}} = \sum_{l,m} |l, m\rangle \langle l, m|$  désigne l'identité dans l'espace de Hilbert du réseau carré (i.e. sans les degrés de liberté internes).

L'espace sur lequel évolue le marcheur est représenté Figure I.12 et les deux premiers pas de temps sont illustrés Figure I.13. Le code couleur sur ces deux Figures a son importance. Il permet de préciser la position de l'état interne dans la représentation matricielle. La couleur rouge désigne le premier vecteur, ici,  $|RU\rangle$ , la couleur verte le second vecteur, ici,  $|RD\rangle$ , la couleur orange le troisième vecteur, ici,  $|LU\rangle$  et enfin, le bleu, le quatrième vecteur, ici,  $|LD\rangle$ .

Tout comme pour la marche à deux états internes, cette marche se déplace suivant les diagonales du réseau carré. Le réseau carré initial est donc divisé en deux réseaux carrés sous-jacents qui ne se voient pas, tournés de  $45^\circ$  et dilatés de  $\sqrt{2}$  par rapport au réseau initial.

On peut souligner le fait que, d'un point de vue mathématique, l'opérateur faisant évoluer ce marcheur quantique sur un réseau carré 2D est le même que celui faisant évoluer deux marcheurs quantiques sans interaction sur une chaîne 1D où la position du premier marcheur serait la position  $x$  et celle du second marcheur la position  $y$ . Les états internes  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  seraient respectivement  $|R\rangle$  et  $|L\rangle$  pour le premier marcheur et  $|U\rangle$  et  $|D\rangle$  pour le second marcheur. Il n'est donc pas surprenant alors de constater que l'évolution de ce système redonne le produit de deux marches quantiques sur une chaîne 1D l'une se faisant dans la direction  $x$  et l'autre dans la direction  $y$  (voir Figure I.14), l'angle  $\theta$  permettant d'asymétriser la vitesse de propagation entre les deux directions. Pour  $\theta < \pi/4$ , la propagation se fait plus rapidement dans la direction  $y$  que dans la direction  $x$  (voir Figure I.14-a).

On trace également la relation de dispersion de cette marche pour  $\theta = \pi/6, \pi/4, \pi/3$  (voir Figure I.15). Ici, on a 4 bandes à cause des 4 états internes sur chaque site. Sachant que cette marche est le produit de deux marches 1D, les valeurs propres et vecteurs propres peuvent

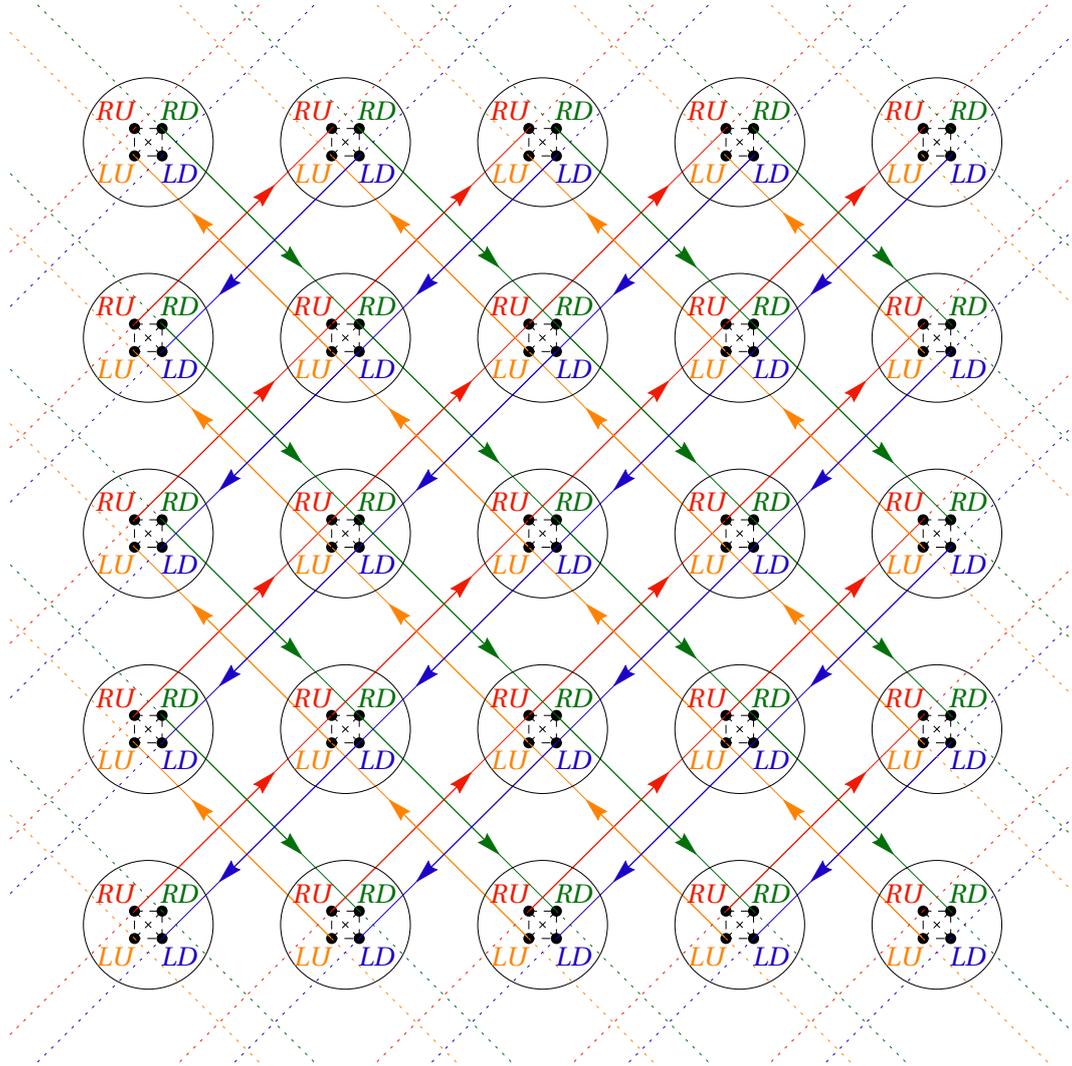


Fig. I.12 Représentation d'une portion du réseau sur laquelle le marcheur évolue avec ses quatre états internes provenant de la base tensorialisée. Les cercles représentent les sites du réseau carré où se trouvent à l'intérieur les quatre états internes  $|RU\rangle$ ,  $|RD\rangle$ ,  $|LU\rangle$  et  $|LD\rangle$ . Les liens en pointillés noirs représentent l'action du dé qui couple tous les états internes d'un même site. Les liens fléchés représentent l'action de l'opérateur de translation, en rouge projeté suivant l'état  $|RU\rangle$ , en vert suivant  $|RD\rangle$ , en orange suivant  $|LU\rangle$  et en bleu suivant  $|LD\rangle$ .

être déduits simplement de l'étude faite à la Section I.1.3 :

$$U_{\text{carré}} |\psi\rangle = e^{-iE} |\psi\rangle$$

$$U_{\text{chaîne } x} |\psi_x\rangle \otimes U_{\text{chaîne } y} |\psi_y\rangle = e^{-i\varepsilon_{\text{chaîne } x}} |\psi_x\rangle \otimes e^{-i\varepsilon_{\text{chaîne } y}} |\psi_y\rangle$$

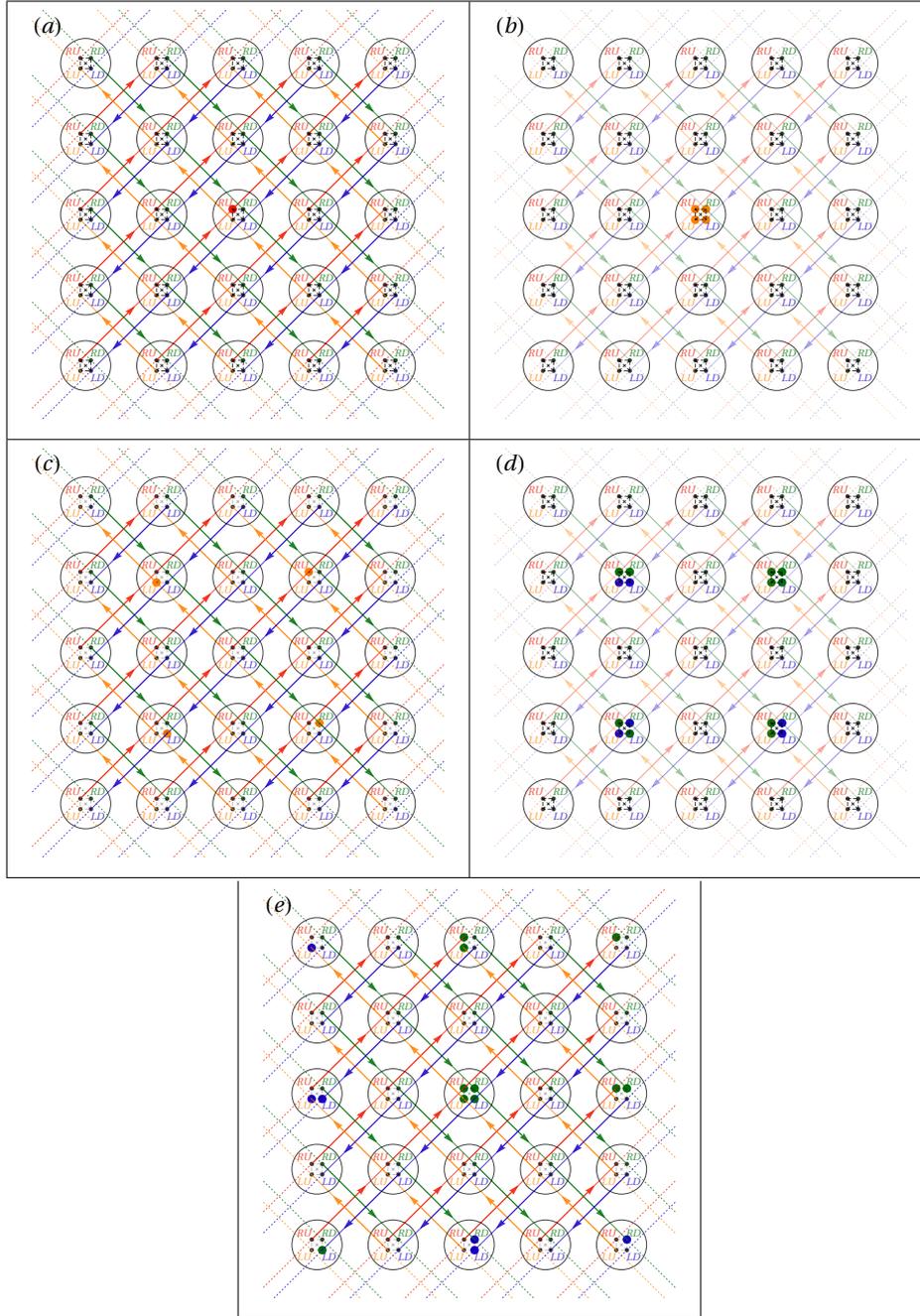


Fig. I.13 Illustration du protocole de la marche quantique utilisant la base tensorialisée  $\{|RU\rangle, |RD\rangle, |LU\rangle, |LD\rangle\}$  pour un état initial localisé sur le site du milieu dans l'état de spin  $|RU\rangle$  (Figure (a)). Les Figures (b) à (e) illustrent l'action successive du dé puis de la translation composant la marche sur deux pas de temps. Les liens non utilisés par l'opérateur sont mis en transparent. Le dé utilisé est celui de l'équation (I.15). Un état interne colorié en rouge signifie que l'amplitude de probabilité est égale à 1, en orange à  $1/2$ , en vert à  $1/4$ , en bleu à  $-1/4$  et en noir est nulle.

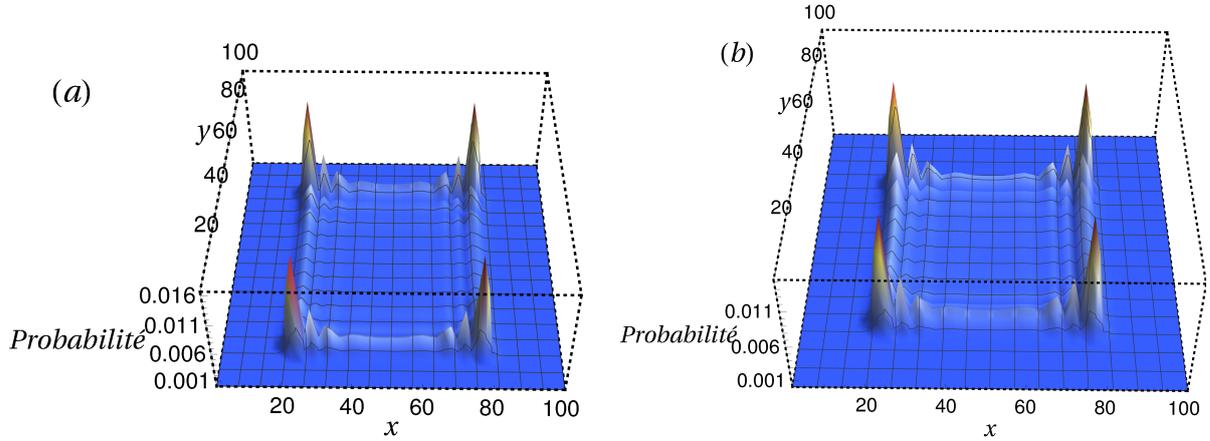


Fig. I.14 Évolution d'un marcheur quantique sur réseau carré utilisant la base tensorialisée, initialement dans l'état symétrique  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|50, 50, RU\rangle + i|50, 50, RD\rangle + i|50, 50, LU\rangle - |50, 50, LD\rangle)$  pour un angle de mélange (a) :  $\theta = \pi/6$  et (b) :  $\theta = \pi/4$  du dé défini équation (I.15). L'évolution est simulée jusqu'au pas de temps  $t = 40$ .

Les quasi-énergies sont les sommes des deux bandes des deux systèmes 1D (équation (I.7)) :

$$E^{\pm, \pm}(\theta, k_x, k_y) = \varepsilon_{\text{chaîne } x}^{\pm}(k_x, \theta = \pi/4, \varphi = \pi/2, -\beta = -\pi/2) + \varepsilon_{\text{chaîne } y}^{\pm}(k_y, \theta, \varphi = \pi/2, -\beta = -\pi/2)$$

$$E^{\pm \pm}(\theta, k_x, k_y) = \pi \pm \cos^{-1}\left(\frac{\sin k_x}{\sqrt{2}}\right) \pm \cos^{-1}(\cos \theta \sin k_y)$$

La relation de dispersion à  $\theta = \pi/4$  est tracée Figure I.15-c,d, les bandes de quasi-énergies ont des minima et des maxima aux quasi-énergies  $\pm\pi/2$ . Il n'y a pas de gap donc toutes les fréquences sont autorisées, cependant, les différentes bandes ne se touchent pas en ces extrema car ils ne sont pas atteints aux mêmes endroits de la relation de dispersion (i.e. aux mêmes valeurs de quasi-moment  $(k_x, k_y)$ ). Comme on a pu le voir dans la section I.1.3, lorsque  $\theta = \pi/4$ , autour de ces minima la relation de dispersion est parabolique avec comme masse effective  $\tan \pi/4 = 1$  dans la direction  $k_x$  et  $k_y$ . De la même manière que dans la marche quantique à deux niveaux, les iso-quasi-énergies sont des cercles qui se déforment continûment en des carrés aux quasi-énergies 0 et  $\pm\pi$ . Les iso-quasi-énergies 0 et  $\pm\pi$  sont également des lignes de contact droites inter-bandes.

Lorsque  $\theta \neq \pi/4$ , si l'on se concentre sur l'évolution des minima et maxima autour de la quasi-énergie  $\pi/2$ , les minima de la bande inférieure varient comme  $3\pi/4 - \theta$  et ceux de la bande supérieure comme  $\pi/4 + \theta$ . Pour  $\theta > \pi/4$ , les minima de la bande supérieure montent et les maxima de la bande inférieure s'abaissent (voir Figure I.15-e), on a alors un gap qui s'ouvre. Au contraire, pour  $\theta < \pi/4$ , les minima descendent et les maxima montent (voir Figure I.15-a), les deux bandes se recouvrent alors en quasi-énergies sans pour autant s'intersecter. On a une évolution similaire autour de la quasi-énergie  $-\pi/2$ . La relation de dispersion reste parabolique autour des extrema mais la masse effective dans la direction  $k_y$  devient  $\tan \theta$ . Les iso-énergies se déforment donc et ressemblent maintenant à des ellipses proches du minimum de la bande. Proche des quasi-énergies 0 et  $\pm\pi$ , les iso-quasi-énergies

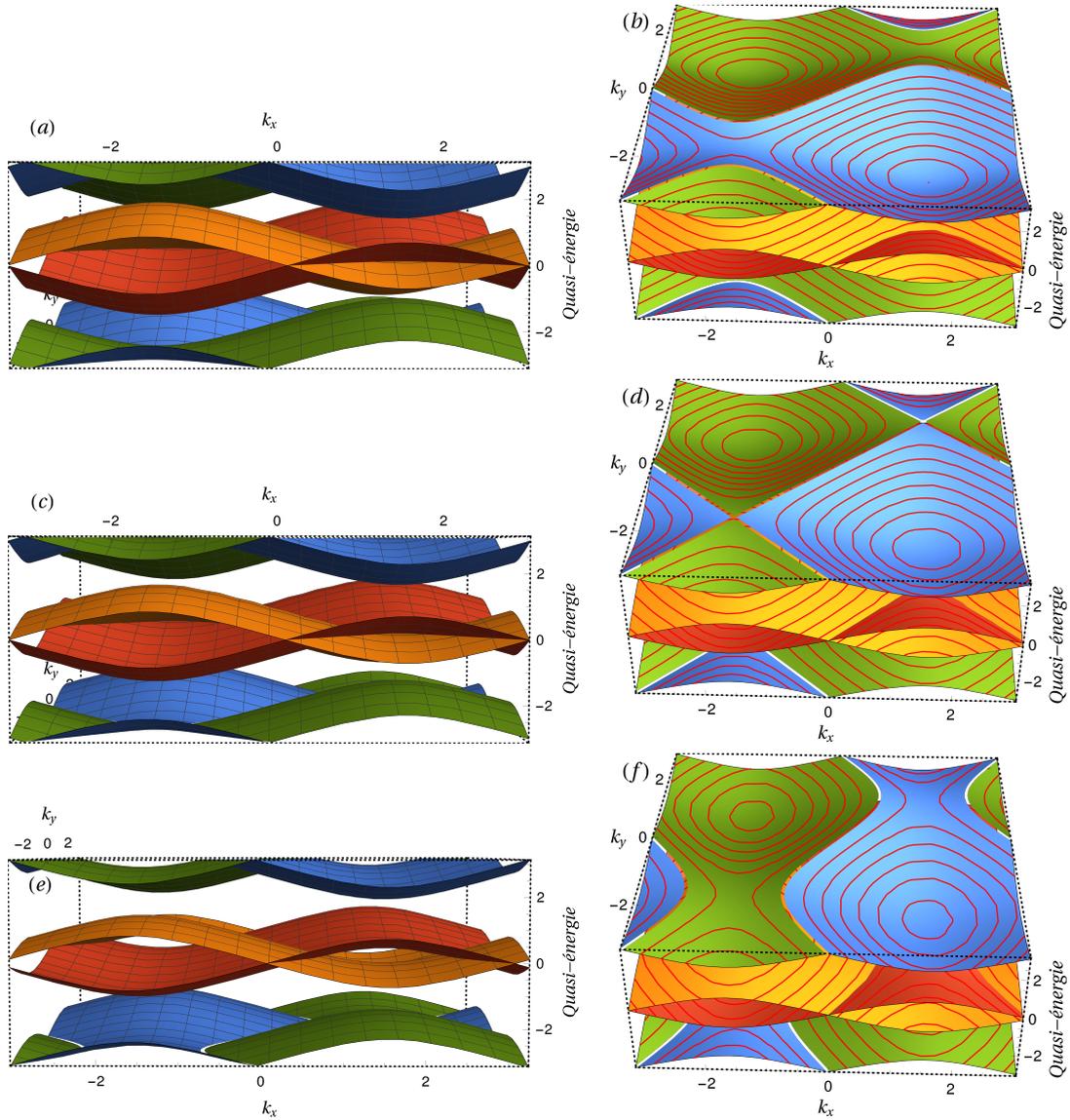


Fig. I.15 Relation de dispersion sur réseau carré utilisant la base tensorialisée, pour un angle de mélange (a),(b) :  $\theta = \pi/6$ , (c),(d) :  $\theta = \pi/4$  et (e),(f) :  $\theta = \pi/3$ . Les Figures (a), (c) et (e) sont les relations de dispersion vue de face et les Figures (b), (d) et (f) vue de haut où l'on a tracé en rouge certaines lignes d'iso-quasi-énergies.

sont également des lignes ouvertes oscillantes.

Ces relations de dispersion possèdent également les deux mêmes symétries, la symétrie de sous-réseau et la symétrie chirale, que la marche quantique à deux états internes. Leur analyse est détaillée en Annexe A.1 et A.2.2.

### b) Base naturelle

Les deux marches quantiques étudiées précédemment ont la particularité de se déplacer sur les diagonales du réseau carré et non sur ses arêtes. Puisque l'on peut contrôler via l'opérateur de translation le déplacement du marcheur, on peut s'interroger sur l'effet qu'aurait ce changement sur l'évolution temporelle et la relation de dispersion de la marche.

Pour cela, on garde la même représentation matricielle du dé que dans l'équation (I.15) mais la base de spin est maintenant renommée ( $|U\rangle, |R\rangle, |D\rangle, |L\rangle$ ) puisque l'opérateur de translation se comporte comme ceci :

$$T_{\text{naturelle}} = \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l, m+1\rangle \langle l, m| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |l+1, m\rangle \langle l, m| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |l, m-1\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |l-1, m\rangle \langle l, m| \end{pmatrix}$$

ayant pour représentation matricielle :

$$|U\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |R\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |D\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |L\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

La composante du marcheur sur l'état  $|U\rangle$  est donc translatée vers le haut,  $|R\rangle$  vers la droite,  $|D\rangle$  vers le bas et  $|L\rangle$  vers la gauche.

Le protocole de marche quantique est de la même simplicité que celui de la base tensorialisée. On y applique d'abord le dé puis l'opérateur de translation :

$$U_{\text{naturelle}} = T_{\text{naturelle}} \cdot D(\theta)$$

On représente le réseau de ce marcheur Figure I.16. Si l'on tourne de  $45^\circ$  dans le sens horaire et que l'on dilate de  $\sqrt{2}$  le réseau de cette marche, on réobtient alors l'un des deux réseaux sous-jacent de la base tensorialisée (représentée Figure I.12) à la différence que les couleurs bleue et orange sont inversées donc la position des deux derniers vecteurs dans la représentation matricielle est inversée. Cela vient du fait que la base ( $|U\rangle, |R\rangle, |D\rangle, |L\rangle$ ) est orientée dans le sens horaire, ce qui n'est pas le cas de la base tensorialisée. En tournant notre réseau pour essayer de le faire correspondre à la marche précédente, on transforme l'opérateur de translation que l'on renomme  $T_{\text{naturelle}}^{\text{tourné}}$  et on peut renommer les vecteurs de la base de spin (puisque ce ne sont que des noms) comme  $|U\rangle \rightarrow |RU\rangle$  car il est translaté dans la direction diagonale haut droite,  $|R\rangle \rightarrow |RD\rangle$  car il est translaté dans la direction diagonale bas droite,  $|D\rangle \rightarrow |LD\rangle$  car il est translaté dans la direction diagonale bas gauche,  $|L\rangle \rightarrow |LU\rangle$  car il est translaté dans la direction diagonale haut gauche. Cependant, maintenant  $|LD\rangle$  est en troisième position dans notre représentation matricielle et  $|LU\rangle$  est en dernière position.

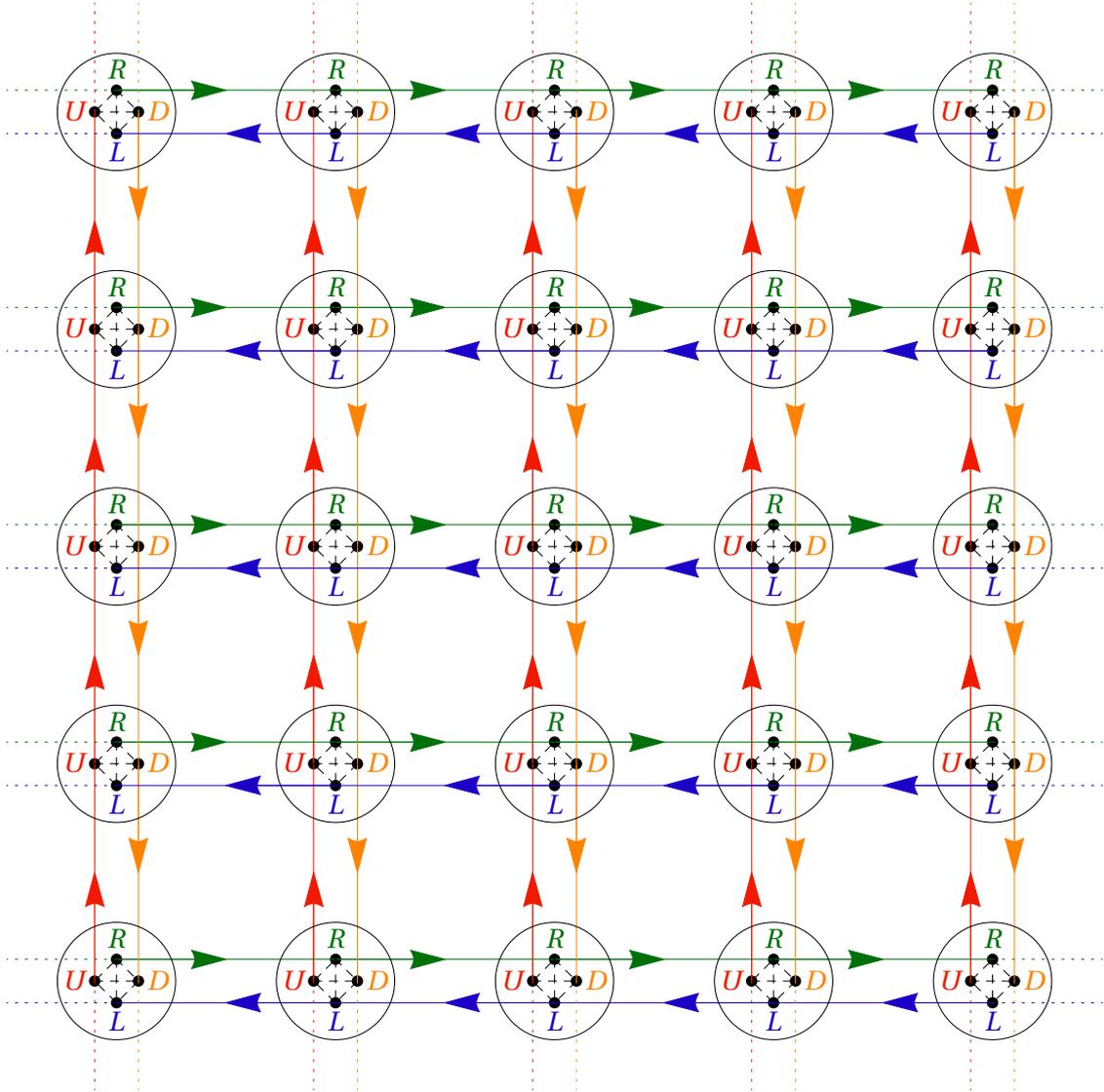


Fig. I.16 Représentation d'une portion du réseau sur laquelle le marcheur évolue avec ses 4 états internes provenant de la base naturelle. Les cercles représentent les sites du réseau carré où se trouvent à l'intérieur les quatre états internes  $|U\rangle$ ,  $|R\rangle$ ,  $|D\rangle$  et  $|L\rangle$ . Les liens en pointillés représentent l'action du dé qui couple tous les états internes d'un même site. Les liens fléchés représentent l'action de l'opérateur de translation, en rouge projeté suivant l'état  $|U\rangle$ , en vert suivant  $|R\rangle$ , en orange suivant  $|D\rangle$  et en bleu suivant  $|L\rangle$ .

Le dé utilisé est toujours celui de l'équation (I.15). Pour faire correspondre au mieux les deux marches on intervertit la position du troisième et quatrième vecteur afin de retrouver la représentation matricielle de la base tensorialisée (équation (I.17)). Cela se fait grâce à l'opérateur :

$$P = \mathbb{I}_{\text{carré}} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

en l'appliquant sur l'opérateur de marche quantique :

$$\begin{aligned} P.U_{\text{naturelle}}^{\text{tourné}}.P^{-1} &= P.T_{\text{naturelle}}^{\text{tourné}}.P^{-1}.P.D(\theta).P^{-1} \\ &= T_{\text{carré}}.D'(\theta) \end{aligned}$$

L'opérateur de translation correspond alors parfaitement à celui de la base tensorialisée (équation (I.16)) mais l'opérateur dé est alors changé (les deux dernières lignes et colonnes ont été interverties) :

$$D'(\theta) = P.D(\theta).P^{-1} = \mathbb{I}_{\text{carré}} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & \sin \theta & \cos \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta & -\cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta & \cos \theta & -\sin \theta \\ \cos \theta & \sin \theta & -\sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{I.18})$$

Par souci de comparaison avec la base tensorialisée, les prochaines figures seront tracées sur le réseau tourné et dilaté, on utilisera donc l'opérateur d'évolution  $U'_{\text{carré}}(\theta) = T_{\text{carré}}.D'(\theta)$ .

On représente Figure I.17 son évolution temporelle et sa relation de dispersion Figure I.18 à  $\theta = \pi/4$ . Dans le cas de cette marche quantique, on ne regardera que le cas  $\theta = \pi/4$  par souci de concision mais également, parce que l'angle  $\theta \neq \pi/4$  avait été introduit pour asymétriser les deux directions du réseau et que dans ce cas précis, il ne remplit plus cette fonction.

Ce que l'on peut constater c'est que ce petit changement au niveau du dé induit une évolution et une distribution complètement différentes. Son évolution temporelle Figure I.17 semble être confinée sur l'axe  $x$ , ne pouvant que, faiblement, se déplacer dans la direction  $y$ .

La relation de dispersion s'en trouve également complètement modifiée et beaucoup plus complexe. L'expression exacte des 4 bandes de quasi-énergies est :

$$\begin{aligned} E'_{\text{jaune,bleu}} &= -\sin^{-1} \left( \frac{1}{2} \left( \cos k_x \sin k_y \pm \sqrt{1 - \cos 2k_x + \cos^2 k_x \sin^2 k_y} \right) \right) \\ E'_{\text{verte,rouge}} &= \pm \pi + \sin^{-1} \left( \frac{1}{2} \left( \cos k_x \sin k_y \mp \sqrt{1 - \cos 2k_x + \cos^2 k_x \sin^2 k_y} \right) \right) \end{aligned} \quad (\text{I.19})$$

où les couleurs font références aux bandes tracées Figure I.18. Une étude beaucoup plus poussée que celle qui sera effectuée dans ce manuscrit est nécessaire pour comprendre l'entièreté de cette relation de dispersion. Ici, on peut se concentrer au niveau des points de contact entre la bande verte et bleue (à la quasi-énergie  $\pi/2$ ) et entre la bande jaune et rouge (à la quasi-énergie  $-\pi/2$ ). Suivant la direction  $k_x$  (Figure I.18-a), ces points de contact ont une relation de dispersion parabolique, tandis que suivant la direction  $k_y$ , la relation de dispersion est linéaire i.e. à la Dirac. On voit donc que cette nouvelle marche présente un

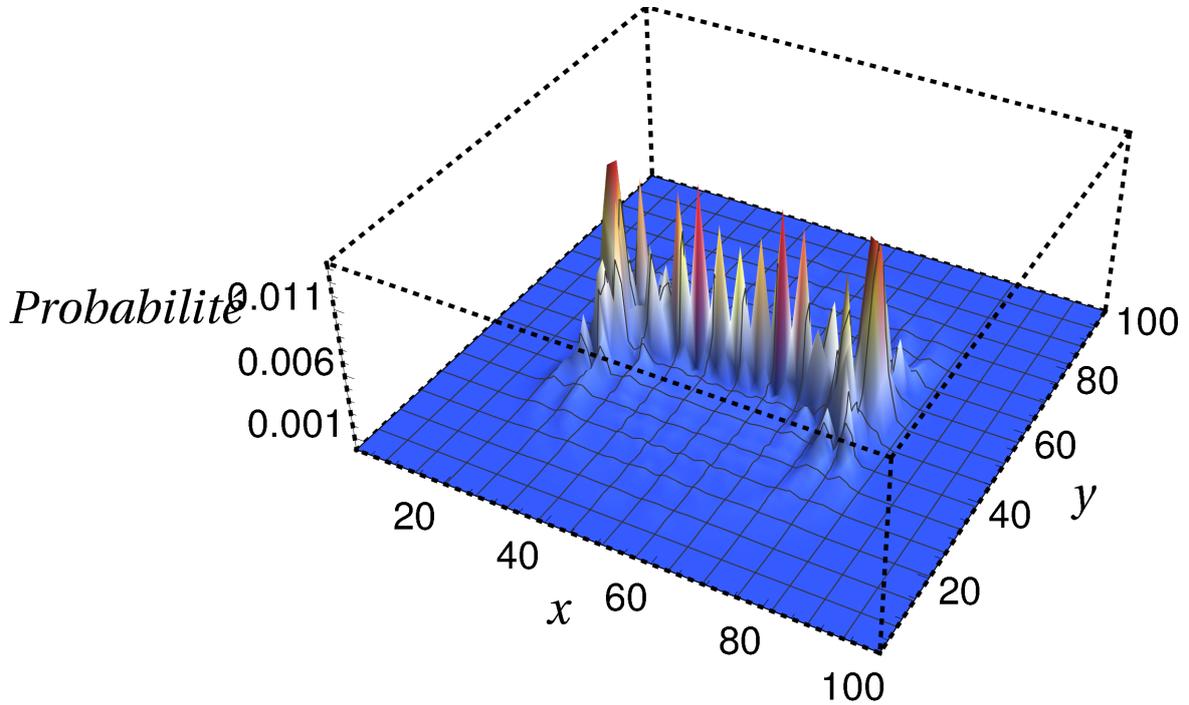


Fig. I.17 Évolution d'un marcheur quantique sur réseau carré gouvernée par l'opérateur de marche quantique  $U'_{\text{carré}}(\pi/4) = T_{\text{carré}} \cdot D'(\pi/4)$ , initialement dans l'état symétrique  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|50, 50, RU\rangle + i|50, 50, RD\rangle + i|50, 50, LU\rangle - |50, 50, LD\rangle)$ . L'évolution est simulée jusqu'au pas de temps  $t = 40$ .

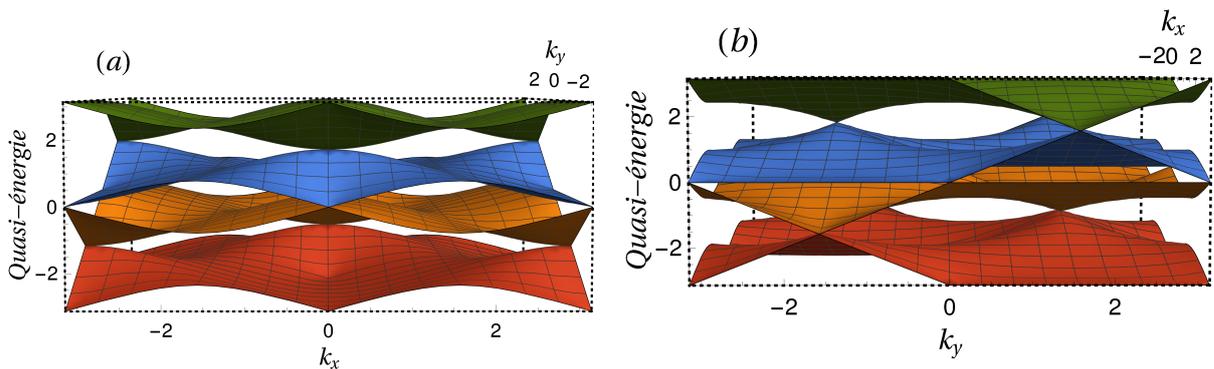


Fig. I.18 Relation de dispersion pour le dé  $D'(\pi/4)$  défini équation (I.18). (a) : vue suivant l'axe  $k_x$ . (b) : vue suivant l'axe  $k_y$ . On voit que les points de Dirac sont linéaires suivant  $k_y$  et quadratiques suivant  $k_x$  (semi-Dirac).

comportement hybride entre la marche quantique utilisant un spin à deux niveaux (points de contact à la Dirac) et la marche quantique utilisant la base tensorialisée et le dé  $D(\theta)$  (points de contact parabolique). On appelle ces points de contact **semi-Dirac** [62].

### I.3 Conclusion

Les marches quantiques ont été introduites initialement pour discrétiser en temps et en espace l'équation de Dirac (“*Feynman checkerboard*” [6]). En implémentant directement la matrice d’adjacence du graphe dans l’opérateur d’évolution, une vitesse maximale apparaît naturellement car le marcheur ne peut visiter que les sites voisins au pas de temps suivant. L’exploration du graphe par le marcheur se fait de manière balistique mais l’angle de mélange  $\theta$  du dé permet de contrôler sa vitesse d’expansion en simulant l’effet d’une masse pour la particule. Afin de garantir l’unitarité de l’opérateur d’évolution, il est nécessaire d’introduire une variable interne permettant de faire la distinction sur les différentes provenances possibles du marcheur. La discrétisation en temps implique l’apparition de quasi-énergies définies modulo  $2\pi$ . Ici, la notion d’état fondamental n’est alors plus bien définie.

Sur les dernières décennies, le développement de nouvelles techniques expérimentales ouvre la perspective de simuler directement des systèmes quantiques sur réseau. Plusieurs réalisations expérimentales de ces marches quantiques sont actuellement produites en laboratoire en utilisant différentes méthodes. Pour l’instant la plupart de ces expériences concernent des marches quantiques 1D soit avec des ions [63–65] ou des atomes froids [66–68] piégés dans des réseaux optiques ou directement avec de la lumière et des tables optiques [69–73], mais encore en utilisant un réseau de semi-conducteurs [74] et même un condensat de Bose-Einstein afin de produire une marche dans l’espace des moments [75]. A deux dimensions, une généralisation a été produite avec de la lumière [76].

La grande diversité de dés et de protocoles que l’on peut utiliser avec les marches quantiques offre la possibilité de créer des systèmes avec un large spectre de propriétés. Dans ce chapitre, on a vu qu’en modifiant soit le protocole soit le dé des marches quantiques bidimensionnelles, on pouvait obtenir des relations de dispersion très différentes avec chacune ses propres spécificités.



## II – Effet d’un champ magnétique transverse à un réseau 2D

Le but de ce chapitre est d’étudier le comportement des marches quantiques 2D précédemment introduites lorsque l’on leur applique un champ magnétique uniforme, constant et transverse à leur réseau. Pour cela, on obtiendra des équivalents de résultats connus pour les hamiltoniens de liaisons fortes, adaptés au cas des marches quantiques. On s’intéressera principalement au **papillon de Hofstadter**, une figure fractale (voir Figure II.3) obtenue par D.R. Hofstadter [51] en 1976 où les énergies d’un hamiltonien de liaisons fortes sur réseau carré sont tracées en fonction du flux du champ magnétique qui le traverse. Par la suite, le papillon de Hofstadter a été étendu à d’autres réseaux et pavages, par exemple, le réseau triangulaire en 1979 par Claro et Wannier [77], le pavage nid d’abeille (graphène) par Rammal [78] en 1985 ou encore le pavage  $\mathcal{T}_3$  par Vidal, Mosseri et Douçot en 1998 [79] (dans lequel on reviendra plus en détail dans le chapitre suivant).

Dans la première partie de ce chapitre, on rappelle certains résultats connus pour les hamiltoniens de liaisons fortes sous champ magnétique dans le cas du réseau carré et du nid d’abeille. On part d’une analyse dans le continu pour trouver les niveaux de Landau i.e. les énergies du système sous champ magnétique et on montre la façon dont sont modifiées les amplitudes de transition lors de l’ajout d’un tel champ. Ensuite, on introduit la substitution de Peierls permettant de prendre en compte un champ magnétique transverse à un réseau. Un effort particulier est apporté pour comprendre les différentes approximations menant à cette substitution. Une fois l’hamiltonien de liaisons fortes sous champ obtenu, on discute la façon d’obtenir le papillon de Hofstadter. On montre que la partie à bas flux permet de réobtenir les niveaux de Landau ainsi que les orbites cyclotrons lorsque l’on y fait évoluer un paquet d’onde gaussien. Enfin, on étudie le système avec des bords qui mènent à l’apparition de nouveaux états localisés sur ces extrémités et ayant un lien avec les invariants topologiques.

La seconde section est consacrée à l’étude des trois marches quantiques étudiées précédemment en présence d’un champ magnétique. On obtient l’analogie des papillons pour marches quantiques. On discute des niveaux de Landau, de la limite semi-classique. On montre que la question des conditions aux bords ouverts et la périodicité des quasi-énergies mènent à l’existence d’un nouvel invariant topologique.

## II.1 Champ magnétique dans les hamiltoniens de liaisons fortes

L'analyse qui suit est tirée en grande partie de [80]. On pourra s'y référer pour plus de détail.

Tout d'abord, il est nécessaire de comprendre comment le champ magnétique est introduit dans l'hamiltonien de liaisons fortes. On peut d'ores et déjà donner le résultat et on expliquera par la suite comment l'obtenir. Ici, on se concentre sur l'hamiltonien de réseau carré qui s'écrit sans champ magnétique :

$$H_0 = -t \sum_{l,m} \left[ |l+1, m\rangle \langle l, m| + |l-1, m\rangle \langle l, m| + |l, m+1\rangle \langle l, m| + |l, m-1\rangle \langle l, m| \right]$$

où  $t$  est le paramètre de saut et le pas du réseau est égal à 1. Grâce à l'invariance par translation, on peut appliquer le théorème de Bloch. L'hamiltonien est donc diagonal dans l'espace des quasi-moments :

$$H_0 = -2t \sum_{k_x, k_y} (\cos k_x + \cos k_y) |k_x, k_y\rangle \langle k_x, k_y|.$$

On en déduit la relation de dispersion  $E(k_x, k_y) = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$  avec  $k_x$  et  $k_y$  appartenant à la première zone de Brillouin  $[-\pi, \pi[$ .

En ajoutant un champ magnétique transverse (suivant  $z$ ) au plan  $(x, y)$  du réseau bidimensionnel, on modifie l'hamiltonien. Le paramètre de saut reliant le site  $i$  au site voisin  $j$ ,  $t_{i \rightarrow j} = t$  est remplacé par  $t_{i \rightarrow j} = t e^{i \frac{q}{\hbar} \int_i^j \vec{A}(\vec{s}) \cdot d\vec{s}}$  où  $q$  est la charge de la particule vivant sur le réseau et soumise au champ magnétique,  $\vec{A}$  le potentiel vecteur associé au champ magnétique transverse et l'intégrale est prise le long de l'arête connectant le site  $i$  au site  $j$ . Cette substitution est valable pour n'importe quel hamiltonien de liaisons fortes, c'est la **substitution de Peierls** [81]. Ainsi, le nouvel hamiltonien sur réseau carré sous champ s'écrit :

$$\begin{aligned} H = -t \sum_{l,m} & \left[ e^{i \frac{q}{\hbar} \int_l^{l+1} A_x(x, m, 0) dx} |l+1, m\rangle \langle l, m| + e^{-i \frac{q}{\hbar} \int_{l-1}^l A_x(x, m, 0) dx} |l-1, m\rangle \langle l, m| \right. \\ & \left. + e^{i \frac{q}{\hbar} \int_m^{m+1} A_y(l, y, 0) dy} |l, m+1\rangle \langle l, m| + e^{-i \frac{q}{\hbar} \int_{m-1}^m A_y(l, y, 0) dy} |l, m-1\rangle \langle l, m| \right]. \end{aligned} \quad (\text{II.1})$$

### II.1.1 Équation dans le continu

Pour comprendre ce terme de Peierls, revenons dans le continu. La phase prise par la particule provient de l'intégration du potentiel vecteur sur le chemin suivi. On rappelle d'abord le résultat dans le cas classique. On mettra dans ce qui suit, la célérité de la lumière égale à 1,  $c = 1$ .

#### a) Niveaux de Landau

En partant du Lagrangien  $\mathcal{L} = \frac{mv^2}{2} + q\vec{v} \cdot \vec{A}$ , on peut vérifier grâce aux équations d'Euler-Lagrange  $\left( \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}} \right)$  que l'on retrouve bien les équations du mouvement classique d'une

particule chargée  $q$  dans un champ magnétique uniforme :

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q\vec{v} \times \vec{B}$$

où  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ ,  $\vec{v}$  est la vitesse de la particule.

Le mouvement décrit est alors une orbite cyclotron de rayon de giration  $r_c = \frac{mv}{qB}$  et de pulsation  $\omega_c = \frac{qB}{m}$ .

On peut d'ailleurs, par une transformation de Legendre  $\mathcal{H} = \vec{p} \cdot \vec{v} - \mathcal{L}$ , en déduire l'hamiltonien associé :  $\mathcal{H} = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m}$ .

Traisons maintenant le problème dans le cadre de la mécanique quantique. La particule est donc un vecteur dans un espace de Hilbert, où la position et la vitesse deviennent des opérateurs. Le champ magnétique étant constant dans le temps on doit alors résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire  $\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  où  $|\psi\rangle$  est la fonction d'onde de la particule et  $E$  son énergie.

Pour cela, on se place dans le cas particulier d'une particule confinée dans le plan  $(x, y)$  et soumise (selon la direction  $z$ ) à un champ magnétique transverse, constant (dans le temps) et uniforme (dans l'espace). On fait alors un choix de jauge, ici, on prendra la jauge de Landau

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} 0 \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix}. \text{ On peut vérifier que } \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} = \vec{\nabla} \times \begin{pmatrix} 0 \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix}$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\begin{aligned} E|\psi\rangle &= \mathcal{H}|\psi\rangle \\ &= \left( \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{(\hat{p}_y - qB\hat{x})^2}{2m} \right) |\psi\rangle \end{aligned}$$

Ici on met  $\hat{\cdot}$  sur  $\hat{p}_x$ ,  $\hat{p}_y$  et  $\hat{x}$  pour insister sur leur nature d'opérateur. La jauge de Landau brise l'invariance par translation selon la direction  $x$  mais la conserve suivant la direction  $y$ . On a alors  $[\mathcal{H}, \hat{p}_y] = 0$  où  $[\cdot, \cdot]$  désigne le commutateur entre deux opérateurs. Ainsi,  $|\psi\rangle$  qui est un vecteur propre de  $\mathcal{H}$  est également un vecteur propre de  $\hat{p}_y$ . La partie dépendante de  $y$  dans  $|\psi\rangle$  se factorise comme une onde plane suivant  $y$ ,  $\psi(x, y) = e^{-ik_y y} \phi(x)$  i.e.  $|\psi\rangle = |k_y\rangle \otimes |\phi\rangle$  et l'on peut remplacer l'opérateur  $\hat{p}_y$  dans l'équation par sa valeur propre  $\hbar k_y$ . On se ramène alors à une famille de problèmes effectifs unidimensionnels indexés par  $k_y$  :

$$\begin{aligned} E|\phi\rangle &= \left( \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{(\hbar k_y - qB\hat{x})^2}{2m} \right) |\phi\rangle \\ &= \left( \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{q^2 B^2}{2m} \left( \hat{x} - \frac{\hbar k_y}{qB} \right)^2 \right) |\phi\rangle \\ &= \left( \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (\hat{x} - x_0)^2 \right) |\phi\rangle \end{aligned}$$

avec  $\omega_c = \frac{qB}{m}$  la pulsation cyclotron présentée dans le cas classique et  $x_0 = \frac{\hbar k_y}{qB}$ . On reconnaît l'équation d'un oscillateur harmonique 1D centré en  $x_0$  dont les énergies sont  $E_n = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right)$ ,  $n \geq 0$ .

Les énergies sont indépendantes de  $k_y$ . Si l'on est sur un échantillon de taille infinie les niveaux de Landau sont infiniment dégénérés puisque  $k_y$  prend des valeurs continues. Si l'on est sur un échantillon de taille finie et que l'on impose des conditions aux bords périodiques suivant  $y$  et ouverts suivant  $x$ , la particule est confinée dans une région d'aire  $\mathcal{A} = L_x L_y$  dans le plan  $(x, y)$  et  $k_y$  prend les valeurs discrètes  $k_y = \frac{2\pi j}{L_y}$ ,  $j \in \mathbb{Z}$ . De plus, on sait que :

$$0 \leq x_0 \leq L_x \Rightarrow 0 \leq j \leq \frac{qBL_x L_y}{2\pi\hbar} = \frac{qBA}{h} = \frac{BA}{\Phi_0} \equiv N_\Phi$$

où  $\Phi_0 = h/q$  est appelé le **quantum de flux**. Chaque niveau est donc dégénéré  $N_\Phi$  fois.

On a montré, dans le cas d'une particule non-relativiste i.e. avec une relation de dispersion libre s'écrivant  $E = \frac{p^2}{2m}$ , que les énergies du système sont maintenant quantifiées, ce sont les **niveaux de Landau**. Les énergies de ces niveaux croissent de manière linéaire avec le champ  $B$  ainsi que leur dégénérescence.

### b) Niveaux de Landau relativistes

Pour le cas des particules relativistes, la relation de dispersion libre est modifiée  $E = \sqrt{p^2 + m^2}$  ou  $E^2 = p^2 + m^2$ . Pour trouver un hamiltonien reproduisant cette équation de dispersion, Dirac suppose [82] alors que l'hamiltonien mis au carré s'écrit comme :

$$\mathcal{H}_{\text{Dirac libre}}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + m^2\mathbb{I}$$

où  $\mathbb{I}$  désigne l'identité sur l'espace de Hilbert correspondant. Ici, on traite le cas d'une particule se déplaçant dans le plan  $(x, y)$  donc il n'y a pas d'impulsion suivant  $p_z$ . Il cherche alors la racine carrée de cet opérateur en supposant que l'on puisse écrire l'hamiltonien au premier ordre en  $\vec{p}$  :

$$\mathcal{H}_{\text{Dirac libre}} = A\hat{p}_x + B\hat{p}_y + Cm\mathbb{I}$$

Les opérateurs  $\hat{p}_x$  et  $\hat{p}_y$  commutant, il tombe sur la condition que  $A.B = -B.A$ ,  $A.C = -C.A$  et  $B.C = -C.B$ . Les 3 coefficients doivent alors anti-commuter, il en déduit que ce sont nécessairement des matrices. Ces 3 matrices vérifient également la relation  $A^2 = B^2 = C^2 = \mathbb{I}$ , elles forment ce que l'on appelle l'algèbre de Lie du groupe  $SU(2)$ . On les note  $A = \sigma_x$ ,  $B = \sigma_y$  et  $C = \sigma_z$ , ce sont les matrices de Pauli. Elles possèdent une représentation matricielle simple  $2 \times 2$  :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

On note de manière compacte :

$$\mathcal{H}_{\text{Dirac libre}} = \vec{p} \cdot \vec{\sigma} + m\sigma_z \text{ avec } \vec{p} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix} \text{ et } \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \end{pmatrix}$$

où l'on oublie la notation  $\hat{\cdot}$  qui permet de préciser que ce sont des opérateurs.

De manière similaire à ce qui a été fait précédemment, le champ magnétique modifie l'impulsion de la particule via son potentiel vecteur :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{Dirac}} &= (\vec{p} - q\vec{A}) \cdot \vec{\sigma} + m\sigma_z \\ &= p_x \cdot \sigma_x + (p_y - qBx)\sigma_y + m\sigma_z \text{ (jauge de Landau)} \end{aligned}$$

Le premier à avoir obtenu ces niveaux de Landau relativistes (dans le graphène) est McClure en 1956 [83]. L'astuce consiste à mettre au carré l'hamiltonien pour trouver une forme plus simple. Cependant, les opérateurs  $x$  et  $p_x$  ne commutent pas faisant apparaître alors un terme proportionnel à  $\sigma_z$  :

$$\mathcal{H}_{\text{Dirac}}^2 = (p_x^2 + (p_y - qBx)^2 + m^2)\mathbb{I}_2 - q\hbar B\sigma_z$$

Comme dans le cas des niveaux de Landau non relativistes, on peut factoriser par l'onde plane suivant  $y$  puisqu'il y a invariance par translation dans la direction  $y$  :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{Dirac}}^2(k_y) &= 2m \left( \left( \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c(x - x_0)^2 + \frac{m}{2} \right) \mathbb{I}_2 - \frac{\hbar\omega_c}{2}\sigma_z \right) \\ &= 2m \begin{pmatrix} \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c(x - x_0)^2 + \frac{m}{2} - \frac{\hbar\omega_c}{2} & 0 \\ 0 & \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c(x - x_0)^2 + \frac{m}{2} + \frac{\hbar\omega_c}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

On a alors deux oscillateurs harmoniques quantiques donnant, respectivement, comme énergies :

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{n,\uparrow}^2 = 2m\hbar\omega_c n + m^2 \\ E_{n,\downarrow}^2 = 2m\hbar\omega_c(n+1) + m^2 \end{array} \right., n \in \mathbb{N} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} E_0 = m \text{ ou } E_0 = -m \\ E_n^\pm = \pm\sqrt{2m\hbar\omega_c n + m^2}, n \geq 1 \end{array} \right.$$

Une différence notable avec l'équation de Schrödinger est que le premier niveau est indépendant du champ magnétique, et les niveaux suivants sont en racine du champ.

En reprenant l'analyse des dégénérescences faite pour l'équation de Schrödinger, on retrouve que chaque niveau est dégénéré  $N_\Phi = \frac{BA}{\Phi_0}$  fois si l'on est sur un échantillon d'aire  $\mathcal{A}$ .

Il reste encore à déterminer si le premier niveau est d'énergie  $+m$  ou  $-m$ . Avec cette analyse il n'est pas possible de trancher. Il faut reprendre toute cette analyse en terme d'opérateur de création ou d'annihilation. On pose  $\vec{\Pi} = \vec{p} - q\vec{A}$ ,  $a = \frac{\sqrt{\hbar}(\Pi_x + i\Pi_y)}{\sqrt{2qB}}$  et  $a^\dagger = \frac{\sqrt{\hbar}(\Pi_x - i\Pi_y)}{\sqrt{2qB}}$  où  $a^\dagger$  et  $a$  sont les opérateurs de création et d'annihilation i.e.  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$  et  $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ . L'hamiltonien de Dirac se réécrit :

$$\mathcal{H}_{\text{Dirac}} = \sqrt{\frac{2qB}{\hbar}} \begin{pmatrix} +\sqrt{\frac{\hbar}{2qB}}m & a^\dagger \\ a & -\sqrt{\frac{\hbar}{2qB}}m \end{pmatrix} \quad (\text{II.2})$$

On peut vérifier que le premier niveau de Landau est  $E_0 = +m$  et a pour vecteur propre  $\begin{pmatrix} |0\rangle \\ 0 \end{pmatrix}$ . Si on avait eu pour  $\mathcal{H}_{\text{Dirac}}$  la matrice transposée de l'équation (II.2), l'énergie du

premier niveau de Landau aurait été  $E_0 = -m$  avec pour vecteur propre  $\begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix}$ .

### c) Couplage magnétique dans l'intégrale de chemin

Dans les deux sections précédentes, on a pu voir comment le couplage minimal, en modifiant le terme cinétique, permettait de prendre en compte l'effet d'un champ magnétique dans

des systèmes continus. On a ensuite pu déterminer les vecteurs propres et valeurs propres associés. La partie cinétique de l'hamiltonien de liaisons fortes étant contenue dans les amplitudes de saut entre voisins, il est utile de comprendre comment ces derniers sont modifiés par le champ magnétique. On se place dans le formalisme de l'intégrale de chemin [2] en reprenant l'argumentaire développé dans la section 4-2 de [84]. La probabilité pour qu'une particule en  $\vec{r}_a$  à l'instant  $t_a$  se trouve en  $\vec{r}_b$  à l'instant  $t_b$  est donnée, dans le formalisme hamiltonien, par l'élément de matrice entre ces deux états de l'opérateur d'évolution (voir équation (II.3)). Dans le formalisme de l'intégrale de chemin de Feynman, cela prend la forme d'une somme sur les différents chemins possibles pondérés par l'exponentielle de l'action associée à chaque chemin (voir équation (II.4)) :

$$K_0(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) = \langle \vec{r}_b | e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(t_b - t_a)} | \vec{r}_a \rangle \quad (\text{II.3})$$

$$= \sum_{\mathcal{C}} e^{\frac{i}{\hbar} S_0[\mathcal{C}]} = \sum_{\mathcal{C}} K_0^{\mathcal{C}}(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) \quad (\text{II.4})$$

Dans le formalisme de Feynman,  $K(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a)$  est appelé le propagateur quantique, il représente l'amplitude de probabilité totale d'aller de  $\vec{r}_a$  à  $t_a$  en  $\vec{r}_b$  à  $t_b$  et  $K^{\mathcal{C}}(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a)$  est l'amplitude de transition entre l'état initial  $(t_a, \vec{r}_a)$  et l'état final  $(t_b, \vec{r}_b)$  suivant le chemin  $\mathcal{C}$ . Ici, l'indice 0 sur  $K_0$ ,  $H_0$  et  $S_0$  fait référence à un problème à champ magnétique nul  $B = 0$ .  $H_0$  peut donc être l'hamiltonien de Schrödinger libre ou celui de Dirac libre vu dans les sections précédentes. On peut éventuellement partir d'un hamiltonien plus général avec un certain potentiel  $V(\vec{r})$  pourvu que l'on connaisse l'amplitude de transition associée à chaque chemin de cet hamiltonien car la stratégie ici est d'exprimer  $K_B^{\mathcal{C}}$  en fonction de  $K_0^{\mathcal{C}}$ . L'action sans champ s'écrit donc (dans le cas de l'équation de Schrödinger i.e. sans spin, non relativiste) :

$$S_0[\mathcal{C}] = \int_{\mathcal{C}} dt \mathcal{L} = \int_{\mathcal{C}} dt \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 - V(\vec{r}) \right]$$

On a vu au début de la section II.1.1 a), que l'ajout d'un champ magnétique ajoute un terme au Lagrangien  $q \frac{d\vec{r}}{dt} \cdot \vec{A}$ . L'action sous champ devient alors :

$$S_B[\mathcal{C}] = S_0[\mathcal{C}] + q \int_{\mathcal{C}} dt \frac{d\vec{r}}{dt} \cdot \vec{A} = S_0[\mathcal{C}] + q \int_{\mathcal{C}} d\vec{r} \cdot \vec{A}$$

L'amplitude de transition sous champ le long du chemin  $\mathcal{C}$  s'exprime alors [85] :

$$K_B^{\mathcal{C}}(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) = K_0^{\mathcal{C}}(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) e^{i \frac{q}{\hbar} \int_{\mathcal{C}} d\vec{r} \cdot \vec{A}}$$

La phase prise par l'amplitude de transition est appelée **phase magnétique**. Le propagateur quantique devient alors :

$$K_B(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) = \sum_{\mathcal{C}} K_0^{\mathcal{C}}(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) e^{i \frac{q}{\hbar} \int_{\mathcal{C}} d\vec{r} \cdot \vec{A}}$$

Il est important de noter que la phase magnétique dépend du chemin suivi et ne peut être factorisée en dehors de la somme. Pour que deux chemins différents  $\mathcal{C}$  et  $\mathcal{C}'$  (ayant le même point de départ et d'arrivée) aient la même phase magnétique, il faut que le flux

encerclé par ces deux chemins soit multiple d'une quantité appelée le **quantum de flux**  $\Phi_0 = \frac{h}{q} \sim 10^{-15} T.m^2$  :

$$\begin{aligned} e^{i\frac{q}{\hbar} \int_C d\vec{r} \cdot \vec{A}} &= e^{i\frac{q}{\hbar} \int_{C'} d\vec{r} \cdot \vec{A}} \Leftrightarrow e^{i\frac{q}{\hbar} \oint d\vec{r} \cdot \vec{A}} = 1 \\ &\Leftrightarrow e^{i\frac{q}{\hbar} \iint_S \vec{B} \cdot d\vec{S}} = 1 \\ &\Leftrightarrow f := \iint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = hn/q = n\Phi_0 \end{aligned}$$

où  $n$  est un entier.

Enfin, on peut analyser l'effet d'une transformation de jauge  $\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\chi$  sur l'amplitude de transition le long d'un chemin :

$$K_{B'}^C(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) = K_B^C(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) e^{i\frac{q}{\hbar} \int_C d\vec{r} \cdot \vec{\nabla}\chi} = K_B^C(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) e^{i\frac{q}{\hbar} (\chi(\vec{r}_b) - \chi(\vec{r}_a))}$$

La transformation de jauge implique  $\vec{B}' = \vec{\nabla} \times \vec{A}' = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}$ . La phase prise entre les deux jauges ne dépend que du point d'arrivée et du point de départ et est indépendante du chemin suivi, cela modifie donc le propagateur quantique par une phase globale. La fonction d'onde est elle-même modifiée par une simple phase locale  $\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) e^{i\frac{q}{\hbar} \chi(\vec{r})}$ , le changement de jauge ne produit donc pas d'effet mesurable.

#### d) Phase d'Aharonov-Bohm

Ici, on ne reprend pas le raisonnement historique de la **phase d'Aharonov-Bohm** [86]. On choisit plutôt de retrouver le même résultat via un argument sur l'intégrale de chemin dont on a déjà discuté dans la section précédente. Ce raisonnement est expliqué dans le cours de Feynman sur le potentiel vecteur [87] ou plus récemment dans le cours de J. Dalibard [84].

Le principe de l'expérience d'Aharonov-Bohm consiste à montrer qu'une particule peut subir l'influence d'un champ magnétique même si cette dernière ne peut jamais être trouvée dans la région  $B \neq 0$ . Pour cela, on place un solénoïde infini produisant un champ magnétique à l'intérieur de ce dernier et nul à l'extérieur, au milieu d'un interféromètre à deux voies et on empêche l'accès à la région  $B \neq 0$  via un potentiel. On place un écran derrière l'expérience afin d'observer la figure d'interférence (voir Figure II.1).

Dans le formalisme de Feynman, on observe principalement deux types de chemins : ceux passant à gauche du solénoïde et ceux passant à droite et on néglige ceux faisant le tour du solénoïde plusieurs fois. Le flux encerclé par deux chemins du même type étant nul, le propagateur quantique s'écrit alors :

$$K_B(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) \simeq K_0^g(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) e^{i\frac{q}{\hbar} \int_{C_g} d\vec{r} \cdot \vec{A}} + K_0^d(t_b, \vec{r}_b, t_a, \vec{r}_a) e^{i\frac{q}{\hbar} \int_{C_d} d\vec{r} \cdot \vec{A}}$$

où  $K_0^g$  et  $K_0^d$  désignent la somme des amplitudes de transition sans champ restreint aux chemins, respectivement, de gauche et de droite et  $C_g$  et  $C_d$  sont deux chemins quelconques passant, respectivement, à gauche et à droite du solénoïde. La phase relative prise entre les deux types de chemins est alors :

$$\begin{aligned} \frac{q}{\hbar} \left( \int_{C_g} d\vec{r} \cdot \vec{A} - \int_{C_d} d\vec{r} \cdot \vec{A} \right) &= \frac{q}{\hbar} \oint_C d\vec{r} \cdot \vec{A} \\ &= \frac{q}{\hbar} f \end{aligned}$$

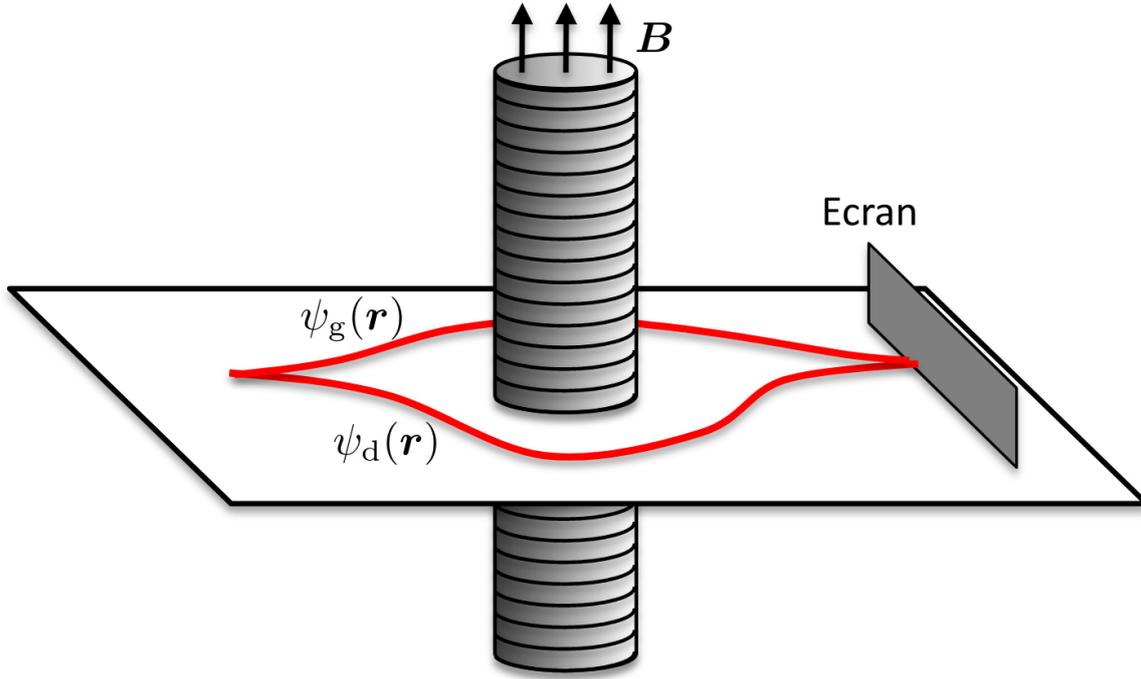


Fig. II.1 Schéma de principe de l'expérience envisagée par Aharonov et Bohm. Figure tirée de [84].

où  $\mathcal{C}$  est un circuit fermé encerclant le solénoïde et  $f$  le flux magnétique encerclé,  $qf/\hbar$  est donc la phase d'Aharonov-Bohm. La figure d'interférence se trouve alors décalée d'une quantité proportionnelle au flux du solénoïde. Le champ magnétique est pourtant nul dans la région de l'espace où habite la particule. À l'inverse le potentiel vecteur ne l'est pas. L'expérience de pensée d'Aharonov et Bohm puis ses réalisations expérimentales [88–91] ont permis de repenser le rôle du potentiel vecteur non plus comme une simple astuce mathématique, mais comme un objet possédant une réalité physique.

## II.1.2 Substitution de Peierls

### a) Approximation de Peierls

La substitution de Peierls peut faire référence à deux façons distinctes d'introduire le champ magnétique sur un réseau : la première de ces approches (et qui est celle détaillée dans le manuscrit) consiste à modifier le paramètre de saut dans le modèle de liaisons fortes pour prendre en compte le champ magnétique. La seconde approche est l'obtention d'un hamiltonien effectif à une seule bande sous champ à partir de la relation de dispersion à champ nul  $E_n(\vec{k})$  en effectuant la substitution minimale :  $\vec{k} \rightarrow \vec{k} - q\vec{A}/\hbar$ . Le domaine de validité de cette seconde approche est discuté par Luttinger [92] et les effets inter-bandes sont pris en compte, perturbativement, par Kohn en 1959 [93].

Pour comprendre l'origine du terme de saut  $t_{i \rightarrow j} = t$  dans l'hamiltonien de liaisons fortes, on part du problème de l'effet tunnel dans un double-puits en suivant le calcul de [94]. On modélise le saut entre deux sites voisins  $i$  et  $j$  par un potentiel quartique de la forme  $V(x) =$

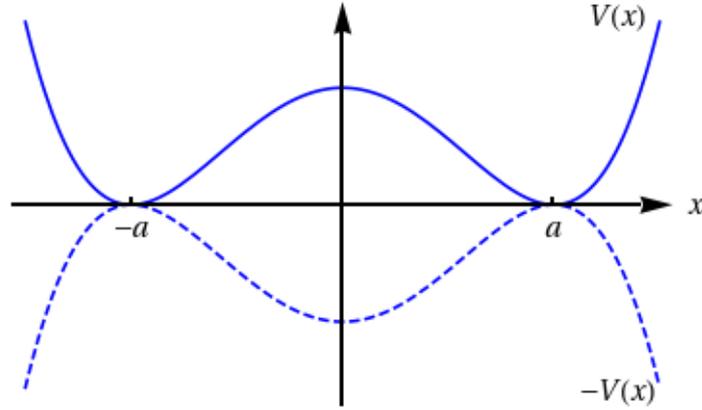


Fig. II.2 Représentation du potentiel quartique  $V(x)$  (ligne continue) modélisant deux sites voisins  $i$  et  $j$  situés respectivement en  $-a$  et  $a$ . En pointillé le potentiel retourné  $-V(x)$  est représenté.

$\frac{m\omega^2}{2} \left( \frac{x^2 - a^2}{2a} \right)^2$  (voir Figure II.2). Ce potentiel présente deux minima en  $\pm a$  (représentant les sites  $i$  et  $j$ ) séparés par une barrière de potentiel de hauteur  $V(0) = \frac{m\omega^2 a^2}{4}$ . L'amplitude de probabilité de passer du minimum en  $-a$  à l'autre minimum en  $+a$  en un temps  $T$  est donnée par le calcul du propagateur  $K(a, T/2, -a, -T/2)$ . Pour obtenir une bonne approximation de ce propagateur, on utilise généralement la méthode du point col : on approxime l'action par le chemin le plus important, le chemin classique qui minimise l'action (on peut aller à l'ordre supérieur suivant en prenant en compte les fluctuations quantiques gaussiennes facilement calculables). Le problème, ici, est qu'il n'existe pas de chemin classique pour aller de  $-a$  à  $+a$ . La particule peut seulement aller d'un minimum à l'autre par effet tunnel, un phénomène purement quantique. L'astuce est de retourner le potentiel en  $-V(x)$  grâce à l'absorption du facteur imaginaire  $i$  devant l'action dans la définition du temps  $\tau = iT$  (rotation de Wick). L'action en temps imaginaire est notée  $\tilde{S} = -iS$ . Le chemin classique dans le potentiel retourné pour aller de  $-a$  à  $+a$  est appelé un instanton et son action vaut  $\tilde{S}_{\text{inst}} = \int_{-a}^{+a} dx \sqrt{2mV(x)}$  (on retrouve l'approximation WKB). Il est également possible de faire plusieurs aller-retours entre les deux minima. En prenant en compte ces différentes contributions classiques (on parle de gaz d'instantons dilués) on trouve que le propagateur s'écrit (à quelques facteurs numériques d'ordre 1 près) :

$$K(a, \tau/2, -a, -\tau/2) \simeq \sinh \left( \tau \omega \sqrt{\frac{\tilde{S}_{\text{inst}}}{\hbar}} e^{-\frac{\tilde{S}_{\text{inst}}}{\hbar}} \right) \quad (\text{II.5})$$

Afin de relier le paramètre de saut  $t_{i \rightarrow j}$  à l'équation (II.5), on calcule l'amplitude de transition d'un modèle à deux sites où l'on met l'énergie fondamentale à 0 et le couplage entre les deux sites est donné par  $t_{i \rightarrow j}$ . L'amplitude de transition entre les deux sites sont les oscillations de Rabi standards donnant un sinus hyperbolique pour un temps imaginaire  $\tau = iT$  :

$$K(a, \tau/2, -a, -\tau/2) = \sin \left( \frac{2T t_{i \rightarrow j}}{\hbar} \right) = \sinh \left( \frac{2\tau t_{i \rightarrow j}}{\hbar} \right) \quad (\text{II.6})$$

En comparant les expressions des équations (II.5) et (II.6), on trouve :

$$t_{i \rightarrow j} \simeq \hbar \omega \sqrt{\frac{\tilde{S}_{\text{inst}}}{\hbar}} e^{-\frac{\tilde{S}_{\text{inst}}}{\hbar}}$$

En ajoutant maintenant un champ magnétique, l'action de l'instanton devient :

$$\tilde{S}_{\text{inst}} \rightarrow \tilde{S}_{\text{inst}}^B = \tilde{S}_{\text{inst}} - iq \int_i^j d\vec{r} \cdot \vec{A}$$

où l'intégrale entre le site  $i$  et  $j$  se fait sur le chemin en ligne droite i.e le chemin classique de l'instanton. Le terme de saut est alors modifié aux deux endroits où l'action apparaît. D'abord par une simple phase due à l'action dans l'exponentielle mais aussi en amplitude et en phase due à l'action sous la racine. Ce second terme provient des fluctuations quantiques gaussiennes autour des chemins classiques. L'approximation de Peierls consiste à le négliger et à ne prendre en compte que la modification de la phase :

$$\text{substitution de Peierls : } t_{i \rightarrow j}^B \approx t_{i \rightarrow j} e^{i \frac{q}{\hbar} \int_i^j \vec{A} \cdot d\vec{r}}$$

Il est important de remarquer que l'on a considéré dans le calcul du propagateur seulement les chemins classiques en ligne droite (et leurs aller-retours) ainsi que les fluctuations gaussiennes autour de ces derniers. On a donc négligé les chemins quantiques plus exotiques car l'action n'étant pas minimisée, les phases des amplitudes de transition pour ces chemins varient rapidement et se compensent donc. L'ajout d'un champ magnétique et de leur phase magnétique ne change pas l'argument, on peut toujours les négliger. Pour les chemins proches de la ligne droite, on néglige les variations de la phase magnétique par rapport à celle du chemin en ligne droite, cela revient à considérer que le flux encerclé par ces chemins et celui de la ligne droite est faible. Cette approximation est valable pour un champ magnétique faible avec un pas du réseau petit i.e.  $Ba^2 \ll h/q$  et des variations spatiales lentes du champ magnétique.

En fait, on peut interpréter l'approximation de Peierls comme une expérience d'Aharonov-Bohm sur chaque plaquette du système. On remplace alors le champ magnétique homogène par un réseau de tubes de flux qui concentrent tout le flux magnétique au centre de chaque plaquette (en conservant le même flux par plaquette) de sorte que les tubes de flux soient inatteignables pour la particule ne se déplaçant que sur les arêtes du réseau (ou proche de ces arêtes : fluctuations gaussiennes). De cette manière, elle se déplace dans une région de l'espace où le champ magnétique est nul et ne ressent que les effets de ce champ via une phase.

Par ailleurs, il faut garder en tête que le calcul du propagateur dans le double-puits est effectué sur un modèle unidimensionnel alors que le réseau carré est bidimensionnel. Néanmoins, l'approximation de Peierls ne devrait pas changer puisqu'elle consiste justement à ne prendre en compte que la ligne droite dans le calcul de la phase magnétique. Cela devrait affecter, par contre, le préfacteur concernant les fluctuations gaussiennes.

En plus des approximations déjà discutées, la substitution de Peierls néglige la sensibilité du réseau au champ magnétique. Le modèle de liaisons fortes est censé représenter des cristaux où les arêtes du réseau correspondent aux liaisons chimiques entre atomes. Les orbitales atomiques se déforment alors sous l'effet d'un champ magnétique extérieur ce qui

impacte l'amplitude de saut mais aussi sa phase qui diffère alors du simple terme de Peierls ; l'ajout du champ modifie également leur énergie [95].

### b) Substitution dans l'hamiltonien de liaisons fortes sur réseau carré

En utilisant la substitution de Peierls sur le modèle de liaisons fortes on retrouve alors l'équation (II.1). La dernière étape consiste à faire un choix de jauge ; on prendra la jauge de Landau dirigée seulement dans la direction  $y$  ce qui enlève le terme de Peierls dans la direction  $x$  :

$$H = -t \sum_{l,m} \left[ |l+1, m\rangle \langle l, m| + |l-1, m\rangle \langle l, m| + e^{i\frac{q}{\hbar}Bl} |l, m+1\rangle \langle l, m| + e^{-i\frac{q}{\hbar}Bl} |l, m-1\rangle \langle l, m| \right].$$

En principe, si l'on remet le pas du réseau  $a$ , la phase devrait être  $\frac{q}{\hbar}Bla^2 = 2\pi\frac{q}{\hbar}l \iint_S \vec{B} \cdot d^2\vec{S} = 2\pi\frac{q}{\hbar}l \oint_{\partial S} \vec{A} \cdot d\vec{l}$  où  $S$  est la surface d'une cellule (ou plaquette) et  $\partial S$  son contour. Remettre l'expression sous cette forme permet de faire apparaître la phase d'Aharonov-Bohm prise autour de chaque plaquette ou le flux magnétique par plaquette. On retrouve également le quantum de flux  $\Phi_0 = \frac{h}{q}$ , une constante naturelle du problème. On réécrit la phase d'Aharonov-Bohm comme  $2\pi l\Phi$  où  $\Phi$  est le flux magnétique par plaquette dans les unités du quantum de flux.

$$H = -t \sum_{l,m} \left[ |l+1, m\rangle \langle l, m| + |l-1, m\rangle \langle l, m| + e^{2i\pi l\Phi} |l, m+1\rangle \langle l, m| + e^{-2i\pi l\Phi} |l, m-1\rangle \langle l, m| \right] \quad (\text{II.7})$$

$\Phi$  apparaît seulement dans une phase  $e^{2i\pi\Phi l}$ , on peut donc décrire toute la physique pour  $\Phi \in [0, 1[$ . En remettant les unités si l'on prend un pas de réseau de l'ordre de quelques angstroms, ce qui est à peu près la distance inter-atomique dans les solides, on trouve pour  $\Phi \sim 1$ , un champ magnétique équivalent  $B \sim 10^4$  T. Il est, expérimentalement, impossible d'atteindre ces valeurs de champ magnétique et dans tous les cas pour ces ordres de grandeurs, le matériau aura été détruit bien avant. Pour contourner cette difficulté, on peut soit utiliser ce que l'on appelle des champs magnétiques artificiels pour les atomes froids dans un réseau optique soit créer des matériaux avec des distances inter-atomiques plus élevées. La première méthode utilise une technique appelée réseaux secoués, en modulant en temps un potentiel on imprime une phase aux atomes [96–98]. Pour la seconde méthode, il y a plusieurs moyens, par exemple en décalant en angle deux feuilles de graphène, on obtient un super réseau triangulaire appelé moiré. À faible champ, on peut alors négliger la structure fine des réseaux sous-jacents et ne considérer que le super réseau triangulaire. Malgré un champ magnétique faible, la nouvelle taille du paramètre de la maille triangulaire permet d'atteindre des flux de l'ordre 1 en unité du quantum de flux et donc de reproduire le papillon du réseau triangulaire [99]. Il existe également d'autres méthodes pour augmenter le pas du réseau [100, 101].

### II.1.3 Papillon de Hofstadter

#### a) Équation de Harper

Reprenons l'hamiltonien du réseau carré dans la jauge de Landau (équation (II.7)), on se place pour le calcul qui suit dans le cas d'un réseau infini et on traitera les conditions aux bords dans la section suivante. À cause du potentiel vecteur qui brise l'invariance par translation, le théorème de Bloch ne s'applique plus pour un flux magnétique quelconque. Considérons un vecteur propre  $|\Psi\rangle$  d'énergie  $E$ ,  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ . En appliquant une relation de fermeture et utilisant l'orthonormalité des vecteurs désignant les sites on trouve :

$$\begin{aligned} E|\Psi\rangle &= H \sum_{l',m'} |l',m'\rangle \langle l',m'|\Psi\rangle = H \sum_{l',m'} |l',m'\rangle \Psi_{l',m'} \\ &= -t \sum_{l,m} \left( |l+1,m\rangle + |l-1,m\rangle + e^{2i\pi l\Phi} |l,m+1\rangle + e^{-2i\pi l\Phi} |l,m-1\rangle \right) \Psi_{l,m} \end{aligned}$$

Puis en contractant par  $\langle l',m'|$  on obtient :

$$\begin{aligned} \langle l',m'| E|\Psi\rangle &= E\Psi_{l',m'} \\ E\Psi_{l',m'} &= -t \left( \Psi_{l'-1,m'} + \Psi_{l'+1,m'} + e^{2i\pi l'\Phi} \Psi_{l',m'-1} + e^{-2i\pi l'\Phi} \Psi_{l',m'+1} \right) \end{aligned} \quad (\text{II.8})$$

On réécrit  $\Psi_{l,m} = e^{ik_y m} a_{l,k_y}$  où  $a_{l,k_y}$  sont les fonctions de Bloch qui ne dépendent pas de  $m$  grâce à l'invariance par translation suivant  $y$  (Théorème de Bloch).  $k_y \in [-\pi, \pi[$  appartient à la première zone de Brillouin. L'équation (II.8) devient :

$$E_{k_y} a_{l',k_y} = -t \left( a_{l'-1,k_y} + a_{l'+1,k_y} + 2 \cos(2\pi\Phi l' - k_y) a_{l',k_y} \right) \quad (\text{II.9})$$

L'équation (II.9) est connue sous le nom d'**Équation de Harper** [102]. Elle ramène le problème 2D à un problème effectif unidimensionnel indexé par  $k_y$ .

Pour des flux irrationnels, ce modèle devient très compliqué à traiter (analytiquement et numériquement). On a un modèle de liaisons fortes 1D avec un potentiel incommensurable. On peut montrer que l'on est à une transition de phase isolant-métal d'un modèle plus général appelé le modèle d'Aubry-André [103] ayant pour équation :

$$E\psi_l = \zeta \cos(2\pi\Phi l)\psi_l - \psi_{l+1} - \psi_{l-1}$$

où l'on a mis  $k_y = -\pi$  et  $t = 1$  par simplicité. L'équation d'Aubry-André redonne l'équation de Harper pour  $\zeta = 2$ . Dans le cas plus général d'un réseau carré anisotrope (i.e. amplitudes de saut suivant  $x$  et  $y$  différentes,  $t_x \neq t_y$ ) l'équation de Harper correspondante est obtenue en mettant  $\zeta = 2t_y/t_x$ .

Le modèle d'Aubry-André est également son propre dual, on retrouve la même équation dans l'espace réciproque :

$$E'\phi_k = \zeta' \cos(2\pi\Phi k)\phi_k - \phi_{k+1} - \phi_{k-1} \text{ où } \psi_l = \sum_k e^{2i\pi\Phi lk} \phi_k, \quad E' = \frac{2E}{\zeta}, \quad \zeta' = \frac{4}{\zeta} \quad (\text{II.10})$$

Lorsque  $\Phi$  est irrationnel et que  $\zeta < 2$ , les fonctions d'ondes propres de l'équation sont délocalisées dans l'espace direct des  $\psi_l$  et localisées dans l'espace réciproque des  $\phi_k$ , on

est dans une phase métallique. D'après l'équation (II.10), on retrouve alors exactement les mêmes fonctions d'ondes propres pour un paramètre  $4/\zeta$  mais cette fois localisées dans l'espace direct et délocalisées dans l'espace réciproque, on est dans la phase isolante. À  $\zeta = 2$  (cas de l'équation de Harper), on est à la transition, les fonctions d'ondes sont critiques avec une décroissance algébrique.

Dans la suite du manuscrit on s'intéressera seulement aux flux rationnels  $\Phi = \frac{p}{q}$  où  $p$  et  $q$  sont premiers entre eux. L'équation de Harper (équation (II.9)) devient plus simple à manipuler car on retrouve une invariance par translation suivant  $x$ , l'équation pour  $l' = q$  redevient similaire à celle en  $l' = 0$ . On peut donc utiliser le théorème de Bloch pour une maille magnétique de taille  $q$  selon la direction  $x$ . On définit  $n \equiv l' \pmod{q}$  et l'équation de Harper s'écrit dans le cas d'un flux rationnel :

$$E_{k_x, k_y} a_{k_x, k_y}^n = -t \left( e^{-ik_x} a_{k_x, k_y}^{n-1} + e^{ik_x} a_{k_x, k_y}^{n+1} + 2 \cos \left( 2\pi n \frac{p}{q} - k_y \right) a_{k_x, k_y}^n \right)$$

En regroupant dans un même vecteur les fonctions de Bloch de la même maille magnétique, l'équation de Harper prend la forme matricielle :

$$E_{k_x, k_y} \begin{pmatrix} a_{k_x, k_y}^0 \\ a_{k_x, k_y}^1 \\ \vdots \\ \vdots \\ a_{k_x, k_y}^{n-2} \\ a_{k_x, k_y}^{n-1} \end{pmatrix} = -t \begin{pmatrix} C_0 & e^{ik_x} & 0 & 0 & \cdots & 0 & e^{-ik_x} \\ e^{-ik_x} & C_1 & e^{ik_x} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & e^{-ik_x} & C_{n-2} & e^{ik_x} \\ e^{ik_x} & 0 & \cdots & 0 & 0 & e^{-ik_x} & C_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k_x, k_y}^0 \\ a_{k_x, k_y}^1 \\ \vdots \\ \vdots \\ a_{k_x, k_y}^{n-2} \\ a_{k_x, k_y}^{n-1} \end{pmatrix}$$

où  $C_j = 2 \cos \left( 2\pi j \frac{p}{q} - k_y \right)$ .

Pour chaque flux  $\Phi = \frac{p}{q}$ , on est ramené à diagonaliser une matrice de taille  $q \times q$ . On a alors  $q$  valeurs propres pour une paire de  $(k_x, k_y)$  fixée. En faisant varier  $(k_x, k_y)$  dans la zone de Brillouin magnétique<sup>1</sup> (de manière continue pour un échantillon infini), on obtient  $q$  bandes.

## b) Conditions aux bords périodiques

Avant de tracer le papillon, c'est-à-dire les énergies propres du système en fonction du flux, il nous faut résoudre le problème sur un échantillon de taille finie. En se plaçant dans la jauge de Landau, on a toujours cette invariance suivant la direction  $y$ . La direction  $x$  n'est plus invariante à cause du terme de Peierls mais les conditions aux bords périodiques identifient les sites de coordonnées  $(0, m)$  avec les sites de coordonnées  $(N_x, m)$  où  $m \in \llbracket 0, N_y - 1 \rrbracket$ <sup>2</sup>. Les termes de Peierls doivent donc être égaux,  $1 = e^{2i\pi\Phi N_x} \Rightarrow \Phi = \frac{j}{N_x}$ ,  $\forall j \in \mathbb{Z}$  mais comme  $\Phi \in [0, 1[ \Rightarrow j \in \llbracket 0, N_x - 1 \rrbracket$ . On a donc une contrainte forte qui apparaît sur les flux, et la résolution en flux du papillon dépend fortement de la taille suivant la direction  $x$ .

$\Phi = \frac{j}{N_x}$  peut être réécrit comme  $\frac{p}{q}$  où  $p$  et  $q$  sont premiers entre eux. À cause des conditions aux bords périodiques  $k_x$  et  $k_y$  ne sont plus continus. Dans la direction  $y$ , la cellule

1.  $(k_x, k_y) \in ] -\frac{\pi}{q}, \frac{\pi}{q} ] \times ] -\pi, \pi ]$

2.  $N_x$  et  $N_y$  sont respectivement la taille de l'échantillon suivant  $x$  et  $y$ .

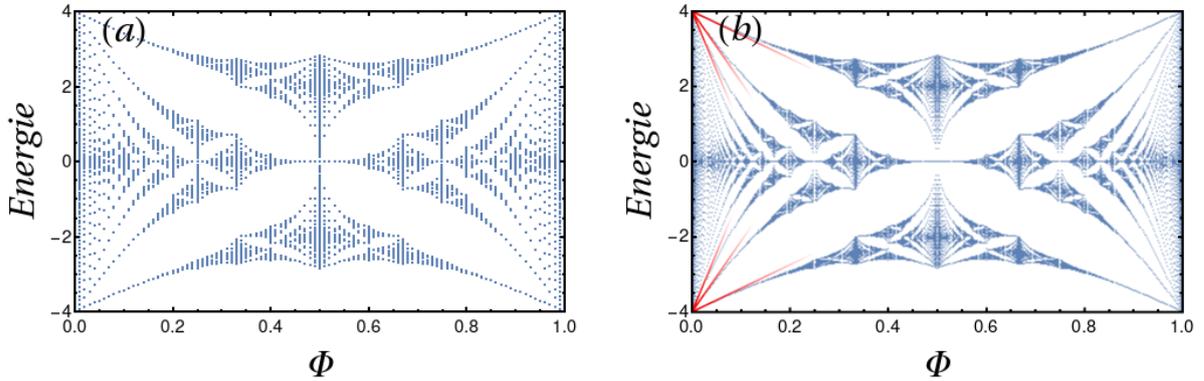


Fig. II.3 Spectre de l'hamiltonien de liaisons fortes sur réseau carré sous champ magnétique en fonction du flux magnétique  $\Phi$  par plaquette par unité de quantum de flux, c'est le papillon de Hofstadter. (a) : Le papillon a été tracé à l'aide de l'équation de Harper en utilisant la jauge de Landau pour un système de taille  $100 \times 100$ . On a alors une résolution de 100 flux. (b) : Le papillon a été tracé en utilisant la jauge améliorée pour un système de taille  $20 \times 20$ . Non seulement la résolution en flux est nettement meilleure (400 flux autorisés) mais le temps de calcul est drastiquement réduit. Les lignes rouges sont les niveaux de Landau obtenus dans la limite du continu.

unité étant toujours de longueur  $a = 1$ , les quasi-moments s'expriment comme  $\frac{2\pi k_y}{N_y}$  avec  $k_y \in \left[-\frac{N_y}{2}, \frac{N_y}{2} - 1\right]$  pour  $N_y$  pair et  $k_y \in \left[-\frac{N_y-1}{2}, \frac{N_y-1}{2}\right]$  pour  $N_y$  impair. Pour la direction  $x$ , la maille magnétique étant de longueur  $q$ , les quasi-moments s'expriment également comme  $\frac{2\pi k_x}{N_x}$  avec  $k_x \in \left[-\frac{N_x}{2q}, \frac{N_x}{2q} - 1\right]$  pour  $\frac{N_x}{q}$  pair et  $k_x \in \left[-\frac{N_x-q}{2q}, \frac{N_x-q}{2q}\right]$  pour  $\frac{N_x}{q}$  impair. Pour chaque flux  $\Phi = \frac{j}{N_x} = \frac{p}{q}$ , on doit donc diagonaliser  $\frac{N_x \cdot N_y}{q}$  matrices de taille  $q \times q$ , ce qui redonne bien les  $N_x \cdot N_y$  valeurs propres du problème entier. Le papillon utilisant la jauge de Landau est tracé Figure II.3-a. Le nombre de bande du papillon au flux  $\Phi = p/q$  est donné par la taille de la matrice à diagonaliser, ici,  $q$ .

La résolution limitée du papillon en flux n'est pas une limite physique. Avec un meilleur choix de jauge, on peut alors tracer  $N_x \cdot N_y$  flux au lieu de  $N_x$  [104–106]. On détaille le choix de la nouvelle jauge en Annexe B et le papillon avec cette nouvelle résolution est tracé Figure II.3-b. Dans la suite du manuscrit, on tracera tous les papillons aux conditions aux bords périodiques avec cette jauge améliorée.

Le papillon de Hofstadter possède plusieurs symétries. La première est celle entre  $E$  et  $-E$ . Elle est due au fait que le réseau carré est un graphe biparti, c'est à dire que l'on peut colorier ses sites avec seulement deux couleurs différentes en respectant la condition que deux sites voisins n'ont jamais la même couleur. Soit  $|\psi\rangle$  état propre de  $H$  avec pour valeur propre  $E$ . Soit  $S = \sum_{x,y} (-1)^{x+y} |x, y\rangle \langle x, y|$ , alors  $S|\psi\rangle$  est vecteur propre de  $H$  avec pour valeur propre  $-E$ .

Le papillon a également une symétrie de flux  $\Phi \leftrightarrow -\Phi$ . A flux nul cet hamiltonien est symétrique par renversement du temps i.e. dans la base des positions cet hamiltonien ne possède que des termes de saut réels. A flux non nul, on a alors :  $H(-\Phi) = H^*(\Phi)$ . Si  $|\psi\rangle$  est

un état propre de  $H(\Phi)$  de valeur propre  $E$  alors  $|\psi\rangle^*$  est état propre de  $H(-\Phi)$  de valeur propre  $E$ .

### c) Niveau de Landau à bas flux

Sur la Figure II.3, on remarque une quantification des niveaux d'énergie à bas flux. Ces derniers se comportent de manière linéaire avec le champ : ce sont les niveaux de Landau (non relativistes). On les a étudiés dans la section II.1.1 dans le continu ; pour comprendre pourquoi ils apparaissent dans la limite à faible flux dans le papillon, on identifie d'abord une longueur caractéristique du système dépendant du champ magnétique  $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{qB}}$ , c'est la **longueur magnétique**. Le flux s'exprime donc en utilisant cette longueur  $\Phi = \frac{a^2}{2\pi l_B^2}$ . Regarder le papillon à faible flux  $\Phi \ll 1$  est donc équivalent à regarder un pas du réseau faible devant la longueur magnétique  $a \ll l_B$ . En remettant, les unités du pas du réseau (et  $\hbar$ ) dans l'hamiltonien de liaisons fortes sous champ, on a :

$$H = -t \sum_{l,m} e^{i\frac{q}{\hbar} \int_{la}^{(l+1)a} A_x(x, ma, 0) dx} |l+a, m\rangle \langle l, m| + e^{-i\frac{q}{\hbar} \int_{(l-1)a}^{la} A_x(x, ma, 0) dx} |l-a, m\rangle \langle l, m|$$

$$+ e^{i\frac{q}{\hbar} \int_{ma}^{(m+1)a} A_y(la, y, 0) dy} |l, m+a\rangle \langle l, m| + e^{-i\frac{q}{\hbar} \int_{(m-1)a}^{ma} A_y(la, y, 0) dy} |l, m-a\rangle \langle l, m|$$

En se plaçant dans les longueurs d'ondes grandes devant le pas du réseau i.e. les moments de faible impulsion donc au bas de la bande (de manière équivalente on peut faire le raisonnement pour le haut de bande) on peut traiter le réseau en perturbation :

$$|l+a, m\rangle \langle l, m| = e^{-\frac{ip_x a}{\hbar}} |l, m\rangle \langle l, m| = \left( 1 - \frac{ip_x}{\hbar} a - \frac{p_x^2}{2\hbar^2} a^2 + \mathcal{O}\left(\left(\frac{ap_x}{\hbar}\right)^3\right) \right) |l, m\rangle \langle l, m|$$

$$|l, m+a\rangle \langle l, m| = e^{-\frac{ipy a}{\hbar}} |l, m\rangle \langle l, m| = \left( 1 - \frac{ipy}{\hbar} a - \frac{p_y^2}{2\hbar^2} a^2 + \mathcal{O}\left(\left(\frac{apy}{\hbar}\right)^3\right) \right) |l, m\rangle \langle l, m|$$

et puisque  $a \ll l_B$  i.e. la variation du champ magnétique (le potentiel vecteur) est faible devant la quantité  $\hbar/(qa)$ ,  $|\vec{A}| \sim B(l+1)a - Bla = B(m+1)a - Bma = Ba \ll \frac{\hbar}{qa}$ , on peut développer la phase de Peierls jusqu'à l'ordre 2 :

$$e^{i\frac{q}{\hbar} \int_{la}^{(l+1)a} A_x(x, ma, 0) dx} \simeq e^{i\frac{q}{\hbar} A_x(la, ma, 0) a} = \left( 1 - i\frac{qA_x}{\hbar} a - \frac{q^2 A_x^2}{2\hbar^2} a^2 + \mathcal{O}\left(\left(\frac{qA_x}{\hbar} a\right)^3\right) \right)$$

$$e^{i\frac{q}{\hbar} \int_{ma}^{(m+1)a} A_y(la, y, 0) dy} \simeq e^{i\frac{q}{\hbar} A_y(la, ma, 0) a} = \left( 1 - i\frac{qA_y}{\hbar} a - \frac{q^2 A_y^2}{2\hbar^2} a^2 + \mathcal{O}\left(\left(\frac{qA_y}{\hbar} a\right)^3\right) \right)$$

En remplaçant les approximations dans l'hamiltonien de liaisons fortes on arrive à :

$$H = \left[ -4t + \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m_*} + \mathcal{O} \left( \left( \frac{a\vec{p}}{\hbar} \right)^3, \left( \frac{q\vec{A}}{\hbar} a \right)^3 \right) \right] \mathbb{I}_{\text{réseau}} \text{ avec } m_* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$$

On retrouve alors l'hamiltonien sous champ magnétique dans le continu. On peut faire le même raisonnement pour le haut de bande. En remettant  $a = \hbar = q = t = 1$ , on trace en rouge sur la Figure II.3-b, les trois premiers niveaux de Landau,  $E_n = \pm 4 \mp 4\pi\Phi(n + 1/2)$ .

Si l'on raffine l'approximation en prenant en compte l'effet d'un potentiel périodique de manière perturbative (approche de Rauh [107, 108]), les niveaux de Landau ne sont plus parfaitement dégénérés. En se plaçant dans le niveau fondamental, on retrouve un modèle de Harper dans l'espace des quasi-moments suivant  $y$  (i.e.  $k_y$ ) où  $\Phi$  est remplacé par  $1/\Phi$  et dont l'élargissement des énergies se fait en  $e^{-\pi/(2\Phi)}$ . On réobtient alors le dual d'un papillon ( $1/\Phi$  au lieu de  $\Phi$ ) à l'intérieur du niveau de Landau élargit. Dans l'autre limite, où l'on traite le champ magnétique en perturbation à partir d'un modèle de liaisons fortes (approche de Wilkinson [109, 110]), on réobtient un modèle de liaisons fortes dans l'espace des phases sous un champ magnétique effectif en  $1/\Phi$  (Hamiltonien de Wilkinson). Les orbitales atomiques de ce modèle de liaisons fortes sont en première approximation des niveaux de Landau, le terme de saut de ce modèle est le couplage de ces niveaux par effet tunnel proportionnel à  $e^{-C/\Phi}$  avec  $C$  une constante. On peut répéter le raisonnement à l'infini, ce qui donne la structure auto-similaire des papillons. Dans tous les cas, les niveaux de Landau s'élargissent (on parle de bande de Landau) en une puissance de  $e^{-1/\Phi}$  reproduisant un papillon dual à l'intérieur.

### II.1.4 Approximation semi-classique

À partir du théorème d'Ehrenfest  $\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle$ , on redérive les équations d'Hamilton pour les valeurs moyennes des opérateurs positions  $\vec{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}}$  et impulsions  $\vec{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$  :

$$\frac{d\langle \vec{x} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \right\rangle, \quad \frac{d\langle \vec{p} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \right\rangle$$

La valeur moyenne de l'opérateur est prise sur un état  $|\psi\rangle$ . Prendre comme état un paquet d'onde gaussien permet à la fois de localiser l'état dans l'espace direct et l'espace réciproque si sa largeur  $\sigma \sim 1$  puisque la transformée de Fourier d'une gaussienne de largeur  $\sigma$  est une gaussienne de largeur  $1/\sigma$ .

Dans le cas d'un hamiltonien libre  $H = p^2/(2m)$ , préparer un état gaussien autour d'une certaine impulsion  $\vec{k}_0$ , nous donnera alors une gaussienne se déplaçant avec une vitesse de groupe donnée par la dérivée de la relation de dispersion en  $\vec{k}_0$ ,  $\vec{v}_g = \frac{\partial E}{\partial \vec{k}}(\vec{k}_0)$ . On peut aller plus loin en montrant que l'étalement du paquet d'onde  $\sigma(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \left| \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right| t = \frac{t}{m}$ .

Dans le cas d'un hamiltonien de liaisons fortes sous champ magnétique en se plaçant aux extrema de la bande i.e. aux grandes longueurs d'ondes, à faible flux et en prenant un paquet d'onde relativement localisé  $\sigma \sim 1$ , son centre de masse reproduira les orbites cyclotrons classiques. Le paquet d'onde a un mouvement de gyration dans l'espace direct et réciproque, de pulsation  $\omega_c = 4\pi\Phi$  et de rayon  $r_c = \frac{v}{\omega_c} = \frac{\sqrt{E}}{2\pi\Phi}$  (dans l'espace direct). Un exemple de

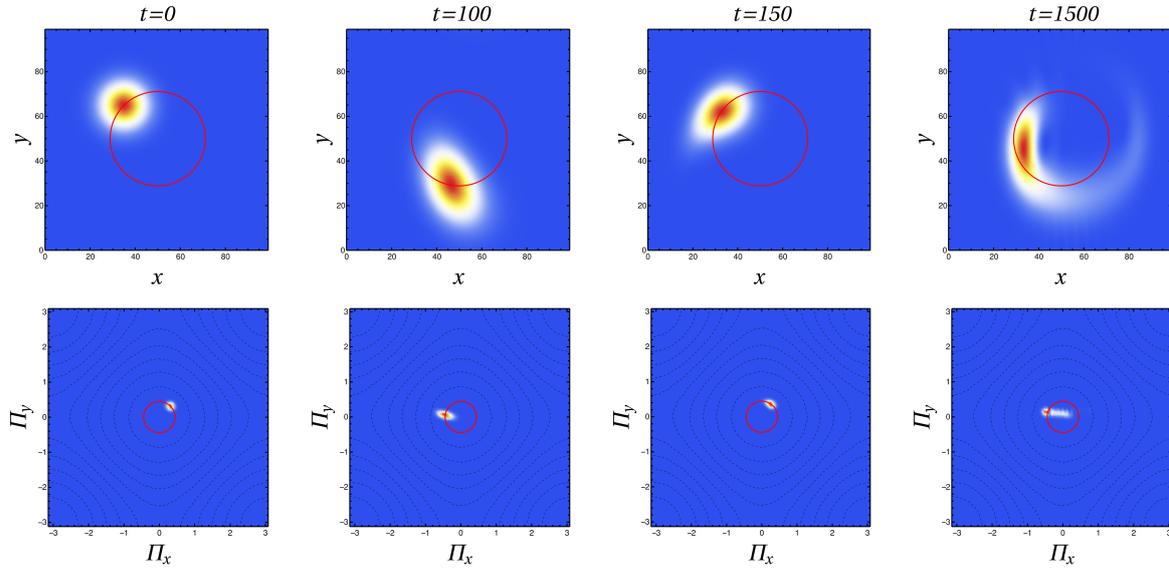


Fig. II.4 Évolution sur un réseau carré sous champ magnétique d'un paquet d'onde initialement gaussien préparé autour du quasi-moment généralisé  $\Pi_x = \Pi_y = \pi/10$  avec pour largeur typique initial dans l'espace direct  $\sigma = 10$ . Le flux magnétique est  $\Phi = 1/300$ . Haut : On trace l'évolution dans l'espace direct des sites. Le cercle rouge est l'orbite cyclotron de rayon  $r_c \simeq 21$  et de période  $T_c = \frac{1}{2\Phi} = 150$  prédite par les équations classiques. Bas : Mouvement dans l'espace réciproque, le cercle rouge est l'iso-énergie  $E$  autour de laquelle le paquet d'onde a été préparé. Les autres traits noirs en pointillés sont d'autres iso-énergies de la relation de dispersion du réseau carré.

paquet d'onde évoluant sous champ magnétique est montré Figure II.4.

L'espace réciproque est l'espace des quasi-moments généralisés  $\vec{\Pi} = \vec{p} - q\vec{A}$  qui sont les bonnes quantités physiques à regarder i.e. invariantes de jauge. Cependant, un problème de nature quantique survient lorsque l'on tente de représenter le paquet d'onde dans cet espace, les deux composantes du quasi-moment ne commutent plus  $[\Pi_x, \Pi_y] = i\hbar qB = \frac{i\hbar^2}{l_B^2}$ . Représenter la fonction d'onde dans cet espace revient à regarder pour tous les couples de valeur propre  $(\Pi_x, \Pi_y)$  le recouvrement de la fonction d'onde sur chaque vecteur propre associé. Or, de tels vecteurs propres ne peuvent exister puisque les deux opérateurs ne commutent pas, ils ne partagent pas de base commune de diagonalisation.

Pour contourner cette difficulté sur la Figure II.4, nous proposons d'approximer les quasi-moments généralisés. En se plaçant dans la jauge de Landau,  $\Pi_x = p_x$  et  $\Pi_y = p_y - qBx$  on calcule le quasi-moment  $\Pi_y$  en utilisant la valeur moyenne de  $x$ ,  $x \sim \langle x \rangle$ . Cette approximation est valide lorsque le paquet d'onde est gaussien et bien localisé dans la direction  $x$  mais ne marche plus lorsqu'il s'étale et se déforme comme c'est le cas à grands temps (voir panneau droit Figure II.4). On a l'image dans l'espace réciproque d'un paquet d'onde qui quitte son iso-énergie. Cela ne peut pas être exact car le champ magnétique ne travaille pas classiquement, or comme la valeur moyenne de l'opérateur impulsion suit les équations classiques, elle ne peut pas sortir de son iso-énergie initial.

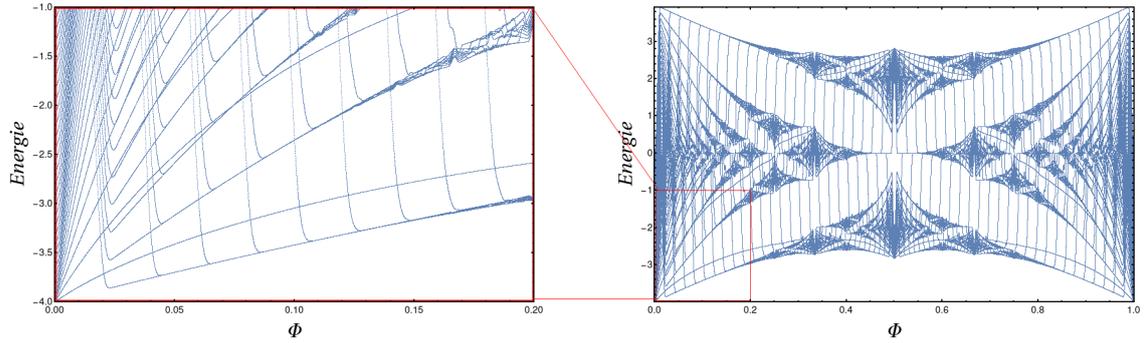


Fig. II.5 Papillon de Hofstadter tracé avec 40 000 flux différents pour un système avec des conditions aux bords ouverts suivant  $x$  et de taille  $N_x = 50$  et des conditions aux bords périodiques suivant  $y$  et de taille  $N_y = 10$ . Par ailleurs, on n'a tracé que les états ayant un quasi-moment  $k_y$  nul. A gauche, on effectue un zoom du papillon sur les niveaux de Landau à basses énergies et bas flux. Les niveaux de Landau à très petits flux ne sont pas présents à cause de la taille finie du système.

### II.1.5 Conditions aux bords ouverts

En traçant le papillon pour un système ouvert, on remarque l'apparition de nouveaux états situés dans les gaps. La Figure II.5 illustre ce phénomène. Elle a été tracée avec des conditions aux bords ouverts dans la direction  $x$ . On garde la périodicité dans la direction  $y$  et on conserve la jauge de Landau. Les états propres sont alors des ondes planes dans la direction  $y$  et l'on choisit de tracer ici uniquement celles de quasi-moments nuls par souci de clarté. Les conditions aux bords ouverts permettent également de relâcher la contrainte sur les flux, tous les flux sont donc accessibles.

Pour comprendre ce phénomène, on s'inspire en grande partie du cours de David Tong

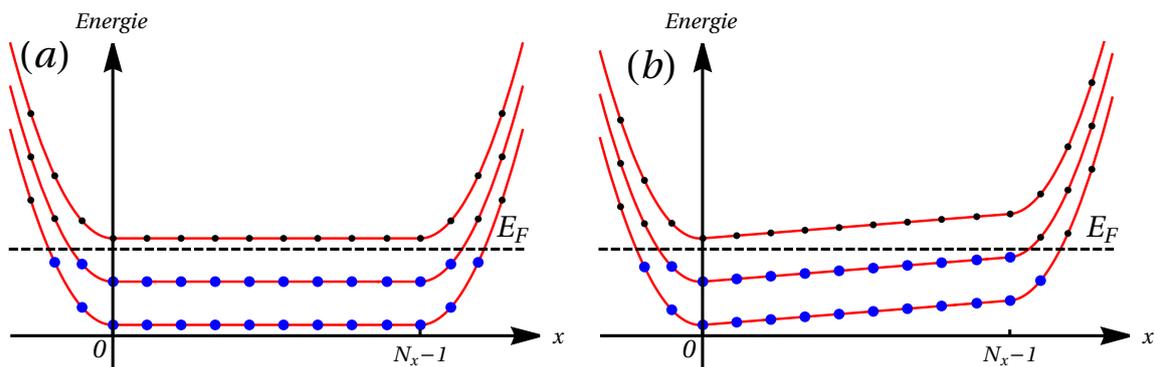


Fig. II.6 Représentation de 3 différents niveaux de Landau en présence d'un potentiel confinant  $V(x)$  et (a) : sans champ électrique, (b) : avec un champ électrique dans la direction  $x$  (champ électrique de Hall). Les états propres dégénérés sont localisés suivant  $x$  et représentés par des points. Les états en bleu sont les états occupés car situés en dessous de l'énergie de Fermi. Les états en noir sont inoccupés car au-dessus de l'énergie de Fermi.

sur l'effet Hall quantique entier [111]. Le raisonnement repose sur le papier de Halperin [112] qui eut l'idée de simuler les bords du système par un potentiel confinant. On se place dans le continu ce qui est équivalent à regarder le spectre à bas flux comme vu dans la section II.1.3 c). L'hamiltonien s'écrit alors :

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + (p_y - qBx)^2) + V(x) \text{ avec } \begin{cases} V(x) = 0 \text{ si } 0 \leq x \leq N_x - 1 \\ V(x) > 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

Lorsque l'on est dans le coeur du matériau ( $V(x) = 0$ ), l'analyse faite dans la section II.1.1 permet de conclure que chaque état de quasi-moment  $k_y$  est centré autour d'une position  $x_0 = \frac{\hbar k_y}{qB}$ . Les états propres sont donnés par les polynômes d'Hermite multipliés par une gaussienne centrée en  $x_0$  et dont l'écart-type est la longueur magnétique  $l_B$ . Lorsque l'on est sur les bords du matériau, on considère un potentiel variant lentement comparé à la longueur magnétique de façon à ce que l'on puisse l'approximer par  $V(x) = V(X) + (x - X)\frac{dV}{dx}$  où  $X$  est la position d'un état propre sur le bord du matériau. L'ajout de ce potentiel revient à décaler la position moyenne des états propres  $x_0$  d'une quantité  $-\frac{1}{\omega_c}\frac{dV}{dx}$  et en énergie d'une quantité  $V(X) - \frac{1}{2m\omega_c^2}\left(\frac{dV}{dx}\right)^2$ . Chaque onde plane suivant  $k_y$  est donc associée à une position  $x_0$ . La représentation des états propres de la Figure II.6 est donc justifiée. L'ajout d'un potentiel induit également une vitesse de dérive suivant  $y$  en plus du mouvement cyclotron :

$$v_y^{\text{dérive}} = \frac{1}{qB} \frac{dV}{dx}$$

Les modes sur chaque bord sont alors dit chiraux puisque qu'ils ne peuvent se déplacer que dans un seul sens :  $v_y^{\text{dérive}} > 0$  à gauche et  $v_y^{\text{dérive}} < 0$  pour  $q = -e$  et  $B > 0$  (suivant  $+z$ ). En remplissant les  $n$  premiers niveaux de Landau de l'état fondamental jusqu'à l'énergie de Fermi (avec des particules sans interaction), on calcule l'intensité du courant suivant  $y$ . En pratique, le courant porté par le bord gauche compensera exactement le courant porté par le bord droit. On ajoute un champ électrique suivant  $x$  pour asymétriser les deux bords et créer un courant suivant  $y$ , ce qui modifie l'hamiltonien par un terme  $qEx$  (voir Figure II.6). Le courant s'écrit alors :

$$\begin{aligned} I_y &= q \sum_{i=1}^n \sum_{k_y} \langle \psi_{i,k_y} | v_y | \psi_{i,k_y} \rangle = \frac{q}{m} \sum_{i=1}^n \sum_{k_y} \langle \psi_{i,k_y} | p_y - qBx | \psi_{i,k_y} \rangle \\ &= \frac{q}{m} \sum_{i=1}^n \sum_{k_y} \langle \psi_{i,k_y} | \hbar k_y - qBx | \psi_{i,k_y} \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.11})$$

or comme on l'a vu chaque état est situé autour d'une position  $x_0$  qui dans le cas d'un potentiel  $V(x)$  et d'un champ électrique  $E$  s'écrit comme :

$$x_0 = \langle \psi_{i,k_y} | x | \psi_{i,k_y} \rangle = \frac{\hbar k_y}{qB} + \frac{mE}{qB^2} + \frac{1}{qB} \frac{dV}{dx}$$

Le premier terme se compense avec le terme  $\hbar k_y$  de l'équation (II.11), le terme dérivant du potentiel confinant est nul dans le coeur du matériau et ceux des deux bords se compensent, il ne reste plus que le terme dépendant de  $E$ . On a alors :

$$I_y = n \frac{qEN_\Phi}{B} = n \frac{qEA}{\Phi_0} \quad (\text{II.12})$$

On a donc un courant qui est quantifié dépendant du nombre de niveaux de Landau sous l'énergie de Fermi et indépendant du champ magnétique : c'est l'**effet Hall quantique entier**.  $n$  est appelé le **nombre de Hall**.

Une autre caractéristique importante de cette conduction est sa très forte résilience face aux perturbations du système. En effet, en général dans un conducteur le courant est détérioré par les défauts du système car ils rétro-diffusent l'onde des électrons. Ici, puisque les modes de bord sont chiraux, la rétro-diffusion n'est pas possible sur un même bord, il faut pouvoir atteindre le bord opposé par effet tunnel ce qui est exponentiellement interdit du fait de la localisation des modes de propagation sur une longueur  $l_B$ .

On admet en général que ce sont les modes de bord du système qui sont conducteurs et que ceux situés dans le coeur sont isolants. On parle alors d'isolant 2D en volume et de conducteur 1D sur les bords. Cependant, cette image doit-être nuancée. En effet, sur la Figure II.6-b, on voit que finalement, ce sont un peu tous les modes qui participent au courant sur le bord droit en raison de l'asymétrie globale du système due au champ électrique. Par ailleurs, il est également possible de calculer un courant quantifié pour un matériau sans bord [113] en utilisant la formule de Kubo. Cette quantification est due à ce que l'on appelle un invariant topologique dépendant seulement de la topologie des vecteurs propres dans la zone de Brillouin. C'est un entier qui est calculé pour chaque bande du système et qui est insensible face aux perturbations. Dans le cas particulier que l'on étudie, cet invariant est le **nombre de Chern**. Il fait partie d'une théorie plus générale appelée **isolants topologiques**, née avec l'effet Hall quantique entier. L'identification entre la quantification de la conductivité sur les bords du matériau et le calcul d'un invariant topologique défini pour un système sans bord est connue sous le nom de la **correspondance coeur-bord**.

Le nombre de Hall  $n$  de l'équation (II.12) est défini dans les gaps du système (sans bord) et correspond au nombre d'états de bord sous l'énergie de Fermi. Il est relié au nombre de Chern, invariant topologique, défini dans les bandes du système par la formule :

$$n = \sum_{i < \text{gap}} C_i$$

où la somme porte sur l'ensemble des bandes situé en dessous du gap où l'on calcule le nombre de Hall.

En augmentant le flux (donc en se déplaçant horizontalement sur le papillon), l'énergie des niveaux de Landau augmente linéairement avec le champ et ils franchissent successivement l'énergie de Fermi (cela correspond à franchir les bandes de Landau dans le papillon). Dans la Figure II.5, on ne trace que pour un seul quasi-moment  $k_y$  le papillon donc le nombre d'états de bord diminue de 1 à chaque franchissement de bande, la conduction varie de manière discrète.

On peut également tracer le papillon toujours avec des conditions aux bords périodiques mais en traçant également les flux ne respectant pas la condition  $\Phi = \frac{p}{N_x \cdot N_y}$  (voir Figure II.7). Cela revient à introduire dans le matériel une plaquette ayant un flux différent des autres plaquettes donc un défaut. De la même manière, des états viennent peupler le gap aux flux interdits et ces états sont localisés autour de la plaquette défailante. On observe aussi un flot spectral partant d'une bande de Landau au-dessus d'un gap et allant à la bande de Landau en-dessous du gap. Ce flot rend compte de manière élégante de la dégénérescence des niveaux

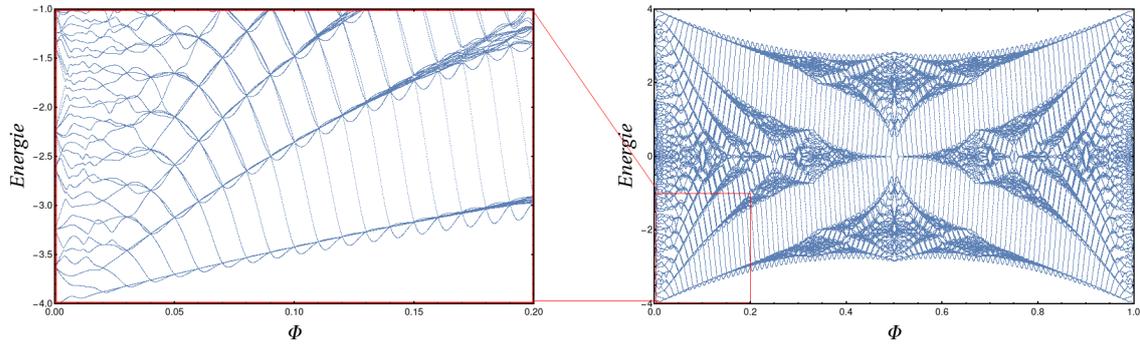


Fig. II.7 *Papillon de Hofstadter tracé avec 10 000 flux différents pour un système avec des conditions aux bords périodiques suivant  $x$  et  $y$  et de taille  $N_x = N_y = 10$ , on a donc tracé des flux interdits. A gauche, on effectue un zoom du papillon sur les niveaux de Landau à basses énergies et bas flux. Les niveaux de Landau d'énergies plus élevées et ceux à très petits flux ne sont pas présents à cause de la taille finie du système.*

de Landau  $N_\Phi$  augmentant avec le flux magnétique. À chaque pas de flux autorisé  $1/(N_x \cdot N_y)$  la dégénérescence des bandes augmente de 1. Le flot montre que cet état supplémentaire provient de la bande de Landau supérieure. Puisque la  $n$ -ième bande de Landau a perdu  $n - 1$  états partis vers la  $n - 1$ -ième bande de Landau alors elle reçoit  $n$  états venant de la  $n + 1$ -ième bande de Landau. La Figure II.7 illustre ce phénomène de flot spectral bien qu'il est dur, à l'œil, de compter le nombre d'états traversant le gap car très proches (voire se superposant) en énergie.

On peut néanmoins numériquement l'obtenir et chaque gap de ce papillon peut alors être indexé par un entier comptant le nombre d'états entre deux flux autorisés (voir Figure II.8). De manière équivalente, cette indexation permet de montrer le caractère topologique de ce spectre puisque le nombre de Chern de chaque bande est donné par la différence entre le nombre d'états dans le gap supérieur et inférieur à la bande. Le papillon de Hofstadter est le diagramme de phase d'un isolant topologique.

## II.2 Papillons pour marches quantiques

L'ajout d'un champ magnétique transverse à un réseau bidimensionnel a permis de découvrir des effets physiques surprenants et inattendus comme le papillon de Hofstadter ou la quantification de la conduction. Les marches quantiques étant naturellement définies sur un réseau, on se propose d'étudier leur comportement sous champ magnétique et de comparer leurs similarités et différences avec les systèmes hamiltoniens.

Plusieurs articles se sont déjà intéressés aux marches quantiques sous champ magnétique [40, 52, 114, 115]. Pour prendre en compte le champ magnétique, nous allons comme dans le cas des systèmes hamiltoniens utiliser la substitution de Peierls i.e. la phase prise quand la particule se déplace sur les arêtes du réseau (voir Section II.1.2). Elle sera donc naturellement encodée dans l'opérateur de translation.

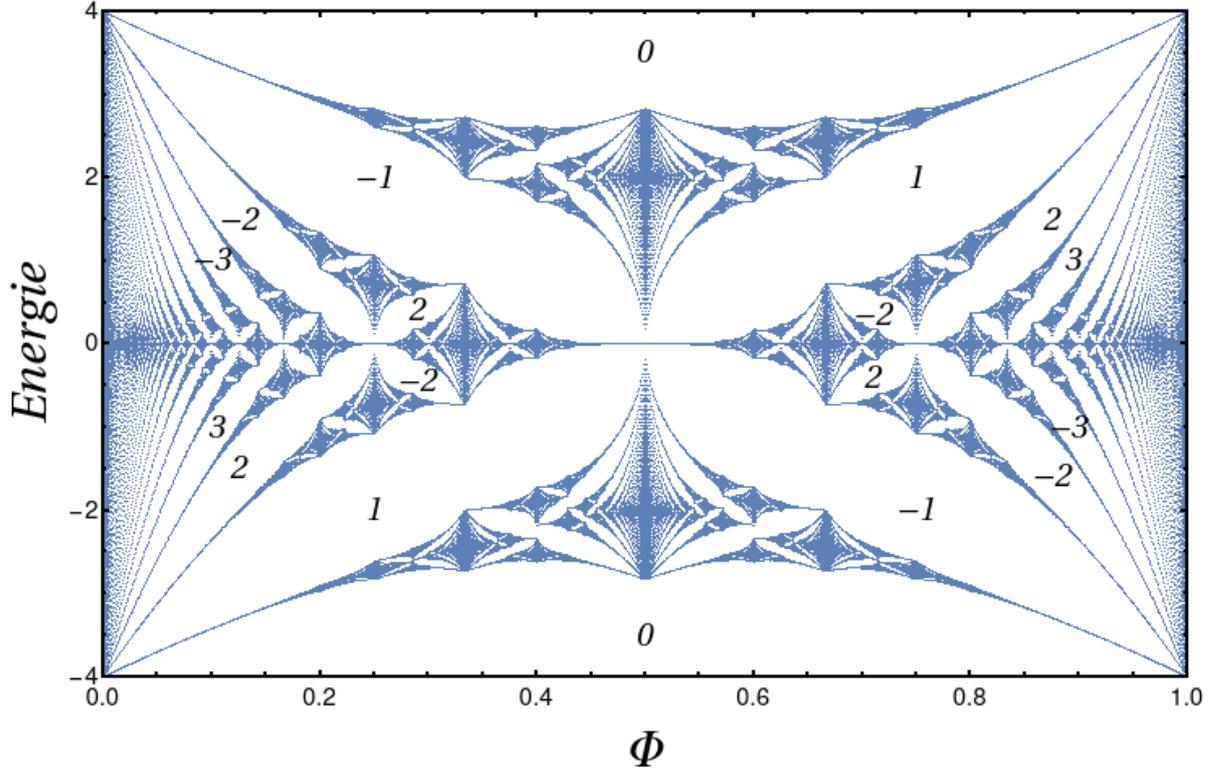


Fig. II.8 *Papillon de Hofstadter* tracé pour un système de taille  $N_x = N_y = 40$  avec des conditions aux bords périodiques. On a indexé les premiers gaps du papillon par l'entier  $n$  quantifiant le courant (voir équation (II.12)). Il correspond à la différence entre le nombre de Chern de la bande supérieure et inférieure.

## II.2.1 Papillons de la marche quantique bidimensionnelle à deux états internes

### a) Equation de Harper et papillons

Pour la marche quantique à deux niveaux, les résultats décrits dans cette section sont principalement ceux de l'article [52] (que l'on a étendu au cas  $\theta \neq \pi/4$ ) et l'on pourra s'y référer pour plus de détails, notamment pour les effets topologiques. On rappelle que l'opérateur d'évolution s'écrit  $U = T_y \cdot D_y(\theta) \cdot T_x \cdot D_x$  où  $D_x$  est le dé de Hadamard utilisé sur tous les sites du réseau carré,  $D_y(\theta)$  sa généralisation pour un angle  $\theta \in [0, 2\pi]$  (voir équation (I.10)),  $T_x$  et  $T_y$  les opérateurs de translation dans les directions correspondantes. Pour la substitution de Peierls, on choisira également une jauge de Landau dirigée suivant l'axe  $y$ , il n'y a donc pas de phases prises dans la direction  $x$ , l'opérateur  $T_x$  reste inchangé, mais l'opérateur  $T_y$  devient :

$$\begin{aligned} T_y(\Phi) &= \sum_{l,m} e^{2i\pi\Phi l} |+\rangle \langle +| \otimes |l, m+1\rangle \langle l, m| + e^{-2i\pi\Phi l} |-\rangle \langle -| \otimes |l, m-1\rangle \langle l, m| \\ &= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} e^{2i\pi\Phi l} |l, m+1\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & e^{-2i\pi\Phi l} |l, m-1\rangle \langle l, m| \end{pmatrix} \end{aligned}$$

L'opérateur d'évolution dépend alors maintenant explicitement de  $\Phi$ . On peut de la même manière que dans la section II.1.3 a) obtenir l'analogue de l'équation de Harper pour les marches quantiques en écrivant l'équation aux valeurs propres puis en insérant une relation de fermeture, en projetant les vecteurs obtenus sur un site du réseau et enfin, en faisant apparaître les fonctions de Bloch. Ici, on obtient alors un système matriciel de dimension 2 dû à la dimension de l'espace interne utilisé :

$$e^{-i\varepsilon} A_l = \frac{1}{\sqrt{2}} (B_l \cdot A_{l+1} + C_l \cdot A_{l-1})$$

avec  $A_l = \begin{pmatrix} a_l^+ \\ a_l^- \end{pmatrix}$  les fonctions de Bloch,  $B_l(\theta) = \begin{pmatrix} b_l^+(\theta) & -b_l^+(\theta) \\ -b_l^{+*}(\theta) & b_l^{+*}(\theta) \end{pmatrix}$  et  $C_l(\theta) = \begin{pmatrix} b_l^-(\theta) & b_l^-(\theta) \\ b_l^{+*}(\theta) & b_l^{+*}(\theta) \end{pmatrix}$

où  $b_l^-(\theta) = \cos(\theta)e^{-i(k_x - k_y) + if_l}$ ,  $b_l^+(\theta) = \sin(\theta)e^{i(k_x - k_y) + if_l}$  et  $f_l = 2\pi\Phi l$ .

Lorsque le flux est un rationnel  $\Phi = p/q$  avec  $p$  et  $q$  premiers entre eux alors le système à résoudre est de taille  $2q \times 2q$ .

$$e^{-i\varepsilon} \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ A_{q-2} \\ A_{q-1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0_{2 \times 2} & B_0 & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & \cdots & 0_{2 \times 2} & C_0 \\ C_1 & 0_{2 \times 2} & B_1 & 0_{2 \times 2} & \cdots & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} \\ 0_{2 \times 2} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0_{2 \times 2} \\ 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & \cdots & 0_{2 \times 2} & C_{q-2} & 0_{2 \times 2} & B_{q-2} \\ B_{q-1} & 0_{2 \times 2} & \cdots & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & C_{q-1} & 0_{2 \times 2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ A_{q-2} \\ A_{q-1} \end{pmatrix}$$

On trace Figure II.9, les papillons de cette marche quantique pour différentes valeurs de  $\theta = 0, \pi/6, \pi/4, \pi/3$ . Ici ce qui est tracé sont les quasi-énergies, les phases des valeurs propres en fonction du flux  $\Phi$ . Au flux  $\Phi = p/q$ , le papillon possède  $2q$  bandes. On observe plusieurs symétries dont certaines ont déjà été discutées dans le cas d'un champ magnétique nul. La symétrie  $\varepsilon \leftrightarrow \pi + \varepsilon$  due à la symétrie de sous-réseau (voir Annexe A.1) est toujours présente. Cependant, la symétrie  $\varepsilon \leftrightarrow -\varepsilon$  due à la symétrie chirale ne tient plus pour un champ magnétique non nul (voir Annexe A.2). Elle est néanmoins conservée dans le cas symétrique  $\theta = \pi/4$ . Les papillons contiennent également des symétries au niveau du flux. Déjà comme dans le cas de systèmes hamiltoniens, puisque le flux n'apparaît que dans une exponentielle imaginaire multipliée par un facteur  $2\pi$ , on peut se restreindre aux flux compris entre 0 et 1. Tous les papillons sont également symétriques sous la transformation  $(\varepsilon, \Phi) \leftrightarrow (-\varepsilon, -\Phi)$  (voir Annexe A.2.4). Pour  $\theta = \pi/4$ , combinée avec la symétrie chirale cela donne une symétrie entre  $\Phi \leftrightarrow -\Phi$ . La dernière symétrie observée correspond à une translation en quasi-énergie de  $\pi/2$  et en flux de  $1/2$ ,  $(\varepsilon, \Phi) \leftrightarrow (\varepsilon + \pi/2, \Phi + 1/2)$ , l'opérateur responsable de cette symétrie étant également discuté en Annexe A.2.4.

Dans le cas où  $\theta = \pi/4 + \alpha$  avec  $\alpha \ll \pi/4$ , on trouve à bas flux des niveaux de Landau autour de la quasi-énergie 0 variant en racine du champ. On sait déjà à partir de l'analyse de la section II.1.3 c) que la substitution de Peierls redonne le couplage minimal à bas flux

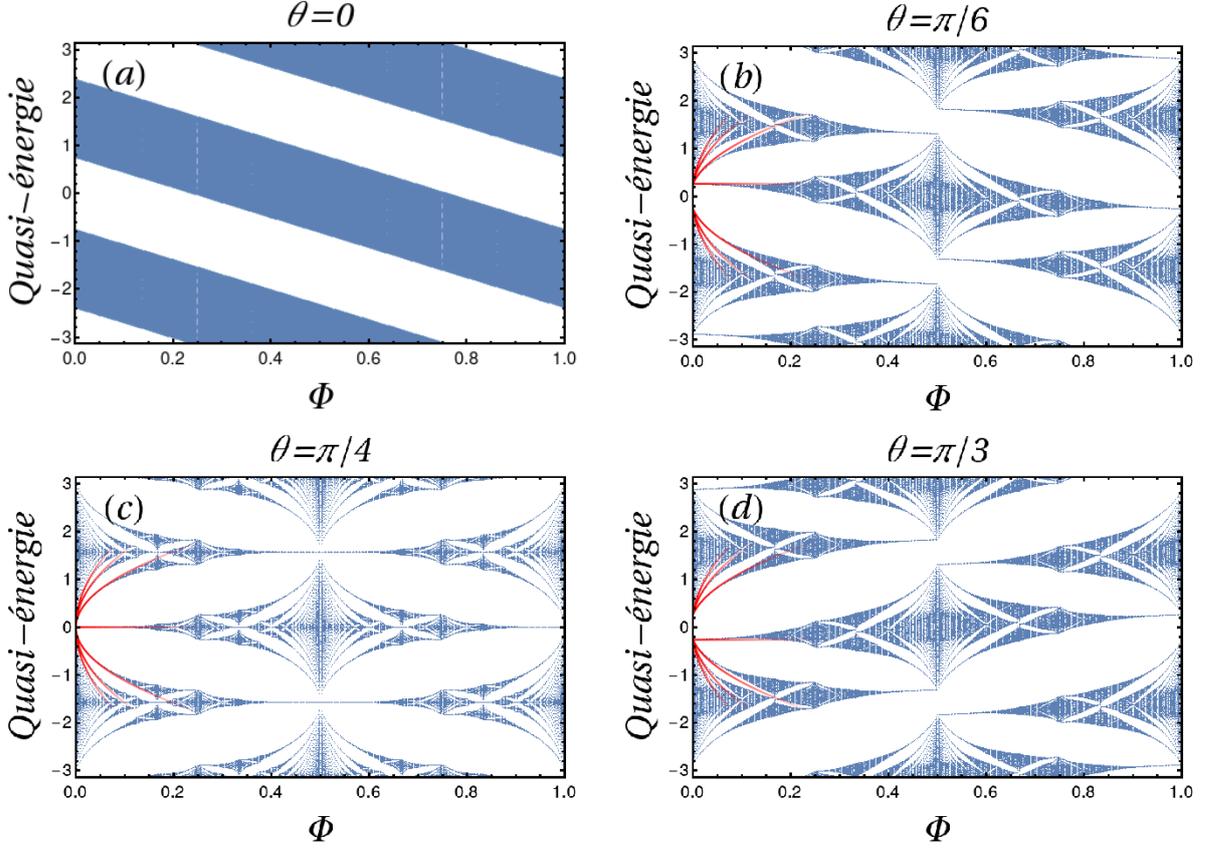


Fig. II.9 *Papillon* pour la marche quantique à deux états internes. On trace les quasi-énergies de l'opérateur d'évolution correspondant en fonction du flux  $\Phi$  pour un dé suivant  $y$  utilisant un angle de mélange (a) :  $\theta = 0$ , (b) :  $\theta = \pi/6$ , (c) :  $\theta = \pi/4$  et (d) :  $\theta = \pi/3$ . Les courbes en rouge sont les niveaux de Landau prédits.

$\Phi \ll 1 \Leftrightarrow a \ll l_B$  et aux grandes longueurs d'ondes  $|\delta\vec{p}| \ll 1/a$ . En utilisant l'hamiltonien effectif obtenu équation (I.14), on substitue à  $\delta\mathbf{k}$ ,  $\delta\Pi = \delta\mathbf{k} - q\mathbf{A}$ . Pour simplifier les notations, on se place autour du point de Dirac  $\mathbf{K}_{0,0}$  :

$$\hat{H}_{\text{eff}}(\pi/4 + \alpha, \delta\Pi) = \delta\Pi_y \sigma_z + \delta\Pi_x \sigma_x + \alpha \sigma_y + o(\delta\Pi)$$

Ici, on n'obtient pas exactement le même hamiltonien que dans la section II.1.1. Pour retrouver l'hamiltonien de Dirac on se place dans la base des vecteurs propres de  $\sigma_y$ . Cela revient à faire une permutation cyclique des matrices de Pauli  $\sigma_y \rightarrow \sigma_z$ ,  $\sigma_z \rightarrow \sigma_x$  et  $\sigma_x \rightarrow \sigma_y$ . Les rôles des directions  $x$  et  $y$  sont échangés :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}}(\pi/4 + \alpha, \delta\Pi) &= \delta\Pi_y \sigma_x + \delta\Pi_x \sigma_y + \alpha \sigma_z + o(\delta\Pi) \\ &= \sqrt{4\pi\Phi} \begin{pmatrix} \frac{\alpha}{\sqrt{4\pi\Phi}} & -ib \\ ib^\dagger & -\frac{\alpha}{\sqrt{4\pi\Phi}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Cela implique l'apparition d'un facteur  $i$  et l'échange des opérateurs création et annihilation par rapport à l'équation (II.2). Seul le premier niveau de Landau est affecté par ce

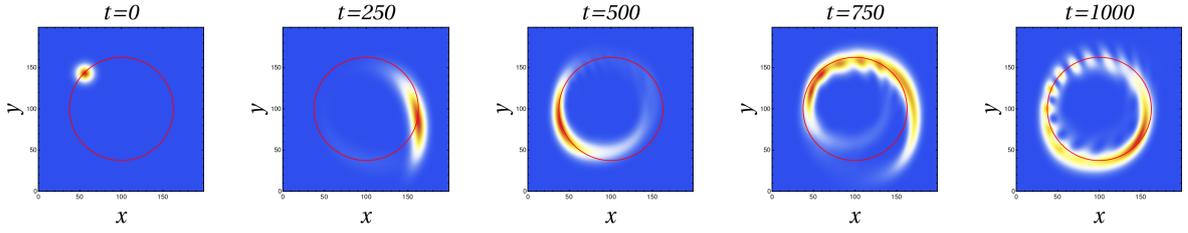


Fig. II.10 Évolution d'un paquet d'onde sous champ magnétique avec un flux  $\Phi = 1/500$  pour une marche quantique à deux niveaux de spin utilisant un dé symétrique  $\theta = \pi/4$  préparé autour d'une impulsion de norme  $|\delta k| = \pi/4$ . L'orbite cyclotron classique tracée en rouge a un rayon  $r_c = 62.5$  et une période  $T_c \simeq 393$ .

changement et change de signe :

$$\begin{cases} E_0 = -\alpha \\ E_n^\pm = \pm \sqrt{4\pi\Phi n + \alpha^2} \end{cases} \text{ pour } \alpha \ll \pi/4$$

On trace en rouge sur la Figure II.9-c les premiers niveaux de Landau jusqu'à  $n = 3$  pour  $\alpha = 0$ . La dégénérescence des niveaux de Landau dans ce système est doublée car on a 2 points de Dirac à la quasi-énergie 0. Chaque niveau a donc pour dégénérescence  $2N_\Phi = \frac{2BA}{\Phi_0}$  avec  $\mathcal{A}$  l'aire du système. En utilisant la symétrie de sous-réseau, le même travail peut être fait autour de la quasi-énergie  $\pi$ . Lorsque  $\theta \neq \pi/4$  i.e.  $\alpha \neq 0$ , le premier niveau de Landau s'attache soit aux niveaux de Landau supérieurs si  $\alpha < 0$ , soit aux niveaux de Landau inférieurs pour  $\alpha > 0$ . Une relation de dispersion à flux nul autour des points de contact Dirac entraînent alors des niveaux de Landau en racine du champ à faible flux.

## b) Paquet d'onde

Préparer un paquet d'onde gaussien sous champ magnétique proche du bas de l'une des deux bandes nous permet de retrouver l'orbite classique cyclotron prévu pour l'hamiltonien effectif étudié juste avant. La relation de dispersion étant différente, la pulsation cyclotron s'exprime dans le cas relativiste  $\omega_c = 2\pi\Phi/|\delta k|$  et le rayon cyclotron  $r_c = 1/\omega_c$  dû à notre choix de prendre  $c = 1$ . La Figure II.10 montre l'évolution d'un paquet d'onde pour une amplitude  $|\delta k| = \pi/4$  et un champ magnétique  $\Phi = 1/500$ . Le cercle rouge est l'orbite cyclotron relativiste prédite par les équations classiques. Le paquet d'onde décrit une orbite puisque le champ magnétique ne travaillant pas classiquement, la valeur moyenne de son impulsion se déplace sur les iso-quasi-énergies à flux nul qui sont dans le cas  $\theta = \pi/4$  des cercles déformés (en bas de bande ils sont peu déformés).

En asymétrisant les directions  $x$  et  $y$  i.e.  $\theta \neq \pi/4$ , on a vu que l'on pouvait obtenir des iso-quasi-énergies ouvertes (voir Figure I.11 et Figure II.11-b). L'évolution d'un paquet d'onde sur ces lignes ouvertes change radicalement la dynamique (voir Figure II.11-a). Le paquet d'onde se met maintenant à osciller (ou "serpenter") tout en se déplaçant dans la direction diagonale.

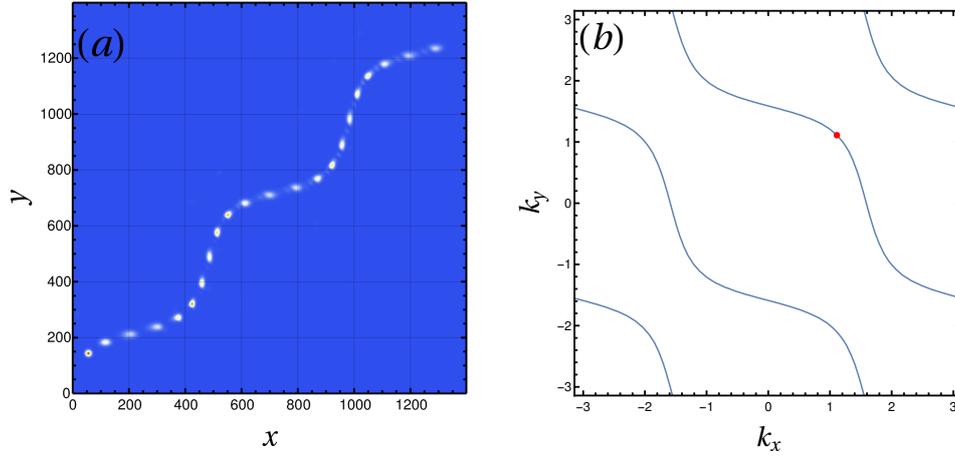


Fig. II.11 (a) : Évolution d'un paquet d'onde préparé autour d'une impulsion de norme  $|\delta k| = \pi/2$  pour un angle  $\theta = \pi/6$  et un flux magnétique  $\Phi = 1/1000$ . Le paquet d'onde se met alors à se déplacer et osciller le long de la diagonale. Pour reconstituer la trajectoire on a affiché l'évolution du paquet d'onde tous les 100 pas de temps jusqu'à  $t = 2100$ . L'évolution du paquet d'onde n'a pas été simulé directement sur un système de taille  $1400 \times 1400$ . On a utilisé un système  $200 \times 200$  (maille carré sur la Figure (a)) avec des conditions aux bords périodiques que l'on a mis bout à bout à chaque fois que le paquet d'onde sortait par un bord et réapparaissait de l'autre côté. Cette approximation est valable lorsque la taille du paquet d'onde est petite devant la taille du système sur lequel on simule. (b) : Le point rouge est l'endroit où le paquet d'onde a été initialement préparé dans la relation de dispersion. Les courbes bleues sont les iso-quasi-énergies correspondantes qui sont des lignes ouvertes oscillantes.

### c) Conditions aux bords ouverts

L'implémentation de conditions aux bords ouverts dans la marche quantique est plus subtile que dans le cas des systèmes hamiltoniens. Pour bien comprendre comment on les implémente, on repart du cas 1D. Pour interdire au marcheur d'aller au-delà du bord du matériau, on ne peut pas se contenter d'annuler le terme de saut dans l'opérateur de translation, car cela aurait pour conséquence d'abandonner le caractère unitaire de la marche. Imposer au marcheur de faire un saut sur place aurait également les mêmes conséquences. En effet, si le marcheur a pu atteindre cet état interne c'est qu'il est atteignable depuis le coeur du matériau (ici, le même état interne mais au site d'avant). Autoriser un saut sur place revient à dire que l'amplitude de probabilité sur cet état interne peut provenir de deux états différents soit du même état interne au même site (c'est le saut sur place) soit du même état interne mais du site précédent. Il y a donc une impossibilité de remonter dans le temps la marche quantique sans ambiguïté, cela veut dire que l'opérateur n'est plus inversible donc plus unitaire. En fait, la possibilité la plus naturelle pour conserver l'unitarité est d'aller occuper l'autre état interne du même site. Puisque le site sur lequel le marcheur se situe, est localisé sur le bord et l'état interne dans lequel il se trouve, est atteignable depuis le coeur du matériau, cela signifie que l'autre état interne du même site devrait se coupler avec un site situé de l'autre côté du bord, en dehors du matériau. Puisqu'il n'existe pas de site à

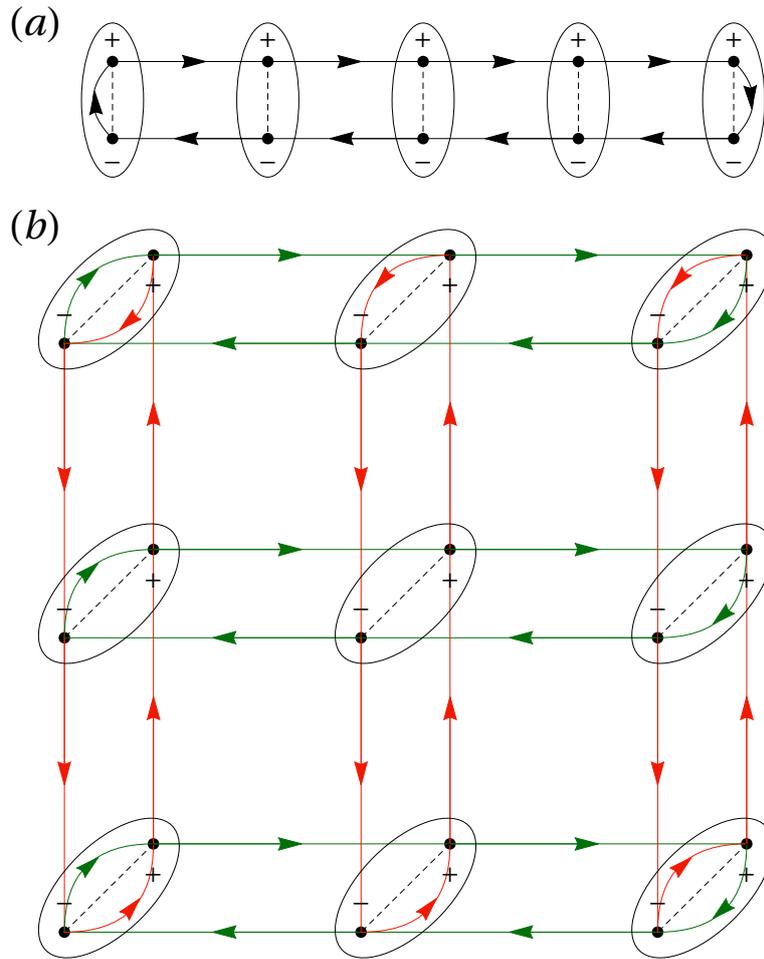


Fig. II.12 Représentation de la marche quantique avec des conditions aux bords ouverts. Il est nécessaire de modifier les termes de translation sur les bords pour conserver l'unitarité de l'opérateur. (a) : Sur une chaîne de taille 5. (b) : Sur un réseau carré de taille  $3 \times 3$  en utilisant la marche quantique à deux états internes.

l'extérieur du matériau, cet état ne se couple avec aucun autre état. Le marcheur peut donc venir l'occuper.

Pour la marche quantique 1D, on représente sur la Figure II.12-a cet échange d'état interne sur les sites de bords par les flèches courbées. Avec cette prescription sur les bords, l'opérateur de translation reste unitaire. Une prescription similaire peut également être appliquée dans le cas de la marche quantique 2D à deux états internes (voir Figure II.12-b).

Une fois ces conditions implémentées sur les bords, on peut tracer les papillons des systèmes correspondants. Comme dans le cas des systèmes hamiltoniens, on prendra des conditions aux bords périodiques suivant  $y$  et des conditions aux bords ouverts suivant  $x$  et par souci de clarté, on ne tracera que les états de quasi-moment  $k_y$  nul. On trace également les systèmes avec des conditions aux bords périodiques mais en s'autorisant à faire le calcul

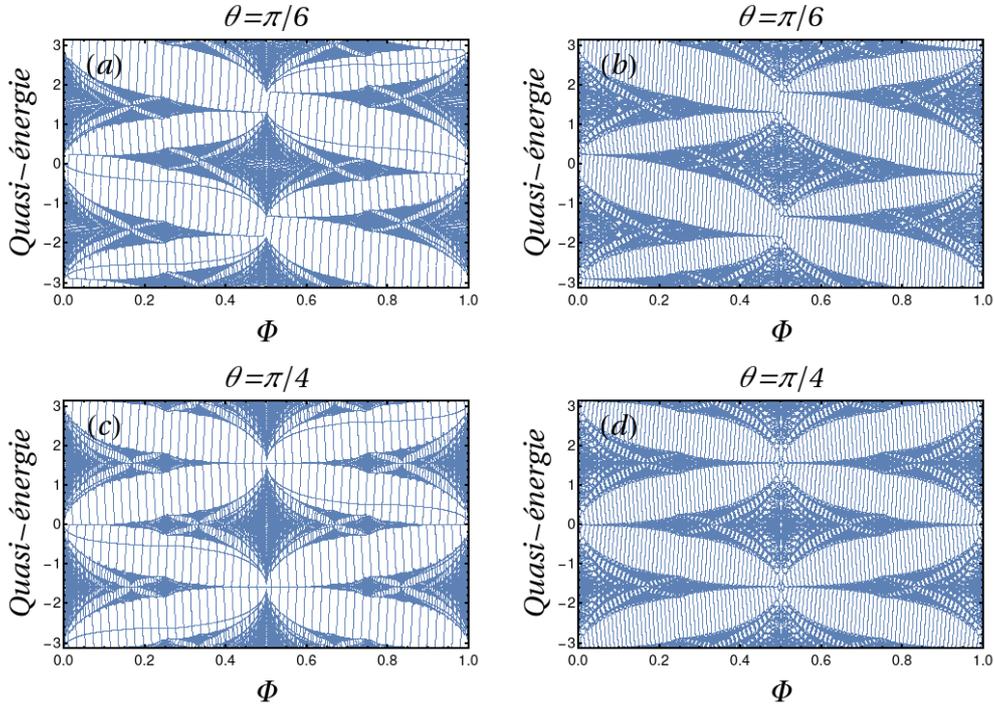


Fig. II.13 *Papillon pour la marche quantique à deux niveaux avec un système présentant des défauts. On trace pour chaque système 10000 flux différents. (a) et (c) : Le défaut correspond à un bord ouvert le long de la direction  $x$  dont la prescription est illustrée Figure II.12-b (on met des conditions aux bords périodiques suivant la direction  $y$ ). La taille du système dans la direction  $x$  est  $N_x = 50$  et on trace dans la direction  $y$  que le quasi-moment  $k_y$  nul. (b) et (d) : Le défaut est une plaquette défective lorsque l'on trace des flux interdits pour un système avec des conditions aux bords périodiques. La taille du système est  $N_x = 10$  et  $N_y = 10$ . (a) et (b) : L'angle utilisé pour le dé est  $\theta = \pi/6$ . (c) et (d) : L'angle utilisé pour le dé est  $\theta = \pi/4$ .*

pour des flux interdits, c'est-à-dire en introduisant une plaquette défective dans le système. On trace ces papillons pour des valeurs de  $\theta = \pi/6, \pi/4$  (voir Figure II.13).

On observe donc des états dans les gaps qui sont localisés sur les bords du matériau ou le long de la plaquette défective. De façon équivalente aux systèmes hamiltoniens, ces états permettent un transport unidimensionnel sur les bords du matériau (voir Figure II.14). La façon dont on implémente les conditions aux bords ouverts ne changera pas le nombre d'état dans chaque gap.

Ce nombre est directement relié à un invariant topologique : **l'invariant RLBL** nommé d'après ses auteurs M. S. Rudner, N. H. Lindner, E. Berg et M. Levin [116]. Cet invariant est différent du nombre de Chern vu dans le cas de l'effet Hall quantique entier. Cette différence provient de la topologie de la zone de Floquet qui est périodique dans la direction des quasi-énergies (voir Figure II.15). La correspondance coeur-bord du nombre de Chern est la différence entre le nombre d'états (localisés sur un bord) qui apparaissent dans les deux gaps bordant la bande (compté avec un signe -1 pour un état de chiralité opposé) (voir Figure II.15-a). On voit que la périodicité sur l'axe des quasi-énergies introduit un gap supplémentaire,

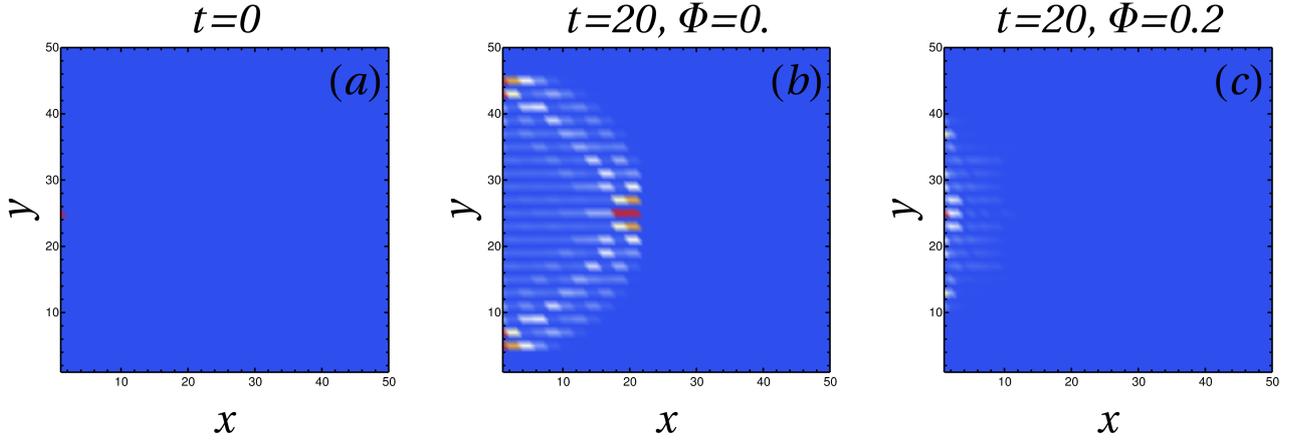


Fig. II.14 Marche quantique à deux états internes en condition aux bords ouverts sur les bords verticaux et périodiques sur les bords horizontaux. (a) : L'état initial est localisé au milieu du bord gauche dans l'état  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 24, +\rangle + i|0, 24, -\rangle)$ . (b) et (c) : Évolution après 20 pas de temps du marcheur pour un flux (b) :  $\Phi = 0$  et (c) :  $\Phi = 0.2$ . Le marcheur reste proche des bords du système lorsque le champ magnétique est allumé preuve de l'existence de mode localisé sur les bords. Lorsque le champs magnétique est nul, le marcheur pénètre dans le coeur du système car il n'existe pas de modes de bord. Les fonctions d'onde propre en volume ont également du poids sur les bords.

rendant possible l'existence d'états localisés sur le bord, stables topologiquement, quand bien même les invariants de Chern des bandes sont triviaux (voir Figure II.15-b). On en déduit donc que le nombre de Chern n'est pas capable de décrire toute la topologie des systèmes de Floquet i.e. hamiltonien périodique en temps pour lequel il est également possible de définir des quasi-énergies. Rudner et al. ont donc compris qu'un autre invariant était nécessaire. L'invariant RLBL, contrairement au nombre de Chern, est défini dans les gaps du système et s'annule pour un hamiltonien statique (indépendant du temps). Il correspond à compter le nombre d'état dans un gap (avec un signe -1 pour une chiralité opposé) (voir Figure II.15-b). À première vue, il peut sembler difficile de voir quelle information supplémentaire porte l'invariant RLBL. En effet, il y a autant de gaps que de bandes dans le cas d'un système de Floquet ; en connaissant tous les nombres de Chern on pourrait donc en déduire tous les invariants RLBL et vice-versa. Cependant les nombres de Chern doivent vérifier une condition supplémentaire, leur somme sur toutes les bandes doit être nulle :  $\sum_n C^{(n)} = 0$ . Cette condition traduit le fait que lorsque tous les niveaux d'énergies sont occupés par un électron la conductivité s'annule car ils n'ont plus de place pour se mouvoir. Pour un système de  $N$  bandes, il n'y a donc que  $N - 1$  nombres de Chern indépendants. La connaissance de tous les invariants RLBL est équivalent à connaître tous les nombres de Chern de toutes les bandes plus un invariant RLBL dans un gap :  $\{R_n\} \Leftrightarrow \{C_n\} + R_i$ .

En pratique il existe une méthode numérique rapide et simple pour calculer les invariants de Rudner dans les gaps du papillon, donné par [117]. Il faut pour cela considérer le système avec des conditions aux bords périodiques et remarquer que le déterminant de l'opérateur de Floquet ou de marche quantique  $U(\Phi)$  est indépendant du flux. En effet, la dépendance en flux n'étant contenue que dans les termes de Peierls qui sont des termes hors-diagonaux

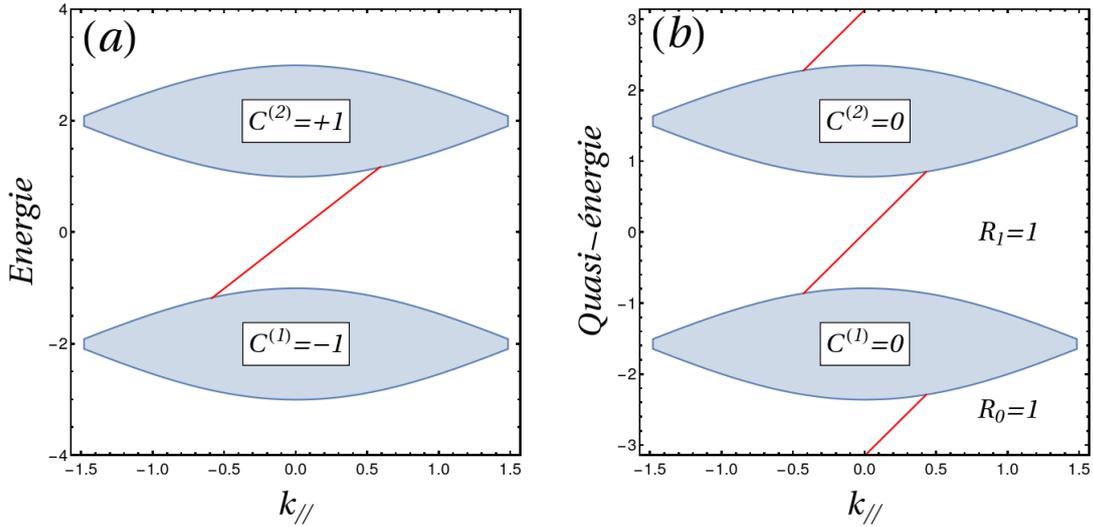


Fig. II.15 *Modèle simplifié illustrant la nécessité de l'invariant de RLBL. (a) : Relation de dispersion d'un modèle hamiltonien statique en temps, le nombre de Chern est directement relié aux états de bords. (b) : Relation de dispersion d'un système de Floquet ou d'une marche quantique. Le nombre de Chern ne permet pas de rendre compte de toute la topologie de ces systèmes. Il faut définir un nouvel invariant. Figures inspirées de [116].*

sur  $U$  et donc pour  $H_{\text{eff}}$  également, en utilisant la formule  $\det U(\Phi) = e^{-i\text{Tr}H_{\text{eff}}}$ , l'opération de trace passe donc à côté de ces termes. Ainsi, la somme des quasi-énergies ne peut varier que par pas de  $2\pi$ , ce qui arrive lorsqu'une quasi-énergie traverse la zone de Floquet  $\pm\pi$ . En déplaçant la coupure du logarithme complexe dans les gaps du papillon et en calculant la différence de la somme des quasi-énergies entre deux flux consécutifs autorisés, on en déduit le nombre d'états ayant traversé le gap entre ces deux flux :

$$R = \frac{1}{2\pi} \sum_j \varepsilon_j\left(\Phi + \frac{1}{N_x \cdot N_y}\right) - \varepsilon_j(\Phi) \quad (\text{II.13})$$

où la somme porte sur l'ensemble des quasi-énergies.

Sur la Figure II.16, on indexe donc les gaps des papillons de la marche quantique pour les valeurs de  $\theta = \pi/6, \pi/4$ .

## II.2.2 Papillons de la marche quantique pour la base tensorialisée

On rappelle que le protocole de la marche quantique utilisant un spin à 4 niveaux provenant du produit tensoriel des espaces de Hilbert associés à deux marcheurs 1D s'écrit comme  $U_{\text{carré}} = T_{\text{carré}} \cdot D_{\text{carré}}$  où  $D_{\text{carré}}$  est le dé utilisé sur chaque site du réseau carré et qui est une matrice de taille  $4 \times 4$  (voir équation I.15) provenant du produit tensoriel  $H_2(\theta) \otimes H_2(\pi/4)$  où  $H_2(\pi/4)$  est la porte de Hadamard et  $H_2(\theta)$  sa généralisation à un angle  $\theta$  quelconque. L'opérateur de translation déplace le marcheur quantique sur les sites situés en diagonale. Cependant, pour prendre en compte le terme de Peierls, on considérera que le marcheur se déplace sur les arêtes du réseau d'abord suivant la direction  $y$  puis suivant la direction  $x$  (voir Figure II.17).

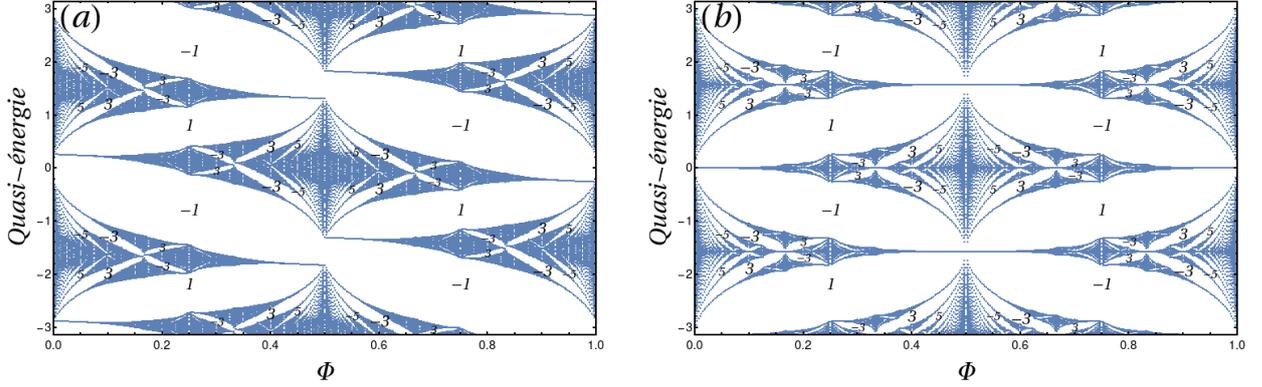


Fig. II.16 Papillons de la marche quantique à deux états internes indexés par l'invariant RLBL pour (a) :  $\theta = \pi/6$  et (b) :  $\theta = \pi/4$ . Seul les gaps les plus grands ont été indexés. Entre deux gaps successifs les invariants RLBL varient par pas de 2, le nombre de Chern de chaque bande est donc  $\pm 2$ .

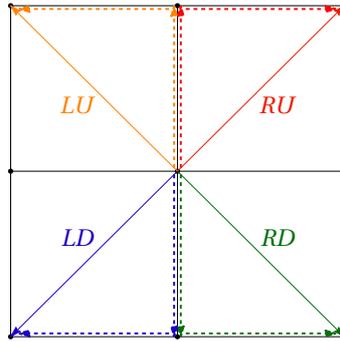


Fig. II.17 Prescription utilisée lors de la prise en compte des termes de Peierls. Le marcheur quantique allant en diagonale se déplace d'abord dans la direction  $y$  puis dans la direction  $x$ .

L'opérateur de translation prenant en compte le champ magnétique s'écrit alors dans la jauge de Landau :

$$T_{\text{carré}}(\Phi) = \sum_{l,m} e^{if_l} |l+1, m+1\rangle \langle l, m| \otimes |RU\rangle \langle RU| + e^{-if_l} |l+1, m-1\rangle \langle l, m| \otimes |RD\rangle \langle RD| \\ + e^{if_l} |l-1, m+1\rangle \langle l, m| \otimes |LU\rangle \langle LU| + e^{-if_l} |l-1, m-1\rangle \langle l, m| \otimes |LD\rangle \langle LD|$$

avec  $f_l = 2\pi\Phi l$ . On peut également dériver une équation de type Harper associée à cet opérateur de marche quantique sous champ magnétique :

$$e^{-i\varepsilon} A_l = \frac{1}{\sqrt{2}} (B_l \cdot A_{l+1} + C_l \cdot A_{l-1})$$

$$\text{avec } A_l = \begin{pmatrix} a_l^{RU} \\ a_l^{RD} \\ a_l^{LU} \\ a_l^{LD} \end{pmatrix} \text{ les fonctions de Bloch, } B_l(\theta) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cos \theta b_l^{LU} & \sin \theta b_l^{LU} & -\cos \theta b_l^{LU} & -\sin \theta b_l^{LU} \\ \sin \theta b_l^{LD} & -\cos \theta b_l^{LD} & -\sin \theta b_l^{LD} & \cos \theta b_l^{LD} \end{pmatrix}$$

$$\text{et } C_l(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta b_l^{RU} & \sin \theta b_l^{RU} & \cos \theta b_l^{RU} & \sin \theta b_l^{RU} \\ \sin \theta b_l^{RD} & -\cos \theta b_l^{RD} & \sin \theta b_l^{RD} & -\cos \theta b_l^{RD} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{où } b_l^{RU} = e^{i(-k_x - k_y + i f_{l-1})}, b_l^{RD} = e^{i(-k_x + k_y - f_{l-1})}, b_l^{LU} = e^{i(k_x - k_y + f_{l+1})} \text{ et } b_l^{LD} = e^{i(k_x + k_y - f_{l+1})}.$$

En prenant un flux rationnel  $\Phi = p/q$  avec  $p$  et  $q$  premiers entre eux le système à résoudre est de taille  $4q \times 4q$  :

$$e^{-i\varepsilon} \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ A_{q-2} \\ A_{q-1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0_{4 \times 4} & B_0 & 0_{4 \times 4} & 0_{4 \times 4} & \cdots & 0_{4 \times 4} & C_0 \\ C_1 & 0_{4 \times 4} & B_1 & 0_{4 \times 4} & \cdots & 0_{4 \times 4} & 0_{4 \times 4} \\ 0_{4 \times 4} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0_{4 \times 4} \\ 0_{4 \times 4} & 0_{4 \times 4} & \cdots & 0_{4 \times 4} & C_{q-2} & 0_{4 \times 4} & B_{q-2} \\ B_{q-1} & 0_{4 \times 4} & \cdots & 0_{4 \times 4} & 0_{4 \times 4} & C_{q-1} & 0_{4 \times 4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ A_{q-2} \\ A_{q-1} \end{pmatrix}$$

On trace alors Figure II.18 les papillons pour différents angles  $\theta = \pi/6, \pi/4, \pi/3$ . Au flux  $\Phi = p/q$ , le système possède  $4q$  bandes. L'analyse des symétries de ces papillons est similaire à celle de la marche quantique à deux niveaux de spin. Ils possèdent une symétrie de sous-réseau  $\varepsilon \leftrightarrow \pi + \varepsilon$ , une symétrie chirale  $\varepsilon \leftrightarrow -\varepsilon$  qui, cette fois, est valable pour n'importe quelle valeur d'angle  $\theta$ . On a également les mêmes symétries de flux  $(\Phi, \varepsilon) \leftrightarrow (-\Phi, -\varepsilon)$  et  $(\Phi, \varepsilon) \leftrightarrow (\Phi + 1/2, \varepsilon + \pi/2)$ . Toutes ces symétries sont détaillées dans l'Annexe A.

À  $\theta = \pi/4$ , pour les quasi-énergies  $\varepsilon = \pm\pi/2$ , à bas flux, des niveaux de Landau linéaires dans le flux apparaissent. Ils résultent des extrema des bandes aux relations de dispersion paraboliques à flux nul (voir Figure I.15). Lorsque l'extremum est un minimum, les niveaux de Landau sont croissants en fonction du flux, quand c'est un maximum ils sont décroissants.

À  $\theta = \pi/3$ , un gap s'ouvre entre deux bandes aux quasi-énergies  $\pm\pi/2$  (voir Figure I.15), les niveaux de Landau associés à chaque extremum de chaque bande s'écartent également. Lorsque  $\theta = \pi/6$ , une plage de quasi-énergie devient commune aux deux bandes, les niveaux de Landau se croisent dans le papillon sans se "voir" car leurs extrema correspondants sont situés à des quasi-moments  $\vec{k}$  différents dans la relation de dispersion.

Pour comprendre les pentes des niveaux de Landau qui apparaissent, on va d'abord effectuer un premier raisonnement naïf puis le raffiner par la suite. La première chose qu'il est naturel de faire pour les trouver est de développer la relation de dispersion autour des extrema paraboliques, pour obtenir la masse effective du système et avoir ainsi la fréquence cyclotron. Dans le cas présent la masse  $m = 1$ , la fréquence cyclotron prédite est  $\omega_c = 2\pi\Phi$  et les pentes des différents niveaux de Landau s'expriment simplement comme  $\pi(2n + 1)$

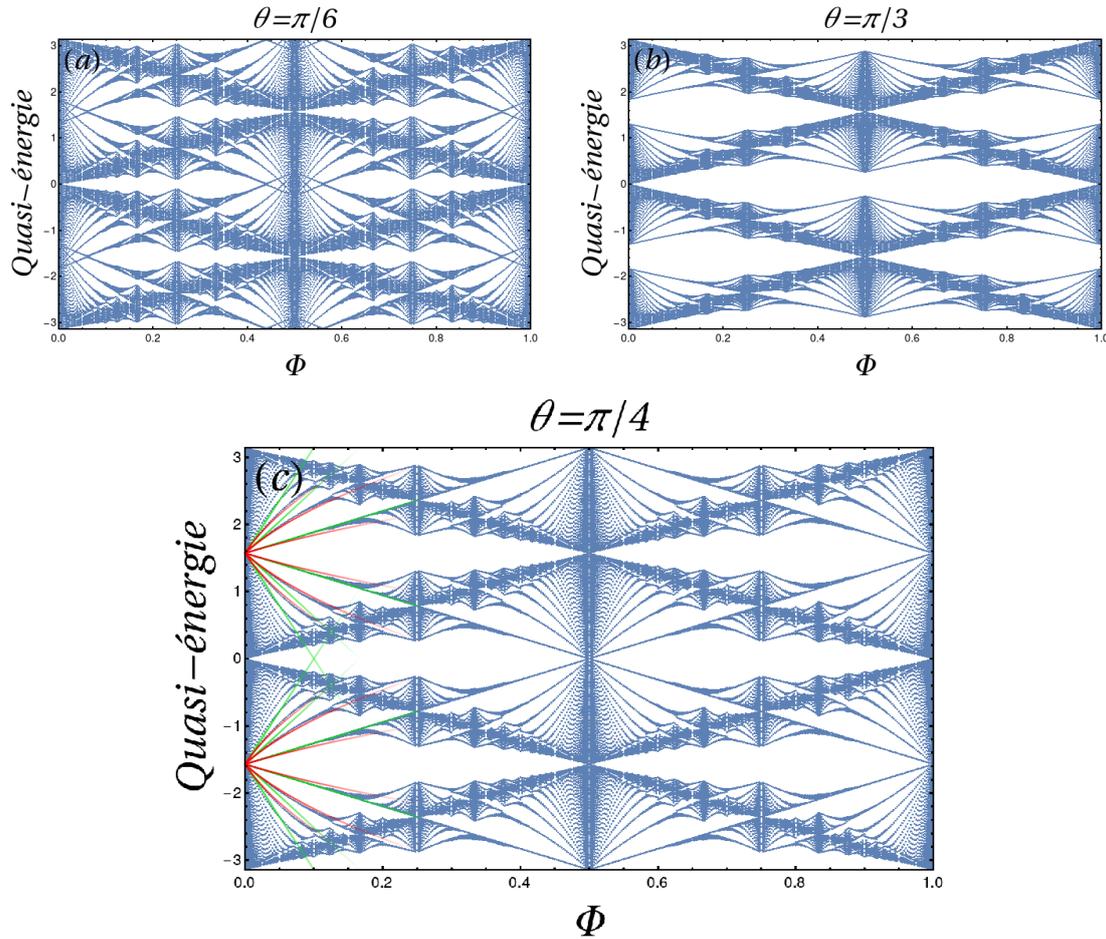


Fig. II.18 Papillon pour la marche quantique utilisant la base tensorialisée. On trace les quasi-énergies de l'opérateur d'évolution correspondant en fonction du flux  $\Phi$  pour un dé utilisant un angle de mélange (a) :  $\theta = \pi/6$ , (b) :  $\theta = \pi/3$ , (c) :  $\theta = \pi/4$ . Les courbes sont les niveaux de Landau prédits à bas flux, en rouge (resp. vert) en tenant (resp. en ne tenant pas) compte de l'effet de couplage inter-bande.

(voir courbes vertes Figure II.18-c). Cependant, on constate qu'à part le premier niveau, les pentes des niveaux supérieurs ne sont pas en accord avec celles du papillon. Pour obtenir une meilleure prédiction, il est nécessaire d'affiner le raisonnement. Développer directement les relations de dispersion, revient à se placer dans la base qui diagonalise l'hamiltonien à champ nul et négliger les termes de couplage inter-bande pouvant survenir à flux non-nul. Pour éviter cela, on considère l'hamiltonien effectif de l'opérateur de marche quantique dans la base tensorialisée ( $|RU\rangle, |RD\rangle, |LU\rangle, |LD\rangle$ ). En général pour une marche quantique utilisant un spin à 4 niveaux, il n'est pas simple de le trouver puisque l'espace interne est de dimension 4 on ne peut pas utiliser l'algèbre simple des matrices de Pauli. Dans ce cas précis, la marche 2D est le produit tensoriel de deux marches 1D utilisant un spin à deux niveaux. En se servant de l'hamiltonien effectif obtenu pour une chaîne 1D (équation (I.8)),

on a :

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}}^{2D} &= H_{\text{eff}}^{1D}(k_x) \otimes \mathbb{I}_2 + \mathbb{I}_2 \otimes H_{\text{eff}}^{1D}(k_y) \\
&= (\vec{\alpha}(k_x) \cdot \vec{\sigma}) \otimes \mathbb{I}_2 + \mathbb{I}_2 \otimes (\vec{\alpha}(k_y) \cdot \vec{\sigma}) \\
&= \vec{\beta}_1(k_x) \cdot \vec{\tau}_1 + \vec{\beta}_2(k_y) \cdot \vec{\tau}_2 \\
&\text{avec } \vec{\tau}_1 = \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2, \quad \vec{\tau}_2 = \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma}, \\
\vec{\beta}_1(k_x) &= \vec{\alpha}(k_x) \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \vec{\beta}_2(k_y) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \vec{\alpha}(k_y)
\end{aligned}$$

Afin de prendre en compte le champ magnétique on effectue la substitution  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{\Pi} = \mathbf{k} - q\mathbf{A}$ . Les opérateurs vectoriels  $\vec{\beta}_1(\Pi_x)$  et  $\vec{\beta}_2(\Pi_y)$  ne commutent plus. Pour trouver les valeurs propres de l'opérateur  $H_{\text{eff}}^{2D}(\Pi_x, \Pi_y)$ , on cherche un polynôme annulateur de cette matrice dont les valeurs propres seront incluses dans les racines de ce polynôme. On s'appuie sur l'algèbre des matrices de Pauli et on s'inspire de la preuve plus simple dans le cas de l'hamiltonien de Dirac où mettre au carré l'hamiltonien suffisait à trouver une matrice diagonale. Ici, en mettant l'hamiltonien au carré puis en soustrayant les termes proportionnels à l'identité et enfin en remettant au carré cette nouvelle matrice on obtient un polynôme annulateur de degré 4 :

$$\begin{aligned}
(H_{\text{eff}}^{2D})^2 &= \alpha^2(\Pi_x)\mathbb{I}_4 + \alpha^2(\Pi_y)\mathbb{I}_4 + \{\beta_1(\Pi_x), \beta_2(\Pi_y)\} \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 \\
\Leftrightarrow [(H_{\text{eff}}^{2D})^2 - (\alpha^2(\Pi_x) + \alpha^2(\Pi_y))\mathbb{I}_4]^2 &= \{\beta_1(\Pi_x), \beta_2(\Pi_y)\}^2 \mathbb{I}_4
\end{aligned}$$

avec  $\{\cdot, \cdot\}$  désignant l'anti-commutateur. Pour trouver les niveaux de Landau, on développe (à l'ordre 2 en  $\Pi_x$  et  $\Pi_y$ ) cet hamiltonien autour des points de la zone de Brillouin où se trouvent les extrema paraboliques  $(k_x, k_y) = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ . On remplace  $\Pi_x$ , et  $\Pi_y$  par les opérateurs d'échelle  $a = \frac{l_B(\Pi_x + i\Pi_y)}{\sqrt{2}}$  et  $a^\dagger = \frac{l_B(\Pi_x - i\Pi_y)}{\sqrt{2}}$ , l'approximation à l'ordre 2 revient à prendre en compte seulement les termes linéaires en champ. En chaque point de la zone de Brillouin où se situent les extrema paraboliques  $(k_x, k_y) = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$  2 des 4 racines du polynôme donnent les niveaux de Landau. Leur expression est :

$$\begin{aligned}
\varepsilon_n(\Phi) &\simeq \pm \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{1}{2} + 4(n + \frac{1}{2})\Phi + \frac{1}{2} \sqrt{1 + 16(n + \frac{1}{2})\Phi}} \\
\varepsilon_n(\Phi) &\simeq \mp \pi \pm \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{1}{2} + 4(n + \frac{1}{2})\Phi + \frac{1}{2} \sqrt{1 + 16(n + \frac{1}{2})\Phi}}
\end{aligned}$$

Ces niveaux sont tracés en rouge sur la Figure II.18-c. De manière surprenante, le premier niveau n'est pas aussi bien approximé que dans l'autre approche mais les niveaux supérieurs correspondent très bien à ceux du papillon. Dans cette nouvelle expression il n'est pas surprenant de trouver une dépendance en racine du flux. La relation de dispersion parabolique de la marche 1D à  $\theta = \pi/4$  n'est qu'une approximation à masse grande devant l'impulsion de la relation de dispersion relativiste. Par ailleurs, au premier ordre on retrouve bien les niveaux de Landau de la première méthode avec une dépendance en champ linéaire. L'approximation du raisonnement naïf revient aussi à négliger la non-commutativité des quasi-moments généralisés (ou des opérateurs créations et annihilations).

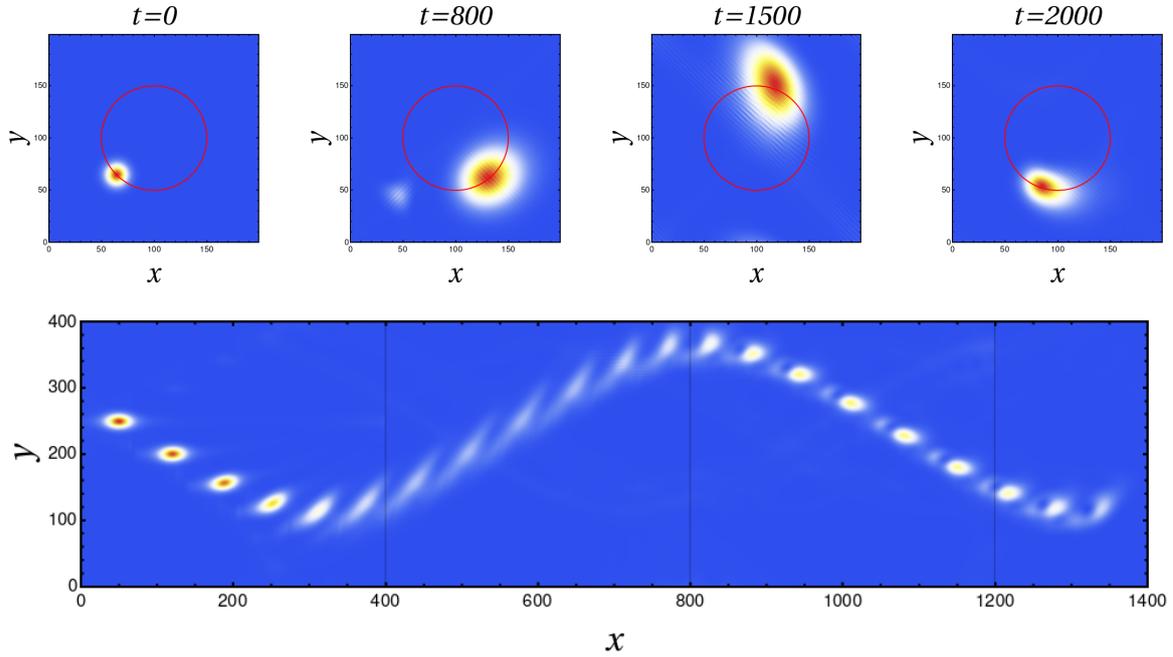


Fig. II.19 Évolution d'un paquet d'onde sous champ magnétique avec un flux  $\Phi = 1/1000$  pour une marche quantique à 4 niveaux de spin utilisant la base tensorialisée. Haut : Le dé utilisé est symétrique  $\theta = \pi/4$  et le paquet d'onde est préparé à une distance en impulsion  $|\delta k| = \pi/10$  du maximum de la bande verte (voir Figure I.15) en  $(k_x, k_y) = (\pi/2, -\pi/2)$ . L'orbite cyclotron classique tracée en rouge a un rayon  $r_c = 50$  et une période  $T_c = 1000$ . Bas : Le dé utilisé est asymétrique  $\theta = \pi/3$ , le paquet d'onde est préparé en milieu de bande autour de l'impulsion  $(k_x, k_y) = (0, 0.1)$  sur une iso-quasi-énergie ouverte. On trace sur la même Figure le paquet d'onde tous les 100 pas de temps. On a simulé l'évolution sur un système de taille  $400 \times 400$  aux conditions aux bords périodiques.

On peut également préparer un paquet d'onde autour du minimum d'une des 4 bandes afin qu'il décrive une orbite cyclotron (voir Figure II.19). Cette orbite est celle prédite par les équations classiques avec  $\omega_c = 2\pi\Phi$  et  $r_c = \sqrt{2E}/(2\pi\Phi)$ . Ici, l'approche semi-classique est aussi un moyen de négliger la non-commutativité des moments généralisés et donc la correction apportée aux niveaux de Landau. Cependant, sur la Figure II.19, on remarque également un autre paquet (notamment au pas de temps  $t = 800$ ) se déplaçant sur une autre orbite. Pourtant le paquet d'onde a bien été préparé sur une bande (en utilisant les vecteurs propres à flux nul). C'est une illustration de l'effet du couplage inter-bande à flux non nul.

En asymétrisant les directions  $x$  et  $y$  i.e.  $\theta \neq \pi/4$ , on peut préparer un paquet d'onde en haut de bande dont la trajectoire oscillera (en "zigzag") puisque les iso-quasi-énergies deviennent des lignes ouvertes oscillantes (voir Figure II.19).

On peut également indexer le papillon de cette marche quantique dans le cas symétrique i.e.  $\theta = \pi/4$  par l'invariant RLBL. Pour  $\theta \neq \pi/4$ , les invariants topologiques restent les mêmes que dans le cas symétrique car il n'y pas de fermeture de gap avec des points de contact inter-bandes aux niveaux des extrema. C'est la propriété de robustesse des invariants

topologiques. Ils ne changent pas sous déformation continue si le gap ne se ferme pas. Tout d'abord, on trace les papillons en conditions aux bords ouverts dans la direction  $x$  (et toujours en conditions aux bords périodiques selon  $y$ ). La prescription faite pour les conditions aux bords ouverts est représentée Figure II.20-a. Son papillon est tracé Figure II.20-b. On trace également le papillon en conditions aux bords périodiques avec des flux interdits Figure II.20-c et on indexe les gaps de ce papillon par l'invariant RLBL Figure II.20-d en utilisant la formule (II.13). L'invariant varie par pas de 2 entre deux gaps successifs, on en déduit que le nombre de Chern de chaque bande est de  $\pm 2$ .

### II.2.3 Papillon de la marche quantique pour la base naturelle

Enfin intéressons nous maintenant au cas de la marche quantique utilisant la base naturelle ( $|U\rangle, |R\rangle, |L\rangle, |D\rangle$ ) et un dé symétrique  $\theta = \pi/4$ . Nous avons vu dans le chapitre précédent que cela était équivalent (à une dilatation et rotation du réseau près) à définir une marche quantique utilisant la base tensorialisée ( $|RU\rangle, |RD\rangle, |LU\rangle, |LD\rangle$ ) et un dé  $D'(\pi/4)$  (équation (I.18)) où les deux dernières colonnes et lignes ont été échangées par rapport au dé de Hadamard  $D(\pi/4)$ . Il faut noter qu'en dilatant les arêtes du réseau d'un facteur  $\sqrt{2}$ , le flux par plaquette sera deux fois plus grand dans ce réseau dilaté que dans le réseau original. Pour comparer ces deux marches quantiques au même flux il faut donc diviser par deux la valeur du champ magnétique sur le réseau dilaté.

Lorsque l'on a introduit le champ magnétique, il a été nécessaire de donner une prescription sur la manière dont le marcheur quantique se déplaçait sur le réseau pour aller en diagonale. On a alors fait le choix d'un déplacement d'abord dans la direction  $y$  puis suivant la direction  $x$  (voir Figure II.17). Ici, si l'on veut continuer à représenter un marcheur quantique dans la base naturelle cette prescription n'est plus la bonne. En effet, prenons deux déplacements élémentaires dans la base naturelle. Dans un premier temps, le marcheur se déplace d'abord dans la direction  $y$  croissante ( $|U\rangle$ ) puis dans un second temps il revient sur ses pas en utilisant la même arête mais dans la direction opposée ( $|D\rangle$ ) (voir Figure II.21-a). Ce déplacement n'encerclé pas de plaquette. Maintenant faisons la même chose sur le réseau dilaté et tourné. La direction  $|U\rangle$  devient  $|RU\rangle$  et  $|D\rangle$  devient  $|LD\rangle$ . Dans un premier temps le marcheur se déplace suivant la direction  $y$  croissante puis  $x$  croissante, il arrive donc sur le site en diagonale en haut à droite. Dans un second temps on revient sur le site initial en se déplaçant d'abord dans la direction  $y$  décroissante puis  $x$  décroissante (si on utilise la prescription de la Figure II.17). Dans cet exemple, le marcheur est bien revenu sur le site initial mais a encerclé une plaquette durant ce déplacement (voir Figure II.21-b). Si l'on allume le champ magnétique, le marcheur prendra une phase d'Aharonov-Bohm, contrairement à celui utilisant la base naturelle. On dira alors dans le deuxième cas que les chemins ne sont pas retraçants car le marcheur ne revient pas sur ses pas. Pour imiter le marcheur de la base naturelle il faut donc utiliser une prescription retraçante. On peut alors autoriser le marcheur à se déplacer suivant la direction  $y$  puis  $x$  quand il s'agit de la direction  $|RU\rangle$  et  $|LU\rangle$  mais dans les directions  $|RD\rangle$  et  $|LD\rangle$  on se déplacera dans la direction  $x$  puis  $y$ . Pour faire la distinction on renommera les deux spins dont la prescription a changé respectivement  $|DR\rangle$  et  $|DL\rangle$  (voir Figure II.21-c).

Dans cette section, on va donc regarder les papillons de ces deux types de marches, celle utilisant la base ( $|RU\rangle, |RD\rangle, |LU\rangle, |LD\rangle$ ) et celle utilisant la nouvelle base ( $|RU\rangle, |DR\rangle, |LU\rangle, |DL\rangle$ ). Ces deux marches sont les mêmes à flux nul mais divergent lorsque l'on allume le champ.

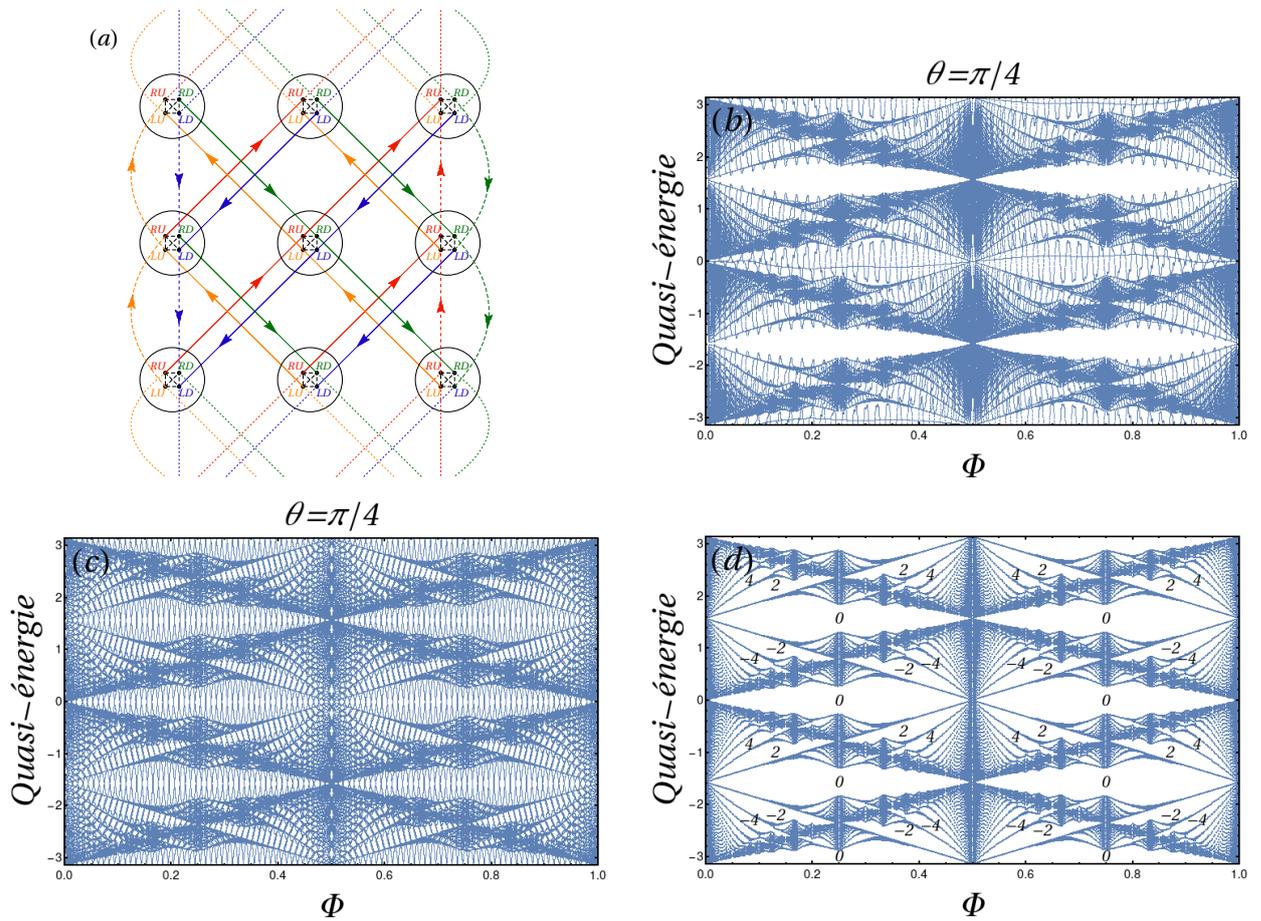


Fig. II.20 (a) : Prescription utilisée pour l'implémentation des conditions aux bords ouverts de la marche quantique utilisant un spin à 4D. (b) : Papillons pour cette marche quantique ( $\theta = \pi/4$ ) avec des conditions aux bords ouverts dans la direction  $x$ . La taille du système est  $N_x = 50$  et on trace dans la direction  $y$  que les quasi-moments  $k_y$  nuls. (c) : Papillon aux conditions aux bords périodiques avec des flux interdits. La taille du système est  $N_x = 10$  et  $N_y = 10$ . (d) : Papillon où les premiers gaps ont été indexés par l'invariant RLBL.

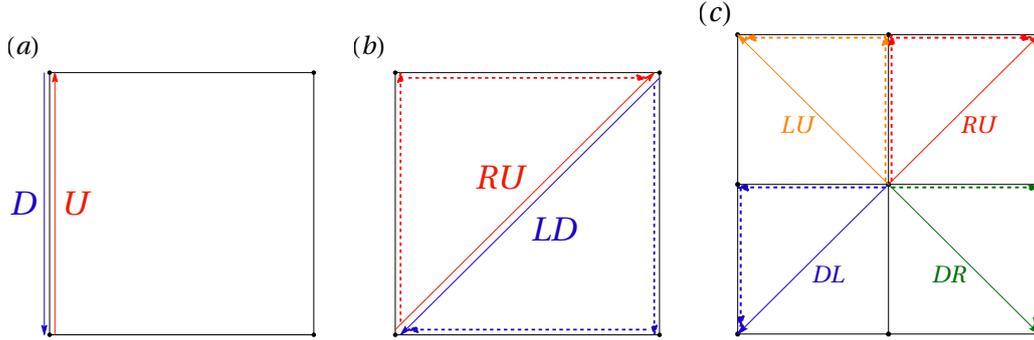


Fig. II.21 (a) : Aller-retour d'un marcheur quantique dans la base naturelle. Le déplacement est trivial, il n'y a pas de plaquette encerclée. (b) : Aller-retour d'un marcheur quantique dans la base tensorialisée. Une plaquette est alors encerclée. (c) : Prescription utilisée pour avoir des chemins retraçants.

Elles utilisent toutes les deux le dé  $D'(\pi/4)$ . Pour être complet et puisque l'on a étudié le dé  $D(\pi/4)$  dans la base  $(|RU\rangle, |RD\rangle, |LU\rangle, |LD\rangle)$  dans la section précédente, on regardera également la marche avec ce dé mais pour la nouvelle prescription  $(|RU\rangle, |DR\rangle, |LU\rangle, |DL\rangle)$ .

Les équations de Harper associées à chacune des ces 3 marches sont données en Annexe C. On trace leurs papillons Figure II.22. Ils possèdent la plupart des symétries déjà discutées pour les autres marches quantiques, la symétrie de sous-réseau, la symétrie chirale et la symétrie de flux  $(\Phi, \varepsilon) \leftrightarrow (-\Phi, -\varepsilon)$ . Cependant, pour les Figures II.22-a,c (celles utilisant la prescription  $(|RU\rangle, |DR\rangle, |LU\rangle, |DL\rangle)$ ), il n'y a plus la symétrie  $(\Phi, \varepsilon) \leftrightarrow (\Phi + 1/2, \varepsilon + \pi/2)$  mais une nouvelle symétrie apparaît  $(\Phi, \varepsilon) \leftrightarrow (\Phi + 1/2, \varepsilon)$ . Cette symétrie vient du fait que la prescription retraçante simule la base naturelle pour un flux  $\Phi$  deux fois plus grand. Regarder le papillon de la prescription retraçante à un flux  $\Phi$  est équivalent à regarder le papillon de la base naturelle mais à un flux  $2\Phi$ . Or, comme tous les papillons possèdent la symétrie  $\Phi \leftrightarrow \Phi + 1$ , celui de la prescription retraçante aura une symétrie  $\Phi \leftrightarrow \Phi + 1/2$ .

On observe à bas flux pour les Figures II.22-a,b des niveaux de Landau qui varient en puissance  $2/3$  du flux  $\Phi$ . Ces niveaux de Landau proviennent des points de contact semi-Dirac de la relation de dispersion à flux nul (voir Figure I.18). En effet, en développant autour de ces points de contact la relation de dispersion (équation (I.19)), on trouve des quasi-énergies linéaires dans la direction  $k_y$  et paraboliques dans la direction  $k_x$  :

$$\varepsilon \simeq \pm\pi/2 \pm k_y \pm k_x^2/2. \quad (\text{II.14})$$

Dans [62], la relation de dispersion est différente :  $\sqrt{p_y^2 + p_x^4/(4m^2)}$  et mène à des niveaux de Landau se comportant en  $\Phi^{2/3}$ . En effectuant la substitution  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}$ , les auteurs se ramènent à une équation d'oscillateur quartique 1D ( $V(x) \propto x^4$ ) en négligeant le terme non-commutatif  $[p_x, x^2] \propto \Phi x$ . La règle de quantification semi-classique de Bohr-Sommerfeld ( $\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \sqrt{E - V(x)} dx = \pi(n + 1/2)$ ) permet alors de trouver  $\varepsilon_n \propto ((n + 1/2)\Phi)^{2/3}$ .

Ici une procédure identique est réalisable pour la relation de dispersion (II.14). En prenant une jauge de Landau dirigée suivant  $x$  ( $\Pi_x = p_x + qBy$  et  $\Pi_y = p_y$ ) et en mettant au carré la nouvelle relation de dispersion sous champ, on se ramène également à une équation

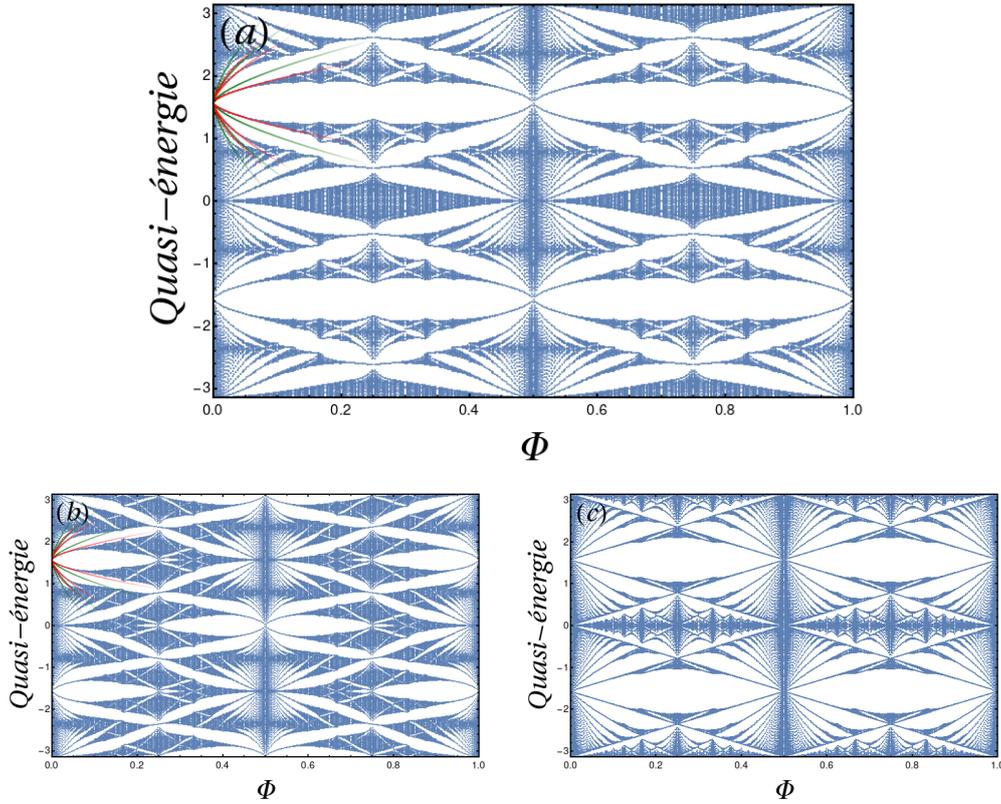


Fig. II.22 (a) : Papillon de la marche quantique utilisant la prescription retraçante et le dé  $D'(\pi/4)$  donc simulant la marche quantique dans la base naturelle mais avec un flux deux fois plus grand. Les courbes vertes sont les premiers niveaux de Landau  $\propto \Phi^{2/3}$  prédits pour un point de contact semi-Dirac. Les courbes rouges sont les niveaux de Landau  $\propto \Phi^{2/3}$  mais où les coefficients ont été ajusté par un fit numérique sur les 10 premiers flux. (b) : Papillon de la marche quantique utilisant la base tensorialisée et le dé  $D'(\pi/4)$ . (c) : Papillon de la marche quantique utilisant la porte de Hadamard tensorialisée  $D(\pi/4)$  avec la prescription retraçante.

d'oscillateur quartique. On trace en vert sur les Figures II.22-a,b les niveaux de Landau prédits qui ne correspondent pas à ceux du papillon et en rouge des courbes  $\propto \Phi^{2/3}$  mais dont le coefficient a été ajusté par un fit numérique sur les 10 premiers flux. La dépendance en puissance 2/3 semble donc être juste. Il peut y avoir plusieurs raisons pour lesquels les niveaux de Landau prédits diffèrent de ceux du papillon : la règle de quantification semi-classique n'est justifiée que pour des niveaux élevés ( $n \sim 10/10^2$ ). Une autre approximation faite durant le calcul a été de négliger le terme  $\{p_y, y^2\}$  où  $\{\cdot, \cdot\}$  désigne l'anti-commutateur. Enfin, la dernière raison est la même que celle évoquée dans la section précédente, les effets de couplage inter-bande peuvent venir ajouter des corrections aux niveaux de Landau théoriquement calculés sans couplage. Ici le calcul n'a pas été fait car il faudrait obtenir l'hamiltonien effectif, d'une marche quantique ayant un spin à 4 niveaux.

Pour le dernier papillon, on trouve bien les mêmes niveaux de Landau linéaires en flux que dans la section précédente puisque leurs relations de dispersion à flux nul coïncident.

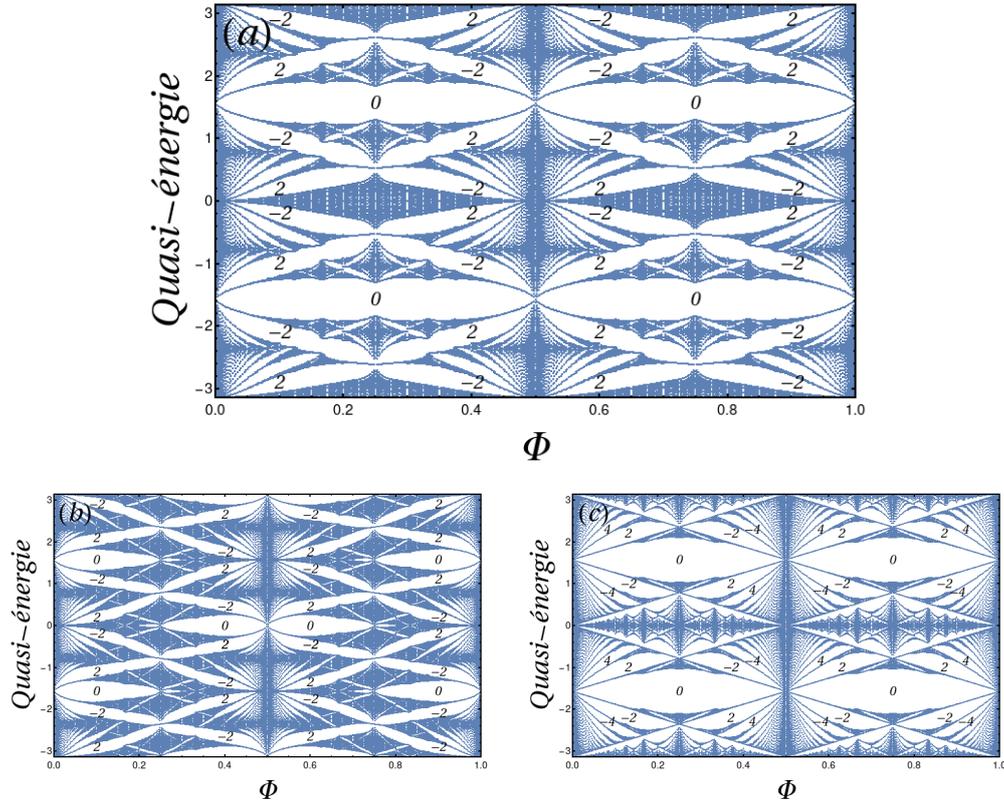


Fig. II.23 Papillons des 3 marches étudiées dans cette section, indexés par l'invariant RLBL pour les premiers gaps.

Les papillons pour des systèmes présentant des défauts sont tracés en Annexe C. On indexe Figure II.23 les gaps des papillons des trois marches quantiques présentées dans cette section par l'invariant RLBL. Le nombre de Chern de chaque bande est de 2.

## II.3 Conclusion

Cette étude sur les marches quantiques sous champ magnétique a permis de révéler les points communs et les différences qui pouvaient exister entre marches quantiques à temps discret et systèmes hamiltoniens. L'étude du spectre de ces systèmes en fonction du flux du champ magnétique a mis en évidence des structures auto-similaires semblables à celle du papillon de Hofstadter. Une étude des symétries en Annexe A a permis de comprendre leurs origines. Par ailleurs, il serait également intéressant de comprendre plus en détail le caractère fractal de ces papillons et sous quelles transformations il est possible de retrouver des parties du papillon global dans des sous-régions de celui-ci. Il est à noter que certains papillons présentent plus ou moins ce caractère auto-similaire. Notamment, lorsque la direction suivant  $y$  est asymétrisée par rapport à  $x$ , les papillons correspondants possèdent moins de sous-

structures et sont donc plus proches de modèles de bandes. Cette étude pourrait permettre de dégager un critère sur les conditions d'auto-similarité du papillon d'une marche. Le papillon de la marche à deux états internes a également été étudié plus rigoureusement dans le cas de flux irrationnels [118]. Les auteurs ont pu montrer que le spectre était singulier continu, un résultat semblable à celui des systèmes hamiltoniens [51].

La dernière grande différence qu'il me semble important de noter est celle des invariants topologiques. La structure périodique des quasi-énergies nous a contraint à trouver un nouvel invariant différent du nombre de Chern. Il est intimement relié au fait qu'il n'existe pas dans ces structures d'état fondamental (resp. d'état à énergie maximale) en-dessous (resp. au-dessus) duquel le gap serait forcément trivial. Ces systèmes possèdent alors un gap supplémentaire non trivial. Ces nouveaux isolants topologiques mènent à une nouvelle classification de ces matériaux propres aux marches quantiques [49, 50].

Il n'est pas clair non plus que l'invariant RLBL soit le bon invariant pour les marches quantiques. Certes, il permet de prendre en compte la périodicité des quasi-énergies et en présence de flux, un moyen opératoire a été trouvé pour calculer cet invariant pour les marches quantiques. Cependant, sa définition en volume nécessite un hamiltonien dépendant du temps pour qu'il soit non nul. Pour les marches quantiques, il y a une ambiguïté. D'un côté, on peut définir à partir de l'opérateur unitaire un hamiltonien effectif statique, indépendant du temps. De l'autre côté, expérimentalement, on utilise des systèmes de Floquet pour simuler les marches quantiques qui redonnent le même hamiltonien effectif au bout d'une certaine période.



# III – Cages d’Aharonov-Bohm

Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser à un phénomène d’extrême localisation de la particule sur certains types de réseaux sous champ magnétique. Ce phénomène est connu sous le nom de **cages d’Aharonov-Bohm**. Il a d’abord été découvert il y a 20 ans [79] pour des hamiltoniens de liaisons fortes. Plusieurs expériences ont pu tester cette prédiction que ce soit dans une hétérostructure semiconductrice GaAs/GaAlAs [119], des réseaux de fils supraconducteurs [120], des jonctions Josephson [121], des ions piégés [122], des gaz d’atomes froids [123] ou des réseaux photoniques [124]. La première partie de ce chapitre est dédiée à leur étude. Dans un second temps, nous proposerons une façon d’adapter ces cages d’Aharonov-Bohm (AB) aux marches quantiques.

## III.1 Systèmes Hamiltoniens

Les cages d’AB interviennent pour des réseaux présentant des structures en losange. Cette localisation de la particule est d’origine purement géométrique. Pour une valeur de champ magnétique spécifique, une particule sera contrainte de ne visiter qu’un nombre restreint de sites autour de son état initial à cause d’interférences destructives dues à la phase d’AB. Nous étudierons dans ce manuscrit deux réseaux présentant ce phénomène. D’abord la chaîne de boucles [125] puis le pavage  $\mathcal{T}_3$  [79] (ou le pavage Dé “*Dice tiling*”).

### III.1.1 Chaîne de boucles

La chaîne de boucles est composée de trois sites par maille. Un site appelé “hub” (moyeu en français) (site  $a$  sur la Figure III.1) et deux sites appelés “rims” (jante en français, par opposition à moyeu dans une roue) (sites  $b$  et  $c$ ). Le site hub est relié à quatre sites voisins rims et les sites rims sont reliés chacun à deux sites hubs. Chaque maille de la chaîne forme un losange (ou une plaquette). On prend la distance entre deux sites voisins  $a = 1$ . On ajoute un champ magnétique transverse de manière à ce que chaque plaquette de la chaîne soit traversée par un flux magnétique  $\Phi$  en unité du quantum de flux  $\Phi_0 = h/q$  défini dans le chapitre précédent. Pour prendre en compte ce champ magnétique il faut que le parcours d’une particule autour de chacun des losanges modifie sa fonction par la phase d’AB correspondante :  $e^{2i\pi\Phi}$ . Une jauge très simple permet de faire ce travail : multiplier une des quatre arêtes de chaque losange par cette phase (voir Figure III.1). Pour ce système, la substitution de Peierls mentionnée ne brise pas l’invariance par translation et le système conserve une structure de bande en présence du flux  $\Phi$ .

En utilisant le théorème de Bloch, on se ramène à une matrice de taille  $3 \times 3$  indexée par

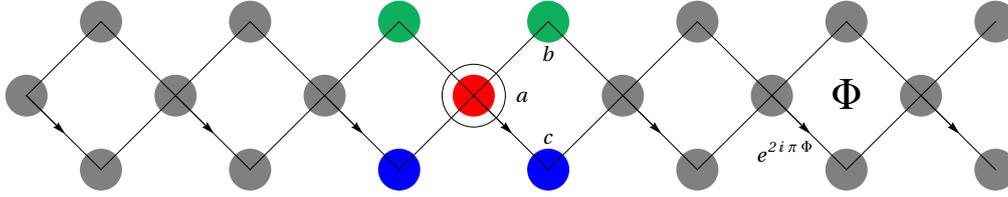


Fig. III.1 Portion de la chaîne de boucles avec 7 mailles représentées. Les sites hubs sont les sites  $a$  centraux à 4 voisins et les sites rims sont les sites  $b$  (en haut) et  $c$  (en bas) à 2 voisins. Un flux  $\Phi$  traverse chaque plaquette, et la substitution de Peierls correspondante est prise en compte par les arêtes fléchées avec une phase  $e^{2i\pi\Phi}$  prise lorsque que l'on parcourt l'arête dans le sens de la flèche. Pour un état initial localisé sur le site rouge encerclé, les sites atteignables par la particule lorsque on est à la condition cageante  $\Phi_c = 1/2$  sont les sites coloriés en rouge, bleu et vert.

les quasi-moments  $k$  et le flux  $\Phi$  à diagonaliser :

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{boucles}}(k, \Phi) &= (1 + e^{ik}) |b\rangle \langle a| + (e^{2i\pi\Phi} + e^{ik}) |c\rangle \langle a| + \text{h.c.} \text{ où le paramètre de saut } t = 1 \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 + e^{-ik} & e^{-2i\pi\Phi} + e^{-ik} \\ 1 + e^{ik} & 0 & 0 \\ e^{2i\pi\Phi} + e^{ik} & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ où } |a\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |b\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |c\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Le spectre est alors composé de 3 bandes d'énergie  $E(k, \Phi) = 0, \pm 2\sqrt{1 + \cos k \cos \pi\Phi}$ . Il est tracé Figure III.2 en fonction du flux pour toutes valeurs de  $k \in [-\pi, \pi]$ . Lorsque  $\Phi \neq 1/2$ , on a deux bandes dépendantes de  $k$  dont les états propres associés sont des ondes planes délocalisées sur la chaîne. La troisième bande à énergie nulle est dégénérée et contient un tiers des états. On peut trouver des combinaisons linéaires dans ce sous-espace dégénéré où chaque état propre est centré autour d'un site hub et dont l'extension est limitée aux quatre sites rims voisins (voir Figure III.3-a) : ce sont les états d'extension minimale. Lorsque  $\Phi = 1/2$ , le spectre dégénère en 3 valeurs distinctes  $E(k, 1/2) = 0, \pm 2$  indépendantes des quasi-moments (on a alors des bandes plates dans la direction  $k$ ). Ici aussi, une combinaison linéaire de vecteurs propres dans l'espace dégénéré de chaque bande plate d'énergie non nulle donne une extension minimale également limitée à un site hub et ses quatre sites voisins rims (voir Figure III.3-b).

Au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ , tous les états propres peuvent donc être construits de manière à ce qu'ils soient de support fini (amplitude de probabilité non nulle sur une région de taille finie). Une particule initialement localisée est donc confinée dans une région de taille finie. Un autre moyen de comprendre ce phénomène est de calculer les puissances successives de l'hamiltonien afin d'en déduire l'opérateur d'évolution  $U = e^{-iH} = \sum_n (-i)^n \frac{H^n}{n!}$  avec  $\hbar = 1$ . Initialement la particule se trouve sur un site  $a$ . Lorsque l'on applique une première fois l'hamiltonien, la particule se retrouve sur les sites rims voisins avec une amplitude de probabilité de 1 pour 3 sites et une amplitude  $-1$  pour le site dont le lien avec le site hub initial porte le terme de Peierls (sur la Figure III.1 c'est le site  $c$  situé à droite). En appliquant une seconde fois l'hamiltonien, la particule arrivera sur les 3 sites hubs environnants dont celui

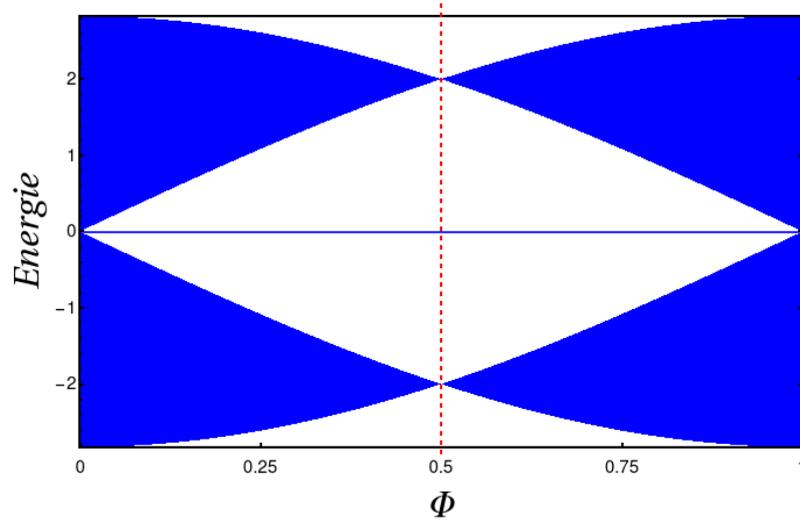


Fig. III.2 Spectre de la chaîne de boucles représenté en fonction du flux  $\Phi \in [0, 1[$ , pour des quasi-moments  $k \in [-\pi, \pi[$ . Les 3 bandes ont pour expression  $E(k, \Phi) = 0, \pm 2\sqrt{1 + \cos k \cos \pi\Phi}$ . Le flux critique est indiqué par un trait pointillé rouge. On y observe un pincement des énergies, signature de la présence des cages.

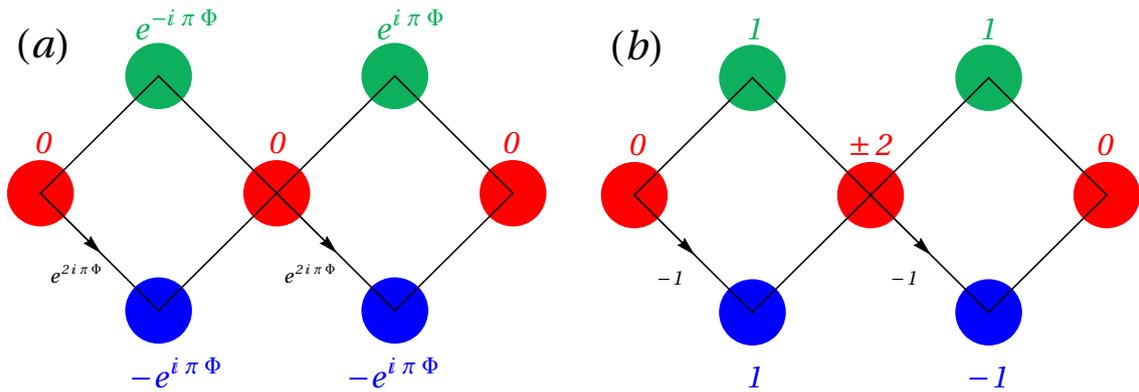


Fig. III.3 États propres (non normalisés) d'extension minimale de la chaîne de boucles (a) : pour la bande plate à énergie nulle quelque soit le flux. (b) : Au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ , à l'énergie  $\pm 2$ . Les nombres indiquent les amplitudes de probabilité sur les sites correspondants.

du milieu est le site original. L'amplitude de probabilité sur les deux sites hubs extrêmes s'annule puisque l'on somme l'amplitude de probabilité passée par le site  $b$  (+1) avec l'amplitude de probabilité passée par le site  $c$  (-1). La particule se retrouve entièrement sur le site initial. L'hamiltonien mis au carré et restreint au site hub se trouve donc être l'opérateur identité. Une algèbre très simple permet de calculer l'opérateur d'évolution restreint au site hub :  $U|_a = \cos t\mathbb{I} - i \sin tH|_a$ . Toute la dynamique de la particule est donc restreint à ces 5 sites discutés (voir sites coloriés sur Figure III.1). En partant d'un site rim, en appliquant une première fois l'hamiltonien, la particule se retrouve sur deux sites hubs. En reprenant la discussion pour chacun de ces deux sites on retrouve une dynamique également confinée. Une dernière façon de prouver la présence des cages est d'utiliser la méthode d'Arnoldi [126]. Cela consiste d'appliquer à chaque étape l'hamiltonien sur l'état précédemment obtenu puis à lui retirer son recouvrement avec les états déjà visités. L'hamiltonien exprimé dans cette nouvelle base que l'on vient de construire est une matrice triangulaire supérieure plus sa sous-diagonale non nulle (forme de Hessenberg).

$$b_{n+1} |n+1\rangle = H |n\rangle - \sum_{i=0}^n \langle i | H |n\rangle |i\rangle$$

où les  $b_n$  sont les normes des états obtenus (car  $|n\rangle$  sont des états normalisés). En particulier, on commencera avec un état initial  $b_0 |0\rangle$  normalisé donc  $b_0 = 1$ .

Dans le cas d'un hamiltonien (ou d'un opérateur hermitien), cette méthode se réduit à l'algorithme de Lanczos [127]. La méthode se simplifie puisque l'opérateur est hermitien, donc dans cette nouvelle base il est tridiagonal. Dans notre cas, il n'y a pas de saut sur site et la chaîne de boucles (ainsi que le  $\mathcal{T}_3$  que l'on introduit dans la prochaine sous-section) sont bipartis (ils ne contiennent que des boucles de longueur paire), la diagonale est nulle et les  $b_i$  peuvent être choisis réels (ils proviennent de la normalisation des états) donc l'équation se réduit à :

$$b_{n+1} |n+1\rangle = H |n\rangle - b_n |n-1\rangle$$

On part d'un état initialement localisé. Si l'algorithme se termine i.e. l'état obtenu est l'état 0, alors le nombre de sites visités est fini, la particule est confinée. Dans le cas de la chaîne de boucles avec un site initial hub, l'algorithme se termine au bout de deux étapes pour  $\Phi = 1/2$ ,  $b_0 = 1 \rightarrow b_1 = 2 \rightarrow b_2 = \sqrt{2} \cos \pi\Phi$ .

Au flux critique, les bandes sont plates (indépendantes du quasi-moment  $k$ ), la vitesse de groupe d'un paquet d'onde construit sur de telles bandes est nulle. Il n'y a pas de transport, c'est l'effet des cages d'AB.

### III.1.2 Pavage $\mathcal{T}_3$

Le pavage  $\mathcal{T}_3$  peut être vu comme une généralisation 2D de la chaîne de boucles dans le sens où l'on retrouve cette structure en losange pavant, maintenant le plan et jouant un rôle primordial dans l'obtention des cages. La maille primitive est également constituée de 3 sites, 1 hub ayant cette fois-ci 6 voisins rims et 2 rims ayant 3 voisins hubs (voir Figure III.4-a). Sur le pavage  $\mathcal{T}_3$ , on ne peut pas choisir de jauge qui préserve la périodicité de la maille pour n'importe quel flux. En traçant les énergies en fonction du flux, on obtient alors un papillon avec une structure fractale [79] plutôt qu'une structure à 3 bandes (voir Figure III.5).

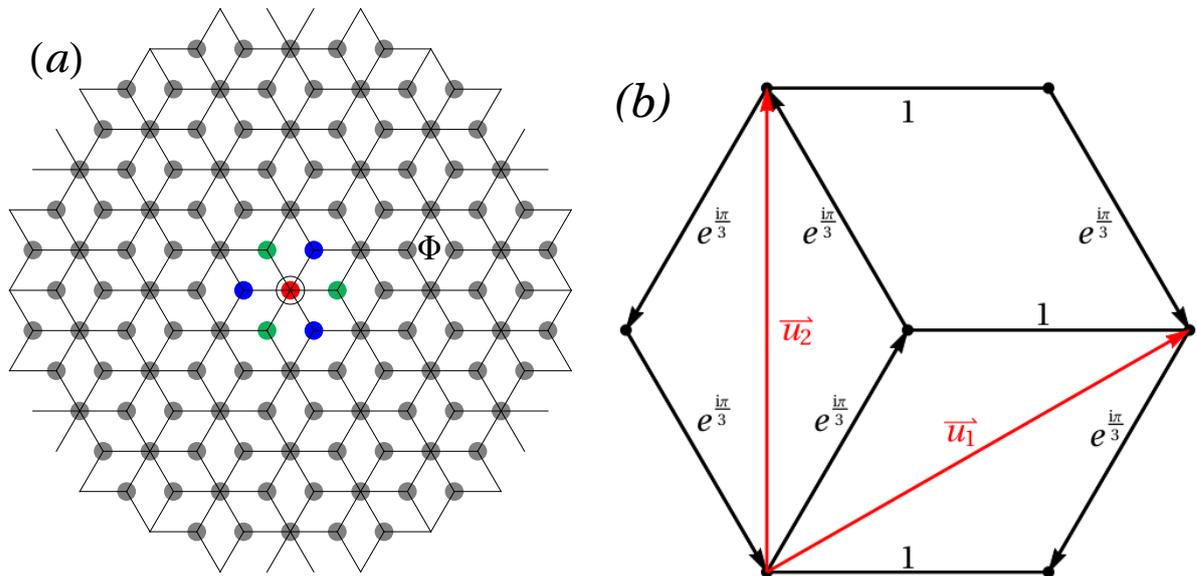


Fig. III.4 (a) : Portion du pavage  $\mathcal{T}_3$  avec en couleur la taille de la cage au flux  $\Phi = 1/2$  pour un état initial sur le site encerclé. Ici on ne représente pas les termes de Peierls. Chaque plaquette est traversée par un flux  $\Phi$ . (b) : Un exemple de la jauge périodique pour le flux  $\Phi = -1/3$ .

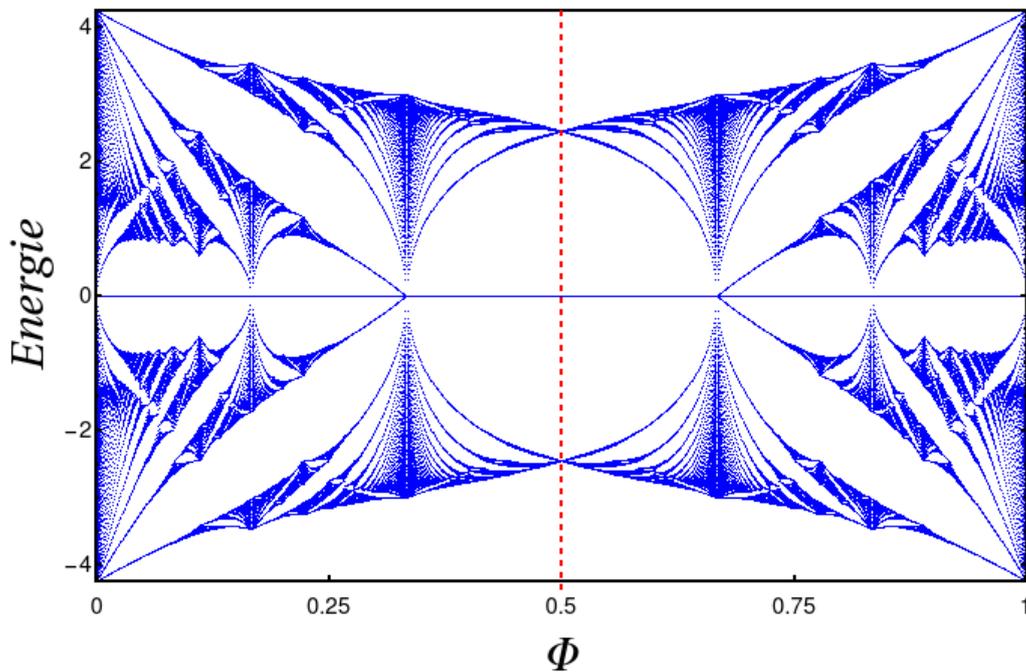


Fig. III.5 Papillon du pavage  $\mathcal{T}_3$ . On trace en pointillé rouge le flux critique  $\Phi_c = 1/2$ .

On peut de la même manière que sur le réseau carré, se ramener à une équation 1D effective : une équation de Harper. Ici, en choisissant la jauge de Landau, et en se restreignant aux sites hub, on obtient :

$$(E_{k_y}^2 - 6)a_{k_y}^n = 2 \cos \pi \Phi \left[ \cos \left( 3\pi \Phi (n + 1/2) + k_y \sqrt{3}/2 \right) a_{k_y}^{n+1} + \cos \left( 3\pi \Phi (n - 1/2) + k_y \sqrt{3}/2 \right) a_{k_y}^{n-1} + 2 \cos \left( 6\pi \Phi n + k_y \sqrt{3} \right) a_{k_y}^n \right]$$

La bande d'énergie nulle est invisible lorsque l'on calcule l'équation de Harper restreint aux sites hubs pourtant elle contient un tiers des états. Cela signifie qu'elle ne vit que sur les sites rims (comme celle de la chaîne de boucles). En utilisant la symétrie du papillon  $\Phi \leftrightarrow 1 - \Phi$ , au flux  $\Phi = p/q$  avec  $p$  et  $q$  premiers entre eux et  $q \notin 3\mathbb{N}$ , l'équation de Harper est un système clos après translation de  $q$  mailles suivant la direction  $x$ , elle engendre donc  $2q$  bandes (sur le papillon en comptant la bande à énergie nulle, il y a donc  $2q + 1$  bandes). Dans le cas particulier  $\Phi = 1/2 = 1 - \Phi$ , on a seulement  $q = 2$  bandes hors de l'énergie nulle. Lorsque  $q$  est un multiple de 3, il est possible de trouver une jauge dont la périodicité est  $q/3$ . En particulier aux flux  $1/3$  et  $2/3$ , la maille magnétique est de même longueur que la maille du réseau (voir Figure III.4-b). Le système présente à ces flux seulement  $2q/3 + 1$  bandes.

Au flux  $\Phi = 1/2$ , le spectre dégénère en 3 énergies distinctes, signature des cages. En partant d'un site hub (site rouge encadré sur la Figure III.4-a), la fonction d'onde passe soit par les sites  $b$  (sites verts) soit par les sites  $c$  (sites bleus) de chaque losange et interfère destructivement avec elle-même aux sites  $a$  voisins. L'algorithme de Lanczos donne dans ce cas  $b_0 = 1 \rightarrow b_1 = \sqrt{6} \rightarrow b_2 = 2 \cos \pi \Phi$  qui s'annule bien à  $\Phi = 1/2$ .

## III.2 Marches quantiques sur la chaîne de boucles et le pavage $\mathcal{T}_3$

### III.2.1 Protocoles pour marches quantiques

Le but de cette section est de voir si l'on peut trouver des conditions, pour les marches quantiques, qui donneraient lieu à des phénomènes équivalents à ceux des cages d'AB trouvés pour des systèmes de liaisons fortes. L'analyse est tirée de l'article [128]. Dans ces réseaux, il existe deux types de site : hub et rim avec des connectivités différentes. Les sites hubs (sites  $a$ ) ont 4 voisins pour la chaîne de boucles et 6 pour pour le pavage  $\mathcal{T}_3$  tandis que les sites rims (site  $b$  et  $c$ ) ont 2 voisins dans la chaîne de boucles et 3 pour le pavage  $\mathcal{T}_3$ . Puisque l'espace interne code pour la direction de la marche, par exemple, dans le cas 1D un spin  $1/2$  est utilisé pour spécifier le long de quelle direction bouger, on utilisera un espace interne de dimension égale au nombre de voisins de chaque site. Pour la chaîne de boucles, chaque cellule unité aura donc un espace interne de dimension 8 ( $= 4 + 2 + 2$ ) et pour le pavage  $\mathcal{T}_3$  de dimension 12 ( $= 6 + 3 + 3$ ). En suivant la référence [129] (et les références citées à l'intérieur), il est plus simple de considérer un opérateur de translation  $T$  hermitique liant les états internes deux à deux (voir Figures III.7 et III.12). L'opérateur de translation  $T$  est donc une somme de termes de saut entre deux états associés à une arête (un état à chaque extrémité de l'arête).  $T$  est donc hermitique et unitaire,  $T^2 = 1$ . L'opérateur  $C_s$  mélange les états internes de chaque site  $s = a, b, c$ . L'opération de dé est la somme directe des dés  $C_a, C_b$  et  $C_c$ . Il peut être hermitique mais ne commute généralement pas avec  $T$ , menant donc à un opérateur de marche quantique non trivial.

On définit donc quatre types de dés de taille  $n \times n$  associés à chaque site de connectivité  $n = 2, 3, 4, 6$ . Les travaux précédents sur les marches quantiques se sont intéressés principalement à trois types de dés [53] : le dé de Hadamard  $H_n$  défini pour des tailles  $n = 2^m$ , le dé de Grover  $G_n$  et la transformée de Fourier discrète  $D_n$  qui peuvent être construits pour n'importe quelle taille de matrice  $n$ . Nous avons essayé des dés de type  $D_n$ , et n'avons pas trouvé de phénomènes de cages. Dans la suite nous nous limiterons au dé de Grover et Hadamard. Le dé de Grover s'écrit  $G_n = (2/n)\mathbf{1}_n - \mathbb{I}_n$ , avec  $\mathbf{1}_n$  la matrice de taille  $n \times n$  pleine de 1 et  $\mathbb{I}_n$  la matrice identité.

Pour les sites rims de la chaîne de boucles, on utilise une matrice unitaire générique. Dans ce chapitre, on adopte une paramétrisation différente de l'équation (I.1) du premier chapitre :

$$U_2(\theta, \varphi, \omega, \beta) = \begin{pmatrix} \cos \theta e^{i\beta} & -\sin \theta e^{i(\varphi+\omega)} \\ \sin \theta e^{-i\omega} & \cos \theta e^{i(\varphi-\beta)} \end{pmatrix}$$

Elle permet de relier simplement la porte de Hadamard  $H_2 = U_2(\pi/4, \pi, 0, 0)$  à la rotation  $SO(2)$  d'angle  $\pi/4$ ,  $U_2(\pi/4, 0, 0, 0)$  via une simple phase  $\varphi$ . Pour  $n = 3$ , on utilise une rotation  $SO(3)$   $R_3(\alpha, \gamma)$ , d'angle  $\alpha$  autour du vecteur unité 3D  $\vec{v} = (\frac{\cos \gamma}{\sqrt{2}}, \sin \gamma, \frac{\cos \gamma}{\sqrt{2}})$ . On retrouve le dé  $G_3$  lorsque  $(\alpha, \gamma) = (\pi, \sin^{-1}(1/\sqrt{3}))$ . Pour  $n = 4$ , on utilise soit le dé de Hadamard  $H_4 = H_2 \otimes H_2$  ou bien  $G_4$ , et enfin  $G_6$  est utilisé pour  $n = 6$ .

Ici, les conventions pour les représentations matricielles des différents dés sont explicitées sur la Figure III.6.

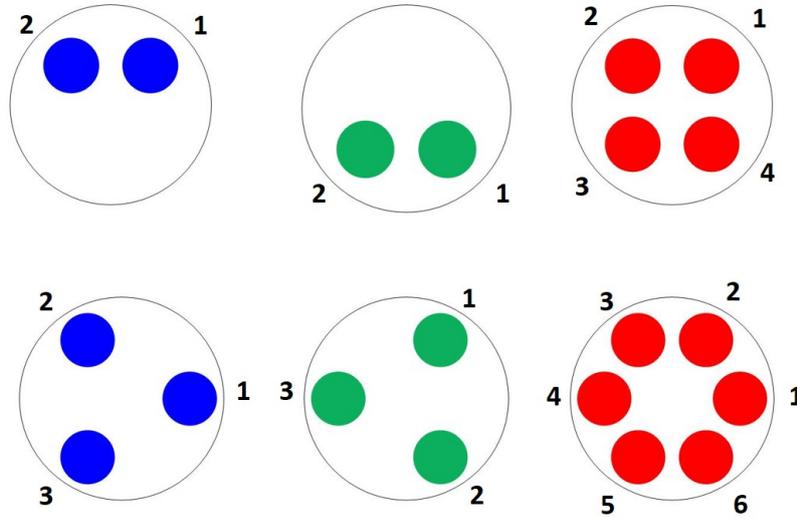


Fig. III.6 Convention utilisée pour la représentation matricielle des états internes. Haut : chaîne de boucles avec les sites à deux voisins (rims, sites  $b, c$ ) et ceux à quatre voisins (hubs, sites  $a$ ). Bas : Pavage  $\mathcal{T}_3$  avec les sites à trois voisins (rims, sites  $b, c$ ) et ceux à six voisins (hubs, sites  $a$ ).

Sur la chaîne de boucles, l'état interne de droite (resp. gauche) des sites  $b$  et  $c$  correspond au premier (resp. second) vecteur de la représentation matricielle de  $U_2(\alpha, \varphi, \omega, \beta)$  :  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

(resp.  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ). Pour les sites  $a$ , le premier vecteur est l'état en haut à droite du site puis on tourne dans le sens trigonométrique pour avoir l'ordre des autres états. Par exemple un marcheur quantique localisé sur l'état interne situé en bas à gauche (indiqué par le nombre 3 en haut de la Figure III.6) représente le vecteur  $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ . Ensuite l'application de la matrice

de Hadamard ou de Grover définit l'action du dé. On procède de manière similaire pour les représentations matricielles des sites du pavage  $\mathcal{T}_3$ .

L'opérateur de translation s'écrit

$$T = \sum_{\langle(i,j),(i',j')\rangle} |i,j\rangle \langle i',j'| + \text{h.c.},$$

avec  $i$  et  $i'$  des sites voisins et  $j$  et  $j'$  les deux côtés opposés d'une arête entre ces deux sites. Le champ magnétique  $B = |\nabla \times \mathbf{A}|$  intervient via la substitution de Peierls i.e. chaque terme de saut est multiplié par  $e^{i\frac{2\pi}{\Phi_0} \int_i^{i'} \mathbf{dl} \cdot \mathbf{A}}$  où  $\mathbf{A}$  est le potentiel vecteur et  $\Phi_0 = h/q$  est le quantum de flux.

### III.2.2 Marches quantiques magnétiques sur la chaîne de boucles

#### a) Spectres

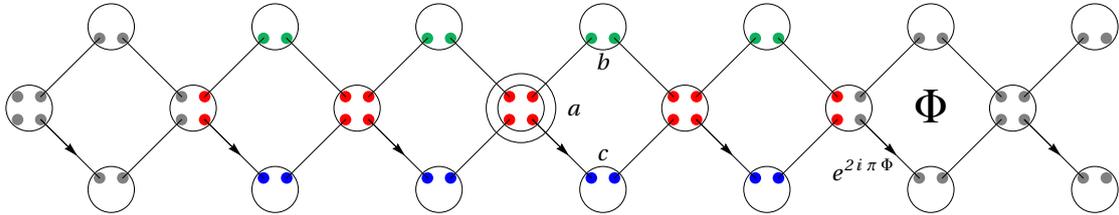


Fig. III.7 Représentation d'une portion de la chaîne de boucles avec les états internes. Les états internes coloriés sont ceux atteints par un état initialement localisé sur le site du milieu encerclé (dans une configuration de spin générique).

Comme vu précédemment dans les systèmes hamiltoniens, il est possible de trouver une jauge qui préserve la périodicité de la maille de la chaîne de boucles, en multipliant le terme de saut associé à une des 4 arêtes de la cellule unité par  $e^{2i\pi\Phi}$  (ici, l'arête connectant le site  $a$  au site  $c$  de droite, voir Figure III.7). En utilisant l'invariance par translation, il est possible de diagonaliser l'opérateur de marche quantique  $W$  en blocs de taille  $8 \times 8$  dépendants de  $k$  où  $k$  est un vecteur d'onde dans la zone de Brillouin. La chaîne de boucles est un graphe biparti. Ainsi, la base de l'espace de Hilbert est l'union des 2 sous-parties  $\mathcal{B}_a$  et  $\mathcal{B}_{b,c}$  et l'action de l'opérateur unitaire  $W$  est bipartite : il envoie les composantes de  $\mathcal{B}_a$  sur les composantes de  $\mathcal{B}_{b,c}$  et vice-versa.  $W(k)$  est donc une matrice de taille  $8 \times 8$  avec des sous-blocs de taille  $4 \times 4$  sur la diagonale nuls. Ainsi,  $W^2$  est fait de blocs diagonaux de taille  $4 \times 4$  avec pour

valeurs propres  $e^{iE(k)}$ . Ainsi, les valeurs propres de  $W$  sont  $e^{i\epsilon(k)}$ , avec  $\epsilon(k) = E(k)/2$  et  $E(k)/2 + \pi$  puisque le système possède la symétrie de sous réseau. Cela implique que les 2 blocs diagonaux de  $W^2$  sont isospectraux, ce que l'on montre maintenant. Supposons que  $|\psi\rangle = |\psi_a\rangle + |\psi_{b,c}\rangle$  est un vecteur propre de  $W$  avec pour valeur propre  $e^{i\epsilon}$  avec  $|\psi_a\rangle$  (resp.  $|\psi_{b,c}\rangle$ ) étant la composante de  $|\psi\rangle$  dans  $\mathcal{B}_a$  (resp.  $\mathcal{B}_{b,c}$ ).  $|\psi\rangle$  est également un vecteur propre de  $W^2$  avec pour valeur propre  $e^{2i\epsilon}$ . Chacun des sous-blocs diagonaux de  $W^2$  vivant soit sur  $\mathcal{B}_a$  ou  $\mathcal{B}_{b,c}$ , a donc un vecteur propre  $|\psi_a\rangle$  ou  $|\psi_{b,c}\rangle$  ayant pour valeur propre  $e^{2i\epsilon}$ ; les deux blocs sont donc isospectraux.

On peut se donner la possibilité d'utiliser deux dés différents pour les sites  $b$  et  $c$ . Par exemple, avec  $C_a = G_4$ ,  $C_b = U_2(\theta, \varphi, 0, \beta)$  et  $C_c = U_2(\theta, \varphi, \omega, \beta)$ , on a les quasi-énergies  $\epsilon(k)$ , menant à 4 bandes indépendantes de  $\beta$  et 4 bandes plates  $\epsilon^{bp}$  :

$$\epsilon(k) = \frac{\varphi + \pi}{4} \pm \frac{1}{2} \cos^{-1} \left[ \sin \theta \cos \left( \pi\Phi - \frac{\omega}{2} \right) \cos \left( \pi\Phi - \frac{\omega}{2} + k + \frac{\pi - \varphi}{2} \right) \right] \pm \frac{\pi}{2} \quad (\text{III.1})$$

$$\epsilon^{bp} = \pm \frac{\pi}{2} + \frac{\varphi}{4} \pm \frac{1}{2} \cos^{-1} (\cos(\beta - \varphi/2) \cos \theta). \quad (\text{III.2})$$

Les quasi-énergies en fonction du flux exhibent différentes symétries : deux translations,  $\Phi \longleftrightarrow 1 + \Phi$  (due à la substitution de Peierls) et  $\epsilon \longleftrightarrow \epsilon + \pi$  (due à la structure bipartite du graphe, voir Annexe A.1) et deux miroirs  $\Phi \longleftrightarrow -\Phi + \omega/\pi$  (avec  $k \longleftrightarrow -k - \pi + \varphi$ ) et  $\epsilon \longleftrightarrow -\epsilon + \varphi/2$  (avec  $k \longleftrightarrow k + \pi$ ). Les Figures III.8-a,b montrent les quasi-énergies  $W$ , pour  $C_a = G_4$  et des dés sur les rims symétriques ( $C_b = C_c$ , donc  $\omega = 0$ ). Il y a deux caractéristiques importantes à remarquer : (i) l'existence de bandes plates (en fonction de  $k$  et  $\Phi$  qui sont d'ailleurs, même indépendantes de  $\theta$  lorsque  $\beta - \varphi/2 = \pm\pi/2$ ); (ii) un pincement des bandes dispersives. Notons tout de même que la valeur du flux critique  $\Phi_c$  auquel le pincement apparaît peut être réglée à n'importe quel flux. C'est une conséquence du fait que l'on peut choisir une jauge partageant la même périodicité que la maille et que l'on ne s'autorise à changer les dés que de manière globale (sur tous les sites de la chaîne d'un même type). Le paramètre  $\omega$  lorsqu'il est asymétrisé entre le site  $b$  et  $c$  ( $C_b \neq C_c$ ,  $\omega = \omega_c - \omega_b$ , ici  $\omega = \omega_c$  car on prend  $\omega_b = 0$ ) joue exactement le rôle d'un champ magnétique fictif supplémentaire qui vient s'ajouter au champ magnétique existant. Le flux magnétique total  $f$  est donc  $f = \Phi + \omega/(2\pi)$ . La condition cageante est toujours réalisée au flux critique total  $f_c = 1/2$ , ce qui implique  $\Phi_c = 1/2 - \omega/(2\pi)$  (voir Figure III.8-c, pour un exemple avec  $\omega = \pi/4 \Rightarrow \Phi_c = 3/8$ ).

Ces deux caractéristiques sont indépendantes : en effet, en utilisant un dé  $H_4$  sur les sites  $a$  (au lieu de  $G_4$ ) nous obtenons un pincement mais sans bandes plates (voir Figure III.8-d,e). Ici,  $\Phi_c = -\omega/2\pi$  et le pincement apparaît à champ nul lorsque l'on utilise deux dés identiques sur les sites  $b$  et  $c$  (i.e.  $\omega = 0$ ). Un exemple de pincement à flux non nul est montré Figure III.8-f ( $\omega = \pi/3 \Rightarrow \Phi_c = 5/6$ ), lorsque l'on asymétrise les dés sur les sites rims. Au flux critique, les 8 quasi-énergies s'écrivent :

$$\epsilon = \frac{\pi}{4} \pm \frac{\pi}{2} + \frac{\varphi}{4} \pm \frac{1}{2} \cos^{-1} \left( \frac{\sin(\beta - \frac{\varphi}{2}) \cos \theta \pm \sqrt{2 \sin^2 \theta + \cos^2 \theta \sin^2(\beta - \frac{\varphi}{2})}}{2} \right) \quad (\text{III.3})$$

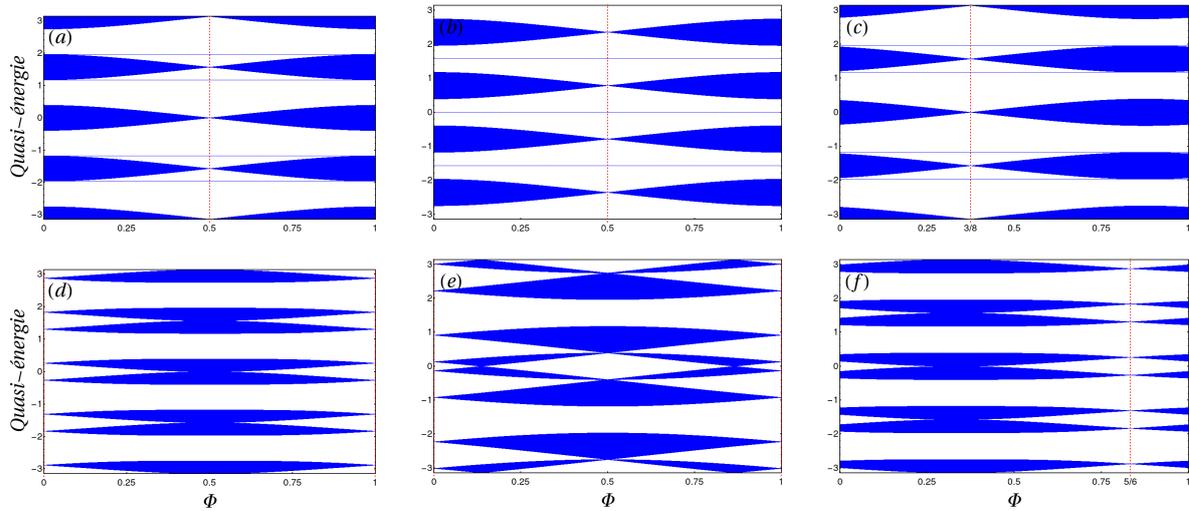


Fig. III.8 Spectres de quasi-énergies de la chaîne de boucles tracés en fonction du flux  $\Phi$ , pour  $\{C_a, C_b = C_c\}$  égale (a) :  $\{G_4, U_2(\pi/4, 0, 0, 0)\}$ , (b) :  $\{G_4, U_2(\pi/4, \pi, 0, 0)\}$ , (d) :  $\{H_4, U_2(\pi/4, 0, 0, 0)\}$ , (e) :  $\{H_4, U_2(\pi/4, \pi, 0, \pi)\}$ , pour  $\{C_a, C_c \neq C_b\}$  égale à (c) :  $\{G_4, U_2(\pi/4, 0, \pi/4, 0)\}$  et (f) :  $\{H_4, U_2(\pi/4, 0, \pi/3, 0)\}$ . En variant  $\omega$ , on déplace horizontalement le spectre. Le flux critique est indiqué par une ligne verticale pointillée rouge.

## b) Cages

Tout comme dans le cas hamiltonien, le pincement est associé à un phénomène de cage. On peut alors le prouver par une analyse de la densité d'état locale. Dans [79], en utilisant la tridiagonalisation de Lanczos, il a été montré qu'un coefficient de récursion (les  $b_n$ ) de l'algorithme s'annulait au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ , signature d'une évolution quantique qui ne se propageait pas. Ici, comme l'opérateur de marche quantique n'est pas hermitique, il faut utiliser la méthode plus générale d'Arnoldi où l'on transforme  $W$  en une matrice presque triangulaire supérieure avec la sous-diagonale en plus (forme de Hessenberg). En partant d'un état donné  $|0\rangle$  et en appliquant itérativement  $W$ , chaque état obtenu  $|n+1\rangle$  est rendu orthogonal aux précédents  $\{|m\rangle, m \leq n\}$  :  $b_{n+1}|n+1\rangle = W|n\rangle - \sum_{m \leq n} \langle m|W|n\rangle|m\rangle$ . Lorsque le coefficient  $b_n$  avec  $n = n_c$  s'annule, cela termine l'itération et prouve un effet de cage puisque si l'on part d'un état localisé, seulement une fraction finie des états peuvent être atteints, menant à une évolution à l'intérieur de l'espace engendré par les  $\{|n\rangle, n \leq n_c\}$ . Un coefficient  $b_8$  s'annulant est effectivement trouvé pour tous les états de la chaîne de boucles avec un état localisé sur n'importe quel état interne du site  $a$  (voir Figure III.9). La cage est de rayon maximal deux fois la taille de la cellule unité (voir sites coloriés Figure III.7).

La Figure III.7 montre que la cage d'un état initialement localisé sur un site  $a$  peut s'étendre jusqu'à deux sites  $a$  à droite et à gauche de l'état initial, tandis que dans le cas hamiltonien, les cages n'atteignaient même pas le site  $a$  voisin. Ici, leur origine est assez différente, le rôle des dés dans leur apparition est un élément déterminant puisque l'utilisation d'un dé différent sur les sites  $a$  change le flux critique. Le fait qu'il y ait du poids également sur les sites  $a$  extrémaux de la cage mais seulement pour les états internes situés à droite pour l'extrémité gauche et à gauche pour l'extrémité droite indique que le dé ne mélange pas ces états internes avec ceux situés sur la partie du site extérieure. Pour comprendre ces

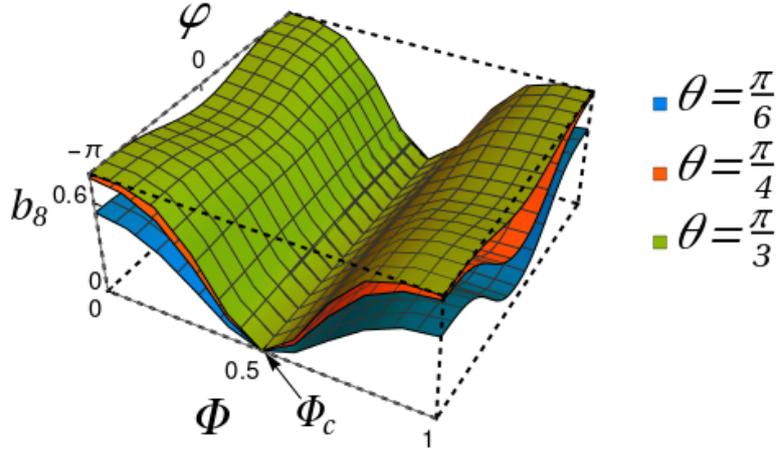


Fig. III.9 Coefficient  $b_8$  de la récursion d'Arnoldi pour la chaîne de boucles utilisant un dé  $G_4$  tracé en fonction du flux  $\Phi$  et du paramètre  $\varphi \in [-\pi, \pi]$  du dé  $U_2(\theta, \varphi, 0, 0)$ . Les valeurs  $\theta = \pi/6, \pi/4, \pi/3$  sont représentées. Le coefficient s'annule bien au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ .

cages, il est utile d'effectuer un changement de base dans l'espace interne des sites  $a$ . On sépare la partie droite de la partie gauche des états internes et on combine la partie haute et basse de manière à faire apparaître la partie symétrique et antisymétrique :

$$|R^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, |R^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, |L^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |L^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

L'effet des dés  $G_4$  et  $H_4$  sur ces nouveaux états de la base est

$$H_4 : \begin{cases} H_4 |R^+\rangle \propto |R^+\rangle \\ H_4 |R^-\rangle \propto |L^+\rangle \\ H_4 |L^+\rangle \propto |R^-\rangle \\ H_4 |L^-\rangle \propto |L^-\rangle \end{cases}, G_4 : \begin{cases} G_4 |R^+\rangle \propto |L^+\rangle \\ G_4 |R^-\rangle \propto |R^-\rangle \\ G_4 |L^+\rangle \propto |R^+\rangle \\ G_4 |L^-\rangle \propto |L^-\rangle \end{cases}$$

Ces nouveaux états sont soit des états propres des dés ou (lorsque le dé agit sur eux) des états qui transfèrent l'amplitude des fonctions d'ondes sur la partie opposée du site. Une cage de la chaîne de boucles peut donc être vue comme deux "murs" tels qu'ils empêchent le transfert sur la partie opposée du site i.e. proportionnel donc à l'un des états propres du dessus. On peut donc analyser l'évolution de la marche quantique pour ces états.

En partant d'un état initialement localisé sur un site  $a$ , on décompose l'état (après application du dé) sur les nouveaux états  $\{|R^+\rangle, |R^-\rangle, |L^+\rangle, |L^-\rangle\}$ . Les pas de la marche quantique suivants (jusqu'à atteindre un nouveau site hub) consiste à appliquer l'opérateur  $K = T.U_2.T = K_{\text{in}} + K_{\text{out}}$ .  $T$  est l'opérateur de translation et  $U_2$  le dé sur les sites rims.  $K_{\text{in}}$  fait référence à la partie qui est renvoyée sur les sites hubs déjà visités, ici, le site hub initial.  $K_{\text{out}}$  est la partie qui nous intéresse, c'est celle qui atteint les nouveaux sites hubs.

$\Phi = 0$	
$ R^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{H_4}  R^+, n_0 - 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$	$ L^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{H_4}  L^-, n_0 + 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$
$ R^-, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{H_4}  L^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  R^+, n_0 - 2\rangle \xrightarrow{H_4}  R^+, n_0 - 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$	$ L^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{H_4}  R^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  L^-, n_0 + 2\rangle \xrightarrow{H_4}  L^-, n_0 + 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$
$\Phi = 1/2$	
$ R^-, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{G_4}  R^-, n_0 - 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$	$ L^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{G_4}  L^-, n_0 + 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$
$ R^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{G_4}  L^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  R^-, n_0 - 2\rangle \xrightarrow{G_4}  R^-, n_0 - 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$	$ L^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{G_4}  R^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  L^-, n_0 + 2\rangle \xrightarrow{G_4}  L^-, n_0 + 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$

Table III.1 Effets des différentes séquences de dés et translations sur les états ( $|R^+\rangle, |R^-\rangle, |L^+\rangle, |L^-\rangle$ ). Toutes ces séquences mènent à des cages.  $|A\rangle \xrightarrow{O} |B\rangle$  signifie l'application de l'opérateur  $O$  sur  $|A\rangle$  donne un état proportionnel à  $|B\rangle$

L'action de  $K_{\text{in}}$  peut être oubliée car il est possible de montrer qu'elle mène toujours à des états proportionnels à ceux atteints par  $K_{\text{out}}$  mais à des pas de temps ultérieurs. L'action de  $K_{\text{out}}$  sur l'état à un site hub  $n_0$  s'écrit

$$\Phi = 0 : \begin{cases} K_{\text{out}} |R^+, n_0\rangle \propto |L^+, n_0 + 1\rangle \\ K_{\text{out}} |R^-, n_0\rangle \propto |L^-, n_0 + 1\rangle \\ K_{\text{out}} |L^+, n_0\rangle \propto |R^+, n_0 - 1\rangle \\ K_{\text{out}} |L^-, n_0\rangle \propto |R^-, n_0 - 1\rangle \end{cases}, \quad \Phi = 1/2 : \begin{cases} K_{\text{out}} |R^+, n_0\rangle \propto |L^-, n_0 + 1\rangle \\ K_{\text{out}} |R^-, n_0\rangle \propto |L^+, n_0 + 1\rangle \\ K_{\text{out}} |L^+, n_0\rangle \propto |R^-, n_0 - 1\rangle \\ K_{\text{out}} |L^-, n_0\rangle \propto |R^+, n_0 - 1\rangle \end{cases}$$

En appliquant les dés  $G_4$  ou  $H_4$  sur cette partie de l'état interne, un "mur" est atteint lorsque l'état sur ce site est proportionnel à un vecteur propre du dé correspondant. Cela n'arrive pas de manière systématique au premier pas de temps, il faut appliquer une nouvelle séquence  $K_{\text{out}}$ . Le Tableau III.1 résume les différentes séquences cageantes aux flux 0 et 1/2. Il part des 4 états  $|R^+, n_0 - 1\rangle, |R^-, n_0 - 1\rangle, |L^-, n_0 + 1\rangle$  et  $|L^+, n_0 + 1\rangle$ . Ce sont les états possiblement atteints après application du dé et de l'opérateur  $K_{\text{out}}$  sur un état initial situé sur le site hub  $n_0$  dans un état interne quelconque.

Pour être complet, si un état est initialement localisé sur un site rim, après un pas de temps, l'état sera situé sur les deux sites hubs voisins. Ainsi, par linéarité, on peut appliquer le même raisonnement sur chacun de ces deux sites pour déterminer l'extension de la cage.

La compréhension des cages, à partir de l'analyse précédente, permet de trouver au flux critique les 8 états propres d'extension minimale. Ils sont représentés sur la Figure III.10 pour le dé de Grover à  $\Phi_c = 1/2$  (Figure (a)) et de Hadamard à  $\Phi_c = 0$  (Figure (b)) dans le cas où le dé sur les rims est la matrice de rotation d'angle  $\pi/4$ ,  $U_2(\pi/4, 0, 0, 0)$ . L'amplitude de probabilité sur chaque état interne est résumée dans le Tableau III.2 pour les différents états propres. Ils s'étendent sur trois cellules unités, on les notera  $|i, \varepsilon\rangle$  où  $i$  est l'indice de la cellule du milieu et  $\varepsilon$  la quasi-énergie correspondante. La présence des composantes des vecteurs propres de  $G_4$  (resp.  $H_4$ ),  $|R^-\rangle$  et  $|L^-\rangle$  (resp.  $|R^+\rangle$  et  $|L^-\rangle$ ) aux sites situés aux extrémités de l'état propre d'extension minimale implique l'effet de mur expliqué plus haut

et l'existence d'une cage.

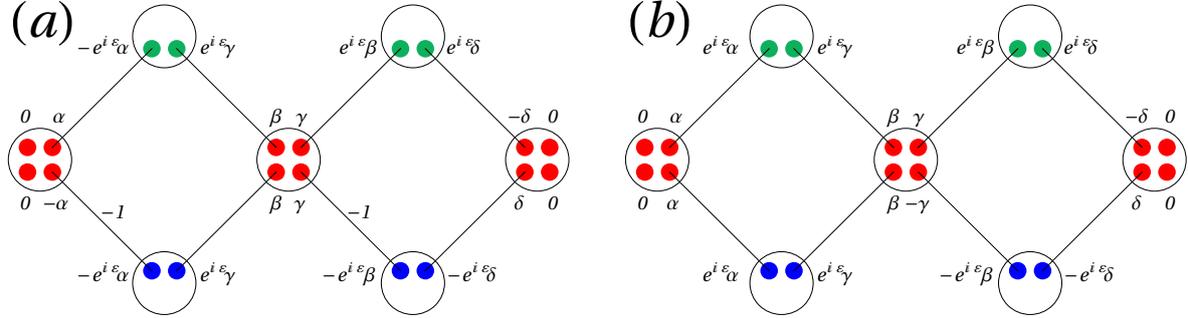


Fig. III.10 Vecteurs propres d'extension minimale de la marche quantique sur chaîne de boucles (a) : au flux critique  $\Phi_c = 1/2$  pour le dé de Grover (b) : au flux critique  $\Phi_c = 0$  pour le dé de Hadamard. La jauge choisie porte une phase de Peierls sur l'arête connectant le site  $a$  au site  $c$  de droite.  $\alpha, \beta, \gamma$  et  $\delta$  sont des coefficients intervenant dans les différentes amplitudes de probabilité des vecteurs propres et dépendants de la quasi-énergie  $\varepsilon$  correspondante. Ils sont résumés dans le Tableau III.2.

$\varepsilon$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\delta$
Grover				
$0, \pi$	1	$1 + \sqrt{2}$	$1 + \sqrt{2}$	1
$\pm\pi/2$	1	$1 - \sqrt{2}$	$1 - \sqrt{2}$	1
$-3\pi/8, 5\pi/8$	-1	$i$	$-i$	1
$3\pi/8, -5\pi/8$	-1	$-i$	$i$	1
Hadamard				
$5\pi/12, -7\pi/12$	$-i\sqrt{5 - 2\sqrt{6}}$	$1 - (-1)^{1/6}\sqrt{2}$	$1 + (-1)^{5/6}\sqrt{2}$	1
$-\pi/12, 11\pi/12$	$-i(\sqrt{2} + \sqrt{3})$	$1 + (-1)^{1/6}\sqrt{2}$	$1 - (-1)^{5/6}\sqrt{2}$	1
$-5\pi/12, 7\pi/12$	$i\sqrt{5 - 2\sqrt{6}}$	$1 + (-1)^{5/6}\sqrt{2}$	$1 - (-1)^{1/6}\sqrt{2}$	1
$\pi/12, -11\pi/12$	$i(\sqrt{2} + \sqrt{3})$	$1 - (-1)^{5/6}\sqrt{2}$	$1 + (-1)^{1/6}\sqrt{2}$	1

Table III.2 Coefficients des vecteurs propres dessinés dans la Figure III.10 pour les différentes quasi-énergies utilisant soit le dé de Hadamard ou le dé de Grover au flux  $\Phi_c = 0, 1/2$  respectivement et le dé  $U_2(\pi/4, 0, 0, 0)$  sur les rims.

Un dernier point concerne l'évolution temporelle du marcheur à l'intérieur de la cage. La dynamique est périodique lorsque les différences entre les quasi-énergies sont commensurables. Dans le cas des systèmes hamiltoniens de liaisons fortes, la dynamique est génériquement périodique que ce soit pour la chaîne de boucles ou le pavage  $\mathcal{T}_3$ . Les quasi-énergies décrites au-dessus sont incommensurables pour des valeurs génériques de  $\theta, \varphi, \beta$ , ce qui mène à des évolutions quasi-périodiques. L'analyse des expressions des quasi-énergies (voir équations (III.1),(III.2),(III.3)) permet de trouver des conditions pour la périodicité. Dans le cas  $C_4 = G_4$ , on trouve que la dynamique est périodique lorsque  $\cos^{-1}(\cos(\beta - \varphi/2) \cos \theta)$  est

Graphe	$C_a$	$C_c$	BP	$\Phi_c$	Période
CB	$G_4$	$U_2(\theta, \varphi, \omega, \beta)$ générique	Oui	$\frac{1}{2} + \frac{\omega}{2\pi}$	QP
CB	$G_4$	$U_2(\theta, \varphi, \omega, \frac{\pm\pi+\varphi}{2})$	Oui	$\frac{1}{2} + \frac{\omega}{2\pi}$	8
CB	$G_4$	$U_2(\frac{2\pi p}{q}, \varphi, \omega, -\frac{\varphi}{2})$	Oui	$\frac{1}{2} + \frac{\omega}{2\pi}$	PPCM(4, 2q)
CB	$H_4$	$U_2(\theta, \varphi, \omega, \beta)$ générique	Non	$\frac{\omega}{2\pi}$	QP
CB	$H_4$	$U_2(\frac{\pi}{4}, \pi, \omega, 0)$	Non	$\frac{\omega}{2\pi}$	24
CB	$H_4$	$U_2(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}, \omega, 0)$	Non	$\frac{\omega}{2\pi}$	10
CB	$H_4$	$U_2(\frac{\pi}{4}, 0, \omega, 0)$	Non	$\frac{\omega}{2\pi}$	12
$\mathcal{T}_3$	$G_6$	$R_3(\alpha, \gamma)$ générique	Oui	$\frac{1}{2}$	QP
$\mathcal{T}_3$	$G_6$	$R_3(\alpha, \gamma, \frac{-2\pi}{3})$	Oui	$\frac{1}{6}$	QP
$\mathcal{T}_3$	$G_6$	$R_3(\frac{2\pi}{3}, \gamma)$	Oui	$\frac{1}{2}$	12

Table III.3 Résumé des différents effets de cages pour la marche quantique sur la chaîne de boucles (CB) et le pavage  $\mathcal{T}_3$ , pour différents dés.  $\Phi_c$  est le flux critique où se produit le pincement du spectre, BP indique si il y a des bandes plates dans le spectre et la dernière colonne spécifie la période d'évolution temporelle quand elle existe (QP signifiant un cas quasi-périodique).

commensurable avec  $\pi$ . Par exemple, si  $\beta - \varphi/2 = 0$ , on trouve une dynamique périodique de période PPCM(4, 2q), quand  $\theta = 2\pi p/q$  avec  $(p, q) \in \mathbb{Z}$ . Par ailleurs, si  $\beta - \varphi/2 = \pm\pi/2$ , la dynamique résultante a une période 8 pour n'importe quelle valeur de  $\theta$ . Les différentes propriétés des cages pour marches quantiques sont résumées dans le Tableau III.3. L'évolution d'un marcheur avec une cage de période temporelle 8 est montrée Figure III.11.

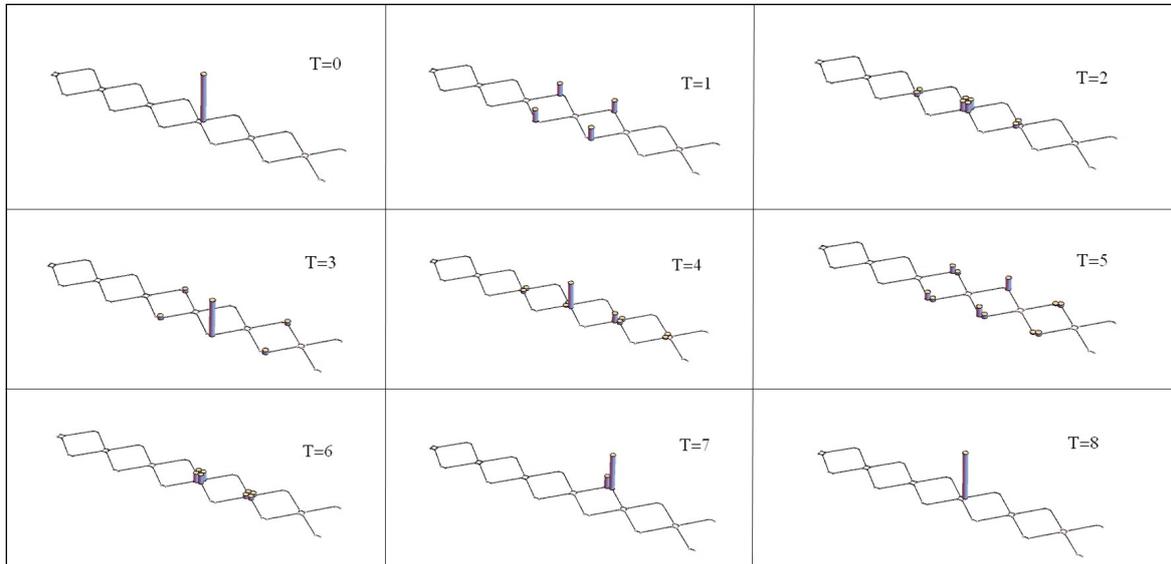


Fig. III.11 Évolution d'une cage pour marche quantique pour la chaîne de boucles de période 8. La probabilité de présence sur chaque état interne de la base est montrée  $C_a = G_4, C_b = C_c = U_2(\pi/4, 0, 0, -\pi/2)$  et  $\Phi_c = 1/2$ .

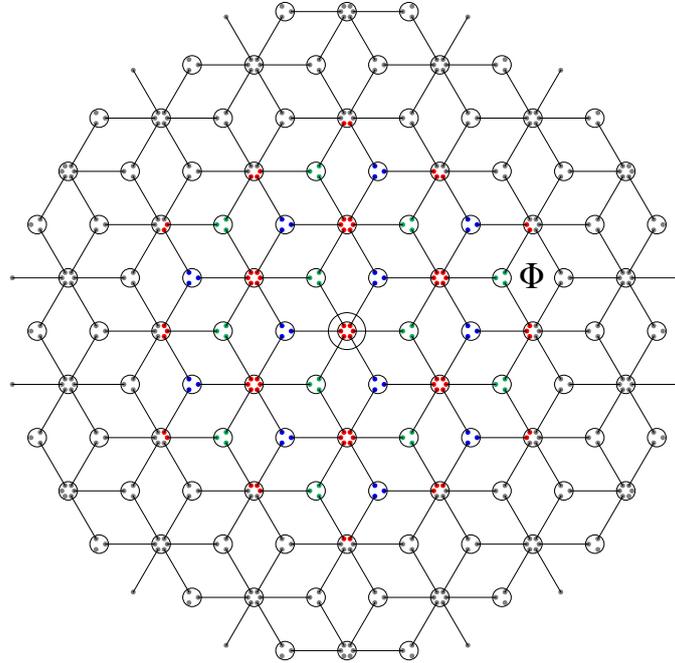
III.2.3 Marches quantiques magnétiques sur le pavage  $\mathcal{T}_3$ 


Fig. III.12 Représentation d'une portion du pavage  $\mathcal{T}_3$  avec les états internes. Les états internes coloriés sont ceux atteints au flux critique par un état initialement localisé sur le site du milieu encerclé (dans une configuration de spin générique).

On s'intéresse maintenant au cas du pavage  $\mathcal{T}_3$  (voir Figure III.12). En utilisant la matrice  $G_6$  comme dé pour les sites  $a$  et le dé  $R_3(\alpha, \gamma)$  pour les sites  $(b, c)$  (défini au début de la section III.2), on trouve effectivement un effet de type cages d'AB. Comme dans le cas de la chaîne de boucles, on s'autorise à asymétriser le dé agissant sur les sites  $b$  et  $c$  en introduisant un angle  $\omega$  :  $\tilde{R}_3(\alpha, \gamma, \omega)_{i,j} = R_3(\alpha, \gamma)_{i,j} e^{i\omega \sum_k \varepsilon_{ijk}}$  avec  $\varepsilon_{ijk}$  le tenseur antisymétrique de Levi-Civita. Le dé unitaire n'est plus une rotation 3D. L'introduction de l'angle  $\omega$  brise la symétrie de renversement du temps. En utilisant la jauge de Landau, on retrouve une périodicité dans la direction  $y$  (avec une maille magnétique de  $12q$  états dans la direction  $x$ ), et  $W$  peut être diagonalisé pour des valeurs rationnelles du flux  $\Phi = p/q$  en blocs de taille  $12q \times 12q$ , menant à un papillon de Floquet-Hofstadter montré sur les Figures III.13-a,b. En vertu de la symétrie  $\varepsilon \leftrightarrow \varepsilon + \pi$ , on ne trace que les spectres entre 0 et  $\pi$ . Ils contiennent des bandes plates et une structure fractale avec des niveaux de Landau. Ici, on se concentre sur le pincement qui a lieu au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ . Les quasi-énergies, doublement dégénérées et indépendantes de  $k$ , s'écrivent :

$$\epsilon = 0, \pm \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{\pi}{2} \pm \frac{\alpha}{2}, -\frac{\pi}{2} \pm \frac{\alpha}{2}, \frac{\pi}{2} \pm \frac{1}{2} \cos^{-1} \left( \frac{2 + \cos \alpha}{3} \right), -\frac{\pi}{2} \pm \frac{1}{2} \cos^{-1} \left( \frac{2 + \cos \alpha}{3} \right).$$

Ces expressions permettent de déduire la dynamique périodique (quand les quasi-énergies sont commensurables) ou non. En soustrayant ces quasi-énergies, on obtient que la dynamique est périodique si  $\alpha$  est commensurable avec  $\pi$  donc  $\alpha = \pi p_1/q_1$  et qu'il satisfait une équation

supplémentaire plus compliquée :  $\cos^{-1}\left(\frac{2 + \cos\frac{\pi p_1}{q_1}}{3}\right) = \pi\frac{p_2}{q_2}$ . Si cette relation est vérifiée alors la période de la marche est  $4 \times \text{PPCM}(q_1, q_2)$ . Par exemple, pour  $\alpha = 2\pi/3$ , la dynamique a une période de 12, et numériquement nous ne trouvons aucune autre solution pour  $q_1, q_2 \leq 100$ . En utilisant la méthode de Arnoldi, on vérifie numériquement que le coefficient  $b_{12}$

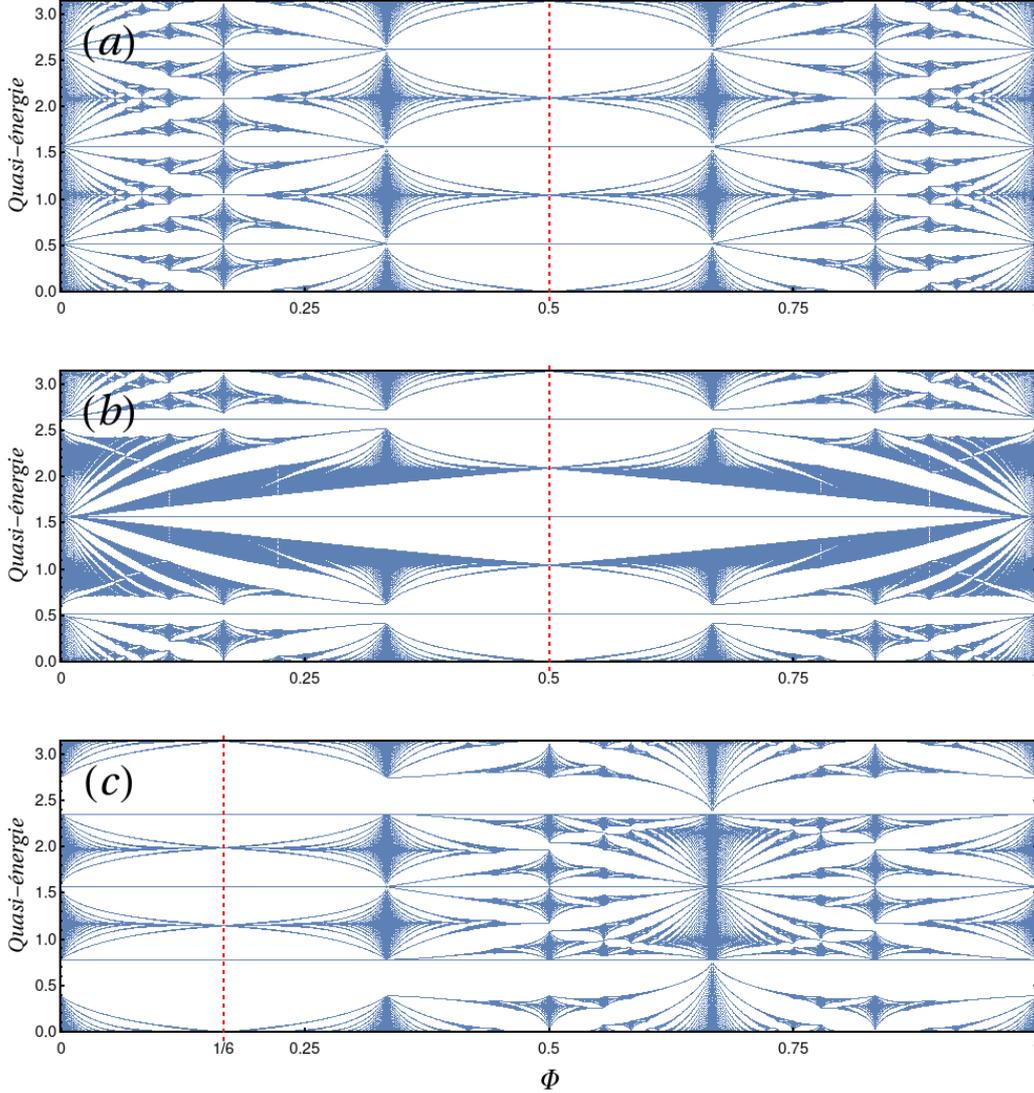


Fig. III.13 Spectre des quasi-énergies de la marche quantique sur le pavage  $\mathcal{T}_3$  pour 3 valeurs du dé  $R_3$  : (a)  $\alpha = 2\pi/3, \gamma = \sin^{-1}(1/\sqrt{3}), \omega = 0$ , (b) :  $\alpha = 2\pi/3, \gamma = 0, \omega = 0$ , (c) :  $\alpha = \pi/2, \gamma = \sin^{-1}(1/\sqrt{3}), \omega = -2\pi/3$ . On ne trace que les quasi-énergies positives en utilisant la symétrie  $\varepsilon \leftrightarrow \varepsilon + \pi$ . Les lignes rouges verticales en pointillés indiquent le flux critique à  $1/2$  (a),  $1/2$  (b) et  $1/6$  (c).

s'annule effectivement au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ , comme montré sur la Figure III.14. Les cages d'AB associées dépendent de l'état initial choisi mais leur taille maximale est plus grande que dans le cas des hamiltoniens de liaisons fortes (voir états colorés Figure III.12).

L'origine de ces cages est expliquée plus en détail dans l'Annexe D.

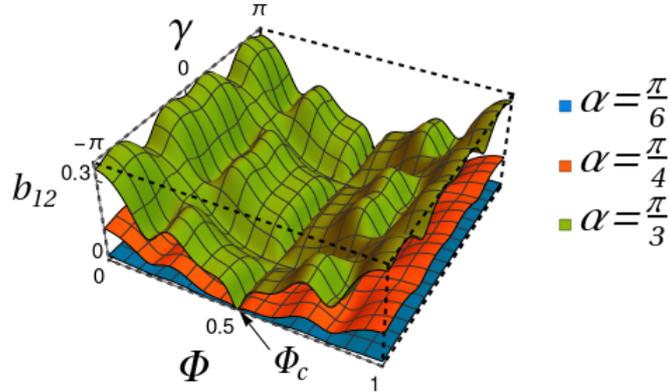


Fig. III.14 Coefficient  $b_{12}$  de la récursion d'Arnoldi pour le pavage  $\mathcal{T}_3$  tracé en fonction du flux  $\Phi$  et du paramètre  $\gamma \in [-\pi, \pi]$  du dé  $R_3(\alpha, \gamma)$ . Les valeurs  $\alpha = \pi/6, \pi/4, \pi/3$  sont représentées. Le coefficient s'annule bien au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ .

Dans le pavage  $\mathcal{T}_3$  il n'est génériquement pas possible de modifier le flux critique à n'importe quelle valeur puisque la périodicité de la maille ne correspondant pas à celle de la jauge, asymétriser les dés entre les sites  $b$  et  $c$  de manière globale ne revient pas à simuler l'effet d'un champ magnétique additionnel fictif. Cependant, une situation particulière survient pour les valeurs de flux  $\pm 1/3$  : on peut trouver une jauge qui partage la périodicité de la maille (voir Figure III.4-b). Par conséquent,  $W$  peut être diagonalisé en un bloc de taille  $12 \times 12$ ,  $W(k_x, k_y)$ . Un dé asymétrique  $\hat{R}_3$  sur le site  $c$  peut changer la valeur du flux critique : quand  $\omega = -2\pi/3$ ,  $\Phi_c$  passe de  $1/2$  à  $1/6$ , selon  $\Phi_c = 1/2 + \omega/2\pi$ . Ici  $\Phi_c$  ne peut pas être réglé de manière continue.

### III.2.4 Contrôle de la taille des cages dans la chaîne de boucles

Revenons au cas de la chaîne de boucles. Le dé de Grover  $G_4$  et celui de Hadamard  $H_4$  sur les sites  $a$  créent des cages à des flux différents. En jouant avec cette nouvelle caractéristique, on peut alors modifier et contrôler la taille des cages. Cette section illustre avec un exemple cette procédure.

Commençons au flux  $1/2$  avec une chaîne utilisant des dés  $H_4$  sur les sites hubs. Sans utiliser d'asymétrie entre les dés sur les rims, il ne peut pas y avoir de cages. On substitue sur certains sites  $a$  des dés  $G_4$  aux dés  $H_4$  de manière périodique (voir Figure III.15). Cela induit l'apparition de nouvelles cages d'AB, où la taille dépend de la distance  $G_4 - G_4$  (la période du super-réseau) et de l'emplacement de l'état initial.

Les règles pour déterminer l'extension de ces nouvelles cages en partant d'un état initial localisé sur un site  $a$ , sur la cellule unité indexée par  $n_0$ , sont :

- **Première règle :** Le dé sur le site initial  $n_0$  n'influence pas l'apparition ou l'extension de la cage. Seuls comptent les dés utilisés sur les sites voisins.
- **Seconde règle :** Pour les sites à droite du site initial, la marche quantique s'étale jusqu'à rencontrer un dé de substitution qui arrête le marcheur sur le site voisin de

droite.

- **Troisième règle :** Pour les sites situés à gauche du site initial, le dé sur le premier site gauche ne compte pas. Le marcheur quantique s'arrête dès qu'il voit un dé de substitution.

La Figure III.15 donne un exemple, au flux  $1/2$ , pour un dé  $G_4$  inséré tous les  $p = 5$  sites hubs (dans une chaîne contenant seulement des dés  $H_4$  autrement). Les cages sont représentées par des boîtes en pointillés où la couleur de la lettre (G ou H) indique l'emplacement de l'état initial.



Fig. III.15 Chaîne de boucles où seuls les sites hubs sont représentés par le dé qui est utilisé,  $H$  (pour Hadamard) ou  $G$  (pour Grover). Entre deux sites  $a$ , l'opérateur  $K = T.U_2.T$  est toujours présent mais non représenté. Les pointillés rouges (resp. verts) délimitent l'extension de la cage pour un état initial sur les sites rouges (resp. verts) au flux  $1/2$ .

On étend l'analyse des cages faite dans le cas pur (sans dé de substitution) au cas où la chaîne de boucles contient les deux types de dés. Pour cela, on se replace dans la base des états  $\{|R^+\rangle, |R^-\rangle, |L^+\rangle, |L^-\rangle\}$  et on applique l'opérateur  $K = T.U_2.T$  en regardant seulement la partie  $K_{\text{out}}$ . On est alors sur les sites voisins du site initial. Dans le cas pur, seules les séquences de dé  $G_4G_4$  ou  $H_4H_4$  pouvaient être vues par le marcheur. Avec des dés de substitution, il y a maintenant de nouvelles séquences  $G_4H_4$  ou  $H_4G_4$ . Ces séquences ne mènent génériquement pas à des cages, et il faut parfois appliquer une troisième fois l'opérateur  $K$  pour atteindre les "murs" de la cage. Les différentes séquences possibles sont résumées dans le Tableau III.4.

En se donnant un état initial  $n_0$ , l'effet de cage doit être indépendant de l'état interne. Par conséquent, puisque appliquer le premier dé change seulement l'état interne, la nature de ce dé ( $G_4$  ou  $H_4$ ) n'est pas pertinente, ce qui mène à la première règle.

La partie du marcheur quantique à droite du site initial est gouvernée par les vecteurs initiaux  $|L^{+/-}, n_0 + 1\rangle$ .  $|L^-\rangle$  est un vecteur propre de  $H_4$  et  $G_4$  donc il est immédiatement réfléchi vers l'intérieur de la cage. On déduit du Tableau III.4 que dès qu'un marcheur dans l'état  $|L^+\rangle$  rencontre un dé  $G_4$  au flux  $1/2$  (ou un dé  $H_4$  au flux 0) il sera piégé au site d'après. C'est la deuxième règle.

La partie gauche du marcheur est gouvernée par les vecteurs  $|R^{+/-}, n_0 - 1\rangle$ . L'opération de dé sur le premier voisin de gauche du site initial n'est pas importante, dans tous les cas le marcheur sera dans l'état  $|R^-, n_0 - 2\rangle$  après deux opérations de marche quantique. Si le dé suivant est  $H_4$ , l'état est transmis sur le site de gauche suivant, toujours dans la configuration  $|R^-\rangle$ . Si c'est le dé  $G_4$ ,  $|R^-\rangle$  est un vecteur propre, l'état est réfléchi à l'intérieur. C'est la troisième règle.

On trace les spectres en fonction du flux de ces marches quantiques alternant périodiquement entre le dé de Grover (dé de substitution) et celui de Hadamard, la Figure III.16-a étant pour une substitution minimale  $p = 2$ , la Figure III.16-b étant l'exemple de la Figure III.15  $p = 5$ . Puisque les trois règles nous garantissent que l'on obtient des cages aux

$\Phi = 0$
séquence : $H_4H_4$
$ R^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{H_4}  R^+, n_0 - 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{H_4}  L^-, n_0 + 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ R^-, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{H_4}  L^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  R^+, n_0 - 2\rangle \xrightarrow{H_4}  R^+, n_0 - 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{H_4}  R^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  L^-, n_0 + 2\rangle \xrightarrow{H_4}  L^-, n_0 + 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$
séquence : $H_4G_4H_4$
$ R^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{H_4}  R^+, n_0 - 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{H_4}  L^-, n_0 + 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{H_4}  R^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  L^-, n_0 + 2\rangle \xrightarrow{G_4}  L^-, n_0 + 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ R^-, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{H_4}  L^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  R^+, n_0 - 2\rangle \xrightarrow{G_4}  L^+, n_0 - 2\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  R^+, n_0 - 3\rangle \xrightarrow{H_4}  R^+, n_0 - 3\rangle \Rightarrow \text{cage}$
séquence : $G_4H_4G_4$ or $G_4H_4H_4$
$ R^-, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{G_4}  R^-, n_0 - 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{G_4}  L^-, n_0 + 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ R^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{G_4}  L^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  R^+, n_0 - 2\rangle \xrightarrow{H_4}  R^+, n_0 - 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{G_4}  R^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  L^+, n_0 + 2\rangle \xrightarrow{H_4}  R^-, n_0 + 2\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  L^-, n_0 + 3\rangle \xrightarrow{G_4 \text{ or } H_4}  L^-, n_0 + 3\rangle \Rightarrow \text{cage}$
$\Phi = 1/2$
séquence : $G_4G_4$
$ R^-, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{G_4}  R^-, n_0 - 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{G_4}  L^-, n_0 + 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ R^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{G_4}  L^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  R^-, n_0 - 2\rangle \xrightarrow{G_4}  R^-, n_0 - 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{G_4}  R^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  L^-, n_0 + 2\rangle \xrightarrow{G_4}  L^-, n_0 + 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$
séquence : $H_4G_4H_4$ or $H_4G_4G_4$
$ R^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{H_4}  R^+, n_0 - 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{H_4}  L^-, n_0 + 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{H_4}  R^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  L^+, n_0 + 2\rangle \xrightarrow{G_4}  R^+, n_0 + 2\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  L^-, n_0 + 3\rangle \xrightarrow{H_4 \text{ or } G_4}  L^-, n_0 + 3\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ R^-, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{H_4}  L^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  R^-, n_0 - 2\rangle \xrightarrow{G_4}  R^-, n_0 - 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$
séquence : $G_4H_4G_4$
$ R^-, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{G_4}  R^-, n_0 - 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^-, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{G_4}  L^-, n_0 + 1\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ R^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{G_4}  L^+, n_0 - 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  R^-, n_0 - 2\rangle \xrightarrow{H_4}  L^+, n_0 - 2\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  R^-, n_0 - 3\rangle \xrightarrow{G_4}  R^-, n_0 - 3\rangle \Rightarrow \text{cage}$ $ L^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{G_4}  R^+, n_0 + 1\rangle \xrightarrow{K_{\text{out}}}  L^-, n_0 + 2\rangle \xrightarrow{H_4}  L^-, n_0 + 2\rangle \Rightarrow \text{cage}$

Table III.4 Effets des différentes séquences de dés (en prenant en compte les possibles dés de substitution) sur les états ( $|R^+\rangle$ ,  $|R^-\rangle$ ,  $|L^+\rangle$ ,  $|L^-\rangle$ ). Toutes les séquences mènent à des cages.  $|A\rangle \xrightarrow{O} |B\rangle$  signifie que l'application de l'opérateur  $O$  sur  $|A\rangle$  donne un état proportionnel à  $|B\rangle$ .

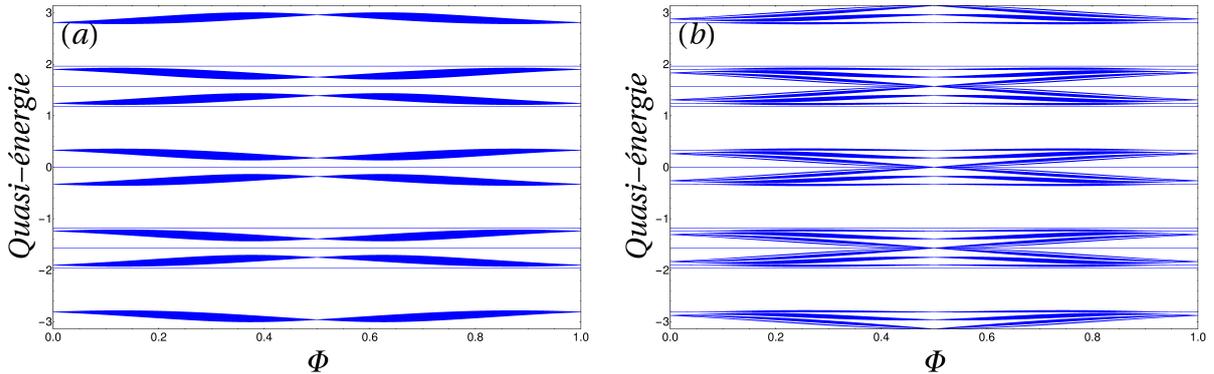


Fig. III.16 Spectres de quasi-énergies en fonction du flux pour différentes périodes de substitution. Le dé de Grover est le dé de substitution et le dé de Hadamard celui usuel. Les dés sur les rims ont pour paramètres  $\theta = \pi/4$  et  $\varphi = \omega = \beta = 0$ . (a) : On substitue tous les deux sites hubs un dé de Grover à un dé de Hadamard. On a donc alternativement un dé de Hadamard puis un dé de Grover. C'est la substitution de période minimale. (b) : On substitue tous les  $p = 5$  sites hubs, un dé de Grover à un dé de Hadamard. Le schéma de substitution correspondant est représenté Figure III.15.

deux flux  $\Phi = 0, 1/2$ , on observe alors un pincement des bandes de quasi-énergies à ces flux correspondants. Lorsque la longueur de la super-cellule est minimale (successions d'un dé de Hadamard suivi d'un dé de Grover), les cages s'étendent sur 6 cellules aux deux flux  $\Phi = 0, 1/2$ . Quand  $p \rightarrow \infty$ , on s'attend à retrouver le spectre sans dé de substitution (un pincement soit au flux  $\Phi = 1/2$  pour un dé de Grover soit à  $\Phi = 0$  pour un dé de Hadamard). Lorsque  $p$  est fini, la substitution périodique entre les deux dés permet de réobtenir une nouvelle super-cellule ayant pour taille la période de substitution  $p$  sur laquelle on peut appliquer le théorème de Bloch. On a alors un système contenant  $L/p$  super-cellule avec  $L$  le nombre maille de la chaîne de boucles et on peut donc indexer les états par un nouveau quasi-moment  $k_s = 2\pi j p/L$  avec  $j \in \llbracket -L/(2p), L/(2p) - 1 \rrbracket$ .

En supposant que le dé de substitution est le dé de Grover, lorsque  $p \gg 1$ , et  $\Phi = 0$ , la plupart des états vivent alors seulement sur des sites où des dés de Hadamard agissent (car la fraction de dés de Grover devient faible et les états propres sont de support fini, voir Figure III.10). Les quasi-énergies associées à ces états sont donc similaires à un système sans dé de substitution. Quelques nouvelles énergies apparaissent au flux critique  $\Phi = 0$  (par rapport au cas pur sans dé de substitution) correspondant aux nouveaux états propres vivant à la fois sur les dés de Grover et de Hadamard. Au flux  $\Phi = 1/2$ , la dynamique étant piégée sur une ou deux super-cellules (+2 sites hubs sur la super-cellule adjacente de droite, voir Figure III.15), les états propres sont également de support fini. On observe donc un pincement au flux critique  $\Phi = 1/2$  en  $8p$  quasi-énergies (sans prendre en compte les possibles dégénérescences au sein d'une même super-cellule) du fait de la dimension de l'espace de Hilbert associé à la super-cellule. Lorsque  $p$  augmente, on s'attend à ce que le poids des vecteurs propres sur les dés de substitution diminuent. Les quasi-énergies devraient alors tendre vers celle des bandes dispersives du cas pur avec un quasi-moment quantifié par la longueur de la super-cellule  $k = 2\pi n/p$  avec  $n \in \llbracket -p/2, p/2 - 1 \rrbracket$ .

### III.2.5 Conclusion

Comme dans le cas des hamiltoniens de liaisons fortes, les cages d'AB résultent d'une interférence destructive réglée par le champ magnétique entrant via la phase de Peierls. Cependant, dans le cas des marches, l'action du dé sur les degrés de liberté interne est cruciale pour que les cages se produisent. L'amplitude de probabilité s'annule sur la partie extérieure des sites situés en bord de cage, qui autrement après translation, autoriserait le marcheur à s'échapper. Les cages d'AB pour marches quantiques sont également plus grandes que leur équivalent hamiltonien.

En jouant avec les différents types de dés, les cages peuvent se produire à des flux critiques autres que  $1/2$ . Les conditions nécessaires pour que le réglage de  $\Phi_c$  puisse se faire est l'existence d'une jauge respectant la symétrie de translation de la structure (si l'on veut que les dés soient appliqués de manière uniforme sur tout le graphe) et que le dé brise la symétrie de renversement du temps (correspondant au  $\omega \neq 0$  dans l'opérateur de dé sur les rims) afin de compenser partiellement l'effet du champ magnétique.

Par ailleurs, le dé sur les sites hubs peut être vu comme une sorte de porte qui se comporte comme un miroir au flux critique  $\Phi_c$ . Ainsi, sur la chaîne de boucles, une substitution périodique par un type de dé (disons  $G_4$  dans une assemblée de  $H_4$ ) permet de créer des cages d'AB (ici au flux  $\Phi = 1/2$ ) de taille arbitraire en réglant la distance entre deux dés  $G_4$ .

Les cages d'AB et les papillons de Floquet-Hostadter correspondants pourraient être observables. Récemment, des implémentations expérimentales concrètes pour des marches quantiques sous champ magnétique à deux dimensions ont déjà été proposées [52]. Le défi supplémentaire, ici, est d'implémenter ces marches sur un réseau avec une coordinence variable. Les marches quantiques sur de tels réseaux ont été théoriquement étudiées depuis plusieurs années [129], mais nous ne connaissons pas de réalisation expérimentale à ce jour. Une méthode brut force serait d'avoir un grand espace interne (8 pour la chaîne de boucles et 12 pour le pavage  $\mathcal{T}_3$ ). On aurait alors plus qu'un seul site par maille et un graphe étant une simple chaîne pour la chaîne de boucle ou un réseau triangulaire pour le pavage  $\mathcal{T}_3$ . Dans tous les cas, même si cette méthode permet de simplifier le réseau sur lequel on travaille, toute la difficulté est maintenant cachée dans l'opération de dé et les transitions internes. Nous ne connaissons pas d'expérience capable de gérer un si grand nombre d'états internes. Enfin, une confirmation de ces cages serait de tester le réglage des flux critiques auxquels elles apparaissent. Une autre façon de tester l'originalité de ces cages serait de produire des tailles de cages différentes.

Bien que les marches quantiques puissent être vues comme une sous-classe de systèmes hamiltoniens périodiques en temps, notre proposition pour la chaîne de boucles est significativement différente des cages d'AB proposées dans [124] et qui utilise une ingénierie de Floquet pour réaliser le modèle de liaisons fortes de [125].



# IV – Déconfinement : quelques solutions pour les marcheurs quantiques

Les cages d'AB sont obtenues pour certains types de réseaux ou pavages (e.g. chaîne de boucles ou  $\mathcal{T}_3$ ) lorsque le flux magnétique est réglé à une valeur critique. Si le flux est différent du flux critique, on réobtient alors une bande dispersive et donc une expansion balistique de la particule hors de sa cage. Par ailleurs, on a pu voir que lorsque l'on substituait périodiquement un dé de Grover à un dé de Hadamard (ou vice-versa), on obtenait des cages pour deux flux critiques différents. De manière générale, on peut s'interroger sur la robustesse des cages face à différents types de perturbations.

Une étude pour le cas hamiltonien a déjà été menée dans le cas du pavage  $\mathcal{T}_3$  lorsque l'on introduit du désordre géométrique : des phasons i.e. des “flips” dans les losanges du pavage ou bien que l'on désordonne les potentiels sur site [130]. Dans ce cas précis, les désordres considérés étaient gelés (ou statiques). L'influence de tels désordres sur l'évolution d'un marcheur quantique le long d'une chaîne simple unidimensionnelle a également été étudiée pour différents types de processus aléatoires [131–136]. Dans tous les cas le désordre statique mène à un phénomène bien connu : la localisation d'Anderson [137].

Par ailleurs, on peut regarder l'effet d'un autre type de désordre : dynamique i.e. on change une variable de manière globale (pas de dépendance en espace) à chaque pas de temps. L'étude d'un marcheur quantique sur une chaîne sous désordre temporel a aussi été menée par exemple dans [133, 134, 136, 138–140]. L'intérêt du désordre dynamique est qu'il permet de simuler l'effet d'un environnement extérieur et d'étudier les phénomènes de décohérence, on s'attend alors à retrouver un comportement classique du système.

Dans la première section de ce chapitre, on s'intéressera à l'effet de ces différents désordres (statique ou dynamique) au niveau des dés sur les marches quantiques de la chaîne de boucles. On regardera ces désordres aussi bien sur les dés des sites rims que des sites hubs.

Une autre façon de briser les cages d'AB est d'introduire une seconde particule interagissant avec la première. Dans le cas hamiltonien de la chaîne de boucles [125], l'interaction considérée est une interaction de contact (Hubbard), cela crée alors un état moléculaire pouvant se déplacer le long de toute la chaîne de boucles et ne subissant plus l'effet des cages d'AB. Dans la seconde section, on s'intéressera au cas de deux marcheurs quantiques en interaction sur la chaîne de boucles.

## IV.1 Désordre sur le dé

Pour l'étude de la robustesse des cages dans le cas de la marche quantique, on introduira du désordre seulement au niveau de l'opérateur dé et on laissera intact l'opérateur de translation. Puisque la chaîne de boucles comporte deux types de sites hubs ou rims, on considérera séparément les deux cas.

Dans le premier cas, lorsque le désordre sur les dés est situé sur les sites hubs, les deux dés utilisés (Grover et Hadamard) seront choisis aléatoirement grâce à une loi de Bernoulli (distribution discrète). Dans le second cas, celui des dés sur les sites rims (matrice unitaire  $2 \times 2$ ), on considérera seulement un désordre sur la variable  $\theta$  (distribution continue) et l'on mettra à 0 les autres paramètres  $\varphi = \omega = \beta = 0$ . La variable  $\theta$  permet de contrôler le poids de la fonction d'onde du marcheur qui est transféré au site hub voisin.

Dans la première sous-section, on étudiera l'effet d'un désordre statique sur l'évolution de la fonction d'onde du marcheur et ses conséquences spectrales. Cette étude est l'extension de [130] au cas d'un marcheur quantique sur la chaîne de boucles. On s'attend alors à ce que le système se localise (localisation d'Anderson [137]) avec des états propres n'étant plus des fonctions d'onde à support fini mais ayant des décroissances exponentiellement localisées autour d'un site.

Dans un second temps, on regardera l'effet d'un désordre dynamique sur l'étalement de la fonction d'onde du marcheur. Une étude spectrale dans ce cas n'est plus vraiment pertinente puisque l'hamiltonien n'est pas invariant dans le temps. Les quasi-énergies ne sont alors plus conservées et la connaissance des valeurs propres pour un opérateur d'évolution jusqu'à un temps  $T$  ne nous renseigne pas sur l'évolution future qu'aura le marcheur. Le désordre dynamique a pour conséquence de tuer les cohérences quantiques du système à long terme car le temps de cohérence de phase n'est plus infini. Pour un marcheur quantique sur une simple chaîne, le système perd alors sa cohérence de phase et redevient une marche classique aléatoire avec une expansion diffusive [138].

Enfin, nous mêlerons ces deux types de désordre sur les sites rims et nous verrons qu'il existe des systèmes pour lesquels l'étalement est anormal i.e. ni balistique ni diffusif ni localisé.

### IV.1.1 Désordre statique

Pour un hamiltonien de liaisons fortes quantique unidimensionnel, le système se localise dès qu'il existe une petite quantité de désordre au niveau des potentiels sur site [137, 141]. Plus le désordre est grand, plus la longueur de localisation est faible. Pour un système de taille finie, il faut donc atteindre une certaine force du désordre avant de voir cette longueur de localisation devenir plus petite que la taille du système et donc de percevoir ses effets. Les fonctions d'ondes propres du système deviennent alors exponentiellement localisées autour d'un site. La conductivité du système diminue donc exponentiellement avec la taille du système [142], on obtient un isolant sans gap. Spectralement, on s'attend pour un désordre fort à ce que les énergies soient distribuées de manière aléatoire suivant la distribution choisie (car dans le régime d'un désordre fort chaque état propre est localisé autour d'un seul site dont l'énergie est essentiellement l'énergie du potentiel sur site sur lequel il habite). La distribution des écarts en énergies entre deux niveaux successifs suit une loi universelle,

une distribution de Poisson [143] :  $P(s) = e^{-s}$  avec  $s$  l'écart entre deux niveaux successifs moyenné sur la densité d'état autour de l'énergie considérée (pour plus de détail voir le prochain chapitre).

Dans le cas des cages d'AB hamiltoniennes, la discussion doit être légèrement modifiée pour prendre en compte une nouvelle longueur caractéristique : la taille des cages. Le cas pur sans désordre ne montre pas de phase métallique, où les états propres seraient délocalisés sur tout le système de taille  $L$ . On a montré dans le chapitre précédent qu'ils étaient de support fini. Dans l'article [130], les auteurs introduisent un désordre sur les potentiels sur site du modèle. On observe principalement deux régimes. Un régime à désordre faible où le désordre brise les cages mais où la force du désordre n'influence pas de manière significative la localisation des fonctions d'ondes. Dans ce régime, on peut dire que l'effet des cages est encore prédominant. Un régime de désordre fort, où l'on retrouve la localisation d'Anderson. Ici, la longueur de localisation d'Anderson devient inférieure à la taille des cages. On détaillera ces différents effets dans la section IV.1.1 b).

### a) Désordre statique sur les hubs

Sur les sites hubs, on introduit le désordre dans l'opérateur de dé en choisissant aléatoirement entre le dé de Grover et de Hadamard. On crée une séquence aléatoire de dés sur la chaîne de boucles en utilisant une loi de Bernoulli de probabilité  $p_s$  de tirer un dé de Grover  $G_4$  et  $\bar{p}_s = 1 - p_s$  de tirer un dé de Hadamard  $H_4$ . Grâce aux trois règles décrites dans la section III.2.4 du chapitre précédent, on peut calculer la probabilité d'obtenir une cage de taille  $n$ ,  $p_\Phi(n)$ , puis d'ensuite déduire l'extension moyenne des cages  $\langle n_\Phi(p_s) \rangle$  au flux critique  $\Phi = 0, 1/2$ . Si cette extension moyenne reste finie, on dira que les cages ne sont pas brisées mais ont simplement changé de taille.

Pour calculer  $p_\Phi(n)$ , on regarde d'abord la probabilité d'extension du marcheur jusqu'à  $n$  sites hubs à gauche (resp. à droite) du site initial  $p_\Phi^L(n)$  (resp.  $p_\Phi^R(n)$ ) au flux  $\Phi$ . En utilisant la deuxième et troisième règle à  $\Phi = 0$  (resp.  $\Phi = 1/2$ ), on en déduit que c'est la probabilité d'avoir un  $H_4$  (resp.  $G_4$ ) et  $(n-2) G_4$  (resp.  $H_4$ ) et on remarque que  $p_\Phi^L(n) = p_\Phi^R(n)$ .

$$p_0^{R/L}(n) = \bar{p}_s p_s^{n-2}, \quad p_{1/2}^{R/L}(n) = p_s \bar{p}_s^{n-2}$$

L'extension de la cage est donnée par la probabilité :

$$p_\Phi(n) = \sum_{k=2}^{n-3} p_\Phi^L(k) p_\Phi^R(n-1-k)$$

$$p_0(n) = \bar{p}_s^2 p_s^{n-5} (n-4), \quad p_{1/2}(n) = p_s^2 \bar{p}_s^{n-5} (n-4) \quad \text{pour } n \geq 5.$$

Les flux  $\Phi = 0$  et  $\Phi = 1/2$  ont un comportement similaire lorsque l'on change  $p_s \leftrightarrow \bar{p}_s$ . On calcule ensuite l'extension moyenne des cages :

$$\langle n(p_s) \rangle_\Phi = \sum_{k=5}^{\infty} k p_\Phi(k)$$

$$\langle n \rangle_0 = 3 + \frac{2}{\bar{p}_s} \quad \text{et} \quad \langle n \rangle_{1/2} = 3 + \frac{2}{p_s} \quad (\text{IV.1})$$

Dans le cas pure sans désordre, on dit que le système cage lorsqu'il existe au moins un flux pour lesquels le système présente des cages. Lorsque le système cage à deux flux différents,

on prendra l'extension moyenne des cages comme la valeur minimale entre les deux flux critiques (voir Figure IV.1). Elle reste donc finie pour toutes valeurs de  $p_s \in [0, 1]$ , les cages résistent au désordre induit par les dés de Grover et de Hadamard. L'extension minimale moyenne des cages est 7 et se trouve à  $p_s = 1/2$  lorsque le désordre est symétrique entre  $G_4$  et  $H_4$ .

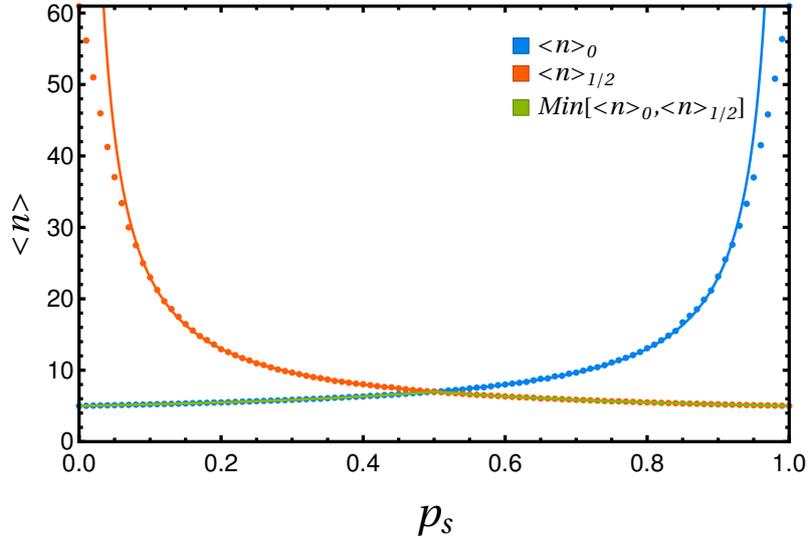


Fig. IV.1 Valeur moyenne de la taille des cages en fonction du paramètre de Bernoulli  $p_s$  pour  $\Phi = 0$  (courbe bleue) ou  $\Phi = 1/2$  (courbe rouge). Les lignes sont les valeurs moyennes calculées théoriquement (équation (IV.1)) tandis que les points représentent les simulations numériques. Chaque point est la moyenne sur 10000 réalisations du désordre de l'extension de la cage du marcheur quantique après 30 pas de temps. Quand la taille de la cage est grande, la simulation numérique dévie de la prédiction théorique à cause du nombre de pas de temps fini (le marcheur n'a pas eu le temps d'atteindre les limites de la cage).

On appelle un domaine de taille  $n$  de Grover (resp. Hadamard), un endroit sur la chaîne où l'on a un enchaînement successif de  $n$  dés de Grover (resp. Hadamard) encadré sur chacun de ses côtés par un dé de Hadamard (resp. Grover). Lorsque la chaîne de boucles  $L \rightarrow \infty$  et  $p_s \neq 0, 1$ , on s'attend à avoir des domaines de Hadamard et de Grover de toutes tailles. Supposons que l'on se place au flux  $\Phi = 1/2$ . Le marcheur quantique peut alors librement se déplacer à l'intérieur d'un domaine de Hadamard mais sa propagation est stoppée par les dés de Grover qui encadrent le domaine, ces deux dés agissent comme des murs. Soit le marcheur est stoppé directement sur le dé de Grover pour la partie située à gauche du site initial (troisième règle) ou bien sur le site hub suivant pour la partie droite (deuxième règle). Lorsque le marcheur démarre dans un domaine de Grover, au flux  $\Phi = 1/2$ , on obtient une dynamique cageante. On a donc deux types de fonctions d'onde. Celles étendues sur 3 sites d'un domaine de Grover, ce sont les états propres cageants (voir Figure III.10-a), avec leurs 8 quasi-énergies données par les équations (III.1) et (III.2) ou bien celles étendues sur tout un domaine de Hadamard avec un poids marginal sur les sites situés aux bords des domaines adjacents. Leurs quasi-énergies correspondantes sont quasiment celles d'un

marcheur quantique sur une chaîne de boucles utilisant des dés de Hadamard sur les sites hubs et avec des conditions aux bords ouverts. Leurs quasi-énergies dépendent alors de la taille de la chaîne. Pour chaque domaine de Hadamard de taille  $n$  existant dans la chaîne, il y a  $\simeq 8n$  quasi-énergies associées. Plusieurs domaines de Hadamard peuvent exister avec la même taille, cela n'ajoute pas de nouvelle quasi-énergie dans le spectre mais augmente la dégénérescence des quasi-énergies associées. On a donc un système où le nombre de quasi-énergies différentes augmente sous-linéairement avec la taille de la chaîne.

Numériquement lorsque l'on zoom sur le spectre au flux  $\Phi = 1/2$ , on se rend compte que la bande qui semblait être dispersive est en fait composée de plusieurs bandes qui pincent au flux critique (voir Figure IV.2). On peut bien entendu faire le même raisonnement à  $\Phi = 0$  en inversant le rôle des dés de Hadamard et de Grover.

### b) Désordre statique sur les rims

On s'intéresse maintenant au cas où le désordre est sur les sites rims et en particulier sur la variable  $\theta$  de la matrice unitaire du dé  $2 \times 2$ . On rappelle que les autres paramètres satisfont  $\varphi = \omega = \beta = 0$ . On fixe donc un dé sur les sites hubs (Hadamard ou Grover) et on se place au flux critique correspondant  $\Phi = 0$  ou  $1/2$ . Le désordre est toujours un désordre statique, le paramètre  $\theta$  est donc différent d'une cellule à l'autre mais le même au cours du temps.

Comme il existe deux sites rims par cellule, on peut dans un premier temps considérer que le paramètre  $\theta$  est le même pour le site  $b$  et  $c$  d'une même cellule. En faisant ce choix, on se rend compte que les cages résistent au désordre, car l'on conserve la symétrie entre le chemin passant par le site  $b$  et celui passant par le site  $c$ .

On considère maintenant un désordre où les variables  $\theta$  d'un site  $b$  et  $c$  d'une même cellule sont différentes ce qui déséquilibre l'interféromètre AB dans chaque boucle. On choisit aléatoirement les différentes variables  $\theta$  dans une distribution en forme de boîte  $[\theta_0 - \Delta\theta/2, \theta_0 + \Delta\theta/2]$  où  $\theta_0$  est la valeur moyenne et  $\Delta\theta$  la force du désordre pouvant être choisie entre 0 et  $2\pi$ .

Afin de caractériser, la vitesse d'étalement du marcheur, on étudie l'écart-type de sa fonction d'onde moyenné sur le désordre en fonction du temps  $\bar{\sigma}(t)$ . On s'intéressera notamment au comportement aux temps longs pour en extraire une puissance  $\gamma : \bar{\sigma} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} t^\gamma$  où  $\sigma = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ ,  $\langle \dots \rangle$  désigne la moyenne sur la fonction d'onde du marcheur et  $\overline{\dots}$  la moyenne sur le désordre.

L'asymétrie créée par le désordre entre le chemin passant par le site  $b$  ou  $c$  est suffisante pour briser les cages. Au temps  $t = 2000$ , sur la Figure IV.3-a, on observe un poids non nul du marcheur loin du site initial. Le premier effet du désordre dans ces systèmes cageants est alors de délocaliser le marcheur. Malgré cette brisure des cages, l'écart-type de la fonction d'onde du marcheur reste fini aux grands temps : la fonction d'onde reste localisée.

Il faut pour autant être prudent sur la nature de la localisation de la fonction d'onde. Il est tentant de conclure que la localisation de ces fonctions d'ondes est de même nature que celles observées dans la localisation d'Anderson. Par exemple, en traçant le spectre en quasi-énergie on observe que les bandes plates au flux critique deviennent de largeur finie (voir Figure IV.4-a). De plus, on remarque une localisation exponentielle des vecteurs propres (voir Figure IV.4-b) et la distribution des écarts de niveaux suit une loi de Poisson comme attendu dans la localisation d'Anderson (voir Figure IV.4-c).

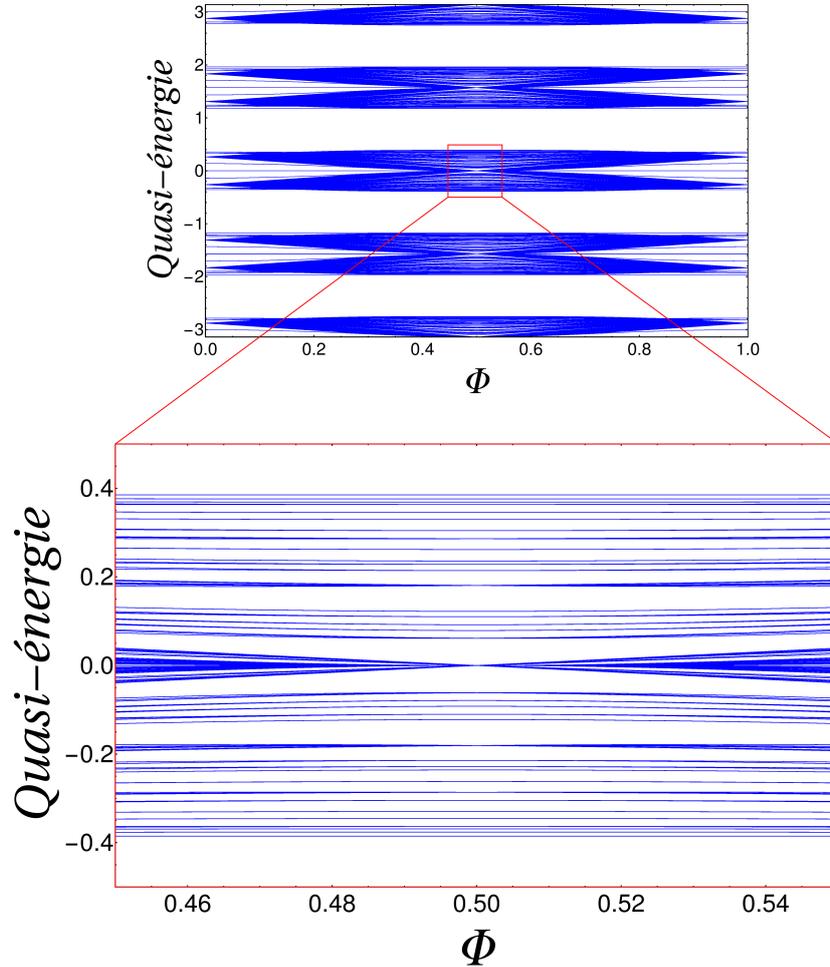


Fig. IV.2 Spectre de la marche sur chaîne de boucles pour un tirage de désordre gelé sur les sites hubs de paramètre  $p_s = 0.2$ . Les paramètres pour les dés sur les rims sont  $\theta = \pi/4$  et  $\omega = \varphi = \beta = 0$ . Haut : Le spectre entier est compris entre  $-\pi$  et  $\pi$  pour les quasi-énergies  $\varepsilon$  et entre 0 et 1 pour le flux  $\Phi$ . Le spectre semble être dispersif au flux critique  $1/2$ . Bas : Un zoom de ce spectre effectué dans la région  $0.45 \leq \Phi \leq 0.55$  et  $-0.5 \leq \varepsilon \leq 0.5$  (carré rouge). La bande dispersible apparente est en fait composée de plusieurs bandes plates au flux critique.

Cependant, le modèle à désordre nul que l'on considère est drastiquement différent des modèles de bandes qui sont le point de départ de la localisation d'Anderson (lorsque l'on n'a pas encore introduit le désordre). Dans notre cas, le modèle sans désordre peut être mis en correspondance avec un système effectif où les cages deviennent les sites de ce modèle. C'est alors un isolant trivial puisque ces sites sont découplés et sont donc les états propres du système tandis que les modèles de bandes présentent des fonctions de Bloch délocalisées sur le réseau. On peut, dans un premier temps, repartir du modèle hamiltonien [130] pour

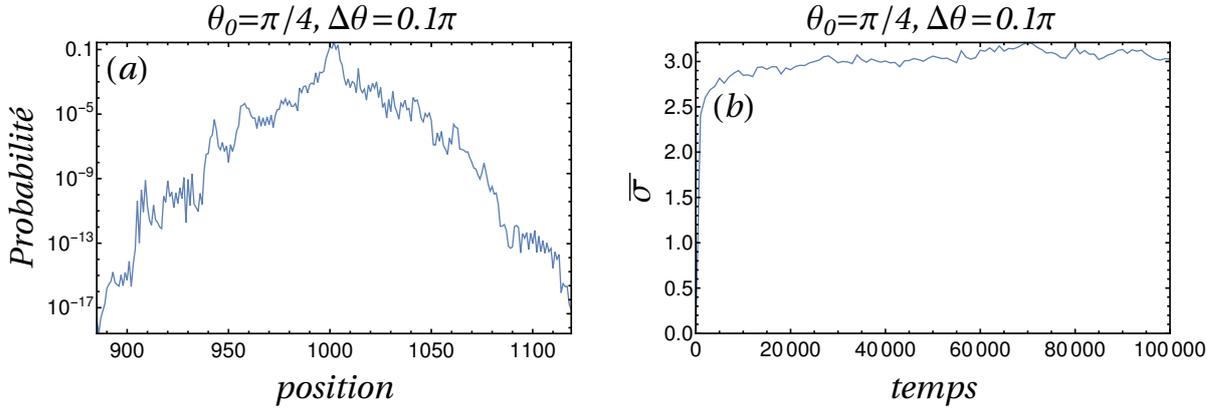


Fig. IV.3 Pour tous les sites rims, la valeur du paramètre  $\theta$  est choisie dans une boîte centrée autour de  $\theta_0 = \pi/4$  avec pour largeur  $\Delta\theta = 0.1\pi$  et  $\omega = \varphi = \beta = 0$ . Pour les sites hubs, on utilise un dé de Grover. On se place au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ . (a) : Distribution de probabilité typique après  $t = 2000$  pas de temps pour un état initialement localisé sur un site hub au milieu de la chaîne. On trace la distribution en échelle logarithmique pour montrer la décroissance exponentielle. (b) : Évolution de l'écart-type de la distribution de probabilité moyennée sur 100 réalisations du désordre. Le comportement aux temps longs de l'écart-type montre une localisation du marcheur :  $\gamma = 0$ .

comprendre les différents effets qu'induit un désordre mis au niveau des potentiels sur site. Le désordre est pris dans une distribution gaussienne centrée autour de 0 et de largeur  $\sigma$ . On s'intéresse à une quantité différente permettant de quantifier le degré de localisation d'un vecteur propre, l'IPR (pour *Inverse Participation Ratio*) que l'on notera  $I_2$ . Il s'écrit pour une fonction d'onde normalisée :

$$I_2 = \sum_{i \in \text{sites}} |\Psi(i)|^4.$$

Lorsque l'IPR vaut 1 cela signifie que la fonction d'onde est localisée sur un site. Lorsqu'elle est équirépartie sur les  $N$  sites d'un système donc avec une probabilité  $1/N$  d'être sur un site, l'IPR vaut  $I_2 = 1/N^2$ . L'IPR est donc maximal pour un état localisé et minimal pour un état complètement délocalisé. Pour plus de détail, on pourra voir la discussion au chapitre suivant dans la section V.2.1.

Dans l'article [130] le logarithme de l'IPR moyenné sur les vecteurs propres et le désordre est tracé en fonction de la valeur du désordre (voir Figure IV.5-a). Loin du flux critique, on observe bien une augmentation monotone de l'IPR en fonction du désordre : c'est la localisation d'Anderson habituelle des modèles hamiltoniens puisque le modèle sans désordre au flux non cageant est bien un modèle de bandes. Au flux critique, cependant, on observe deux régimes. Un régime à désordre faible où l'IPR est quasiment constant en fonction du désordre et un second regime de désordre fort où l'IPR tend vers 1.

À désordre faible et au flux critique, on peut construire un modèle effectif dans chacune des bandes dégénérées couplant les cages entre elles et dont le paramètre de saut effectif entre cages et le potentiel sur site effectif de la cage sont désordonnés [130]. La valeur moyenne du paramètre de saut est nulle et la variance des deux paramètres effectifs désordonnés est

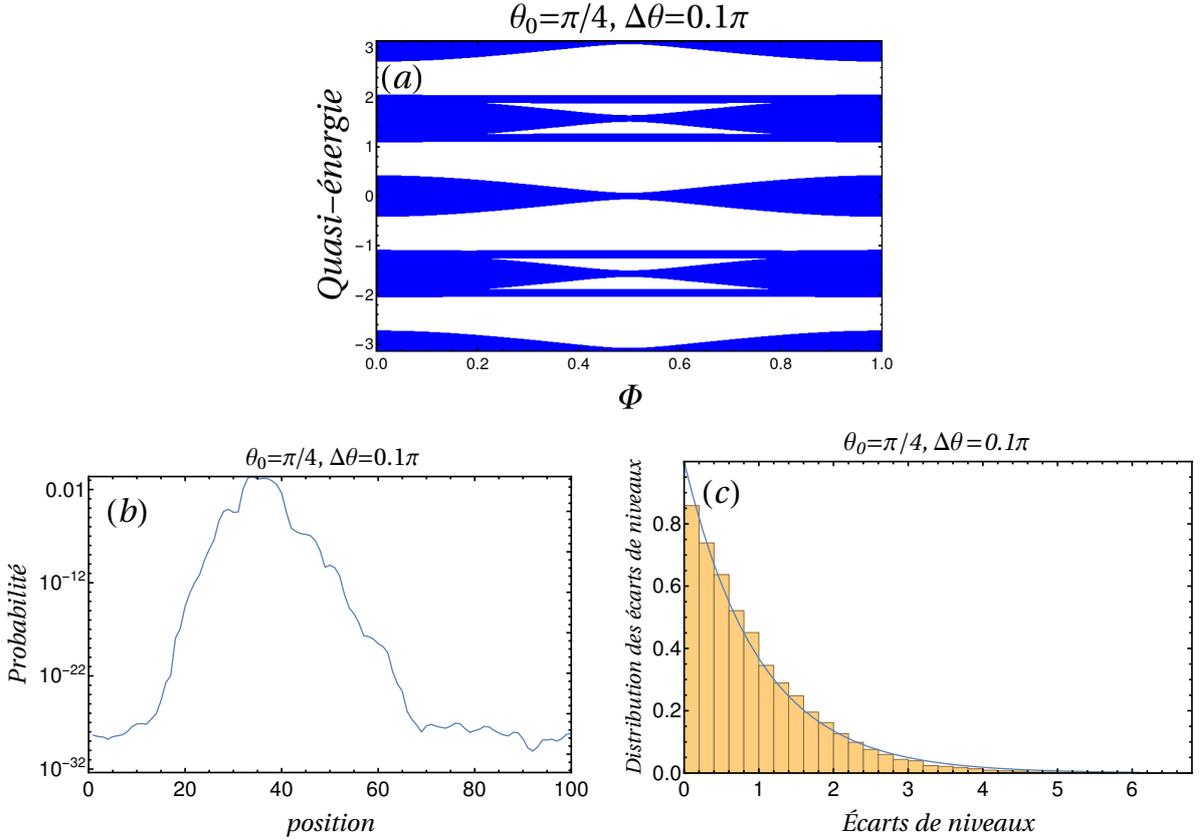


Fig. IV.4 Pour tous les sites rims, la valeur du paramètre  $\theta$  est choisie indépendamment entre  $b$  et  $c$  dans une boîte centrée autour de  $\theta_0 = \pi/4$  avec pour largeur  $\Delta\theta = 0.1\pi$  et  $\omega = \varphi = \beta = 0$ . Pour les sites hubs, on utilise un dé de Grover. (a) : Spectre en fonction du flux  $\Phi$ . Au flux critique, les bandes ne sont plus plates, mais acquièrent une largeur finie. Bas : Analyse du spectre au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ . (b) : On trace le module carré d'un vecteur propre typique du système en échelle logarithmique pour souligner la décroissance exponentielle. (c) : Distribution des écarts de niveaux moyennée sur 100 réalisations du désordre pour un système de taille  $L = 100$ . La courbe bleue est la distribution de Poisson  $P(s) = e^{-s}$ .

proportionnelle à  $\sigma^2$  dans les deux cas. Puisque le rapport de ces deux quantités est indépendant de  $\sigma$ , on ne s'attend pas à ce que les propriétés statistiques des fonctions propres en soient dépendantes. On a alors une indépendance de l'IPR en fonction de l'intensité du désordre comme observé sur la Figure IV.5-a. Ce modèle effectif cesse d'être valable lorsque l'intensité du désordre  $\sigma$  devient de l'ordre de la largeur des gaps ( $\sigma \sim \sqrt{6}$  ici). On ne peut alors plus négliger les effets inter-bandes, et on assiste à une localisation d'Anderson dont la longueur caractéristique est inférieure à la taille des cages. La valeur de l'IPR est d'ailleurs indépendante du flux auquel on se trouvait initialement puisque le désordre est tellement fort que la particule ne ressent plus le flux magnétique i.e. elle n'a pas le temps de passer par les deux bras des boucles pour interférer sur le site hub suivant, elle est localisée avant par le désordre. Pour des flux proches du flux critique ( $\Phi = 0.495$  sur la Figure IV.5-a), on observe

un troisième régime intermédiaire où l'IPR devient égal à celui du flux critique. C'est un régime où la largeur de la bande sans désordre est du même ordre que la force du désordre  $\sigma$ . C'est un effet réminiscent des cages même en dehors du flux critique. Dans ce régime intermédiaire, on remarque que l'IPR diminue légèrement quand le désordre augmente. Il y a donc délocalisation par le désordre puisqu'il brise les cages.

Une étude préliminaire pour les marches quantiques a été effectuée sur le comportement de l'IPR des fonctions d'ondes propres en fonction du désordre  $\Delta\theta$  (voir Figure IV.5-b). Qualitativement, le comportement des courbes est le même. On observe un régime à faible désordre où la longueur de localisation est indépendante du désordre (au flux critique) suivi d'un régime à plus fort désordre correspondant à la localisation d'Anderson. On peut noter tout de même une différence principale par rapport au cas hamiltonien : À fort désordre  $\Delta\theta \sim 2\pi$ , on observe une saturation de l'IPR loin de la valeur maximale 1 et à des valeurs différentes en fonction du flux.

Cette observation peut être expliquée par le fait que l'intensité du désordre est bornée, elle apparaît dans une phase  $0 \leq \Delta\theta \leq 2\pi$ . Ainsi, le désordre n'est pas assez fort pour atteindre une longueur de localisation qui serait inférieure à celle de la taille des cages et donc avoir un comportement indépendant du flux. Les valeurs de saturation à partir de  $\Delta\theta \simeq 2$  peuvent provenir du fait que le désordre dans le couplage entre les cages se fait en  $\sin \Delta\theta$ . Ainsi, la variation du couplage est bornée entre  $-1$  et  $1$  et lorsque  $\Delta\theta > \pi$  la largeur du désordre dans le couplage ne varie plus, elle a déjà atteint ces extrema. Des études supplémentaires sont en cours pour confirmer ces hypothèses. On essaiera notamment d'extraire une marche effective couplant les cages entre elles, de la même manière que ce qui a été fait dans le cas hamiltonien.

Afin de tester l'hypothèse d'un désordre trop faible qui ne permet pas d'atteindre une longueur de localisation où l'IPR serait indépendant du flux, on a désordonné à la fois les dés des sites rims et hubs pour augmenter l'effet de ce désordre. Pour cela, on a utilisé le dé sur les sites hubs :

$$H_2(\theta) \otimes H_2(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{IV.2})$$

qui redonne à  $\theta = \pi/4$  la matrice de Hadamard de taille  $4 \times 4$ ,  $H_4$ . La variable  $\theta$  est, de la même manière que sur les sites rims, tirée aléatoirement dans une distribution en forme de boîte  $[\theta_0 - \Delta\theta/2, \theta_0 + \Delta\theta/2]$  où  $\theta_0 = \pi/4$ . Lorsque le désordre est nul le flux critique est 0 car on a des dés  $H_4$  sur les sites hubs. On regarde donc l'évolution de l'IPR autour de ce flux critique sur la Figure IV.5-c, notamment aux flux  $\Phi = 0, 0.05, 0.005, 1/6, 1/4, 9/10$ . En désordonnant à la fois les sites hubs et rims, on se rend compte qu'à désordre fort, une valeur saturante presque commune est atteinte pour l'IPR ce qui semble confirmer l'hypothèse que le désordre dans le cas de la Figure IV.5-b n'était pas assez fort pour avoir des valeurs de l'IPR indépendantes du flux. Cette valeur atteinte est également plus importante que dans le cas sans désordre sur les sites hubs, on a une localisation plus forte des vecteurs propres puisque que l'on a introduit un désordre supplémentaire sur les hubs, cette localisation plus importante permet de rendre son comportement indépendant du flux.

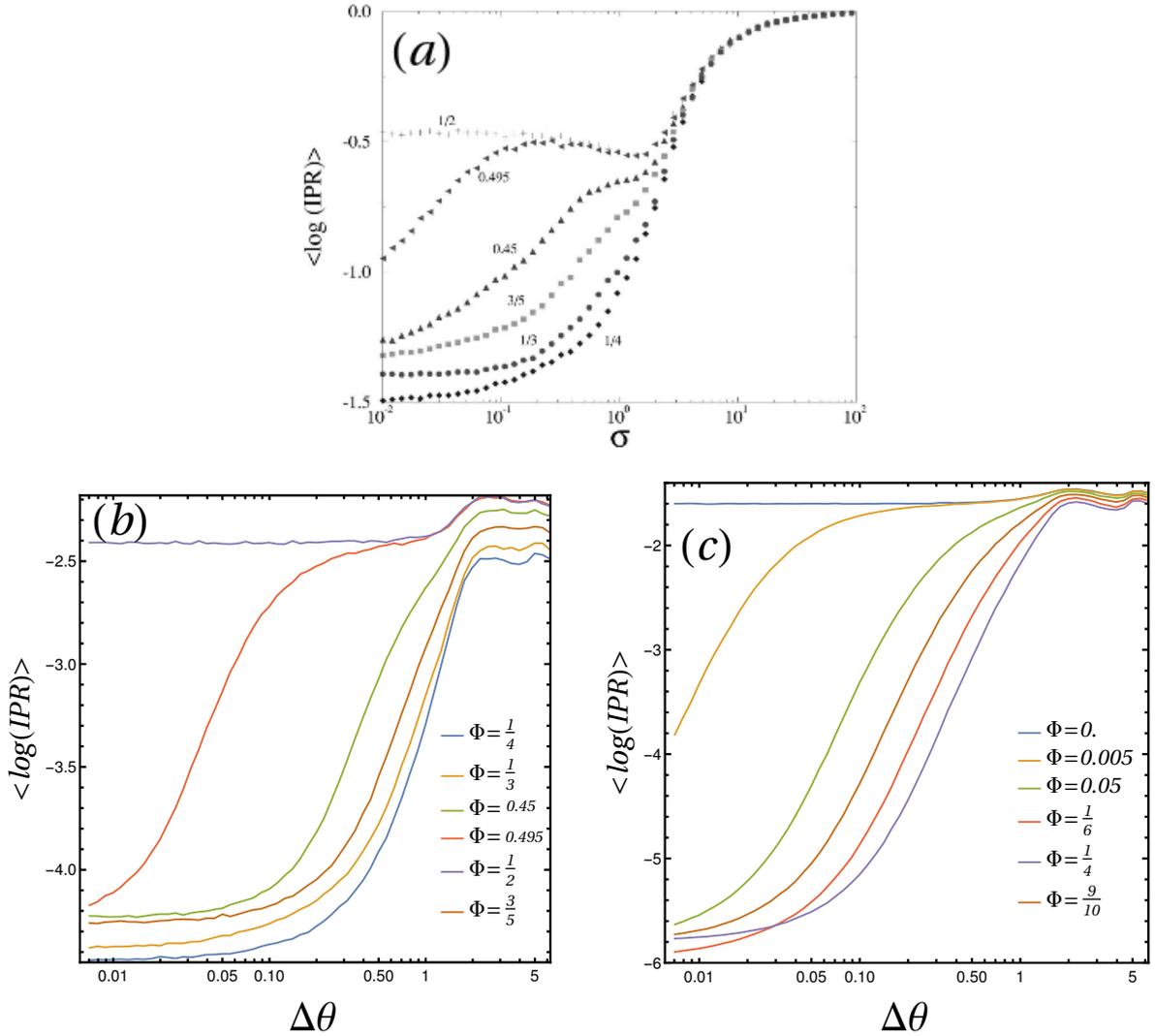


Fig. IV.5 Logarithme de l'IPR tracé en fonction de l'intensité du désordre aux flux  $\Phi = 1/4, 1/3, 0.45, 0.495, 1/2, 3/5$  pour les Figures (a) et (b) et aux flux  $\Phi = 0, 0.005, 0.05, 1/6, 1/4, 9/10$  pour la Figure (c). La moyenne de l'IPR est faite sur le désordre et en (quasi-)énergie. Sur ces Figures, (et contrairement au reste du chapitre)  $\langle \dots \rangle$  désigne la moyenne sur le désordre. (a) : Figure 11 de [130]. Logarithme de l'IPR moyenné en fonction de l'écart-type  $\sigma$  d'un désordre gaussien centré en 0 sur les potentiels sur site du modèle hamiltonien de liaisons fortes sur le pavage  $\mathcal{T}_3$  pour 605 sites. Les différents symboles correspondent aux différents flux notés à côté de chaque courbe. (b) : Logarithme de l'IPR moyenné en fonction du désordre  $\Delta\theta$  introduit sur les dés des sites rims du modèle de marche quantique de la chaîne de boucle. Le dé utilisé sur les sites hubs est le dé de Grover. (c) : Logarithme de l'IPR moyenné en fonction du désordre  $\Delta\theta$ . On a désordonné les dés des sites rims et hubs du modèle de marche quantique de la chaîne de boucle. Les dés utilisés sur les sites hubs sont les dés définis équation (IV.2). Pour les Figures (b) et (c), la moyenne a été faite sur 100 réalisations du désordre et pour des chaînes de 600 sites.

### IV.1.2 Désordre dynamique

Le désordre dynamique dans une marche quantique consiste à utiliser une variable aléatoire intervenant dans les paramètres de l'opérateur de marche quantique (plus précisément, ici, ce sera le dé). On tire aléatoirement cette variable à chaque pas de temps et on l'applique de manière homogène à tous les dés de la chaîne de boucles. Le désordre dynamique sur les dés d'un marcheur quantique sur une chaîne a été étudié dans [138]. Pour des séquences aléatoires de dés, les auteurs trouvent que l'écart-type du marcheur se comporte de manière diffusive (i.e. en racine du temps,  $\gamma = 1/2$ ), un comportement que l'on retrouve également dans la marche classique. Le processus de diffusion a été observé pour deux types de désordre. Le premier choisit aléatoirement un dé parmi deux dés sélectionnés en amont. Le deuxième utilise une variable aléatoire continue paramétrisant le dé et sélectionne aléatoirement une valeur dans une distribution en forme de boîte que l'on pourra faire varier de taille (force du désordre). Dans le cas de la chaîne de boucles, le désordre dynamique sur les sites hubs est similaire au premier type de désordre en choisissant aléatoirement entre  $G_4$  et  $H_4$  tandis que le désordre sur les sites rims est continu avec une variable  $\theta$  choisie dans une distribution en boîte de taille variable.

#### a) Désordre dynamique sur les hubs

Considérons d'abord le désordre sur les sites hubs. On utilise comme dans la section précédente sur le désordre statique une loi de Bernoulli de paramètre  $p_t$  afin de sélectionner aléatoirement un dé entre  $H_4$  et  $G_4$  à chaque pas de temps. On a donc une probabilité  $p_t$  de choisir  $G_4$  et  $\bar{p}_t = 1 - p_t$  de choisir  $H_4$ .

On peut noter les dés utilisés sur les sites hubs (Grover ou Hadamard) à chaque instant. Cela forme une chaîne temporelle de dés, l'axe des abscisses est la direction du temps et non la direction spatiale contrairement à la Figure III.15. On peut alors également trouver des règles sur la chaîne temporelle afin de déterminer l'extension du marcheur quantique sur la chaîne de boucles. Elles sont relativement proches de celle de la chaîne spatiale mais il faut garder en tête que les conditions portent sur le temps et non sur les positions :

- **Première règle :** Le dé au temps  $t = 0$  n'influence pas l'extension du marcheur quantique.
- **Deuxième règle :** Sur la partie située à droite du site initial, on calcule la longueur d'extension du marcheur quantique après  $T \geq 2$  pas de temps. Pour  $\Phi = 0$ , elle est donnée par 2 + le nombre de dés de Grover entre le temps  $t = 1$  et  $t = T - 1$ . Pour  $\Phi = 1/2$ , on remplace dans le calcul le nombre de dés de Grover par le nombre de dés de Hadamard.
- **Troisième règle :** Sur la partie située à gauche du site initial, la longueur d'extension du marcheur quantique après  $T \geq 2$  pas de temps se calcule de la même manière. Pour  $\Phi = 0$ , elle est donnée par 2 + le nombre de dés de Grover mais cette fois entre le temps  $t = 2$  and  $t = T$ . Pour  $\Phi = 1/2$ , on remplace le nombre de dés de Grover par le nombre de dés de Hadamard.

À partir de ces règles il est possible de calculer la probabilité que le marcheur soit étendu sur  $n$  sites au temps  $T$  au flux  $\Phi$ . L'extension minimale est de 5 sites, elle correspond à la chaîne temporelle où apparaissent seulement des dés de Hadamard (pour le flux  $\Phi = 0$ ) ou

des dés de Grover (pour le flux  $\Phi = 1/2$ ). Quand  $n > 5$ , cela signifie que l'on a tiré des dés de Grover (resp. Hadamard) pour le flux  $\Phi = 0$  (resp.  $\Phi = 1/2$ ).

En utilisant les deuxième et troisième règles au flux  $\Phi = 0$ , pour un dé de Grover situé dans la chaîne temporelle entre  $t = 2$  and  $t = T - 1$ , l'extension de la cage se fait d'une unité dans les deux directions. Si le dé de Grover se situe à la position  $T = 1$  (resp.  $t = T$ ) cela signifie que l'extension de la cage se fait d'une unité vers la droite (resp. gauche). Le même raisonnement marche pour  $\Phi = 1/2$  et le dé de Hadamard. Un calcul similaire à ce qui a été fait dans la section désordre spatial sur les hubs nous mène à une expression explicite de la probabilité d'une cage de taille  $n$  au temps  $T$ . Pour  $n$  impair :

$$p_0(n, T) = \binom{T-2}{\frac{n-5}{2}} \bar{p}_t^{\frac{n-5}{2}} p_t^{T-\frac{n+3}{2}} + \binom{T-2}{\frac{n-7}{2}} \bar{p}_t^{\frac{n-3}{2}} p_t^{T-\frac{n-3}{2}}$$

$$p_{1/2}(n, T) = \binom{T-2}{\frac{n-5}{2}} p_t^{\frac{n-5}{2}} \bar{p}_t^{T-\frac{n+3}{2}} + \binom{T-2}{\frac{n-7}{2}} p_t^{\frac{n-3}{2}} \bar{p}_t^{T-\frac{n-3}{2}}$$

et pour  $n$  pair :

$$p_0(n, T) = 2 \binom{T-2}{n/2-3} \bar{p}_t^{n/2-3} p_t^{T-n/2+2}$$

$$p_{1/2}(n, T) = 2 \binom{T-2}{n/2-3} p_t^{n/2-3} \bar{p}_t^{T-n/2+2}$$

L'extension moyenne des cages peut alors être calculée  $\langle n(T) \rangle_\Phi = \sum_n n \times p_\Phi(n, T)$ . Quand  $T \rightarrow \infty$  les termes qui contribuent le plus à la somme sont ceux autour de  $n \sim T$ . Ainsi, la taille moyenne des cages du marcheur croît linéairement avec le temps : les cages sont brisées.

Pour caractériser plus précisément la dynamique de la fonction d'onde, on étudie son écart-type en fonction du temps et on extrait sa loi de puissance. On obtient une diffusion classique i.e.  $\bar{\sigma} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \sqrt{Dt}$  (voir Figure IV.6) comme dans le cas d'une marche quantique sur une simple chaîne désordonnée dynamiquement. Le paramètre de la loi de Bernoulli contrôle le coefficient de diffusion  $D$ , plus il y a de dés de Grover (i.e.  $p_t$  proche de 1) plus le coefficient de diffusion est faible.

## b) Désordre dynamique sur les rims

On rappelle que l'on a fixé les paramètres  $\beta = \varphi = \omega = 0$  et l'on considère un désordre dynamique sur le paramètre  $\theta$ . En déséquilibrant les bras de l'interféromètre AB, on supprime l'effet de cage. Pour cela, à chaque pas de temps on choisit aléatoirement et indépendamment deux variables dans la distribution en forme de boîte  $[\theta_0 - \Delta\theta/2, \theta_0 + \Delta\theta/2]$ . Chacune de ces variables est appliquée uniformément sur tous les sites rims du même type ( $b$  ou  $c$ ). Les cages sont donc brisées et le nombre de sites visités par le marcheur augmente linéairement avec le temps. On étudie l'écart-type de la distribution de probabilité du marcheur moyenné sur le désordre. On trouve comme dans le cas du désordre dynamique sur les sites hubs un comportement diffusif  $\bar{\sigma} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} t^{1/2}$  (voir Figure IV.7).

Le comportement diffusif peut-être calculé analytiquement grâce au formalisme de la matrice densité  $\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$  où  $|\psi(t)\rangle$  est la fonction d'onde du marcheur au temps

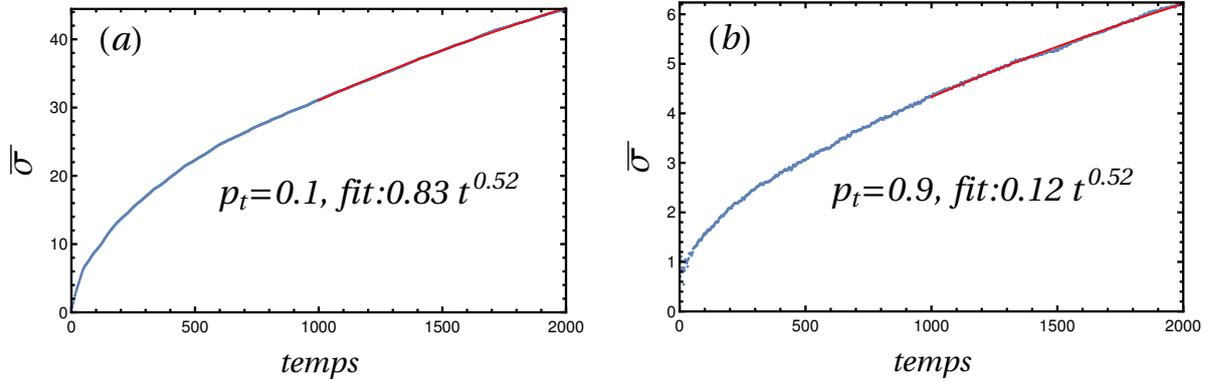


Fig. IV.6 Évolution de l'écart-type de la distribution de probabilité moyenné sur différents tirages du désordre pour deux valeurs de  $p_t$  différentes ((a) :  $p_t = 0.1$ , (b) :  $p_t = 0.9$ ) au flux  $\Phi = 1/2$ . Le fit (courbe rouge) montre un processus diffusif, la valeur de  $p_t$  affecte seulement le coefficient de diffusion. Les paramètres des dés sur les sites rims sont  $\theta = \pi/4$  et  $\varphi = \omega = \beta = 0$ .

$t$  [144]. Les termes diagonaux de la matrice densité correspondent aux termes classiques et représentent la probabilité de la fonction d'onde d'être sur un site tandis que les termes hors-diagonaux sont appelés les cohérences quantiques, ils quantifient le degré de superposition d'état. Lorsque l'on allume le désordre dynamique, l'opérateur de marche quantique n'est plus invariant dans le temps. On s'attend à perdre la cohérence de phase quantique et à retrouver un comportement classique, c'est pourquoi l'on obtient un comportement diffusif comme dans la marche classique standard. Pour la matrice densité, les termes hors-diagonaux tendent vers 0 et elle devient essentiellement diagonale aux temps longs. Les détails de calcul sont donnés dans l'Annexe E.

### c) Mesures

Une autre façon radicalement différente d'introduire un désordre dynamique se fait en mesurant régulièrement la position de la particule au cours du temps. Contrairement aux autres désordres, on ne modifie pas l'opération de dé mais on perturbe directement la fonction d'onde. On choisit de mesurer périodiquement sa position, ce qui implique une réduction du paquet d'onde i.e. projeter sa fonction d'onde sur un état interne d'un site en suivant les probabilités associées. Même si le marcheur a une dynamique piégée dans une cage de 5 cellules entre deux mesures, l'effet de cette dernière peut l'envoyer sur un site différent du site initial. Ainsi, il pourra recommencer une nouvelle dynamique piégée autour de ce nouveau site et atteindre des sites auxquels il n'avait pas accès avant. En répétant le processus, le marcheur peut alors s'échapper de sa cage originale.

Les mesures réduisent le paquet d'onde et empêchent la superposition d'état, on s'attend donc à ce qu'elles annulent les effets quantiques et redonnent une dynamique similaire aux systèmes classiques. Pour le marcheur quantique sur la chaîne de boucles, on retrouve une distribution proche de la marche classique standard, une gaussienne centrée autour du site initial (voir Figure IV.8-a) avec un écart-type évoluant diffusivement (en racine du temps ou du nombre de mesures, voir Figure IV.8-b). Les Figures IV.8-a,b sont tracées pour des

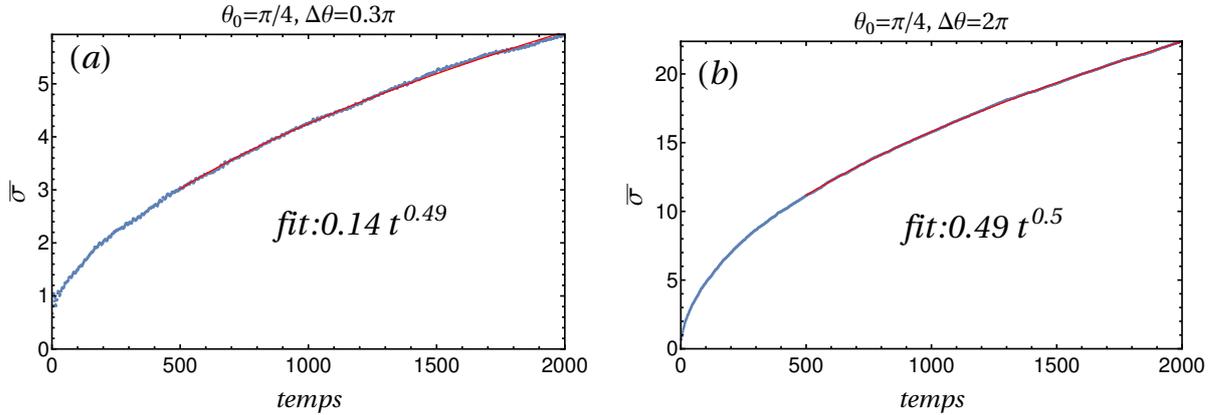


Fig. IV.7 Écart-type de la fonction d'onde du marcheur quantique sur la chaîne de boucles avec un désordre dynamique sur le paramètre  $\theta$  des dés rims. Les autres paramètres valent  $\varphi = \beta = \omega = 0$ . Les paramètres  $\theta$  pour les sites  $b$  et  $c$  sont choisis aléatoirement et indépendamment dans l'intervalle  $[\theta_0 - \Delta\theta/2, \theta_0 + \Delta\theta/2]$  à chaque pas de temps avec  $\theta_0 = \pi/4$  et (a) :  $\Delta\theta = 0.3\pi$  ou (b) :  $\Delta\theta = 2\pi$ . L'écart-type est moyenné sur 100 réalisations du désordre.

mesures tous les 5 pas de temps mais le résultat tient pour n'importe quelle période de mesure. Dans le cas spécial où la cage présente une dynamique périodique, par exemple, pour un dé de Grover sur les sites hubs au flux  $\Phi = 1/2$  et des paramètres sur les dés des sites rims tels que  $\theta = \pi/3$  et  $\varphi = \beta = \omega = 0$ , la période des cages est de 12 (voir Tableau III.3). Quand la période des cages coïncide avec la période des mesures, le coefficient de diffusion s'annule (voir Figure IV.8-c). La raison est que la mesure arrive au moment où la probabilité que le marcheur soit dans sa configuration initiale est de 1. Excepté ce cas, le marcheur quantique peut s'échapper de sa cage grâce aux mesures.

### IV.1.3 Désordre spatial et temporel : diffusion anormale

Dans cette section, on va construire un modèle menant à un comportement aux temps longs plus exotique : ce que l'on appelle de la diffusion anormale (i.e. avec un exposant  $\gamma \neq 0, 1/2, 1$ ). Ce genre de comportement a déjà été obtenu pour des marches quantiques unidimensionnelles : soit en utilisant un désordre statique qui peut être changé à chaque pas de temps avec une certaine probabilité [145] soit en introduisant un degré de liberté supplémentaire, des spins locaux, qui interagissent avec le marcheur quantique [146]. Ici, on propose une autre méthode pour obtenir de la diffusion anormale en utilisant un marcheur quantique sur la chaîne de boucles cageante sans degré de liberté supplémentaire, un désordre dynamique changeant à chaque pas de temps et un désordre supplémentaire gelé. On verra dans la suite que cela revient à envoyer le marcheur quantique vers une marche classique présentant de la diffusion anormale.

La marche classique en question est connue sous le nom de barrière aléatoire symétrique (*symmetric random barrier*) étudiée dans [147] (pour une revue sur la diffusion anormale avec les marches classiques aléatoires on pourra se référer à [148]). L'idée est que le taux de transition (ou la probabilité de saut)  $W_{ij}$  entre deux sites voisins  $i$  et  $j$  est choisi aléatoirement dans une certaine distribution  $\mathcal{P}(W)$ . Le taux de transition simule une barrière de potentiel,

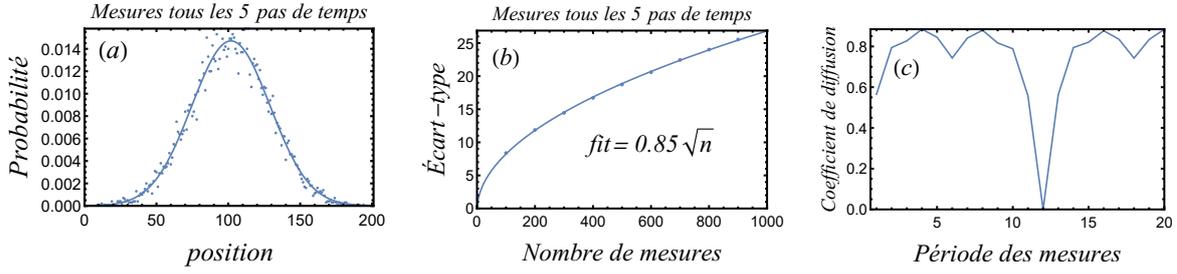


Fig. IV.8 Propriétés statistiques de 10000 marcheurs quantiques différents où l'on mesure la position de chaque marcheur tous les 5 pas de temps (Figures (a) et (b)). On se place à la condition cageante, en utilisant un dé de Grover au flux  $\Phi = 1/2$ . Les paramètres des dés sur les sites rims sont  $\varphi = \beta = \omega = 0$  et  $\theta = \pi/3$ . La configuration interne initiale est  $(|R^+\rangle + |R^-\rangle)/\sqrt{2}$  et sa position sur la cellule d'indice 100. (a) : Distribution de la position finale du marcheur après 1000 mesures donc  $t = 5000$  pas de temps. Les points sont les données des simulations numériques et la courbe est le fit gaussien. (b) : Écart-type de la distribution de (a) en fonction du nombre de mesures. La courbe est un fit de la forme  $a\sqrt{n}$  où  $n$  est le nombre de mesures et  $a = 0.85$ , le coefficient de diffusion au carré. (c) : Évolution du coefficient de diffusion au carré  $a$  pour différentes périodes de mesure. La valeur  $a = 0$  pour  $T = 12$  coïncide avec la période de la cage à  $\theta = \pi/3$ .

plus il est élevé, plus la barrière de potentiel à franchir est petite. Le comportement du marcheur classique est déterminé par les taux de transition  $\mathcal{P}(W)$  proche de 0 puisque ce sera à ces endroits où il passera le plus de temps à essayer de franchir les barrières. Par conséquent, le comportement asymptotique de la distribution des taux de transition proche de 0 joue un rôle essentiel. Dans [147], les auteurs montrent que si  $\overline{1/W}$  est finie i.e.  $\mathcal{P}(W) \underset{W \rightarrow 0}{\propto} W^{\mu-1}$  avec  $\mu > 1$ , on obtient un processus diffusif. On rappelle que  $\overline{\dots}$  désigne la moyenne sur le désordre. Au contraire, lorsque  $\overline{1/W}$  est infinie i.e.  $0 < \mu < 1$ , on a une diffusion anormale avec un exposant  $\nu = \mu/(1 + \mu)$ . Le cas marginal  $\mu = 1$  mène à un comportement de l'écart-type en  $\sqrt{t/\ln t}$ , ce qui à très grands temps donne quasiment un processus diffusif.

En combinant un désordre gelé à un désordre dynamique sur les sites rims d'une certaine manière que nous détaillerons dans la suite, la marche quantique sur la chaîne de boucles reproduira le modèle classique de barrière aléatoire symétrique. Le désordre dynamique envoie la marche quantique sur une marche classique en tuant les termes de cohérence quantique (comme on l'a vu dans la section précédente) tandis que le désordre gelé imite les taux de transition aléatoires du modèle classique. La probabilité pour que le marcheur quantique s'échappe de sa cage est reliée au biais de la variable  $\theta$  entre les sites  $b$  et  $c$  d'une même cellule,  $\theta_{as}(i) = (\theta_b(i) - \theta_c(i))/2$ . Plus précisément, on peut montrer qu'il est proportionnel à  $\sin^2 \theta_{as}(i)$ . Cette quantité joue donc le rôle des taux de transition aléatoires et on choisit aléatoirement  $\theta_{as}$  suivant une distribution :

$$\begin{cases} \mathcal{P}(\theta_{as}) = (1 - \alpha)/2(2/\pi)^{1-\alpha} |\theta_{as}|^{-\alpha} & \text{pour } -\pi/2 \leq \theta_{as} \leq \pi/2 \\ \mathcal{P}(\theta_{as}) = 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{IV.3})$$

Le préfacteur devant  $|\theta_{as}|^{-\alpha}$  normalise la distribution. L'exposant  $\alpha$  règle le comportement de la distribution au voisinage de 0.

La combinaison symétrique des variables  $\theta$ ,  $\theta_s(t) = (\theta_b(t) + \theta_c(t))/2$  est choisie aléatoirement à chaque pas de temps (désordre dynamique) dans une distribution en forme de boîte  $[-\pi/2, \pi/2]$  et appliqué uniformément sur toute la chaîne. La distribution de la probabilité de fuite de la cage ( $L \equiv \sin^2 \theta_{as}$ ) proche de 0 est :

$$\mathcal{P}(\theta_{as})d\theta_{as} \underset{\theta_{as} \rightarrow 0}{\propto} |\theta_{as}|^{-\alpha} d\theta_{as} = \frac{(\arcsin \sqrt{L})^{-\alpha}}{\sqrt{L}\sqrt{1-L}} dL$$

$$\underset{L \rightarrow 0}{\sim} L^{-\frac{\alpha+1}{2}} dL$$

Ainsi on peut identifier l'exposant  $\mu$  du modèle de barrière aléatoire symétrique à l'exposant  $\alpha$  de la distribution des  $\theta_{as}$  :  $\mu = (1 - \alpha)/2$ . On obtient une diffusion anormale pour  $-1 < \alpha < 1$  dont l'exposant se comporte en  $\nu = (1 - \alpha)/(3 - \alpha)$ . Quand  $\alpha < -1$ , on retrouve le processus de diffusion standard en racine du temps et pour  $\alpha = -1$  on tombe sur le cas marginal  $\sqrt{t/\ln t}$  qui à très grands temps se comporte quasiment comme un processus diffusif. Ici, on s'est restreint pour  $\theta_{as}$  aux valeurs entre  $[-\pi/2, \pi/2]$  afin d'éviter les multiples de  $\pi$  qui joueraient un rôle important en raison de la périodicité du sinus intervenant dans la probabilité de fuite de la cage.

Sur chaque site rim de la chaîne de boucles,  $\theta_b$  et  $\theta_c$  sont composés d'une variable désordonnée gelée et dynamique tels que  $\theta_b(t, i) = \theta_s(t) + \theta_{as}(i)$  et  $\theta_c(t, i) = \theta_s(t) - \theta_{as}(i)$ .

On trace sur la Figure IV.9 différents écart-types, moyennés sur 100 réalisations du désordre, de la fonction d'onde du marcheur quantique en fonction des différentes valeurs de la puissance  $\alpha = 1/2, 0, -1/2, -1, -2$ . On obtient des exposants anormaux cohérents avec ce qui est prédit par le modèle classique de barrière aléatoire symétrique. Pour  $\alpha = 0.5$ , l'exposant anormal prédit est 0.2 et le fit donne 0.21. Pour les valeurs  $\alpha = 0$  et  $-0.5$ , les valeurs des exposants des fits respectifs sont légèrement supérieures, 0.35 et 0.46, à ce qui est prédit par la théorie, respectivement  $1/3$  et  $3/7 \simeq 0.43$ . Enfin pour le cas marginal  $\alpha = -1$  qui est censé donner une loi en  $\sqrt{t/\ln t}$ , ici on observe une loi de puissance 0.49. Il faudrait raffiner l'analyse pour retrouver le résultat prédit. Enfin, le comportement diffusif attendu pour  $\alpha = -2$  est retrouvé.

Enfin, on récapitule dans le Tableau IV.1, les principales propriétés des désordres étudiés dans la section IV.1 ainsi que leurs effets sur la fonction d'onde du marcheur quantique.

type de désordre	Désordre statique		Désordre dynamique			Désordre spatial et temporel
	hubs	rims	hubs	rims	mesures : projection de la fonction d'onde	
type de sites désordonnés						rims
brisure des cages	non	oui	oui	oui	oui	oui
$\gamma$ : exposant de l'écart-type	0	0	1/2	1/2	1/2	$0 < \gamma \leq 1/2$
mécanisme	cages de taille variable	Anderson	marche classique aléatoire			barrière aléatoire symétrique

Table IV.1 Récapitulatif des différents désordres étudiés et de leurs propriétés

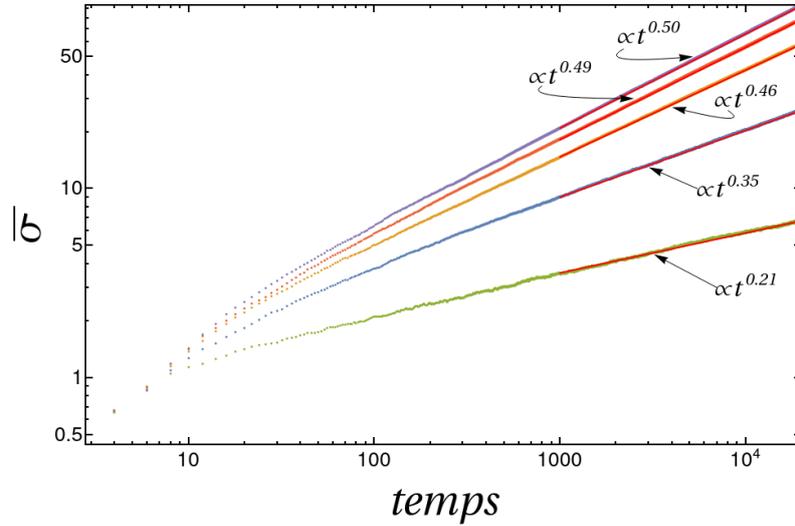


Fig. IV.9 Écart-types moyennés sur 100 réalisations du désordre pour un désordre statique sur la variable  $\theta_{as}$  de la forme de l'équation (IV.3) avec  $\alpha = 0.5, 0, -0.5, -1, -2$  et un désordre dynamique sur la variable  $\theta_s$  pris dans une distribution simple en forme de boîte. L'échelle double logarithmique permet de montrer un comportement en loi de puissance. Les fits réalisés sont de la forme  $at^b$  et l'exposant anormale  $b$  a pour valeur, respectivement, 0.21, 0.35, 0.46, 0.49, 0.50 proches des exposants prédits par la théorie qui sont  $1/5, 1/3, 3/7, 0.5, 0.5$ .

## IV.2 Deux marcheurs quantiques distinguables en interaction

Dans cette section, on va s'intéresser à l'effet d'un deuxième marcheur distinguable en interaction avec le premier sur la chaîne de boucles. On obtiendra des résultats similaires au cas hamiltonien [125], notamment la création d'un état lié pouvant se déplacer sur toute la chaîne mais avec une probabilité strictement nulle d'être séparés de plus de 4 cellules.

On commencera tout d'abord par définir l'espace de Hilbert total des deux marcheurs et décrire le réseau sur lequel ils évoluent. Dans un premier temps, on fera une revue du cas sans interaction. On introduira, ensuite, l'interaction via une modification des dés par une phase et on analysera les spectres obtenus. Enfin, on étudiera l'entropie d'intrication créée par l'interaction comme une mesure de l'espace accessible aux deux marcheurs.

### IV.2.1 Espace de Hilbert

On rappelle, que dans le problème à un corps, il y a trois sites par cellule sur la chaîne de boucles : un site hub  $a$  avec quatre voisins (deux sites  $b$  et deux sites  $c$ ) et deux sites rims ( $b$  et  $c$ ) avec chacun deux voisins hubs. Ici, on prendra comme cellule unité un site hub et les deux sites rims situés à sa droite. Dans le cas de la marche quantique, chaque site est habillé par ses états internes, leur nombre est égal à la coordinence du site. Il y a en tout 8 états internes par cellule (voir Figure III.7).

Pour le problème à deux corps, l'espace de Hilbert est le produit tensoriel de deux espaces

de Hilbert du problème à un corps. On considère deux marcheurs quantiques distinguables. Le réseau devient donc une structure bidimensionnelle avec  $8 \times 8 = 64$  états internes par cellule distribués sur  $3 \times 3 = 9$  sites que l'on notera :  $(a, a)$ ,  $(a, b)$ ,  $(a, c)$ ,  $(b, a)$ ,  $(b, b)$ ,  $(b, c)$ ,  $(c, a)$ ,  $(c, b)$ ,  $(c, c)$ . La première (resp. seconde) composante représente le site du premier (resp. second) marcheur quantique. Le seul site de type "hub-hub" (i.e. les deux marcheurs quantiques sont chacun sur un site hub) est le site  $(a, a)$ , il contient 16 états internes. Les sites de type "rim-rim" (i.e. les deux marcheurs quantiques sont chacun sur un site rim) sont les sites  $(b, b)$ ,  $(b, c)$ ,  $(c, b)$  et  $(c, c)$ , ils contiennent chacun 4 états internes. Enfin les sites de type "hub-rim" (i.e. le premier marcheur est sur un site hub et le second sur un site rim) :  $(a, b)$  et  $(a, c)$  ou de type "rim-hub" (i.e. le premier marcheur est sur un site rim et le second sur un site hub) :  $(b, a)$  et  $(c, a)$  contiennent 8 états internes chacun.

Dans ce graphe 2D on a deux sous-réseaux déconnectés. Le premier sous-réseau s'obtient en partant du site  $(a, a)$  et en regardant les sites atteignables depuis ce site. On atteint alors seulement les sites rim-rim :  $(b, b)$ ,  $(b, c)$ ,  $(c, b)$  et  $(c, c)$ . Il faut également déterminer à quelles cellules appartiennent ces différents sites. Supposons que l'on soit parti du site  $(a, a)$  sur la cellule  $(n, m)$ . Depuis un site hub, les marcheurs quantiques peuvent aller sur les sites rims de leur propre cellule ou bien de la cellule précédente. Ainsi, les cellules atteignables depuis le site  $(a, a)$  de la cellule  $(n, m)$  sont  $(n, m)$ ,  $(n-1, m)$ ,  $(n, m-1)$  et  $(n-1, m-1)$  et arrivent donc sur l'un des 4 sites de type rim-rim. Ces sites rim-rim sont quant à eux connectés seulement à des sites  $(a, a)$  qui ont pour indice de cellule  $(n, m)$ ,  $(n+1, m)$ ,  $(n, m+1)$  et  $(n+1, m+1)$ . Cela forme alors le premier sous-réseau représenté Figure IV.10. Chaque cellule est donc composée de 5 sites : le site hub-hub et les 4 sites rim-rim avec au total  $16 + 4 \times 4 = 32$  états internes dans la cellule.

Le second sous-réseau est composé des sites restants de types rim-hub et hub-rim :  $(a, b)$ ,  $(a, c)$ ,  $(b, a)$  et  $(c, a)$ . Les sites  $(a, b)$  et  $(a, c)$  de la cellule  $(n, m)$  sont connectés aux sites  $(b, a)$  et  $(c, a)$  des cellules  $(n, m)$ ,  $(n-1, m)$ ,  $(n, m+1)$  et  $(n-1, m+1)$ . De la même façon, les sites  $(b, a)$  et  $(c, a)$  de la cellule  $(n, m)$  sont connectés aux sites  $(a, b)$  et  $(a, c)$  des cellules  $(n, m)$ ,  $(n+1, m)$ ,  $(n, m-1)$  et  $(n+1, m-1)$ . On représente Figure IV.11 ce deuxième sous-réseau. Chaque cellule contient donc les 4 différents sites de types hub-rim ou rim-hub et ont au total  $4 \times 8 = 32$  états internes.

## IV.2.2 Cas sans interaction

Soit  $W_2 = W_1 \otimes W_1$  où  $W_1$  est l'opérateur unitaire de marche quantique à un corps et  $W_2$  celui à deux corps. Pour l'opérateur à deux corps, l'opérateur de translation reste hermitique et unitaire et encode les liens des sous-réseaux 1 et 2 construits à la section précédente (voir Figures IV.10, IV.11). L'opération de dé est également le produit tensoriel des dés à un corps. Plus précisément, pour les sites de type hub-hub, (ayant 16 états internes) le dé utilisé est soit le dé  $H_4 \otimes H_4$  soit  $G_4 \otimes G_4$ . Pour les sites rim-rim, le dé utilisé est  $U_2(\theta, \varphi, \omega, \beta) \otimes U_2(\theta, \varphi, \omega, \beta)$ . Pour les sites hub-rim, on utilisera soit le dé  $H_4 \otimes U_2(\theta, \varphi, \omega, \beta)$  soit  $G_4 \otimes U_2(\theta, \varphi, \omega, \beta)$ . Enfin, pour les sites rim-hub, ce sera  $U_2(\theta, \varphi, \omega, \beta) \otimes H_4$  ou  $U_2(\theta, \varphi, \omega, \beta) \otimes G_4$ .

On s'attend à ce que les cages tiennent dans le cas sans interaction car la dynamique est le produit des deux dynamiques à un corps. On donne un exemple de dynamique piégée (et périodique) pour deux marcheurs partant sur un site  $(a, a)$  Figure IV.12.

Les quasi-énergies du problème à deux corps sont la somme des quasi-énergies à un corps

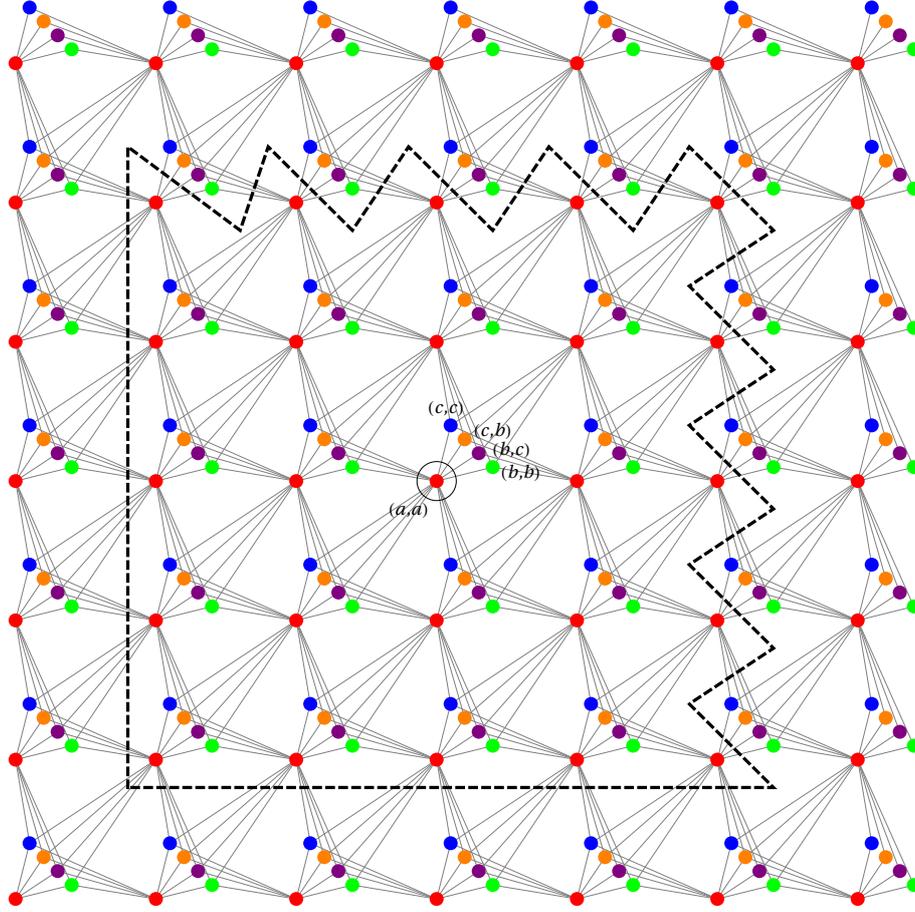


Fig. IV.10 Une portion du premier sous-réseau du problème à deux marcheurs sur la chaîne de boucles avec les sites de type hub-hub et rim-rim :  $(a, a)$ ,  $(b, b)$ ,  $(b, c)$ ,  $(c, b)$  et  $(c, c)$  (coloriés respectivement en rouge, vert, violet, orange, bleu). La direction horizontale (resp. verticale) représente la position du premier (resp. second) marcheur quantique. Les pointillés noirs indiquent l'extension maximale de la cage (au flux critique) pour deux marcheurs sans interaction et initialement localisés sur le site  $(a, a)$  encerclé. Les états internes ne sont pas représentés.

(voir Figure IV.13) :

$$\begin{aligned} W_2 |\psi\rangle &= W_1 |\psi_1\rangle \otimes W_1 |\psi_2\rangle \\ e^{-iE(k_1, k_2)} |\psi\rangle &= e^{-i\varepsilon(k_1)} |\psi_1\rangle \otimes e^{-i\varepsilon(k_2)} |\psi_2\rangle \end{aligned}$$

où  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$  sont les vecteurs propres du problème à un corps. Les vecteurs propres du problème à deux corps sans interaction sont donc  $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$  et leurs quasi-énergies  $E(k_1, k_2) = \varepsilon(k_1) + \varepsilon(k_2)$ . Les spectres des sous-réseaux 1 et 2 sont les mêmes.

Connaissant les quasi-énergies du problème à un corps, on peut alors facilement en déduire ceux du problème à deux corps et leur dégénérescence. Par exemple, les quasi-énergies de la marche quantique, utilisant un dé de Grover sur les sites hubs et les paramètres  $\theta = \pi/4$

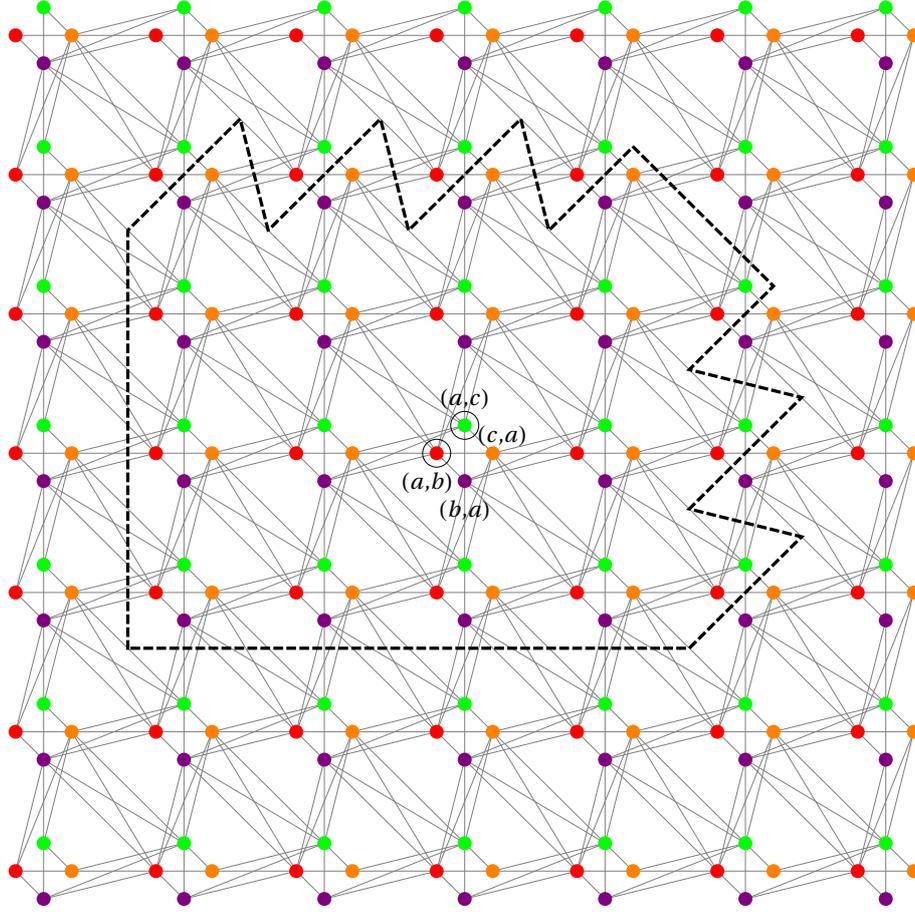


Fig. IV.11 Une portion du second sous-réseau du problème de deux marcheurs quantiques sur la chaîne de boucles avec les sites de type hub-rim ou rim-hub :  $(a, b)$ ,  $(a, c)$ ,  $(b, a)$ ,  $(c, a)$  et  $(c, c)$  (coloriés respectivement en rouge, vert, violet et orange). Les pointillés noirs indiquent l'extension maximale de la cage (au flux critique) pour un site initial localisé soit sur le site  $(a, b)$  soit sur le site  $(a, c)$  encerclé. Les états internes ne sont pas représentés.

and  $\omega = \beta = \varphi = 0$  pour le dé des sites rims au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ , ont pour expression pour le problème à un corps :  $\varepsilon = 0, \pm\pi/2, \pm3\pi/8, \pm5\pi/8, \pi$  et ne sont pas dégénérées (pour un quasi-moment fixé). Les quasi-énergies du problème à deux corps sont donc  $E = 0, \pi$  (dégénérées 8 fois par quasi-moment),  $E = \pm\pi/2, \pm3\pi/8, \pm5\pi/8, \pm\pi/8, \pm7\pi/8$  (dégénérées 4 fois par quasi-moment) et  $E = \pm\pi/4, \pm3\pi/4$  (dégénérées 2 fois par quasi-moment). Sur la Figure IV.13-b (resp. Figure IV.13-a) représentant le spectre en fonction du flux  $\Phi$  pour le problème à deux corps, on observe alors encore un pincement des quasi-énergies au flux critique  $\Phi_c = 0$  (resp.  $\Phi_c = 1/2$ ) pour le dé de Hadamard (resp. Grover) sur les sites hubs et un dé  $U_2(\pi/4, 0, 0, 0)$  pour les sites rims.

Au flux critique  $\Phi_c$ , les états propres du problème à deux corps sans interaction peuvent être notés  $|n_1, \varepsilon_1, n_2, \varepsilon_2\rangle$  où  $|n_i, \varepsilon_i\rangle$  est l'état propre d'extension minimale du marcheur  $i$  décrit dans la section III.2 et montré Figure III.10. On rappelle que cet état propre d'extension minimale a du poids sur 3 cellules de la chaîne de boucles,  $n_i$  est l'indice de la cellule du milieu

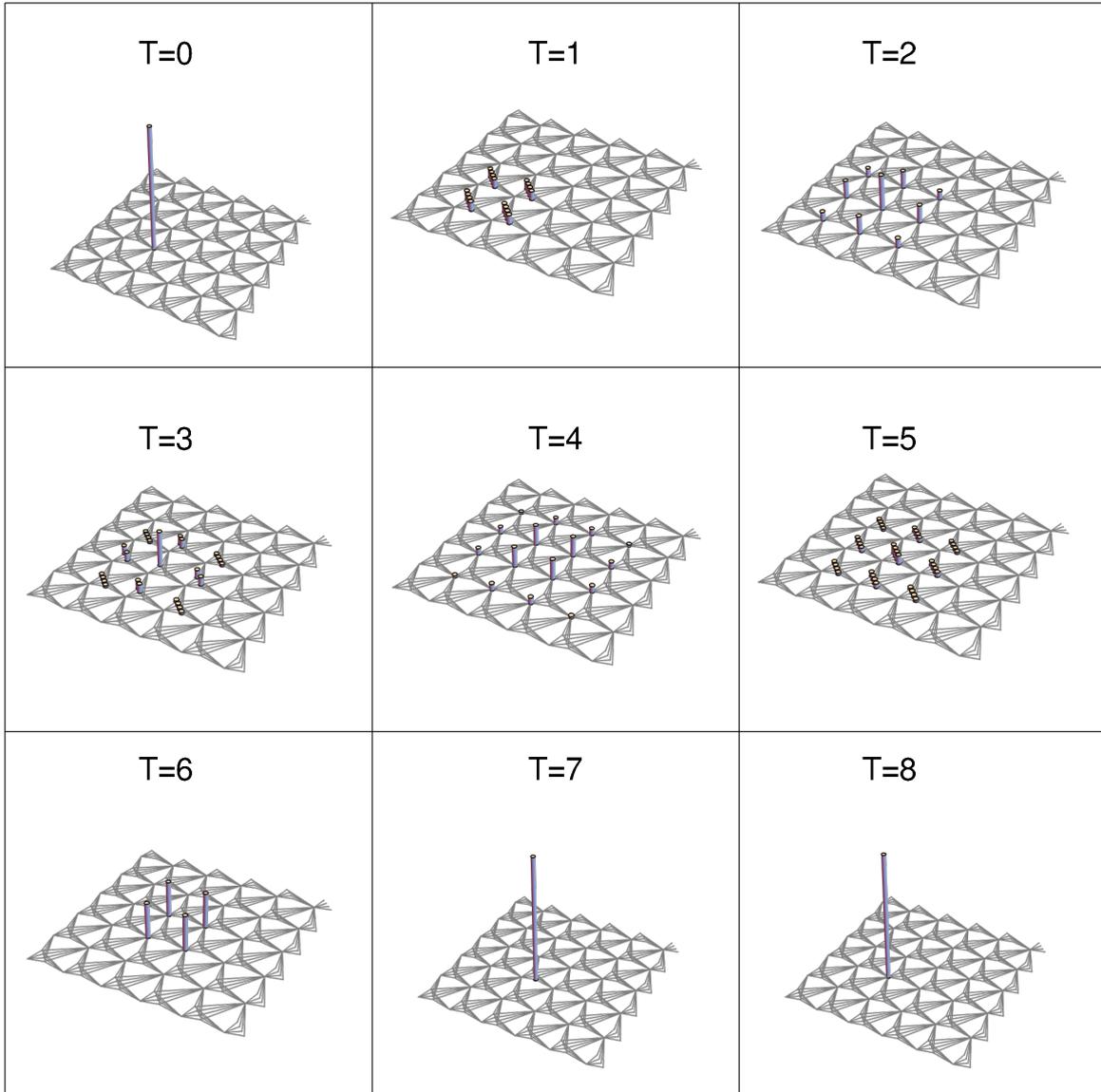


Fig. IV.12 Évolution de deux marcheurs quantiques sans interaction sur la chaîne de boucles avec une cage de période 8. Les deux marcheurs se trouvent sur le sous-réseau 1. On utilise sur les sites hubs le dé de Grover et sur les sites rims le dé  $U_2(\pi/4, 0, 0, -\pi/2)$  au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ . La probabilité de présence sur chaque état interne est tracée.

et  $\varepsilon_i$  sa quasi-énergie associée. Le nombre d'états propres pour le secteur à une particule est de  $8L$  et pour celui à deux particules de  $64L^2$ .

### IV.2.3 Cas avec interaction

On ajoute un terme d'interaction lorsque les deux marcheurs sont sur le même site. Par conséquent, seule la dynamique sur le premier sous-réseau est affectée par l'interaction. Les sites  $(a, a)$ ,  $(b, b)$  et  $(c, c)$  localisés sur la diagonale ( $n = m$ ) sont les seuls sites perturbés par

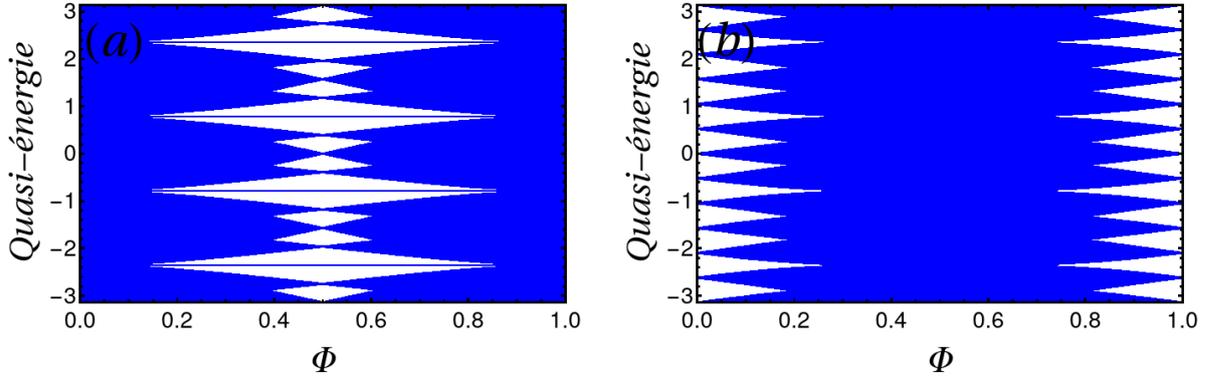


Fig. IV.13 Spectres en fonction du flux magnétique  $\Phi$  pour le problème à deux corps (a) : en utilisant un dé de Grover, (b) : en utilisant un dé de Hadamard sur les sites hubs. Le dé utilisé sur les sites rims est  $U_2(\pi/4, 0, 0, 0)$ .

l'interaction. La façon standard de simuler une interaction de Hubbard (potentiel sur site pour les systèmes hamiltoniens) pour les marches quantiques est de multiplier par une phase  $e^{i\phi}$  les dés sur les sites concernés [149–155] où  $\phi$  joue un rôle similaire au potentiel sur site  $U$  dans le modèle de Hubbard.

On se concentre alors sur le premier sous-réseau où la dimension de l'espace de Hilbert associé est de  $32L^2$ . Dans la section précédente, on a trouvé  $64L^2$  vecteurs propres dans le cas sans interaction vivant sur les deux sous-réseaux. Ces vecteurs propres projetés sur l'un des deux sous-réseaux ne forment alors plus une base, cette famille de vecteurs devient surnuméraire. Il faut alors sélectionner parmi ces  $64L^2$  vecteurs seulement  $32L^2$  vecteurs indépendants. On peut montrer qu'en sélectionnant les états correspondants aux quasi-énergies (sans interaction)  $\varepsilon_1 = 0, \pi/2, 3\pi/8, -3\pi/8$ , on reforme une base de l'espace de Hilbert restreint au premier sous-réseau.

Les invariances par translation suivant les directions naturelles  $x$  (position du premier marcheur) et  $y$  (position du second marcheur) sont brisées par le terme d'interaction. Cependant, l'invariance par translation suivant la direction du centre de masse  $x_+ = \frac{x+y}{2}$  reste une symétrie. On peut donc indexer le problème par le quasi-moment  $k_+$  associé à la direction  $x_+$ . Par conséquent, pour chaque  $k_+$ , le problème devient unidimensionnel dans la direction de la position relative  $x_- = x - y$  avec un potentiel sur le site  $x_- = 0$ .

La symétrie totale de la fonction d'onde sous l'échange des deux particules est conservée. On note les parties symétriques  $S$  et antisymétriques  $AS$  des vecteurs propres (sans interaction) :

$$|n_1, \varepsilon_1, n_2, \varepsilon_2\rangle_{S/AS} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n_1, \varepsilon_1, n_2, \varepsilon_2\rangle \pm |n_2, \varepsilon_2, n_1, \varepsilon_1\rangle)$$

si  $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$  ou  $n_1 \neq n_2$ . On peut également les exprimer en fonction du quasi-moment  $k_+$  qui

est conservé dans le problème en interaction :

$$|\psi_j(k_+, \varepsilon_1, \varepsilon_2)\rangle_{S/AS} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=0}^{L-1} e^{-ink_+} |n, \varepsilon_1, n+j, \varepsilon_2\rangle_{S/AS}$$

où  $j \in [0, L-1]$  est un entier,  $n+j$  est défini modulo  $N$ .

Quand l'état initial est loin de la coordonnée  $x_- = 0$ , les cages des deux marcheurs ne s'intersectent pas, elles restent alors inchangées. En fait, seulement quelques états sont affectés par l'interaction :  $|\psi_0(k_+, \varepsilon_1, \varepsilon_2)\rangle_{S/AS}$ ,  $|\psi_1(k_+, \varepsilon_1, \varepsilon_2)\rangle_{S/AS}$  et  $|\psi_2(k_+, \varepsilon_1, \varepsilon_2)\rangle_{S/AS}$  et ne sont plus vecteurs propres du problème en interaction. Cependant les sous-espaces générés par les familles de vecteur  $\{|\psi_0(k_+, \varepsilon, \varepsilon')\rangle_{S/AS}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$ ,  $\{|\psi_1(k_+, \varepsilon, \varepsilon')\rangle_{S/AS}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  et  $\{|\psi_2(k_+, \varepsilon, \varepsilon')\rangle_{S/AS}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  (avec  $\varepsilon, \varepsilon'$  parcourants les différentes valeurs de quasi-énergies possibles) restent orthogonaux entre eux.

A  $x_- = 0$ , suivant la direction  $x_+$ , l'interaction change la dynamique des deux marcheurs quantiques, les cages sont brisées comme le montre la Figure IV.14.

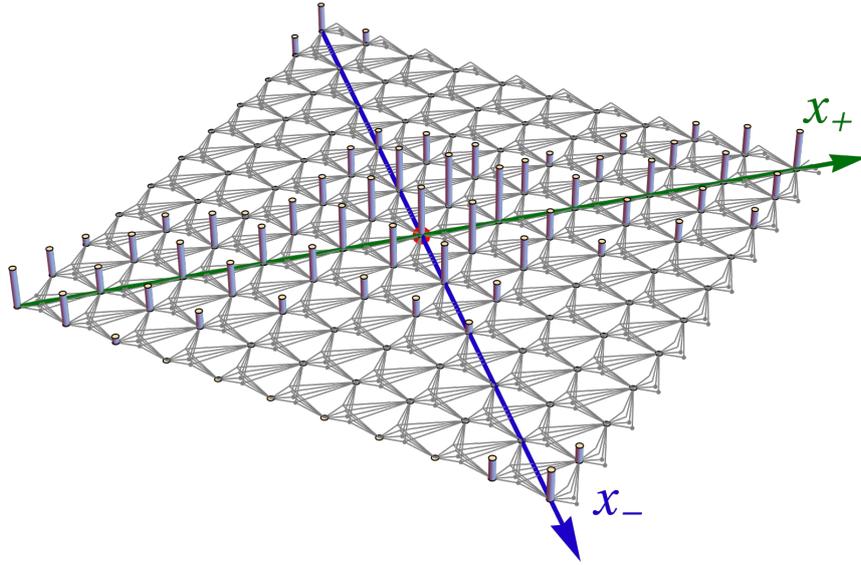


Fig. IV.14 La probabilité de présence des deux marcheurs sur chaque site est montrée après  $T = 50$  pas de temps en utilisant un dé de Hadamard sur les sites hubs et un dé  $U_2(\pi/4, 0, 0, 0)$  sur les sites rims au flux critique  $\Phi_c = 0$  avec une interaction  $\phi = 2$ . Les marcheurs quantiques ont démarré du site  $(a, a)$  à la cellule d'indice  $(5, 5)$  dans une configuration de spin tirée aléatoirement. Le site initial est indiqué par un disque rouge. On a choisi des conditions aux bords périodiques. La flèche verte (resp. bleue) indique la direction du centre de masse  $x_+$  (resp. la position relative  $x_-$ ).

La Figure IV.14 met en lumière également la création d'un état extrêmement lié qui peut se déplacer sur toute la chaîne mais où les deux marcheurs quantiques ne peuvent être séparés de plus de 4 cellules. Par conséquent, les spectres de ces marches quantiques ne pincent plus au flux critique. Les bandes plates à ces flux sont remplacées par des bandes dispersives qui

sont une conséquence de la destruction de ces cages dans la direction  $x_+$ . Les marcheurs quantiques s'échappent de leur cages balistiquement.

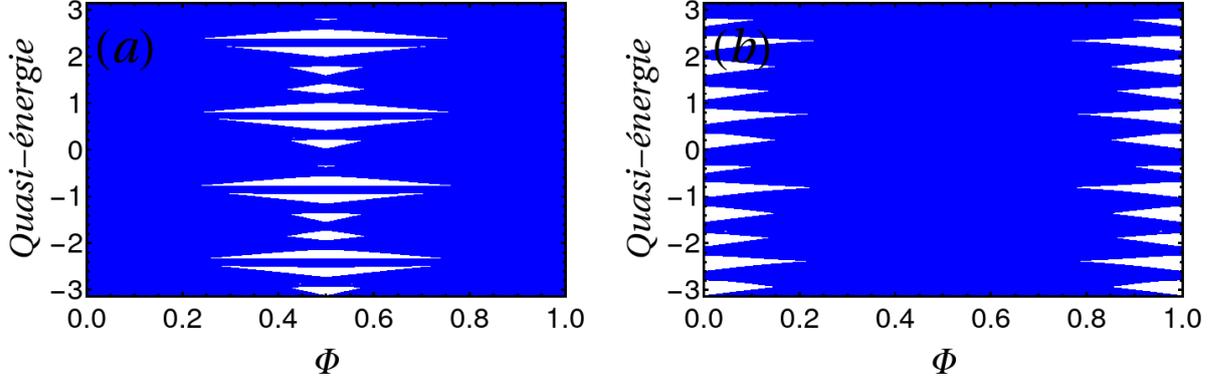


Fig. IV.15 Spectres en fonction du flux  $\Phi$  pour des marcheurs quantiques en interaction utilisant (a) : un dé de Grover, (b) un dé de Hadamard, un dé sur les sites rims  $U_2(\pi/4, 0, 0, 0)$  et une interaction  $\phi = 0.1\pi$ . Il n'y a plus de pincement au flux critique si l'on compare au cas sans interaction (voir Figure IV.13)

Comme dans [125] (version hamiltonienne), on observe deux familles d'énergies dépendantes de l'interaction : des bandes dispersives et non-dispersives (plates). Les bandes dispersives sont seulement dues aux sous-espaces  $\{|\psi_0(k_+, \varepsilon, \varepsilon')\rangle_{S/AS}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$ , elles sont à l'origine de la brisure des cages. Au contraire les énergies associées aux sous-espaces  $\{|\psi_1(k_+, \varepsilon, \varepsilon')\rangle_{S/AS}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  et  $\{|\psi_2(k_+, \varepsilon, \varepsilon')\rangle_{S/AS}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  dépendent de l'interaction  $\phi$  mais les bandes restent plates (voir Figure IV.16).

Ainsi, l'effet de l'interaction peut mener à différents comportements dépendants du sous-espace considéré. On conclut de l'analyse détaillée donnée en Annexe F que, les sous-espaces générés par  $\{|n, \varepsilon, n+2, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  pour un  $n$  fixé sont stables sous l'opérateur de marche quantique en interaction.

Les sous-espaces générés par  $\{|n, \varepsilon, n+1, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  ne sont, quant à eux, plus stables sous l'opérateur en interaction mais on peut retrouver un sous-espace stable de dimension plus grande  $\{|n, \varepsilon, n+1, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'} \oplus \{|n+1, \varepsilon, n, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$ . Ils mélangent les états de position relative  $x_- = \pm 1$  mais donnent encore une dynamique piégée avec une cage plus grande.

Enfin, le sous-espace minimal stable pour les vecteurs propres de position relative  $x_- = 0$  mélange entièrement les différentes positions du centre de masse :  $\bigoplus_n \{|n, \varepsilon, n, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$ , c'est cette dernière famille qui mène à la destruction des cages.

#### IV.2.4 Entropie d'intrication

L'entropie de von Neumann [156] est un objet qui a été largement étudié pour quantifier l'intrication d'un système bipartite. Dans le cas d'un seul marcheur quantique, l'entropie d'intrication entre la variable interne et la position a été analysée dans [157–160]. Pour deux marcheurs quantiques sur une chaîne, plusieurs articles ont déjà proposé de regarder l'intri-

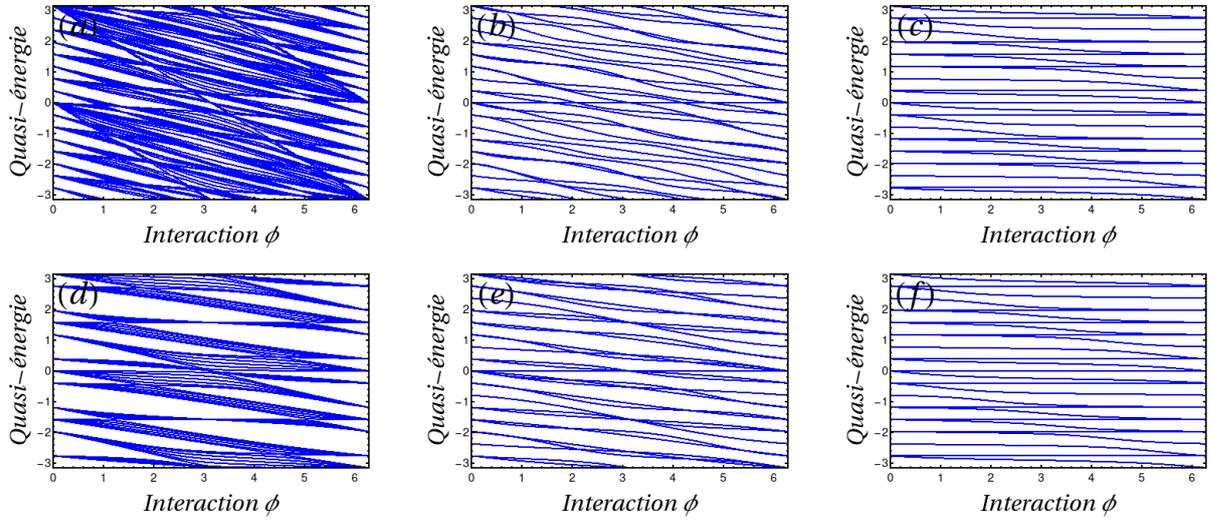


Fig. IV.16 Spectres de quasi-énergies en fonction de l'interaction  $\phi$  au flux critique  $\Phi_c = 1/2$  en utilisant le dé de Grover sur les sites hubs et le dé  $U_2(\pi/4, 0, 0, 0)$  sur les sites rims. Les Figures du haut : (a), (b), (c) (resp. du bas : (d), (e), (f) ) sont les parties symétriques (resp. antisymétriques) du spectre. Les Figures de gauche : (a) et (d) sont les spectres associés au sous-espace  $|\psi_0\rangle$ , les Figures du milieu : (b) et (e) sont associés au sous-espace  $|\psi_1\rangle$  et les Figures de droite : (c) et (f) sont associés au sous-espace  $|\psi_2\rangle$ . Les spectres associés à  $|\psi_0\rangle_{S/AS}$  dépendent de  $k_+$  (dispersifs), ils permettent un mouvement du centre de masse et donc la destruction des cages. Les 4 autres spectres restent plats, ils ne détruisent pas les cages mais leurs quasi-énergies dépendent du paramètre d'interaction  $\phi$ .

cation entre les deux marcheurs en utilisant cette entropie [150, 152, 154, 161]. Pour obtenir cette mesure de l'intrication, l'entropie de von Neumann est définie à partir de la matrice densité  $\rho$  associée à l'état  $|\psi\rangle$ . En traçant ensuite sur l'une ou l'autre des particules (ici la particule 2) on obtient la matrice densité réduite  $\rho_1 = \text{Tr}_2 \rho$  qui est semi-définie positive et  $\|\rho\| \leq 1$ . L'entropie de von Neumann est  $S(\rho_1) = -\text{Tr}(\rho_1 \log_2 \rho_1) = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i$  où  $0 \leq \lambda_i \leq 1$  sont les valeurs propres de la matrice densité réduite. Elles correspondent à la probabilité d'être dans l'état donné par leur vecteur propre. De plus, l'entropie maximale est donnée pour une matrice réduite proportionnelle à l'opérateur identité (avec un facteur  $1/N$  si  $N$  est la dimension du sous-espace d'une particule) et correspond à un mélange égal des différents états possibles (aucune information sur le sous-système). L'entropie de von Neumann est alors de  $\log_2(N)$ .

Lorsque les deux particules n'interagissent pas, soit parce que  $\phi = 0$ , soit parce qu'elles vivent sur le deuxième sous-réseau, soit parce que leurs cages ne se chevauchent pas, l'intrication entre les deux particules ne devrait pas changer au cours du temps, car la dynamique reste le produit tensoriel des deux opérateurs de marche quantique à un corps.

Lorsque des marcheurs quantiques interagissent, on examine l'évolution de l'intrication entre les particules pour différents états initiaux intriqués. Les 9 états initiaux considérés sont :

1. Sur le même site  $a$  (la diagonale)

état initial	i	ii	iii
1 : $(n, n)$	$\{ n, \varepsilon, n, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$	$\{ n, \varepsilon, n, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'} \oplus \{ n+1, \varepsilon, n+1, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$	$\bigoplus_{i=-1}^1 \{ n+i, \varepsilon, n+i, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$
2 : $(n, n-1)$	$\{ n, \varepsilon, n-1, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$	$\{ n, \varepsilon, n-1, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'} \oplus \{ n+1, \varepsilon, n, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$	$\bigoplus_{i=-1}^1 \{ n+i, \varepsilon, n+i-1, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$
3 : $(n, n-2)$	$\{ n, \varepsilon, n-2, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$	$\{ n, \varepsilon, n-2, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'} \oplus \{ n+1, \varepsilon, n-1, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$	$\bigoplus_{i=-1}^1 \{ n+i, \varepsilon, n+i-2, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$

Table IV.2 Sous-espaces de départ sur lesquels vivent les 9 différents états initiaux

2. Sur les sites  $a$  voisins (la sous-diagonale)
3. Sur les sites  $a$  second voisins (la deuxième sous-diagonale)

avec une configuration de spin initiale :

- i)  $(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle) \otimes (|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle)$  (état séparable  $\Rightarrow$  entropie  $S = 0$ )
- ii)  $|11\rangle + |44\rangle$  (état intermédiaire intriqué d'entropie  $S = 1$ )
- iii)  $|11\rangle + |22\rangle + |33\rangle + |44\rangle$  (état d'intrication maximale  $\Rightarrow$  entropie  $S = 2$ )

On étudie l'évolution des états à l'aide d'un dé de Grover au flux critique  $\Phi_c = 1/2$ . On caractérise les différents états initiaux par leur poids sur les différentes familles de vecteurs  $\{|n, \varepsilon, n', \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  car ces sous-espaces sont stables pour  $n' \neq n, n \pm 1$  (voir sous-section IV.2.3). Pour  $n' = n \pm 1$ , les sous-espaces  $\{|n, \varepsilon, n+1, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'} \oplus \{|n+1, \varepsilon, n, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  sont stables  $\forall n$ . Pour  $n' = n$ , le sous-espace  $\{|n, \varepsilon, n, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon', n}$  est stable (notez l'indice  $n$  sur la famille de vecteurs qui va de 0 à  $L-1$ ). Les sous-espaces de départ auxquels appartiennent les états initiaux sont résumés dans le tableau IV.2.

L'état initial 1 pour toute configuration initiale de spin i), ii), iii) vit sur le sous-espace stable généré par  $\{|n, \varepsilon, n, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon', n}$ . Par conséquent, ces états brisent les cages. Au contraire, les conditions initiales 2 et 3 ne brisent pas les cages mais leur dynamique est affectée par l'interaction car elles n'ont du poids que sur, respectivement, le sous-espace  $\{|n, \varepsilon, n-1, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  et  $\{|n, \varepsilon, n-2, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$ . Pour les conditions initiales 2 et 3, le sous-espace stable sur lequel vivent les deux marcheurs dépend de la configuration de spin initiale. Pour la condition initiale 2, les sous-espaces stables sont :

- i)  $\{|n, \varepsilon, n-1, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'} \oplus \{|n-1, \varepsilon, n, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$
- ii)  $\bigoplus_{i=0}^1 \{|n-i, \varepsilon, n+1-i, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'} \oplus \{|n+1-i, \varepsilon, n-i, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$
- iii)  $\bigoplus_{i=-1}^1 \{|n+i, \varepsilon, n+i-1, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'} \oplus \{|n+i-1, \varepsilon, n+i, \varepsilon'\}\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$

Pour la condition initiale 3, le sous-espace stable est le sous-espace de départ indiqué dans le tableau IV.2.

L'entropie maximale qu'une particule peut atteindre sur la chaîne de boucles de taille  $L$  devrait être de  $\log_2(8L)$ . Cependant, comme nous partons d'une condition initiale sur le premier sous-réseau (un site  $(a, a)$ ), les sites hubs et rims ne peuvent pas être intriqués entre eux car les marcheurs n'explorent pas le second sous-réseau. Ainsi, l'entropie maximale est de  $\log_2(4L) = 2 + \log_2(L)$ .

Les Figures IV.17-a,b,c montrent l'intrication des états avec ces conditions initiales au cours du temps. La Figure IV.17-a correspond à la condition initiale 1, les 3 différentes configurations de spin saturent à une valeur comprise entre 3 et 4 qui n'est pas l'entropie

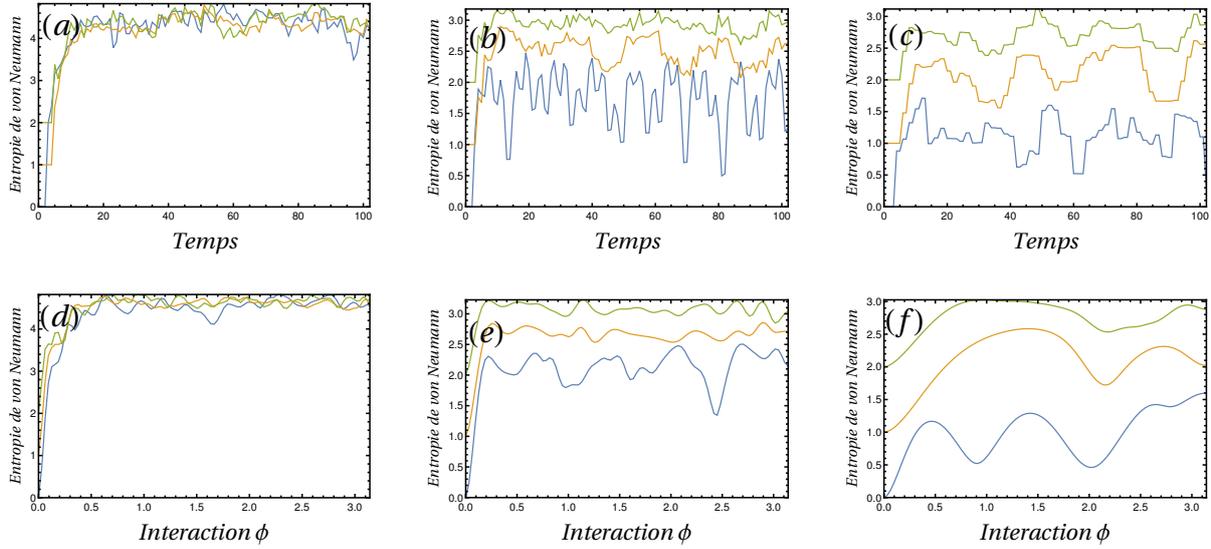


Fig. IV.17 *Intrication pour différentes conditions initiales.* La marche quantique est réalisée sur une chaîne de boucles de longueur 10 avec un angle de mélange  $\theta = 1$  et  $\varphi = \beta = \omega = 0$  et un dé de Grover à  $\Phi = 1/2$ . En haut (Figures (a),(b),(c)) : évolution de l'entropie de von Neumann par rapport au temps avec une interaction maximale  $\phi = \pi$ . En bas (Figures (d),(e),(f)) : l'entropie de von Neumann est tracée par rapport à l'interaction  $\phi$  à un temps fixe  $t = 51$ . À gauche (Figures (a) et (d)) : condition initiale 1 (les marcheurs quantiques sont sur le même site  $a$ ). Au milieu (Figures (b) et (e)) : condition initiale 2 (les marcheurs quantiques sont sur des sites  $a$  plus proches voisins). À droite (Figures (c) et (f)) : condition initiale 3 (les marcheurs quantiques sont sur des sites  $a$  deuxième voisins). Pour chacune de ces positions initiales, les 3 configurations internes  $i$ ) (lignes bleues),  $ii$ ) (lignes orange),  $iii$ ) (lignes vertes) sont tracées.

maximale (la taille de la chaîne de boucles est de 10, l'entropie maximale est  $2 + \log_2(10) \simeq 5.3$ ). On peut vérifier que la valeur de saturation dépend de la taille de la chaîne de boucles considérée (par exemple pour une chaîne de boucles  $L = 20$  elle est comprise entre 5 et 6 tandis que la valeur maximale de l'entropie est de  $2 + \log_2(20) \simeq 6.3$ ).

Pour les conditions initiales 2 et 3, l'entropie sature à des valeurs inférieures à la condition 1 car ces états sont piégés donc ils visitent moins de sites. De plus, la cage de l'état 3 étant plus petite que celle de l'état 2 (pour deux configurations de spin identiques), son entropie tend également à être plus faible.

Une autre différence avec la condition initiale 1 est que ces valeurs de saturation sont différentes d'une configuration interne à l'autre. Si l'entropie de départ est faible, la valeur de saturation sera plus faible. C'est une conséquence du fait que les sous-espaces stables associés aux différentes configurations de spin sont différents. L'entropie est limitée par la dimension du sous-espace stable associé. L'entropie maximale pour l'état 2, avec, respectivement, les configurations de spin  $i$ ),  $ii$ ),  $iii$ ) est  $S = 3, 4, 4 + \log_2(3)$  et pour l'état 3 est  $S = 2, 3, 3 + \log_2(3)$ . Au contraire pour l'état 1, la rupture des cages permet au centre de masse de se déplacer librement sur la chaîne de boucles. Cela signifie que l'ensemble des vecteurs  $\{|n, \varepsilon, n, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon', n}$  seront potentiellement atteints par l'état initial 1 pour toutes configurations internes initiales.

$n_1 \backslash n_2$	0	1	2	3
0	x	2	3	$2 + \log_2(3) \simeq 3,58$
1	3	$2 + \log_2(3) \simeq 3,58$	4	$2 + \log_2(5) \simeq 4,32$
2	4	$2 + \log_2(5) \simeq 4,32$	$3 + \log_2(3) \simeq 4,58$	$2 + \log_2(7) \simeq 4,81$
3	$3 + \log_2(3) \simeq 4,58$	$2 + \log_2(7) \simeq 4,81$	5	x

Table IV.3 Entropie maximale pour différents états initiaux localisés sur un site et avec  $n_0 = 0$ .

Ces 3 états initiaux auront donc accès au même sous-espace, et dans ce cas on observe que l'intrication tend vers la même valeur.

Enfin, les oscillations de l'entropie au cours du temps semblent diminuer en fonction de la distance initiale entre les deux marcheurs. Plus les marcheurs quantiques sont initialement proches, plus les oscillations sont rapides. Les Figures IV.17-d,e,f montrent que les variations de l'intrication par rapport au paramètre d'interaction semblent également plus rapides pour des marcheurs quantiques initialement plus proches et confirment cette corrélation entre la sensibilité à l'intrication et les conditions initiales.

La valeur de saturation et l'entropie maximale dépendent de la dimension du sous-espace stable sur lequel vit l'état initial. On peut caractériser l'entropie maximale par 3 nombres  $(n_0, n_1, n_2)$ . La variable  $n_0$  indique si le marcheur quantique vit ( $n_0 = 1$ ), ou non ( $n_0 = 0$ ) sur  $\{|n, \varepsilon, n, \varepsilon'\}_{\varepsilon, \varepsilon', n}$ .  $n_1$  est le nombre de sous-espaces stables différents de type  $\{|n, \varepsilon, n+1, \varepsilon'\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$   $\oplus$   $\{|n+1, \varepsilon, n, \varepsilon'\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  et  $n_2$  le nombre de sous-espaces de type  $\{|n, \varepsilon, n \pm 2, \varepsilon'\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  sur lequel vit l'état initial. L'entropie maximale associée à ces 3 nombres est  $S_{max}(n_0, n_1, n_2) = n_0 \times (3 + \log_2(L)) + \log_2(16 \times n_1 + 8 \times n_2) = n_0 \times (3 + \log_2(L)) + 3 + \log_2(2n_1 + n_2)$ . Pour un état initial localisé sur un site  $(a, a)$ ,  $n_1$  et  $n_2$  ne peuvent être supérieurs à 3. Le Tableau IV.3 résume les différentes entropies maximales pour de tels états et  $n_0 = 0$ . Un état commençant sur des sites  $(a, a)$  ne peut pas intriquer des sites rims avec des sites hubs. Par conséquent, l'entropie maximale est de  $2 + \log_2(2n_1 + n_2)$ .

La Figure IV.18 permet de montrer que lorsqu'un état est choisi au hasard dans l'ensemble du sous-espace stable (courbes bleus), son entropie initiale se situe dans la plage de la valeur de saturation et son évolution reste dans cette plage. Lorsque l'on choisit un état initialement localisé sur un site (et toujours dans le même sous-espace considéré, courbes rouges), l'évolution de son entropie tend vers cette valeur de saturation. La valeur de saturation reflète seulement la valeur la plus courante de l'entropie dans le sous-espace considéré.

Le Tableau IV.4 récapitule les différentes propriétés des sous-espaces stables de deux marcheurs quantiques en interaction.

### IV.3 Conclusion

En résumé, l'étude de la robustesse des cages pour marches quantiques sur la chaîne de boucles a permis de mettre en avant certains comportements intéressants.

On a pu voir qu'un désordre statique sur les sites rims permettait, dans un premier temps,

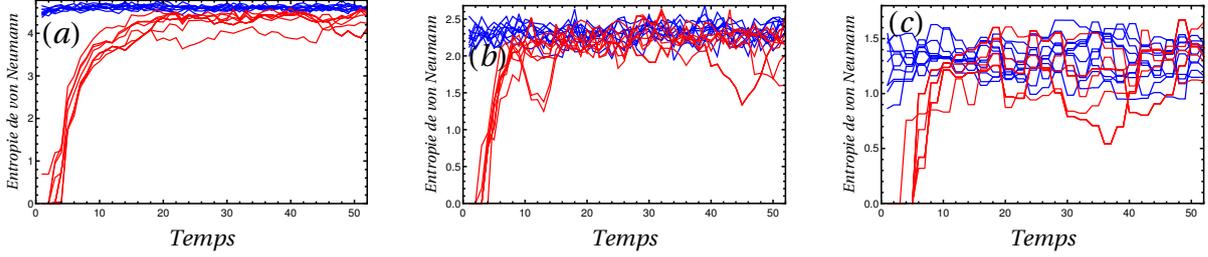


Fig. IV.18 *Intrication pour différentes conditions initiales par rapport au temps.* La marche quantique est réalisée sur une chaîne de boucles de longueur 10 avec un angle de mélange  $\theta = 1$  et  $\varphi = \beta = \omega = 0$  et un dé de Grover à  $\Phi_c = 1/2$  et une interaction  $\phi = \pi$ . (a) : Condition initiale sur  $\{|n, \varepsilon, n, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon', n}$ . (b) : Condition initiale sur  $\{|4, \varepsilon, 5, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'} \oplus \{|5, \varepsilon, 4, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$ . (c) : Condition initiale sur  $\{|4, \varepsilon, 6, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$ . Les conditions initiales sont soit délocalisées sur l'ensemble du sous-espace stable (lignes bleues), soit localisées sur un site (lignes rouges). 10 marcheurs quantiques différents pour chaque cas sont tracés. Les coefficients initiaux sont choisis aléatoirement.

de briser les cages et donc de délocaliser la particule sur une certaine longueur caractéristique indépendante du désordre puis dans un second temps, pour un désordre de plus forte intensité de localiser d'Anderson la particule. On observe alors une décroissance exponentielle des fonctions d'onde propres. Dans ces deux régimes le système est isolant. D'une autre manière, on a également pu obtenir un isolant dans le cas d'un désordre gelé sur les sites hubs mais la nature des fonctions d'onde est complètement différente de la localisation d'Anderson. Ici, les cages ne sont pas brisées et les fonctions d'onde propres restent à support fini à l'intérieur de domaines plus ou moins étendus.

On s'est ensuite intéressé au désordre dynamique. On a pu constater, que ce soit dans le

états propres sans interaction	$ n, \varepsilon, n, \varepsilon'\rangle$ $x_- = 0$	$ n, \varepsilon, n \pm 1, \varepsilon'\rangle$ $ x_-  = 1$	$ n, \varepsilon, n \pm 2, \varepsilon'\rangle$ $ x_-  = 2$	$ n, \varepsilon, n', \varepsilon'\rangle$ $ x_-  =  n' - n  \geq 3$
interaction	oui	oui	oui	non
nature	brise les cages	cages de plus grande taille	cages de la même taille mais dynamique différente	cages inchangées
sous-espace stable minimal	$\{ n, \varepsilon, n, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon', n}$	$\{ n, \varepsilon, n + 1, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'} \oplus \{ n + 1, \varepsilon, n, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$	$\{ n, \varepsilon, n \pm 2, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$	$ n, \varepsilon, n', \varepsilon'\rangle$
Dimension	$32L$	64	32	1
Dimension après avoir tracé sur un marcheur	$8L$	16	8	1
entropie maximale	$\log_2(8L) = 3 + \log_2(L)$	$\log_2(16) = 4$	$\log_2(8) = 3$	0

Table IV.4 *Résumé des différentes propriétés des sous espaces stables de deux marcheurs quantiques en interaction sur la chaîne de boucles.*

cas d'un désordre sur les sites hubs ou bien sur les sites rims ou encore en mesurant périodiquement la position de la fonction d'onde, que l'on obtenait un processus diffusif similaire aux marches classiques standards puisque le désordre dynamique est un bon moyen de simuler l'effet d'un environnement sur un système quantique et donc d'observer le phénomène de décohérence.

Ces deux études précédentes ont permis de construire un modèle de désordre plus sophistiqué où l'on combinait un désordre gelé à un désordre dynamique sur les sites rims. La marche quantique est alors envoyée sur un modèle de marche classique aléatoire (le modèle de barrière aléatoire symétrique) présentant de la diffusion anormale.

Enfin, on a fini par étudier le cas de deux marcheurs quantiques sur la chaîne de boucles avec une interaction de contact. On a pu trouver que les cages sont brisées seulement si les deux marcheurs se trouvent initialement sur le même site. Lorsque c'est le cas, les deux marcheurs forment un état lié capable de se déplacer sur toute la chaîne mais ne pouvant pas être séparés de plus de 4 cellules.

# V – Deux particules sur une chaîne avec une interaction désordonnée

L'idée initiale de ce projet un peu à part du reste de la thèse, proposée par János Asbóth, était de regarder une interaction désordonnée statiquement entre deux marcheurs quantiques sur une chaîne. Elle faisait suite à un article de Toikka [154] qui avait étudié le problème pour un désordre dynamique. Le problème se révéla n'avoir jamais été étudié dans le cas hamiltonien, pourtant plus facile à traiter car sans variable interne. Dans ce chapitre, nous allons donc nous concentrer sur le cas d'un hamiltonien de liaisons fortes standard sans degré de liberté interne (marches quantiques à temps continu). Après avoir fait une rapide analyse pour le cas des marches quantiques à temps discret (non documentée), on ne s'attend pas à une différence de résultats qualitatifs entre les deux systèmes. Tout ce qui est dit dans ce chapitre devrait pouvoir s'appliquer sans trop de difficulté au cas de deux marcheurs. Notamment, les quasi-énergies et leur périodicité ne devraient pas jouer un rôle significatif. Le reste du chapitre est traduit et adapté de l'article [162].

Le modèle de Hubbard a été proposé pour la première fois en 1963, indépendamment par Gutzwiller [163], Kanamori [164] et Hubbard [165]. Ce modèle permettait de comprendre le comportement collectif des électrons en interaction dans les solides. En 1968, Lieb et Wu [166] ont trouvé une solution analytique pour le cas unidimensionnel (1D) en utilisant l'ansatz de Bethe. Malgré sa formulation simple, le problème de Hubbard est mathématiquement difficile à aborder. Pour le cas de dimension supérieure, les physiciens n'ont pu obtenir que des résultats analytiques ou numériques approximatifs (théorie du champ moyen, DMFT,...). Une solution exacte reste encore inconnue. Depuis plus de 50 ans, le modèle a attiré beaucoup d'attention.

Les développements techniques des dernières décennies ont rendu possibles les réalisations expérimentales du modèle de Hubbard. La première expérience a été réalisée par Greiner et al. [167] en 2002 en utilisant des atomes bosoniques ultrafroids piégés dans des réseaux optiques. Ils ont observé la transition d'un superfluide à un isolant de Mott. De nombreuses autres variantes du modèle de Hubbard ont été mises en œuvre, notamment la version fermionique [168] ou encore un modèle dont le paramètre d'interaction dépend de la densité [169]. Il existe de nombreux défis à relever pour les expérimentateurs qui doivent contrôler avec précision différents paramètres : l'amplitude de saut tunnel, la géométrie du réseau ou la forme du potentiel. L'incertitude sur ces variables peut donner lieu à des effets indésirables qui peuvent affecter la qualité globale des résultats. A notre connaissance, il n'y a pas eu d'étude détaillée sur la conséquence d'un paramètre d'interaction désordonné. Nous proposons, dans

ce chapitre, une analyse de l'effet d'une interaction de contact désordonnée pour le problème simple de Hubbard à deux corps (de deux particules distinctes, sans degré de liberté interne) dans une chaîne 1D. Ce modèle jouet s'avère avoir des liens avec plusieurs domaines - physique moléculaire, systèmes désordonnés, physique des surfaces et chaos quantique - que nous passons brièvement en revue.

L'interaction de contact, qu'elle soit attractive ou répulsive, dans le modèle de Hubbard conduit à des états liés à deux corps [170]. Des molécules unidimensionnelles correspondant à des états liés répulsifs ont été observées avec des atomes bosoniques dans une expérience de réseau optique [171]. Dans ce contexte, ces molécules sont parfois appelées doublons.

Un désordre arbitrairement faible au niveau du potentiel sur site dans les systèmes quantiques 1D et 2D peut conduire à une localisation exponentielle de tous les états propres d'énergie, par le mécanisme de localisation d'Anderson [137, 141]. Bien qu'ici le désordre se situe dans l'interaction plutôt que dans un potentiel sur site, le concept de localisation d'Anderson est toujours utile pour interpréter nos résultats, comme nous le verrons dans le reste du chapitre.

Le modèle de liaisons fortes de deux particules sur une chaîne 1D avec interaction de contact peut être mis en correspondance avec celui d'une particule unique sur un réseau carré 2D avec une barrière de potentiel 1D (ou chaîne d'impuretés) le long de la diagonale (voir la discussion section V.1 et la Figure V.1). Notre modèle est donc proche du problème d'une surface désordonnée (impuretés 1D) par rapport à un volume ordonné (2D). En utilisant cette analogie avec la physique des surfaces, nos résultats peuvent également être compris dans le langage des états de surface de Tamm [172, 173] et des états d'impuretés de Koster-Slater [174, 175].

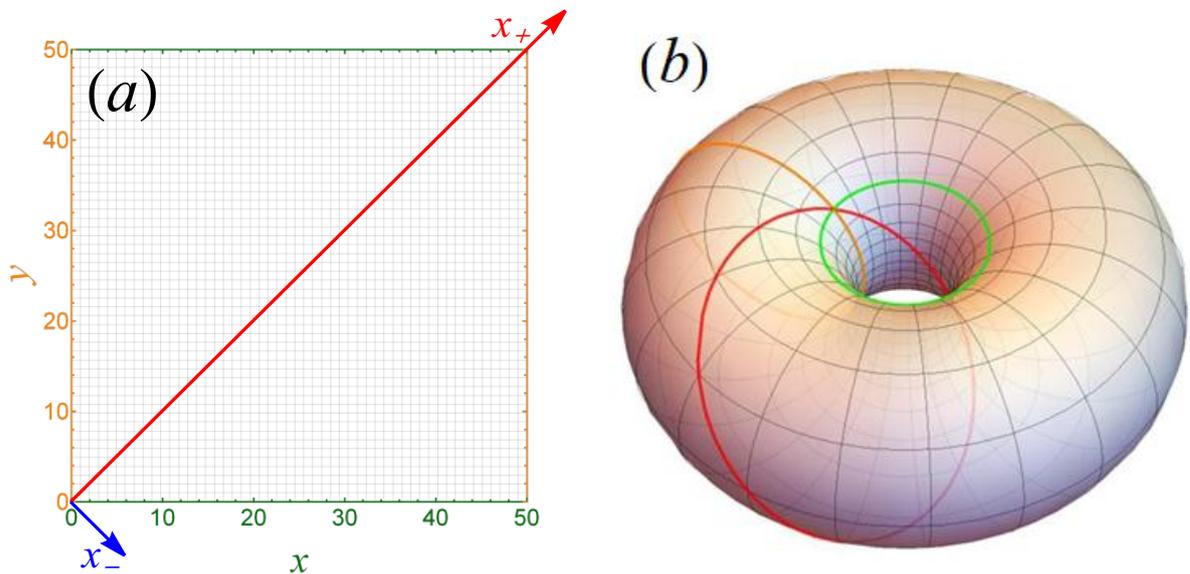


Fig. V.1 (a) : Deux particules sur une chaîne peuvent être représentées comme une particule sur un réseau carré. L'interaction de contact sur site devient une barrière de potentiel sur la diagonale du carré (ligne rouge) (b) : En utilisant des conditions aux limites périodiques, les côtés opposés (lignes verte et orange) du réseau carré sont identifiés. Le système est topologiquement équivalent à un tore.

Une autre analogie 2D peut être faite avec un billard quantique un peu particulier car construit sur un espace discret. Dans le billard classique, on considère la dynamique d’une seule particule classique à l’intérieur d’une région 2D délimitée par des bords. La dynamique est régie par les équations standard de Hamilton avec une énergie cinétique parabolique. Selon la forme du billard, le système peut être soit (i) intégrable et les trajectoires indexées par les constantes du mouvement, soit (ii) chaotique (non-intégrable) et les trajectoires sont exponentiellement sensibles aux conditions initiales [176]. “Quantifier” le modèle signifie que la particule est maintenant décrite par un vecteur dans un espace de Hilbert et que sa dynamique est donnée par l’équation de Schrödinger. Malgré le fait qu’il soit problématique de parler de trajectoires et de sensibilité aux conditions initiales pour les systèmes quantiques, le “chaos quantique” est apparu comme un domaine de recherche actif, dont le but est de trouver des traces de chaos classique dans les objets d’étude habituels de la mécanique quantique, tels que les niveaux d’énergie et leurs fonctions propres [177]. Dans ces modèles, le “désordre” ne réside pas dans le potentiel mais dans la forme des bords. Les recherches sur le chaos quantique ont été principalement effectuées dans le continuum en utilisant une relation de dispersion parabolique. Dans notre cas, on étudie un modèle de liaisons fortes sur un réseau carré, de sorte que la relation de dispersion (énergie cinétique) est  $E \propto \cos k_x + \cos k_y$  au lieu de  $E \propto k_x^2 + k_y^2$ . Cela affecte la dynamique des particules déjà au niveau classique. Quelques articles ont déjà traité ce type de billard quantique avec réseau [178–181].

Par ailleurs, deux particules avec une interaction de contact ont également été récemment discutées, soit dans le contexte d’un modèle plus riche de liaisons fortes à deux bandes unidimensionnel mais sans désordre [182], soit pour une marche quantique en interaction désordonnée dans [154], mais le désordre a été introduit dynamiquement.

Le chapitre est organisé comme suit : d’abord, dans la section V.1, nous passons en revue les principaux résultats du problème standard de Hubbard à deux corps, puis nous introduisons l’interaction désordonnée. Ensuite, dans la section V.2, nous nous concentrons sur l’analyse de la bande atomique sous l’effet du désordre. Dans la section V.3, nous étudions l’effet du désordre sur la bande moléculaire, lorsqu’elle est clairement séparée de la bande atomique (régime de désordre faible). Ensuite, la section V.4 est consacrée au régime de superposition entre la bande moléculaire et atomique (régime de désordre fort). La section V.5 est consacrée aux états “séparatrices”, qui, à notre connaissance, n’ont pas été abordés auparavant dans la littérature. Enfin, dans la dernière section V.6, on conclut en proposant différentes expériences et en proposant des perspectives pour de futurs travaux. Plusieurs Annexes G,H,I donnent des détails sur diverses parties de ce travail.

## V.1 Le modèle de Hubbard à deux particules

Dans cette section, nous définissons le modèle que nous étudions dans les sections suivantes. Considérons deux particules distinguables sautant sur une chaîne de  $N$  sites, avec une interaction de contact entre elles qui dépend de la position. Nous désignons la position de la première et de la seconde particule par des entiers  $x$  et  $y$ , respectivement, avec  $1 \leq x, y \leq N$ , et utilisons des conditions aux limites périodiques, identifiant  $N$  avec 0 (voir Figure V.1).

L'hamiltonien s'écrit :

$$\begin{aligned} H &= - \sum_{x,y=0}^{N-1} |x+1, y\rangle \langle x, y| + |x, y+1\rangle \langle x, y| + \text{h.c.} + \sum_{x=0}^{N-1} U_x |x, x\rangle \langle x, x| \\ &= H_0 + U \end{aligned} \quad (\text{V.1})$$

où  $H_0$  est la partie cinétique de l'hamiltonien et  $U$  le potentiel d'interaction. Ici et dans le reste du chapitre nous fixons  $\hbar = 1$  et mesurons l'énergie en unité de l'amplitude de saut et la longueur en unité du pas du réseau. L'énergie d'interaction  $U_x$  est une variable aléatoire dépendant de la position, uniformément distribuée entre  $\bar{U} - W$  et  $\bar{U} + W$ . Notre modèle – appelé en plaisantant le modèle  $\bar{U}$  – est une modification du modèle de Hubbard (ici restreint à 2 particules en 1D) qui dépend de deux paramètres : l'interaction moyenne  $\bar{U}$  et les fluctuations (ou le désordre) dans l'interaction  $W$ .

Nous examinons brièvement le cas trivial sans interaction  $\bar{U} = W = 0$ . Le théorème de Bloch s'applique, et chacune des deux particules a un quasi-moment que l'on notera  $k_x = 2\pi i/N$  pour l'une et  $k_y = 2\pi j/N$  pour l'autre où  $i, j \in \llbracket -N/2, N/2 - 1 \rrbracket$ , et une énergie totale  $E(k_x, k_y) = -2(\cos k_x + \cos k_y)$  (la notation  $\llbracket \dots, \dots \rrbracket$  indique que seules des valeurs discrètes, par pas de 1, sont prises dans l'intervalle). Les vecteurs propres du système de deux particules sont des ondes planes délocalisées sur l'ensemble du système. Ce système est identique à celui d'une particule unique sur un réseau carré avec des conditions aux limites périodiques (PBC pour “*periodic boundary conditions*”).

Avant de considérer l'effet d'une interaction désordonnée, nous rappelons le cas d'une interaction invariante par translation ( $W = 0$  et  $\bar{U} \neq 0$ ) dans la section suivante.

### V.1.1 Interaction invariante par translation : états liés et états de diffusion

Nous commençons l'analyse du système par le cas où il n'y a pas de désordre,  $W = 0$ , et donc, nous avons deux particules distinctes avec une interaction de contact  $U_x = \bar{U}$ , indépendante de  $x$ .

Comme nous le rappelons ci-dessous, l'hamiltonien peut être résolu exactement, et ses états propres sont soit des états liés des deux particules, soit des états de diffusion.

Pour obtenir des formules explicites pour les états liés et les états de diffusion, nous passons dans le référentiel du centre de masse (voir Annexe G pour plus de détails). Le centre de masse et les coordonnées relatives,  $x_{\pm}$ , sont les suivants :

$$x_+ = \frac{x+y}{2}, \quad x_- = x-y$$

et le nombre d'onde du centre de masse  $k_+$  est défini comme :

$$|k_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x_+} e^{ik_+x_+} |x_+\rangle, \quad \text{avec } k_+ = k_x + k_y = 2\pi K/N$$

où  $K \in \llbracket -N/2, N/2 - 1 \rrbracket$ , donc  $-\pi \leq k_+ < \pi$ . L'hamiltonien s'écrit maintenant :

$$H = - \sum_{x_+, x_- \in \mathcal{L}} |x_+ + 1/2, x_- + 1\rangle \langle x_+, x_-| + |x_+ + 1/2, x_- - 1\rangle \langle x_+, x_-| + \text{h.c.} + \bar{U} \sum_{x_+=0}^{N-1} |x_+, 0\rangle \langle x_+, 0| \quad (\text{V.2})$$

où  $\mathcal{L}$  est le réseau carré original exprimé dans le référentiel du centre de masse, i.e.  $x_- \in \llbracket -N + 1, N - 1 \rrbracket$  et  $x_+ \in \llbracket |x_-|/2, N - 1 - |x_-|/2 \rrbracket$ ,  $x_+$  prenant des valeurs entières lorsque  $x_-$  est pair et des valeurs demi-entières lorsque  $x_-$  est impair.

En raison de l'invariance par translation le long de  $x_+$ , le moment cinétique du centre de masse  $k_+$  est conservé. L'hamiltonien de l'équation (V.2), écrit dans la base  $k_+$ , se sépare en  $N$  chaînes découplées indexées par  $k_+$  :

$$H = \sum_{k_+} |k_+\rangle \langle k_+| \otimes h(k_+)$$

où l'hamiltonien  $h(k_+)$  pour une seule chaîne s'écrit,

$$h(k_+) = -2 \cos \frac{k_+}{2} \sum_{x_-} |x_- + 1\rangle \langle x_-| + \text{h.c.} + \bar{U} |0\rangle \langle 0| \quad (\text{V.3})$$

Pour chacune des  $N$  valeurs différentes des moments du centre de masse  $k_+$ , l'hamiltonien  $h(k_+)$  décrit une particule unique sautant sur une chaîne effective de  $N$  sites avec des conditions aux limites périodiques et une amplitude de saut  $t_{\text{eff}} = -2 \cos(k_+/2)$  en présence d'une impureté de potentiel  $\bar{U}$  à l'origine  $x_- = 0$ . Lorsque  $\bar{U} \neq 0$ , son spectre est constitué d'un seul état lié et d'une bande composée de  $N - 1$  états de diffusion délocalisés (voir Figure V.2). Contrairement aux états de Tamm [172, 173], qui apparaissent pour une impureté suffisamment forte au bord d'une chaîne ouverte, il n'y a pas de seuil pour qu'un état lié existe dans une chaîne périodique avec une impureté. Si l'on reprend la vision originale d'un hamiltonien décrivant deux particules, ceux-ci correspondent à des états où ces deux dernières se déplacent ensemble, comme une paire liée, et à des états de diffusion où elles se déplacent presque indépendamment. Le problème correspondant à l'hamiltonien (V.3) a été résolu par Koster et Slater [174, 175]. Il peut également être obtenu par l'ansatz de Bethe [170]. Ici, nous résumons les principaux résultats d'abord pour les états liés et ensuite pour les états de diffusion.

Les états liés indexés par le nombre quantique  $-\pi \leq k_+ < \pi$  ont des énergies et des fonctions d'onde données par :

$$\begin{aligned} E_{\text{bd}}(k_+) &= \text{sgn}(\bar{U}) \sqrt{\left(4 \cos \frac{k_+}{2}\right)^2 + \bar{U}^2}, \\ \psi_{\text{bd}}(x_+, x_-) &= \frac{e^{ik_+x_+}}{\sqrt{N}} \sqrt{\tanh \kappa} (-1)^{x_-} e^{-\kappa|x_-|}, \end{aligned} \quad (\text{V.4})$$

pour  $N \gg 1/\kappa$ , de sorte que les effets de taille finie peuvent être négligés. Ici, l'inverse de la longueur caractéristique de décroissance  $\kappa > 0$  est une fonction de  $k_+$  donnée par la solution de :

$$\sinh \kappa = \frac{\bar{U}}{4|\cos(k_+/2)|}. \quad (\text{V.5})$$

L'inverse de la longueur caractéristique de décroissance  $\kappa$  définie ci-dessus est également la solution imaginaire pure de l'équation de l'ansatz de Bethe.

D'après l'équation (V.4), les états liés sont des ondes planes le long de la direction  $x_+$  mais sont exponentiellement localisés autour de  $x_- = 0$  dans la direction perpendiculaire, voir Figure V.3. Pour des raisons de simplicité et sans perte de généralité, nous nous limitons

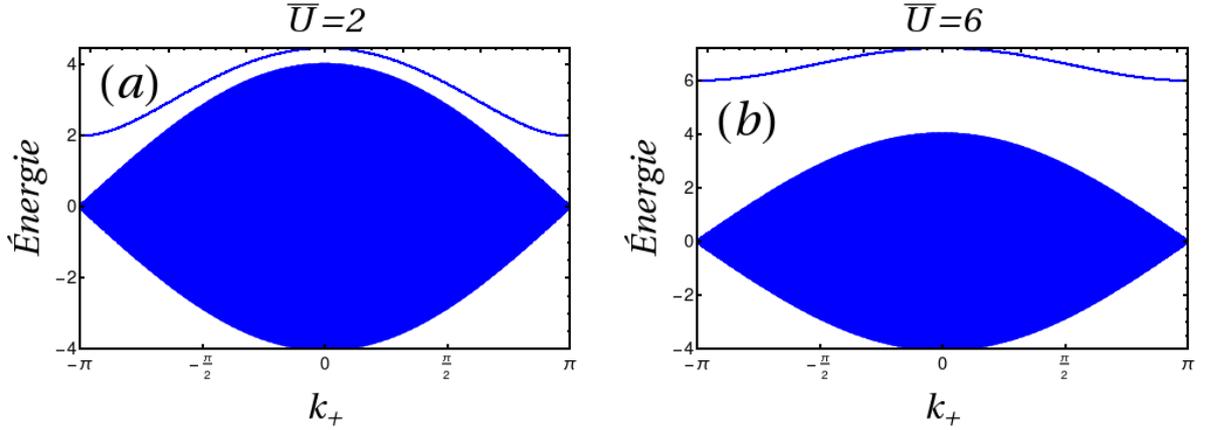


Fig. V.2 Spectres en énergie du modèle de Hubbard à deux particules (interaction invariante par translation) en fonction du quasi-moment du centre de masse  $k_+$ . (a) Pour une interaction faible,  $\bar{U} = 2$ , la bande des états liés à deux particules recouvre partiellement en énergie la bande des états de diffusion, où les deux particules se propagent presque indépendamment. (b) Pour une interaction plus forte,  $\bar{U} = 6$ , un gap  $\bar{U} - 4 = 2$  sépare ces bandes.

à  $\bar{U} > 0$ , auquel cas ils correspondent à des états liés répulsifs qui ne sont possibles que lorsque l'énergie cinétique est également bornée par le haut [170, 171]. L'énergie minimale et maximale des états liés est alors de  $\bar{U}$  et  $\sqrt{\bar{U}^2 + 16}$ . Le nombre d'états liés est de  $N$  par rapport au nombre total  $N^2$  d'états.

Si l'interaction est faible,  $\bar{U} < 4$ , la bande d'énergie de l'état lié et celle des états de diffusion se recouvrent, alors que pour une interaction plus forte,  $\bar{U} > 4$ , il existe un écart égal à  $\bar{U} - 4$  entre ces deux bandes. Dans la limite d'une interaction très forte, la relation de dispersion de l'état lié peut être approximée comme ceci :

$$E_{\text{bd}}(k_+) \simeq \bar{U} + \frac{4}{\bar{U}} + \frac{2}{\bar{U}} 2 \cos k_+ .$$

Il s'agit de la relation de dispersion d'un modèle unidimensionnel de liaisons fortes, avec une amplitude de saut de  $2/\bar{U}$  et une énergie sur site de  $\bar{U} + 4/\bar{U}$  découplée de la majeure partie du spectre en énergie.

Les états de diffusion sont des ondes planes modifiées indexées par  $k_+$  et  $\kappa_-$ . Les fonctions d'onde sont :

$$\psi_{\text{sc}}(x_+, x_-) = C e^{ik_+ x_+} \left[ \sin(\kappa_- x_-) - \frac{4}{\bar{U}} \cos \frac{k_+}{2} \sin \kappa_- \cos(\kappa_- x_-) \right] \quad (\text{V.6})$$

où  $C$  est une constante de normalisation et les "vecteurs d'onde"  $\kappa_-$  sont les  $N - 1$  solutions réelles de l'équation de l'ansatz de Bethe donnée en Annexe I. Le nombre de ces états est  $N(N - 1)$ . Les énergies correspondantes sont :

$$E_{\text{sc}}(k_+, \kappa_-) = -4 \cos \frac{k_+}{2} \cos \kappa_- ,$$

avec  $-\pi \leq k_+ < \pi$  et  $-\pi \leq \kappa_- < \pi$  et sont responsables du continuum d'états entre  $-4$  et  $+4$  montré dans la Figure V.2.

Dans la suite, nous utiliserons les termes "états liés" et "états de diffusion" pour nous référer spécifiquement à la situation en l'absence de désordre  $W = 0$ .

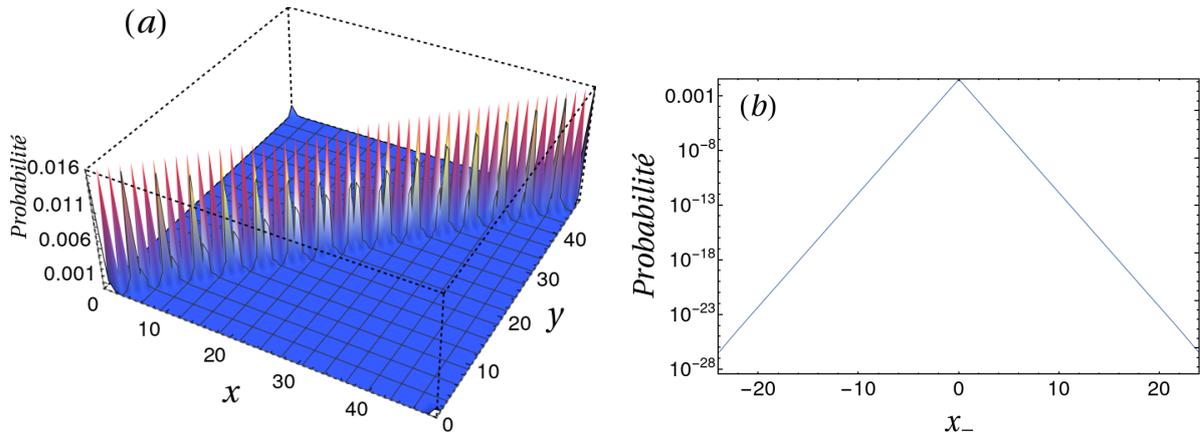


Fig. V.3 *État lié typique pour une interaction invariante par translation  $\bar{U} = 6$  sur une chaîne de  $N = 50$  sites. (a) : Distribution de la position d'un état propre dans les coordonnées  $x$  et  $y$  indiquant respectivement la position de la première et de la seconde particule. (b) : Coupe transversale de la distribution de position, qui révèle la décroissance exponentielle de la fonction d'onde dans la direction antidiagonale  $x_-$  (notez l'échelle logarithmique verticale).*

### V.1.2 Correspondance avec un billard quantique rugueux

Il est utile d'établir une analogie entre le mouvement de deux particules sur le réseau unidimensionnel (chaîne) et le mouvement d'une seule particule sur un réseau carré bidimensionnel. En effet, l'hamiltonien (V.1) peut être interprété de cette manière, avec des conditions aux limites périodiques à la fois le long de  $x$  et  $y$  et le terme d'interaction avec  $U_x$  apparaissant comme une barrière de potentiel sur la diagonale  $x = y$ .

Plus précisément, en raison des conditions aux limites périodiques, le potentiel de désordre se situe le long d'une ligne fermée qui s'enroule une fois autour des deux boucles non contractibles sur le tore, voir Figure. V.1.

Considéré comme décrivant un mouvement bidimensionnel, notre problème est proche d'un modèle quantique d'un billard rugueux, comme celui étudié dans [179]. Ici, une particule unique sautant sur un réseau carré à l'intérieur d'une boîte carrée a été considérée en présence d'un désordre aux bords sous la forme d'un potentiel aléatoire sur site, uniformément distribué entre  $-W$  et  $W$ . Notre modèle diffère de celui de [179] de trois manières principales : nous avons (1) des conditions aux bords périodiques plutôt qu'ouverts ; (2) un désordre sur une ligne diagonale au lieu des quatre bords d'un carré ; et (3) le potentiel de défaut moyen  $\bar{U}$  peut être non nul. Malgré ces différences, nous nous attendons qualitativement au même type de résultats car les deux cas peuvent être décrits comme une chaîne 1D d'impuretés (désordre) plongée dans un système 2D propre.

### V.1.3 États atomiques et moléculaires

Le modèle de deux particules sur une chaîne interagissant via une interaction de contact désordonnée est l'objet principal du chapitre. Dans les sections suivantes, nous discutons différents régimes en fonction des paramètres  $\bar{U}$  et  $W$ .

En présence de désordre  $W \neq 0$ ,  $k_+$  n'est plus une quantité conservée, et on ne peut pas

résoudre le spectre en énergie en fonction de  $k_+$ . Dans ce cas, et à cause de la possibilité pour les bandes de se superposer, la distinction entre états de diffusion et états liés n'est plus pertinente. En fait, le spectre en énergie se sépare en une bande de volume avec une grande densité d'états et une énergie  $E$  entre  $-4$  et  $+4$ , ainsi qu'une bande d'impuretés avec une faible densité d'états et une énergie telle que  $|E| > 4$  (voir Figure V.4). Nous appellerons les états propres d'énergie  $|E| < 4$  des “états atomiques” et ceux d'énergie  $|E| > 4$  des “états moléculaires”. Les bandes correspondantes seront appelées bande atomique et bande moléculaire. Lorsque les deux bandes sont séparées par un gap, cette distinction entre les états atomiques et moléculaires coïncide avec celle introduite lorsque  $W = 0$  entre les états de diffusion et liés. Cependant, lorsque les deux bandes se recouvrent [voir Figure V.2(a)], la distinction entre les états atomiques et moléculaires ne correspond pas à celle entre les états de diffusion et les états liés. La raison en est que le désordre couple les états liés qui se recouvrent en énergie avec les états de diffusion. En conséquence, les états liés se dissocient et ne restent pas localisés : dans un tel cas, nous considérons que les états dans la région de superposition des deux bandes appartiennent également à la “bande atomique”. Dans la suite du chapitre, nous discutons tour à tour des états atomiques (section V.2), des états moléculaires (section V.3), de la situation spécifique dans laquelle les deux bandes se superposent (section V.4) et enfin des états séparatrices qui existent près du centre  $E \approx 0$  de la bande atomique (section V.5).

## V.2 Les états atomiques

Dans cette section, nous analysons les “états atomiques”, c'est-à-dire les états propres dont l'énergie est comprise entre  $-4$  et  $+4$ .

En raison de l'analogie avec le billard quantique bidimensionnel [179], nous nous attendons à ce que le spectre présente des caractéristiques familières de la théorie du chaos quantique.

### V.2.1 Densité d'états et rapport de participation inverse

La densité des états atomiques est similaire à la densité d'états (DoS pour *Density of States*) d'un réseau carré 2D propre, avec une singularité de van Hove au centre de la bande ( $E = 0$ ) et une densité constante aux bords de la bande ( $E = \pm 4$ ), comme le montre la Figure V.4. Étant donné que, dans ces états propres, les particules sont pour la plupart du temps éloignées les unes des autres, la modification de la force d'interaction de contact,  $\bar{U}$ , ou l'augmentation de son désordre,  $W$ , n'affecte pas de manière significative la DoS.

Pour quantifier la localisation des états atomiques et suivre les effets du désordre, nous utilisons le rapport de participation inverse (IPR pour *Inverse Participation Ratio*),  $I_2$ . Pour les fonctions propres normalisées  $\Psi(x, y)$ , il est défini par :

$$I_2 = \sum_{x,y} |\Psi(x, y)|^4. \quad (\text{V.7})$$

Le rapport de participation  $P_2 = 1/(N^2 I_2)$  représente la fraction de sites qui sont occupés par la fonction d'onde (voir Annexe H). Notez qu'en raison du facteur  $N^2$ , l'IPR n'est pas simplement l'inverse du rapport de participation [183], et est donc parfois appelé participation

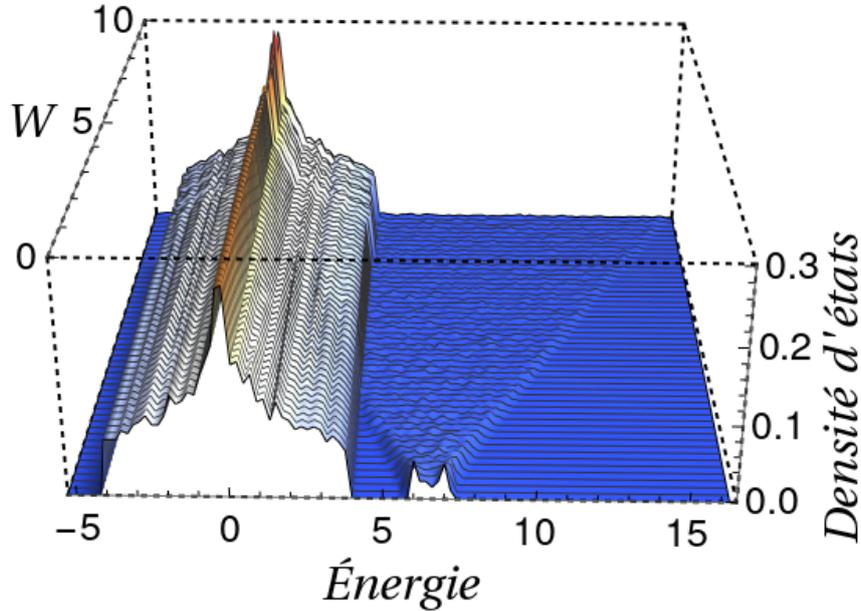


Fig. V.4 Densité d'états de particules en interaction désordonnée pour une chaîne de  $N = 50$  sites, une interaction moyenne  $\bar{U} = 6$  et 10 réalisations sur le désordre. La bande atomique a une DoS proche de celle du réseau carré tandis que la bande moléculaire est similaire à celle d'un modèle d'Anderson 1D.

inverse ou nombre de participation inverse. Lorsque nous augmentons la taille du système  $N$ , les fonctions d'onde qui sont complètement délocalisées dans tout le système devraient avoir  $I_2 \sim 1/N^2$ ; celles qui sont localisées dans une direction et délocalisées dans l'autre (comme les états liés en l'absence de désordre) devraient avoir  $I_2 \sim 1/N$ ; tandis que les fonctions d'onde complètement localisées devraient avoir  $I_2 \sim N^0$ .

Grâce à la diagonalisation complète de l'hamiltonien pour des systèmes de taille  $N = 50$ , comme le montre la Figure V.5, nous observons différents types d'états propres avec différentes propriétés de localisation. Nous nous concentrons ici sur les états atomiques délocalisés avec une énergie comprise entre  $-4$  et  $4$  et analyserons les états moléculaires plus tard. En fonction de la gamme d'énergie et des paramètres  $\bar{U}$  et  $W$ , nous identifions quatre grandes catégories de ces états atomiques – (a) les états quasi-idéaux, (b) les états chaotiques, (c) les états résonants, et (d) les états séparatrices – que nous discutons successivement. Les états (a), (c) et (d) sont des effets de taille finie qui devraient devenir négligeables dans la limite thermodynamique par rapport aux états (b) qui forment la majorité de la bande atomique.

(a) Sur la Figure V.5(a), pour un désordre nul  $W = 0$ , et une force d'interaction  $\bar{U} = 6$ , nous observons un IPR de  $I_2 \approx 6.10^{-4} \simeq 1.5/N^2$  pour  $N = 50$ , ce qui correspond à un taux de participation  $P_2 \sim 67\%$ . Ceci est compatible avec la solution analytique du problème à  $W = 0$  (voir équation V.6), qui donne des ondes planes modifiées que nous avons appelées “états de diffusion”.

Leur taux de participation varie continûment en fonction de  $\bar{U}$  entre  $2/3 \simeq 67\%$  lorsque  $\bar{U} \rightarrow \infty$  (similaire aux ondes stationnaires dans une boîte avec des conditions aux bords ouverts) et 100% pour les ondes planes lorsque  $\bar{U} \rightarrow 0$ . Lors du calcul numérique de l'IPR, nous

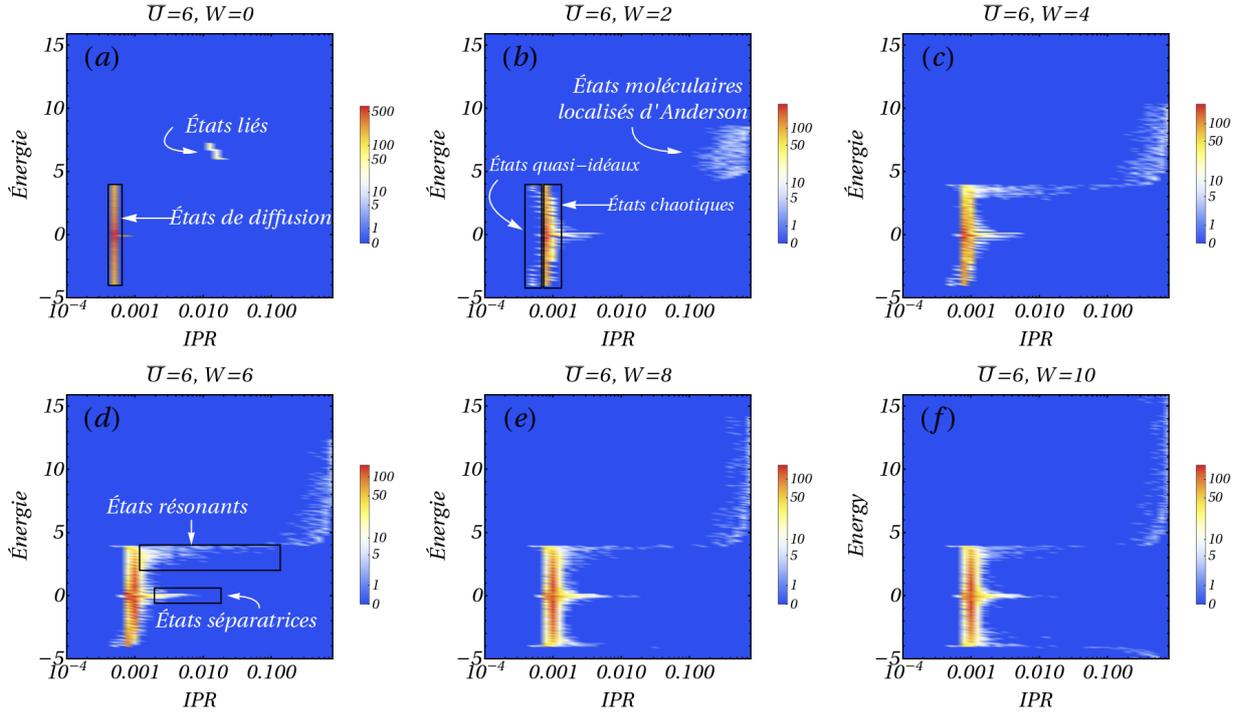


Fig. V.5 Densité d'états (unité arbitraire) en fonction de l'énergie et de l'IPR pour une chaîne de  $N = 50$  sites et  $n_d = 10$  différentes réalisations sur le désordre. Le potentiel moyen sur site est  $\bar{U} = 6$  et différentes valeurs de  $W$  entre 0 et 10 sont considérées. Ici, approximativement, un IPR dans la gamme  $10^{-3}$  signifie que l'état est délocalisé complètement (2D), dans la gamme  $10^{-2}$  signifie qu'il est localisé dans une direction et délocalisé dans l'autre et dans la gamme  $10^{-1}$  signifie complètement localisé. Les différents types d'états sont indiqués en blanc.

avons pris soin d'éliminer la dégénérescence possible des états de diffusion en tordant légèrement les conditions aux bords (c'est-à-dire en ajoutant un petit flux magnétique aléatoire à travers les deux boucles non contractibles du tore de l'espace réel).

Lorsqu'un désordre faible est allumé, nous observons des modifications de l'IPR des fonctions propres de la bande atomique [voir Figure V.5(b)]. Dans la plupart des cas, l'IPR augmente lors de l'introduction d'un désordre fini (ceci est discuté ci-dessous sous le nom d'"états chaotiques"). Cependant, principalement aux bords de la bande atomique [voir Figure V.5(c)], certains états restent très délocalisés. Ils sont appelés quasi-idéaux par [179], car leur poids sur la diagonale désordonnée est faible et ils sont presque comme des états de diffusion non affectés par le désordre [voir Figure V.6(a)]. Dans [179], où  $\bar{U} = 0$ , les auteurs soutiennent que les états quasi-idéaux n'existent qu'en raison d'effets de taille finie en présence de désordre et que leur nombre devrait disparaître lorsque  $N \rightarrow \infty$ . Dans l'Annexe I, nous fournissons une preuve généralisée, valable également pour  $\bar{U} \neq 0$ , que les états quasi-idéaux existent réellement dans la limite thermodynamique. Cependant, ils peuvent encore être considérés comme des effets de taille finie, car ils forment un ensemble de mesure nulle, le rapport entre leur nombre et celui des états chaotiques tendant vers 0 lorsque  $N \rightarrow \infty$ .

(b) La plupart des états à l'intérieur de la bande atomique sont "chaotiques" [voir Fi-

gure V.5(b) et (c)] : leur IPR augmente légèrement et se comporte en  $3/N^2$ , de sorte que le rapport de participation est plus faible ( $\simeq 33\%$ ) mais les fonctions d’onde sont toujours délocalisées [voir Figure V.6(b)]. Ce que nous appelons les “états chaotiques” sont similaires à ceux observés par [179] et sont typiques des billards chaotiques. De tels états quantiques sont discutés en détail dans le chapitre 15 du livre de Gutzwiller [176] (voir en particulier les Figures 44-46). Ils sont délocalisés, ont un caractère aléatoire (mais ne sont pas des tavelures, en anglais “*speckles*”) et ont le même rapport de participation (1/3) que les vecteurs propres des matrices aléatoires dans l’ensemble orthogonal gaussien (GOE pour “*Gaussian Orthogonal Ensemble*”), voir par exemple [184]. De plus, ils présentent des filaments en raison d’une longueur d’onde préférée liée à leur contenu en énergie (voir la Figure 2 dans [179]). Cependant, les filaments ne sont pas capturés par les vecteurs propres des matrices aléatoires. De la même manière que ce qui a été fait dans le continuum dans [185] à la suite d’une conjecture de Berry [186], dans le “billard de liaisons fortes”, les filaments peuvent aussi être reproduits en construisant des superpositions aléatoires d’ondes de Bloch d’une énergie donnée. Fixer une énergie permet de sélectionner une longueur d’onde donnée qui définit la largeur des filaments. Ces filaments doivent être clairement distingués des cicatrices quantiques (“*quantum scars*” [184, 187]). Ces dernières représentent une probabilité accrue dans la fonction d’onde d’un état propre en raison d’une orbite périodique instable sous-jacente du billard classique correspondant. Ici, le mécanisme d’apparition des filaments est différent.

(c) Lorsque le bas de la bande moléculaire à l’énergie  $\bar{U} - W$  devient plus petit que le haut de la bande atomique à 4, il y a recouvrement des 2 bandes. Dans la plage d’énergie de recouvrement, nous observons des états dont l’IPR se situe entre celui des états atomiques typiques et celui des états moléculaires localisés d’Anderson [voir la Figure V.5(d)]. Ces états sont principalement localisés le long de la diagonale et leur fonction d’onde est proche de celle des états moléculaires localisés d’Anderson. Cependant, comme leur énergie correspond à celle des états de diffusion, ils s’hybrident avec eux, ce qui crée un poids loin de la diagonale [voir Figure V.6(c)]. Ils représentent des molécules qui sont couplées à des états atomiques et sont partiellement dissociées. Nous les appelons “états résonants”. Ils pourraient également être appelés états liés virtuels par analogie avec les phénomènes bien connus se produisant avec les impuretés dans les métaux, découverts par Friedel (voir par exemple [188]). Nous nous attendons à ce que ces états deviennent négligeables dans la limite thermodynamique car leur nombre est au plus  $N$  (qui est le nombre d’états liés). Ils sont discutés plus en détail dans la section V.4.

(d) Le dernier type d’états atomiques que nous observons se trouve au milieu de la bande atomique près de l’énergie zéro [voir Figure V.5(d)]. Leur IPR est assez grand par rapport au reste de la bande ( $I_2 \sim 1/N$ ). En fait, ce sont des états qui sont localisés seulement le long de la direction  $x_+$  mais étendus dans la direction du mouvement relatif  $x_-$  [voir Figure V.6(d)]. Ces états “séparatrices” sont une conséquence de la ligne séparatrice (iso-énergie  $E = 0$ ) dans la relation de dispersion lorsqu’il n’y a pas d’interaction. Ils partagent certaines propriétés des états cicatrices [184, 187] familiers dans le contexte du billard quantique mais sont clairement distincts (en fait, nous ne voyons pas d’états cicatrices dans le présent modèle). Comme nous n’avons pas pu trouver de description de ces états ailleurs, nous leur consacrons une section complète (voir section V.5). Comme le nombre de ces états est de  $N/2 \ll N^2$ , on s’attend également à ce qu’ils deviennent négligeables dans la limite thermodynamique.

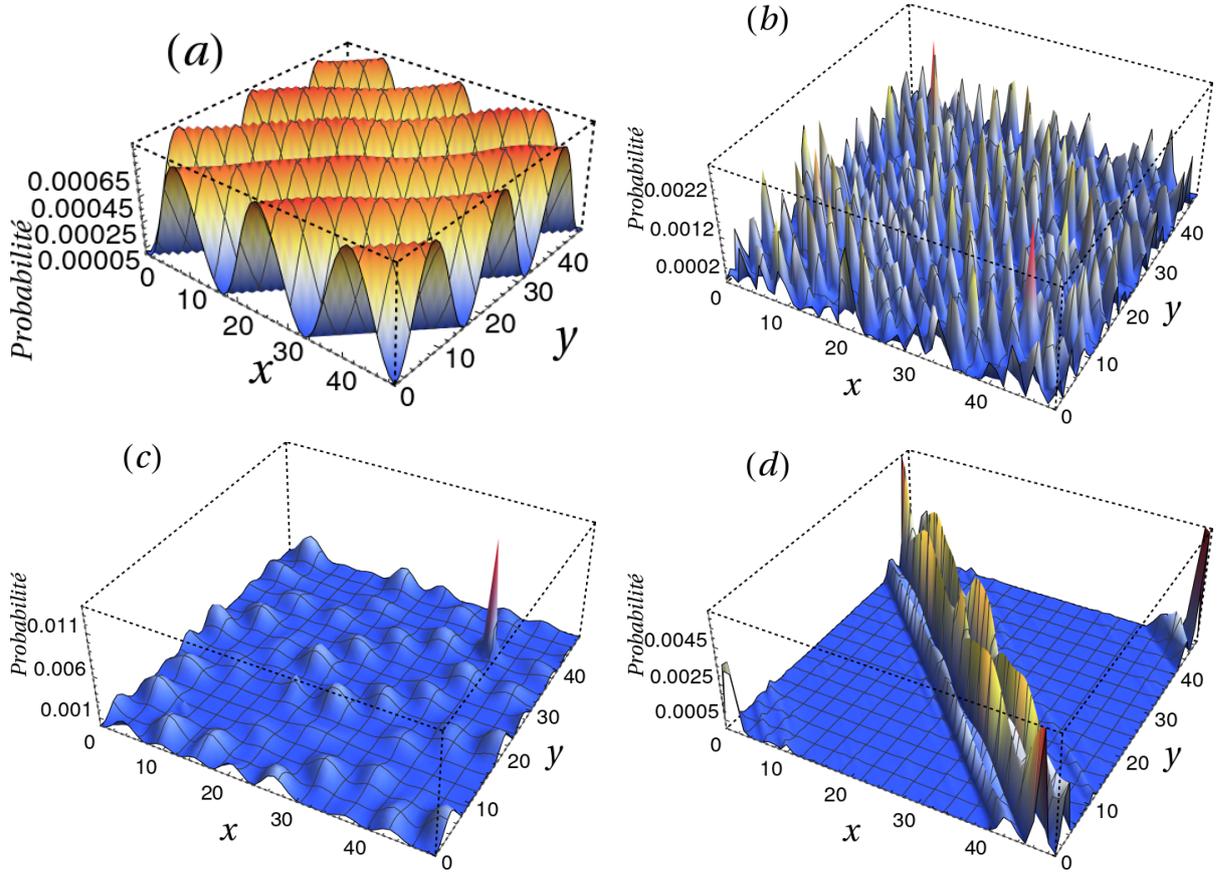


Fig. V.6 États atomiques typiques pour une interaction désordonnée sur une chaîne de  $N = 50$  sites : (a) quasi-idéal, (b) chaotique, (c) résonant, (d) séparatrice.

## V.2.2 Statistiques des écarts de niveaux

La localisation des fonctions propres peut également être étudiée par la statistique des écarts de niveaux (pour une revue, voir par exemple [189]). Pour une énergie donnée  $E$ , un ensemble d'écarts de niveaux normalisés  $s$  est obtenu à partir d'un ensemble de hamiltoniens,  $H^{(r)}$ , où  $r$  est un indice entier pour la réalisation du désordre, par

$$\Delta E_n^{(r)} = E_{n+1}^{(r)} - E_n^{(r)}, \quad \text{avec } E \approx E_n^{(r)}, E_{n+1}^{(r)}; \quad s_n^{(r)} = \frac{\Delta E_n^{(r)}}{\overline{\Delta E}},$$

où  $\overline{\Delta E}$  désigne la moyenne des valeurs de  $\Delta E_n^{(r)}$ . Cette procédure est connue sous le nom de dépliement du spectre dans la littérature sur les statistiques d'écarts de niveaux.

En l'absence de désordre, pour un système intégrable avec plus d'un degré de liberté, on s'attend génériquement à ce que la statistique des écarts de niveaux normalisés  $s$  ait une distribution exponentielle (dans ce contexte également appelée distribution de Poisson) [190] :

$$p(s) = e^{-s}.$$

La statistique des écarts de niveaux est modifiée par le désordre. Un désordre faible rompt généralement l'intégrabilité et couple des états propres presque dégénérés, ce qui entraîne

une répulsion des niveaux et un comportement universel de la distribution des écarts des niveaux, proche de la conjecture de Wigner pour le GOE :

$$p(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right).$$

Nous appellerons ce type de comportement universel la distribution de Wigner-Dyson ou GOE. Un désordre fort, cependant, conduit à la localisation d'Anderson des états propres. Ainsi, des états propres presque dégénérés peuvent avoir des fonctions d'onde localisées dans des parties distantes du système, empêchant l'hybridation entre eux. Dans ce cas, la statistique des écarts de niveaux devrait à nouveau être Poissonienne, si la taille du système est considérablement plus grande que la longueur de localisation. Il existe donc deux situations bien différentes dans lesquelles la statistique de Poisson est obtenue : système intégrable propre (localisé dans l'espace des moments) ou système localisé d'Anderson fortement désordonné (localisé dans l'espace réel).

Sans désordre ( $W = 0$ ), pour la bande d'états atomiques, comme attendu pour un système intégrable 2D, nous avons une distribution de Poisson [voir Figure V.7(a)].

À  $\bar{U} \rightarrow \infty$  ou  $W \rightarrow \infty$ , nous nous attendons à ce que la bande d'états atomiques soit intégrable et nous obtenons une distribution de Poisson car les fonctions d'onde sont expulsées de la diagonale en raison du potentiel sur site sur la diagonale qui tend à être infini.

La question de la statistique des écarts de niveaux à  $\bar{U}$  et  $W$  finis est plus subtile. Pour un  $\bar{U}$  fini et un petit  $W$ , dans l'Annexe I, nous montrons qu'une perturbation en énergie des états de diffusion atomique due à  $U$  se comporte en  $W/(\bar{U}^2 N^{3/2}) \cos^2(k_+/2) \sin^2 \kappa_-$  où  $k_+$  est le quasi-moment du centre de masse et  $\kappa_-$  une des  $N-1$  solutions réelles de l'équation de l'ansatz de Bethe. Elles doivent être comparées à l'écart moyen entre niveaux qui est en  $1/N^2$ . Si la perturbation est plus grande que l'écart moyen des niveaux, les fonctions d'onde atomiques, parce qu'elles sont étendues, conduisent à la répulsion des niveaux et aux statistiques GOE. En dessous de cet écart moyen des niveaux, nous avons toujours une distribution de Poisson. Finalement, nous concluons de l'Annexe I que, dans la limite thermodynamique, nous devrions obtenir une distribution des écarts de niveaux qui converge lentement vers GOE. Le calcul de l'Annexe I ne prend pas en compte la contribution de la bande moléculaire. Cependant, comme nous le verrons dans la section V.3, cette convergence est accélérée lorsque la bande moléculaire se superpose à la bande atomique, le couplage entre le désordre et les états atomiques étant beaucoup plus important. C'est pourquoi, en pratique, nous avons pu obtenir les statistiques GOE pour des  $N$  raisonnables mais pour  $\bar{U} - W < 4$  (voir Figure V.7-c). En effet, afin d'étudier les statistiques des écarts de niveaux de la majorité des états dans la bande atomique, nous devons atteindre des tailles d'échantillon beaucoup plus grandes que dans [179] afin de supprimer la contribution des états minoritaires (états quasi-idéaux, états résonants et états séparatrices).

Au centre de la bande d'énergie près de  $E = 0$ , nous n'obtenons pas une distribution universelle des écarts de niveaux car les états chaotiques et séparatrices sont mélangés [voir Figure V.7(d)]. À faible désordre, les états séparatrices sont localisés le long de la direction du centre de masse et délocalisés dans la direction du mouvement relatif. Leur IPR se comporte en  $1/N$  (voir Annexe H). Ils ne se recouvrent pas et leur statistique d'écarts de niveaux est en accord avec la distribution de Poisson [Figure V.7(b)]. Pour un désordre plus élevé, certains de ces états séparatrices se couplent avec des états atomiques et se délocalisent (conduisant

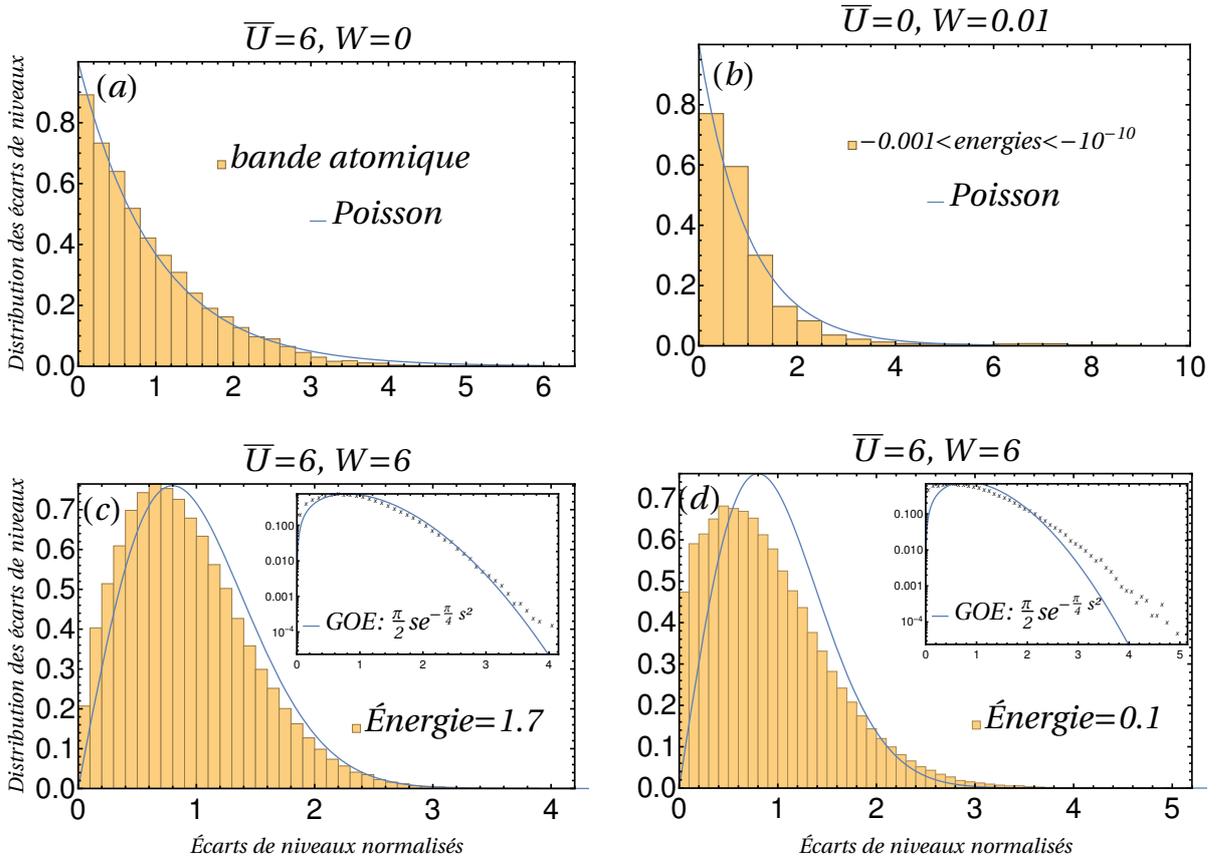


Fig. V.7 Distributions des écarts de niveaux des états atomiques pour différents régimes d'énergie  $E$ , d'interaction moyenne  $\bar{U}$ , de force du désordre  $W$ , de taille de chaîne  $N$  et de nombre de réalisations du désordre  $n_d$ . (a) :  $E \in ]-4, +4[$ ,  $\bar{U} = 6$ ,  $W = 0$ ,  $N = 70$  et  $n_d = 100$ . Des conditions aux limites "twistées" ont été utilisées pour éliminer les dégénérescences éventuelles. (b) :  $E$  entre  $-10^{-3}$  et  $-10^{-10}$  (afin d'isoler les états séparatrices),  $\bar{U} = 0$ ,  $W = 0.01$ ,  $N = 200$  et  $n_d = 100$ . (c)  $E \sim 1.7$ ,  $\bar{U} = 6$  et  $W = 6$ ,  $N = 900$  et  $n_d = 1000$ . Ici, on ne sonde que les états chaotiques. (d) Identique à (c) sauf que  $E \simeq 0.1$ . Dans ce cas, on sonde à la fois les états chaotiques et séparatrices. Dans (c) et (d), la méthode de Lanczos a été utilisée pour diagonaliser l'hamiltonien. L'histogramme et les croix dans l'encart représentent les données numériques avec une échelle linéaire ou logarithmique. Les courbes bleues représentent la distribution de Poisson attendue pour (a) et (b) et la distribution GOE pour (c) et (d).

ainsi à une répulsion de niveau), tandis que les autres restent localisés, ce qui conduit à la distribution non-universelle vue sur la Figure V.7(d).

### V.3 Les états moléculaires

Dans cette section, nous nous concentrons sur la bande moléculaire constituée de paires de particules liées qui est analogue aux états de défaut ou de surface dans un billard 2D. Nous

considérons le régime de grande interaction ( $\bar{U} - 4 > 0$ ) et de faible désordre ( $W < \bar{U} - 4$ ), où ces états moléculaires sont clairement séparés en énergie des états atomiques et discutons de l'effet du désordre sur cette bande moléculaire.

### V.3.1 Spectres et statistiques des écarts de niveaux

La densité d'états (DoS) de la bande moléculaire sans désordre ( $W = 0$ ) est similaire à celle d'un système 1D propre avec des singularités de van Hove aux bords (voir Figure V.4). Lorsque le désordre est petit, des queues de Lifshitz [191] apparaissent aux bords de la bande entre  $\bar{U} - W$  et  $\bar{U}$  pour le bas et  $\sqrt{\bar{U}^2 + 16}$  et  $\sqrt{(\bar{U} + W)^2 + 16}$  pour le haut. Elles correspondent à des événements très rares où le potentiel est approximativement constant et minimal (pour le bas) ou maximal (pour le haut) sur une certaine région, résultant en un potentiel de type boîte. Les états correspondants sont localisés par le désordre, de la même façon qu'une particule est piégée dans une boîte. Ici, la localisation n'est donc pas liée aux interférences, contrairement à la localisation d'Anderson.

Lorsque le désordre augmente, la DoS de la bande moléculaire devient plate et sans structure. Pour un désordre faible  $W < \bar{U} - 4$ , l'énergie de la bande moléculaire est dans l'intervalle  $[\bar{U} - W, \sqrt{(\bar{U} + W)^2 + 16}]$  et se situe en dehors de la bande atomique (dont l'énergie est dans l'intervalle  $[-4, +4]$ ). On constate que tous ces états sont localisés autour de l'interaction de contact diagonale.

Lorsque le désordre est nul, le système est intégrable. La statistique des écarts de niveaux de la bande moléculaire n'est pas universelle (i.e. ni Poisson ni GOE), voir Figure V.8(a), comme cela est bien connu pour un système intégrable 1D [190]. Le désordre ( $W > 0$ ) conduit à la localisation d'Anderson des états moléculaires et on trouve une distribution de Poisson des écarts entre niveaux (voir Figure V.8(b)).

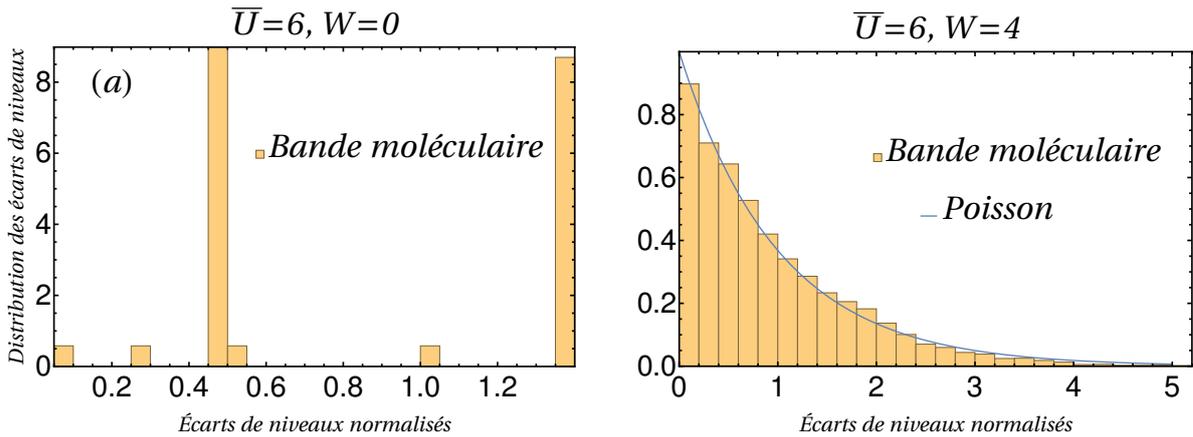


Fig. V.8 Distribution des écarts de niveaux pour la bande moléculaire (énergies  $E$  telles que  $|E| > 4.4$  par rapport aux états atomiques) calculée pour une chaîne de longueur  $N = 70$ , une interaction moyenne  $\bar{U} = 6$  et des réalisations de désordre  $n_d = 100$ . (a) :  $W = 0$ . (b) :  $W = 4$ .

### V.3.2 États propres moléculaires

Pour la bande moléculaire, sans désordre ( $W = 0$ ), la conservation du quasi-moment assure des états étendus dans la direction du centre de masse  $x_+$ . Pour une force d'interaction  $\bar{U} = 6$  et  $N = 50$ , on trouve un IPR de  $I_2 \simeq 10^{-2}$ , correspondant à des états exponentiellement localisés dans la direction du mouvement relatif,  $x_-$ , voir Figure V.3. La fonction d'onde de l'état lié est connue analytiquement dans ce cas, voir équation (V.4). Le long de  $x_-$ , elle présente une décroissance exponentielle sur une échelle de longueur typique  $\xi_{\text{mol}} = 1/(2\kappa) \sim 0.3$ , où  $\sinh \kappa = \bar{U}/[4 \cos(k_+/2)] \sim \bar{U}/(2\sqrt{2})$ , conformément à l'équation (V.5). On peut vérifier que l'IPR théorique est effectivement de  $I_2 \approx \frac{1}{4N\xi_{\text{mol}}^2} \int dx_- e^{-2|x_-|/\xi_{\text{mol}}} \simeq 1.5 \times 10^{-2}$ .

Lorsque le désordre est allumé, l'IPR des états moléculaires augmente, atteignant approximativement  $I_2 \simeq 0.3$  lorsque  $W = 2$  et  $\bar{U} = 6$ , comme le montre la Figure V.5. On observe une localisation d'Anderson dans la direction du centre de masse pour les états moléculaires, voir Figure V.9. En considérant que la taille des molécules,  $\xi_{\text{mol}}$  dépend principalement de l'interaction moyenne,  $\bar{U}$ , la longueur de localisation d'Anderson caractéristique peut être calculée de la même manière que  $\xi_{\text{mol}}$  et nous trouvons  $\xi_{\text{loc}} \simeq 0.625$ . Sous l'influence du désordre, la bande moléculaire s'étend et s'aplatit. Son énergie la plus basse est de  $\bar{U} - W = 4$ . Lorsque  $W$  atteint  $\bar{U} - 4$ , les deux bandes commencent à se recouvrir et les bandes moléculaire et atomique ne sont plus bien séparées. Le cas du recouvrement entre ces deux bandes, correspondant à une petite interaction  $\bar{U} - 4 < 0$  ou à un fort désordre  $W > \bar{U} - 4$ , est analysé dans la section V.4.

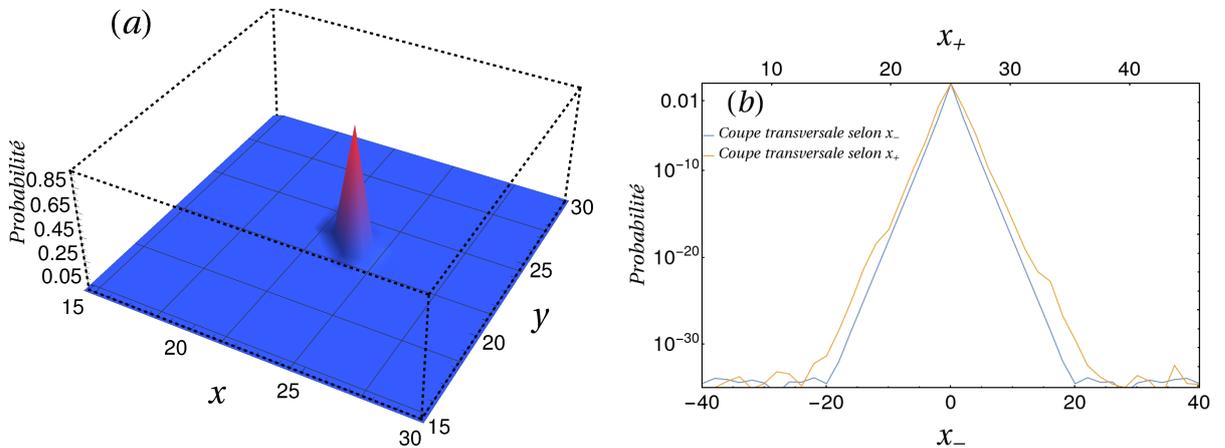


Fig. V.9 État moléculaire localisé d'Anderson pour un désordre  $W = 8$  et  $\bar{U} = 6$  sur une chaîne de sites  $N = 50$ . (a) : Probabilité d'un mode propre dans le plan  $(x, y)$ . (b) : Coupe transversale de cette fonction d'onde dans la direction anti-diagonale  $x_-$  (courbe bleue) montrant l'extension de la molécule  $\sim \xi_{\text{mol}}$ . Coupe transversale dans la direction diagonale  $x_+$  (courbe jaune) montrant la longueur de localisation  $\sim \xi_{\text{loc}}$  du centre de masse. Une échelle verticale logarithmique est utilisée pour souligner la décroissance exponentielle.

## V.4 Recouvrement de la bande moléculaire et atomique

Si l'interaction est faible ( $\bar{U} - 4 < 0$ ) ou si la force du désordre est grande ( $W > \bar{U} - 4$ ), il y a un recouvrement en énergie entre les états bas de la bande moléculaire et les états hauts de la bande atomique. Considérons le cas où le recouvrement est dû à  $\bar{U} < 4$  et le désordre est faible  $W \ll 1$ . En raison du désordre, les états liés et les états de diffusion sont couplés. Par conséquent, d'une part, les états liés se dissocient et se délocalisent pour devenir des états résonants (ou états liés virtuels) [voir Figure V.6(c)]. D'autre part, la plupart des états de diffusion se couplent faiblement aux états moléculaires et restent donc presque inchangés, ce que nous appelons des états quasi-idéaux [voir la Figure V.6(a)].

Pour un désordre encore plus important,  $W > \bar{U}$ , l'interaction  $U_x$  à certaines positions peut devenir négative et certains états moléculaires avec une énergie inférieure à la bande atomique émergent. La bande moléculaire s'étend alors dans l'intervalle  $\left[-\sqrt{(\bar{U} - W)^2 + 16}, \sqrt{(\bar{U} + W)^2 + 16}\right]$  et toute la bande atomique est entièrement recouverte par les énergies moléculaires. Lorsque  $W \rightarrow \infty$ , nous nous attendons à ce que la distribution des énergies moléculaires du système tende vers celle des énergies potentielles sur site, c'est-à-dire une distribution uniforme entre  $\bar{U} - W$  et  $\bar{U} + W$ .

Dans ce qui suit, nous discutons de certaines propriétés des états dans la région de la bande de recouvrement.

### V.4.1 Analyse des états propres

Le régime de recouvrement des bandes ouvre de nouveaux canaux de désintégration pour certains des états moléculaires en supprimant l'invariance par translation du centre de masse. Ceux dont les énergies sont déplacées dans la bande des états atomiques peuvent s'hybrider, se dissocier et se délocaliser. Au lieu d'être de véritables états liés, ils deviennent des résonances à durée de vie finie (voir la sous-section V.4.3 pour une définition du temps de vie). Il s'agit d'un effet contre-intuitif du désordre : les états moléculaires délocalisés à  $W = 0$  sont localisés par le faible désordre  $0 < W < \bar{U} - 4$ , puis se dissocient et se délocalisent par hybridation avec des états atomiques lorsque le désordre augmente encore  $W > \bar{U} - 4$ . Si l'ensemble du spectre en énergie est considéré comme une bande unique, un bord de mobilité à l'énergie 4 sépare les états de haute énergie qui sont localisés des états de basse énergie qui sont délocalisés.

Dans la Figure V.5, nous constatons que la DoS est très faible aux bords de la bande moléculaire désordonnée. Ce sont les queues de Lifshitz exponentiellement faibles [191]. Par conséquent, on ne s'attend pas à un grand recouvrement de ces queues avec la bande atomique pour un système de taille finie et, en pratique, nous observons des résonances uniquement lorsqu'une fraction macroscopique d'états moléculaires recouvre la bande atomique, c'est-à-dire  $W - \bar{U} + 4 \gtrsim 1$ . De plus, l'IPR augmente, par exemple,  $I_2 \simeq 0.5$ , pour  $N = 50$ ,  $W = 4$  et  $\bar{U} = 6$ , correspondant à  $\xi_{\text{loc}} \sim 0.42$ . Finalement, à  $W \geq 8$ , le désordre est si fort que certains états résonants quittent la bande atomique à des énergies inférieures à  $-4$  pour redevenir des molécules localisées d'Anderson.

Les états propres atomiques sont peu affectés par le désordre lorsque la bande moléculaire est bien séparée de la bande atomique, c'est-à-dire  $W < \bar{U} - 4$ . En effet, les états propres moléculaires ont une décroissance exponentielle sur une longueur typique  $\xi_{\text{mol}}$ , et un couplage

avec la diagonale pour les états atomiques est alors permis mais marginal. Dans la limite opposée de  $\bar{W} \rightarrow \infty$ , les fonctions d'onde atomiques ont un poids nul sur la diagonale et ne sont donc pratiquement pas affectées par le caractère aléatoire. Cependant, lorsque la bande moléculaire recouvre la bande atomique, c'est-à-dire,  $W > \bar{U} - 4$  et  $W$  fini, on s'attend à un comportement plutôt différent. Les fonctions d'onde moléculaires avec des énergies dans la gamme atomique s'hybrident avec les fonctions d'onde atomiques et se délocalisent, apportant un couplage plus fort des fonctions d'onde atomiques au potentiel désordonné. On comprend que dans ce régime, le couplage affecte la bande atomique de manière beaucoup plus intensive que dans le cas de  $W < \bar{U} - 4$ . C'est dans ce régime que nous trouvons des statistiques GOE pour les états chaotiques, comme le montre la Figure V.7(c).

## V.4.2 Probabilité moléculaire

Par définition, un état moléculaire est un état propre dont l'énergie est en dehors de l'intervalle  $[-4, +4]$ . Dans cette section, nous nous intéressons à la probabilité pour deux particules initialement sur le même site  $j$  de rester liées à des temps longs.

Nous définissons la probabilité moléculaire (ou de survie)  $P_{\text{mol}}$  comme le carré du recouvrement entre un tel état initial hautement localisé et les états propres moléculaires :

$$P_{\text{mol}}(j) = \sum_{|E_{\text{mol}}| > 4} |\langle \psi_{\text{mol}} | x = j, y = j \rangle|^2,$$

où  $j \in \mathbb{Z}$  est la position initiale. Ce recouvrement est la limite aux temps longs de la probabilité que deux particules parties initialement du même site  $j$  ne se dissocient pas et que leur distance reste bornée. Puisque sa valeur dépend de la position initiale  $j$  pour toute réalisation du désordre, à tout ensemble de paramètres nous pouvons associer une distribution de probabilité de valeurs  $P_{\text{mol}}$ , comme nous le discutons ci-dessous. Pour le moment, nous nous concentrons sur le comportement aux temps longs et ne discutons pas de la dynamique (voir la sous-section V.4.3 pour une discussion du temps de vie).

On analyse tout d'abord le comportement de la distribution de la probabilité moléculaire  $P_{\text{mol}}$  en fonction du désordre  $W$  à une valeur fixe de  $\bar{U} = 6$ , représentée sur la Figure V.10. À faible désordre, la bande moléculaire est séparée de la bande atomique par un gap. Ici, la probabilité moléculaire est de 91% – calculée exactement comme  $2K(-16/\bar{U}^2)/\pi$  en utilisant les équations (V.4) et (V.5), où  $K$  est l'intégrale elliptique complète de première espèce. Lorsque  $W > 2$ , une fraction des états moléculaires est couplée avec les états atomiques, et on trouve ainsi une distribution bimodale des probabilités moléculaires : soit l'état initial a un grand recouvrement avec un état moléculaire localisé d'Anderson, et  $P_{\text{mol}} \approx 1$  ; soit l'état initial est principalement recouvert par des états résonants avec des durées de vie finies et  $P_{\text{mol}} \approx 0$ . Au fur et à mesure que le désordre augmente, de plus en plus d'états moléculaires sont couplés aux états atomiques et, par conséquent, la moyenne de  $P_{\text{mol}}$  diminue.

Pour  $W > 8$ , cependant, nous observons une augmentation de  $P_{\text{mol}}$  : ici l'augmentation de  $W$  pousse certains états moléculaires en dessous de la bande atomique, et donc la moyenne  $P_{\text{mol}}$  augmente en fonction de  $W$ . Ainsi, à fort désordre, la moyenne  $P_{\text{mol}}$  donne directement la fraction d'états moléculaires ayant une énergie en dehors de la bande atomique. Qualitativement, le rapport entre le nombre d'états moléculaires (états dont l'énergie ne chevauche pas celle de la bande atomique) et le nombre  $N$  d'états liés reproduit bien la tendance de la

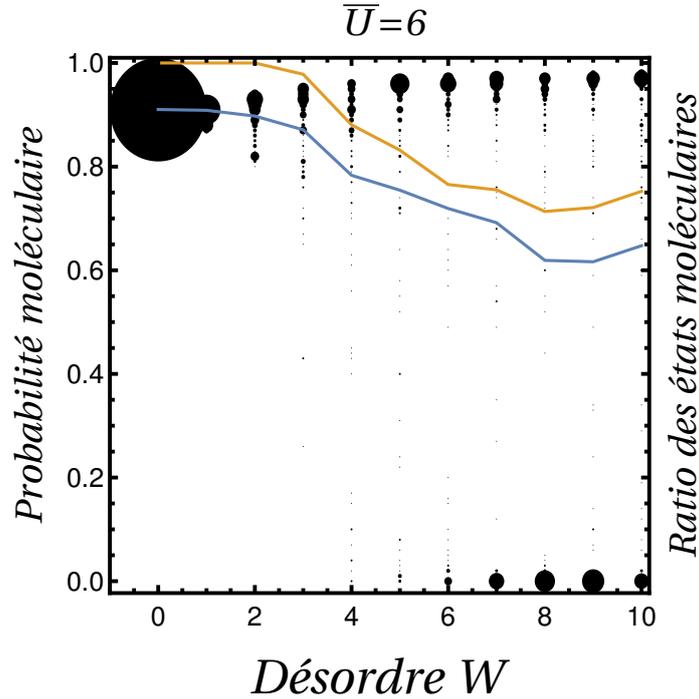


Fig. V.10 Probabilité moléculaire en fonction du désordre  $W$  pour un potentiel moyen  $\bar{U} = 6$  sur une chaîne de taille  $N = 50$  et  $n_d = 10$  réalisations de désordre (pour chacune, on prend 10 conditions initiales choisies aléatoirement sur la diagonale). Le rayon d'un point noir est proportionnel au nombre d'occurrences. La courbe bleue est la moyenne de la distribution. La courbe orange est la moyenne sur  $n_d = 100$  réalisations de désordre du rapport entre le nombre d'états moléculaires (i.e. énergies en dehors de  $[-4, +4]$ ) et le nombre  $N$  d'états liés.

probabilité moléculaire (voir la courbe orange de la Figure V.10). Comme les états moléculaires ont également un poids loin des sites diagonaux, ce dernier rapport donne une limite supérieure à la probabilité moléculaire.

On peut également analyser la probabilité moléculaire en fonction de l'interaction moyenne  $\bar{U}$  pour différentes forces de désordre  $W$ , voir Figure V.11. Lorsque le désordre est nul, il est possible de calculer cette probabilité de manière analytique. Dans la Figure V.11(a), la ligne rouge pleine est la prédiction théorique faite en utilisant la définition de la section V.1 et les équations (V.4) et (V.5) :

$$P_{\text{mol}} = \int_{-k_c}^{k_c} \frac{dk_+}{2\pi} \tanh \kappa = \frac{2\bar{U}}{\pi} \frac{F\left[\frac{k_c}{2}, \frac{16}{16+\bar{U}^2}\right]}{\sqrt{16+\bar{U}^2}},$$

où  $F$  est l'intégrale elliptique de première espèce et  $k_c = \text{Re } 2 \arccos \sqrt{1 - (\bar{U}/4)^2}$  est une coupure qui varie entre 0 et  $\pi$  en fonction de  $\bar{U}$ . L'origine de cette coupure est la définition selon laquelle les états moléculaires ont des énergies  $E$  telles que  $|E| > 4$ .

Pour un désordre élevé [ $W = 4$ , Figure V.11(d)], nous retrouvons une distribution bimodale due à la localisation d'Anderson. Il existe un régime de croissance rapide de la probabilité moléculaire lorsque  $\bar{U}$  augmente, ce qui correspond au découplage des états moléculaires

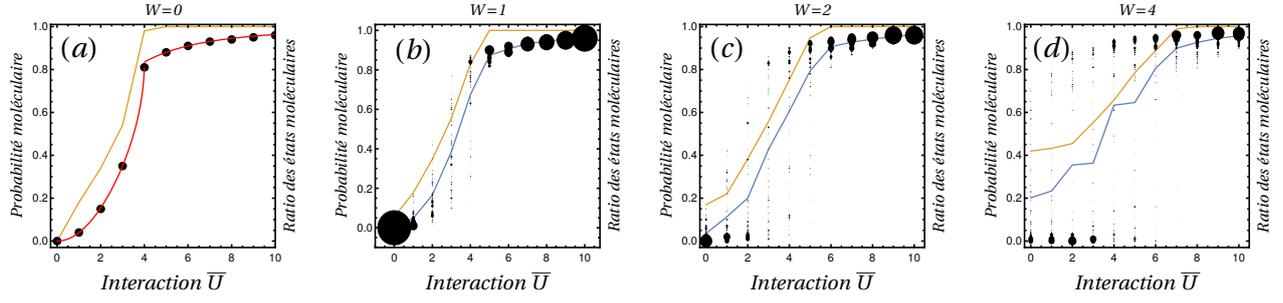


Fig. V.11 Probabilité moléculaire en fonction de l'interaction moyenne  $\bar{U}$  pour différents désordres  $W$  sur une chaîne de taille  $N = 50$  et  $n_d = 10$  réalisations de désordres (pour chacune, on prend 10 conditions initiales choisies aléatoirement sur la diagonale). (a) :  $W = 0$ . La courbe rouge est la prédiction théorique de l'Eq. V.4.2. (b) :  $W = 1$ , (c) :  $W = 2$ , (d) :  $W = 4$ . Les points noirs représentent le calcul numérique de la probabilité moléculaire (de survie). Le rayon d'un disque noir est proportionnel au nombre d'occurrences. Les courbes bleues sont la moyenne des distributions. Les courbes orange donnent la moyenne sur  $n_d = 100$  réalisations de désordre du rapport entre le nombre d'états moléculaires (i.e. énergies en dehors de  $[-4, +4]$ ) et le nombre  $N$  d'états liés.

quittant la bande atomique. Lorsque la bande moléculaire est complètement en dehors de la bande atomique ( $\bar{U} > W + 4$ ), l'état initial sur la diagonale est principalement recouvert par quelques états propres moléculaires localisés d'Anderson. Cependant, leur décroissance exponentielle sur une longueur de  $\xi_{\text{mol}}$  permet un couplage marginal entre l'état initial et les fonctions atomiques. Ce couplage disparaît lorsque  $\bar{U} \rightarrow \infty$ . Plus  $\bar{U}$  est grand, plus  $\xi_{\text{mol}}$  est faible, plus la probabilité moléculaire est grande.

### V.4.3 Temps de vie fini des états résonants

Pour les états résonants (ou états liés virtuels) on peut définir un temps de vie. Les états résonants peuvent être considérés comme le résultat du couplage, via le désordre, entre les états liés et les états de diffusion qui coïncident en énergie, c'est-à-dire dans la région de recouvrement des bandes. En raison de ce couplage, les états liés ne sont plus des états propres mais acquièrent une durée de vie finie. Par exemple, en prenant  $\bar{U} = 2$  et  $W = 0$  et en considérant un état lié avec une énergie  $E_0$  entre  $\bar{U}$  et 4. Un tel état lié sera pris comme état initial  $|\psi(0)\rangle$ . Il satisfait à  $H_0|\psi(0)\rangle = E_0|\psi(0)\rangle$ . Maintenant, en allumant un faible désordre  $1 \gg W > 0$ , on étudie l'évolution temporelle de  $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle$  en considérant la probabilité  $P(t) = |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2$ . Au temps court  $t \ll \tau$ , nous nous attendons à ce qu'il se désintègre comme  $e^{-t/\tau} \simeq 1 - t/\tau$ , où  $\tau$  est la durée de vie donnée par la règle d'or de Fermi  $1/\tau \sim \rho(E_0)W^2$ , où  $\rho(E_0)$  est la densité d'états (par site) de la bande atomique à l'énergie  $E_0$ . La durée de vie devrait donc être égale à  $1/W^2$ . C'est effectivement ce que nous observons : par exemple, pour  $E_0 \simeq 3.087$ , nous trouvons  $\tau \sim 3.5/W^2$ , voir Figure V.12. Aux temps plus longs, l'évolution est plus compliquée.

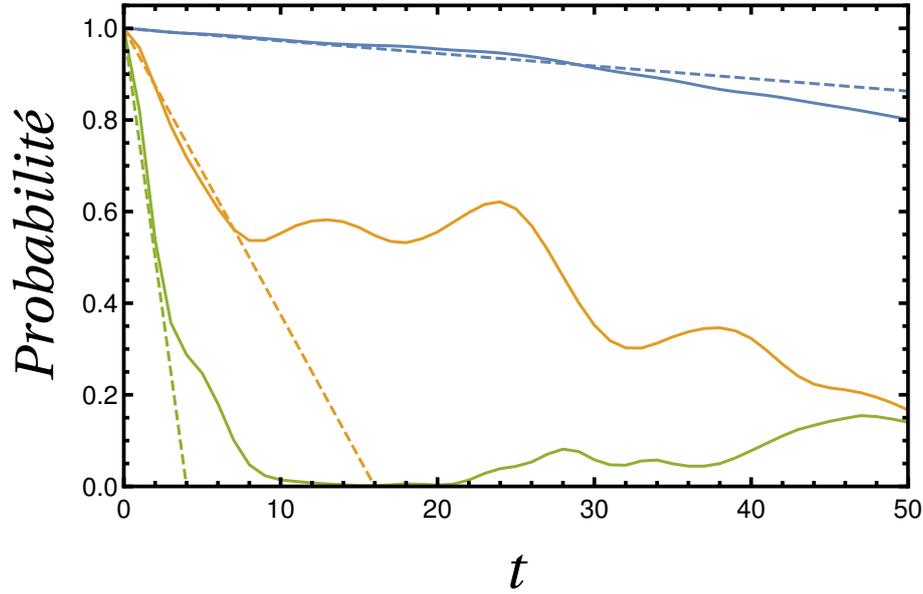


Fig. V.12 Évolution temporelle de la probabilité  $P(t) = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2$  pour trois forces de désordre différentes :  $W = 0.1$  (bleu),  $0.5$  (jaune) et  $1$  (vert). L'état lié initial  $|\psi(0)\rangle$  est un état propre à  $W = 0$  avec une énergie  $E_0 \simeq 3.087$  pour  $N = 30$  et  $\bar{U} = 2$ . D'après  $P(t) \simeq 1 - t/\tau$  (lignes pointillées), la durée de vie  $\tau$  est de (a) 365, (b) 16 et (c) 4, ce qui est en accord avec  $\tau \sim 3.5/W^2$ .

## V.5 Les états “séparatrices”

Après avoir traité les états moléculaires et atomiques ainsi que le recouvrement des bandes, nous nous concentrons maintenant sur une classe spéciale d'états à  $E \simeq 0$  que nous appelons états “séparatrices”. Ces états sont mieux compris en commençant par le modèle sans interaction (évolution libre de deux particules sautant sur une chaîne), puis en considérant la manière dont l'interaction désordonnée affecte les états propres d'énergie 0 du modèle libre. Tout au long de cette section, nous supposons que le nombre de sites  $N$  est pair par simplicité.

### V.5.1 Le sous espace d'énergie nulle du cas sans interaction

Le sous-espace d'énergie nulle du problème sans interaction ( $\bar{U} = W = 0$ ) est généré par  $2N - 2$  ondes planes. Les quasi-moments correspondants se trouvent sur la séparatrice dans la zone de Brillouin bidimensionnelle  $(k_x, k_y)$ . La séparatrice est la ligne d'iso-énergie à énergie nulle (qui sépare les états de type particule et de type trou dans la structure de bande du réseau carré). Elle a la forme d'un carré tourné, comme le montre la Figure V.13, avec

$$\text{Lignes rouges : } k_y = \pm\pi + k_x \Rightarrow k_- = \frac{k_x - k_y}{2} = \pm\frac{\pi}{2};$$

$$\text{Lignes vertes : } k_y = \pm\pi - k_x \Rightarrow k_+ = k_x + k_y = \pm\pi.$$

On remarque qu'en utilisant la zone de Brillouin alternative définie dans l'Annexe G, les équations pour les lignes vertes deviennent  $k_+ = -\pi$  avec  $-\pi \leq k_- < \pi$ .

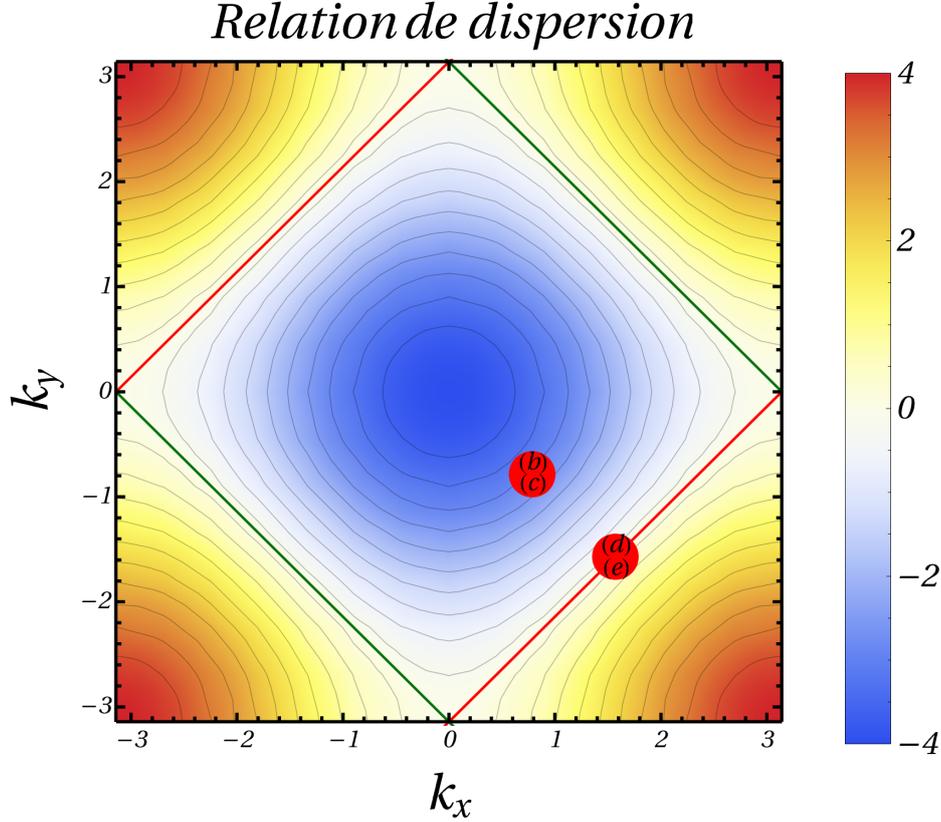


Fig. V.13 Relation de dispersion à  $\bar{U} = 0$  et  $W = 0$ . Les lignes rouges et vertes sont les lignes d'iso-énergie  $E = 0$ . Les combinaisons linéaires des ondes planes sur les lignes vertes donnent des états non perturbés lorsque le désordre est activé, alors que celles sur les lignes rouges donnent lieu aux états séparatrices. Les points rouges (b) – (c) et (d) – (e) correspondent respectivement aux paquets d'onde initiaux des Figures V.15-b,c et Figures V.15-d,e

À partir des ondes planes à l'énergie zéro, nous pouvons former  $3N/2 - 2$  combinaisons linéaires ayant des fonctions d'onde qui s'annulent pour  $x = y$ , comme nous le montrons ci-dessous. Ce sont des états propres du système même lorsque l'interaction sur site entre les particules est allumée. Ils proviennent de deux groupes d'états à énergie nulle, que nous appelons états diagonaux et antidiagonaux.

Les  $N$  états diagonaux sont des combinaisons linéaires des ondes planes le long des lignes vertes dans la zone de Brillouin, choisies de manière à ce que la distance entre les deux particules soit fixe. La valeur de la distance  $j = -N/2, -N/2 + 1, \dots, N/2 - 1$  spécifie l'état,

$$|\psi_d(j)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^N |x, y = x + j \pmod{N}\rangle.$$

Parmi ces  $N$  états mutuellement orthogonaux,  $N - 1$  ont la propriété que leurs fonctions d'onde s'annulent en  $x = y$ . Seul l'état  $|\psi_d(0)\rangle$  est affecté par l'interaction sur site.

Les états antidiagonaux, quant à eux, sont des combinaisons linéaires de  $N - 2$  ondes planes le long des lignes rouges dans la zone de Brillouin. On ne prend que les quasi-moments tels que  $k_x \neq 0$  et  $k_y \neq 0$ , puisque ces modes ont déjà été inclus dans la construction des états diagonaux.

Nous pouvons former  $N/2 - 1$  combinaisons linéaires antidiagonales des ondes planes qui ont un poids nul sur la diagonale  $x = y$ . Ceux-ci peuvent être indexés par la composante du quasi-moment  $k_x$ , qui est  $0 < k_x < \pi$  et prend  $N/2 - 1$  valeurs différentes. Les états sont :

$$|\psi_{\text{ad-}}(k_x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{x,y} (e^{ik_x x} e^{i(k_x - \pi)y} - e^{i(k_x - \pi)x} e^{ik_x y}) |x, y\rangle.$$

Les combinaisons linéaires restantes des  $N/2 - 1$  ondes planes antidiagonales seront affectées par l'interaction. Leurs fonctions d'onde peuvent être écrites comme ceci :

$$|\psi_{\text{ad+}}(k_x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{x,y} (e^{ik_x x} e^{i(k_x - \pi)y} + e^{i(k_x - \pi)x} e^{ik_x y}) |x, y\rangle.$$

## V.5.2 Effets perturbatifs de l'interaction sur les états séparatrices

Nous considérons maintenant l'effet d'un potentiel d'interaction faible, en perturbation au premier ordre en  $U$ , sur les états propres d'énergie 0 vu à la section précédente. Pour des raisons de simplicité, nous nous limitons au cas  $\bar{U} = 0$  et  $W$  fini. Nous appellerons les  $N/2$  états affectés par le désordre les états “séparatrices”.

Afin d'étudier les états séparatrices, nous sommes donc amenés à diagonaliser une matrice  $N/2 \times N/2$ . Nous pouvons diagonaliser numériquement cette matrice pour obtenir des vecteurs propres qui ressemblent typiquement à ceux illustrés sur la Figure V.14. La Figure V.14(b) reproduit la caractéristique principale des états séparatrices, qui est la localisation le long de la direction du centre de masse  $x_+$  avec une délocalisation le long de  $x_-$ .

Afin de comprendre cette localisation des vecteurs propres, on peut regarder plus en détail la forme de cette perturbation. Dans ce qui suit, on ne fournit pas une preuve formelle de ce mécanisme mais on donne quelques arguments expliquant que ce mécanisme de localisation induit par le désordre doit être distingué de la localisation d'Anderson.

L'opérateur d'interaction  $U$  dans la base constituée de l'état diagonal  $\psi_d(x_- = 0)$  et des états rouges symétriques  $N/2 - 1$  s'écrit :

$$\begin{pmatrix} b & \sqrt{2}u \\ \sqrt{2}u^\dagger & 2U_\parallel \end{pmatrix}, \quad (\text{V.8})$$

où  $b = \frac{1}{N} \sum_j U_j$ ,  $u$  est un vecteur de taille  $N/2 - 1$  et  $U_\parallel$  est une matrice de taille  $(N/2 - 1) \times (N/2 - 1)$ . Leurs composantes et éléments de matrice respectifs sont :

$$u_{k_+} = \frac{1}{N\sqrt{N}} \sum_j U_j e^{-i(k_+ + \pi)j} \quad (\text{V.9})$$

$$U_{|k_+, k_-} = \frac{1}{N^2} \sum_j U_j e^{-i(k_+ - k'_+)j} \quad (\text{V.10})$$

avec  $k_+ = \frac{2\pi K}{N}$ ,  $k'_+ = \frac{2\pi K'}{N}$ ,  $K$  et  $K'$  étant un des  $N/2 - 1$  entiers pairs dans  $[-N/2 + 1, N/2[$ .

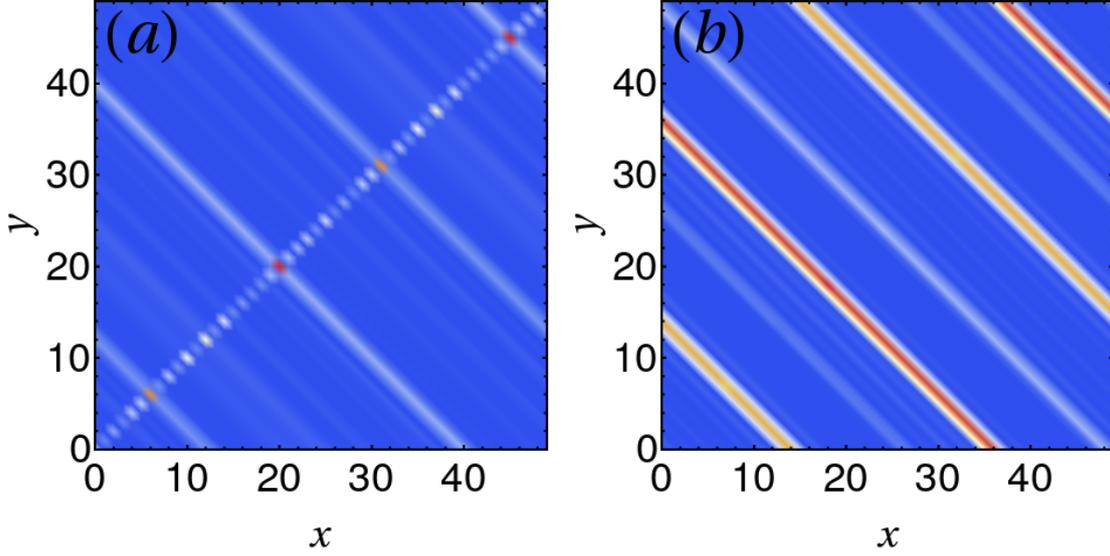


Fig. V.14 États séparatrices. (a) : Un état propre de la perturbation  $U$  ayant un recouvrement non-négligeable avec l'état  $|\psi_d(0)\rangle$ . Il représente une minorité d'états propres. (b) : Un état propre typique de la perturbation  $U$  ayant un recouvrement négligeable avec l'état  $|\psi_d(0)\rangle$ .

L'opérateur d'interaction écrit dans cette base ressemble presque à un hamiltonien de potentiel sur site  $H_{\text{op}}$  sans terme de saut, de dimension  $N/2$  mais écrit dans la base des ondes planes :

$$H_{\text{op}} = \sum_j U_j |j\rangle \langle j| = \sqrt{2/N} \sum_{k,k'} U_j e^{2i\pi j(k-k')} |k'\rangle \langle k|. \quad (\text{V.11})$$

Si l'opérateur d'interaction était exactement proportionnel à  $H_{\text{op}}$  en établissant la correspondance biunivoque entre le quasi-moment du centre de masse  $k_+$  (voir équation (V.9) et (V.10)) et le quasi-moment 1D  $k$  (voir équation (V.11)), chaque vecteur propre serait localisé exactement sur un centre de masse  $x_+$  et délocalisé dans la direction du mouvement relatif  $x_-$ . La Figure V.14-b montre une localisation des vecteurs propres le long de la direction du centre de masse mais nous ne pouvons pas assigner précisément une position du centre de masse à un vecteur propre. Dans ce qui suit, nous rendons explicites les différences entre l'opérateur d'interaction  $U$  et l'hamiltonien potentiel sur site  $H_{\text{op}}$ .

En effectuant la substitution  $U_j \rightarrow U_j \sqrt{2}/(N\sqrt{N})$ , et en établissant une correspondance univoque entre le quasi-moment du centre de masse  $k_+$  de l'équation (V.10) et le quasi-moment 1D  $k$  de l'équation (V.11),  $2U_1$  correspond exactement à la partie restreinte de  $H_{\text{op}}$  sur le sous-espace de dimension  $N/2 - 1$  où l'on supprime l'onde plane de plus faible quasi-moment  $k = -\pi$ . Cependant, si l'on veut que  $b$  de l'équation (V.8) corresponde au premier élément de la matrice de  $H_{\text{op}}$ , on doit effectuer une substitution différente  $U_j \rightarrow U_j/(\sqrt{2N})$ . Finalement, la correspondance entre  $\sqrt{2}u$  de l'équation (V.9) et  $\langle -\pi | H_{\text{op}} | k \neq -\pi \rangle$  est établie, encore, par une autre substitution  $U_j \rightarrow U_j/N$ . Par conséquent, les facteurs numériques (et

la mise à l'échelle avec  $N$ ) ne correspondent pas entre les différentes parties de la matrice dans l'équation (V.8) et ceci constitue l'une des différences avec l'hamiltonien de potentiel sur site de l'équation (V.11).

L'autre différence est que le premier vecteur de l'équation V.8 est l'état diagonal  $\psi_d(0)$  et n'est pas un état d'onde plane comme les autres états rouges symétriques ou l'onde plane 1D du modèle de potentiel sur site. Si l'on avait  $H_{\text{op}}$  au lieu de  $U$ , les vecteurs propres seraient les états symétriques antidiagonaux, bien localisés sur une position du centre de masse. L'opérateur d'interaction résultant étant assez similaire à  $H_{\text{op}}$ , nous ne nous attendons pas à des états propres très différents et nous observons également une localisation le long de la direction du centre de masse. Si cette analogie avec le modèle de potentiel se vérifie, la localisation menant aux états séparatrices est une localisation triviale par des potentiels sur site désordonnés (en effet, il n'y a pas d'énergie cinétique dans le modèle de potentiel) et non une localisation d'Anderson résultant d'interférences de diffusion multiples.

L'analyse perturbative est valable pour les énergies inférieures à la première énergie non nulle ( $\sim 1/N^2$ ). Les valeurs propres de  $U$  se comportent typiquement comme  $W/N$ , ainsi le désordre doit être très petit ( $W \ll 1/N$ ) pour que la théorie des perturbations soit valable.

### V.5.3 Dynamiques des paquets d'onde

La localisation des états séparatrices le long de la direction du centre de masse  $x_+$  conduit à un effet intéressant pour la diffusion des deux particules, que nous discutons ci-dessous.

En raison du désordre dans le potentiel d'interaction, la quantité de mouvement du centre de masse n'est pas conservée. Cependant, comme nous le montrons sur la Figure V.15, si les deux particules ont des paquets d'onde d'énergies égales et opposées,  $+E$  et  $-E$ , alors pendant la diffusion, la quantité de mouvement du centre de masse reste à peu près conservée. Notons qu'il s'agit du même problème que celui d'une particule unique se déplaçant sur un réseau bidimensionnel avec une barrière de potentiel diagonale désordonnée.

Pour établir un problème de diffusion générique, nous préparons les deux particules dans des paquets d'onde gaussiens, éloignés l'un de l'autre, centrés autour des positions  $x$  et  $y$  avec  $x < y$ . Les vitesses des particules,  $v_{x,y} = \partial E(k_{x,y}) / \partial k_{x,y}$  doivent être telles que  $v_x > v_y$  afin qu'une collision se produise. Un exemple de quasi-moment d'état initial  $k_{x0}, k_{y0}$  représentant cette condition est indiqué par les symboles (b) et (c) sur la Figure V.13. La distribution correspondante des positions initiales est représentée sur la Figure V.15 (a). Dans le cas d'une interaction de contact invariante par translation, pendant la collision, l'énergie  $E$  et la quantité de mouvement du centre de masse  $k_+$  sont conservées. Dans ce cas, après la collision, les parties transmises et réfléchies de la fonction d'onde seront des paquets d'onde avec  $k_x \approx k_{x0}$ ,  $k_y \approx k_{y0}$  et  $k_x \approx k_{y0}$ ,  $k_y \approx k_{x0}$ , respectivement. La distribution des positions correspondantes, obtenue numériquement, est illustrée sur la Figure V.15 (b). Si l'interaction est désordonnée, la quantité de mouvement du centre de masse n'est plus conservée, seule l'énergie totale l'est. Ainsi, après la collision, nous nous attendons à voir une large distribution des valeurs de quasi-moment  $k_x, k_y$  tant pour la partie réfléchie que pour la partie transmise. L'ensemble des vitesses accessibles après collision est donc plus grand, et par conséquent – comme le montre la Figure V.15 (c) – la distribution des positions après collision s'est élargie.

Cependant, un cas particulier du problème de diffusion survient lorsque les deux paquets d'onde incidents ont des énergies opposées, de sorte que l'énergie totale est approximativement nulle. Ainsi,  $k_{x0}, k_{y0}$  se situent quelque part sur la ligne séparatrice rouge de la

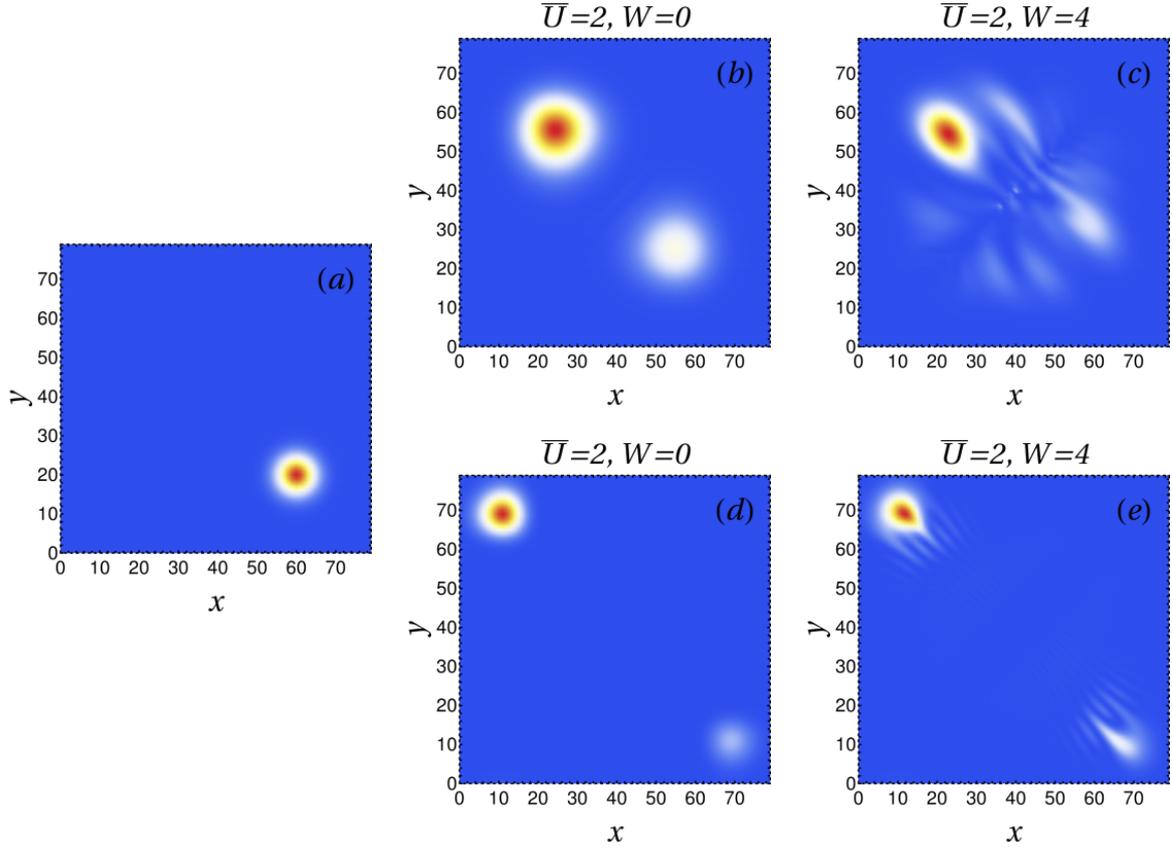


Fig. V.15 Distributions des positions des deux particules avant (a) et après (temps  $t = 25$ ) (b-e) la diffusion des deux paquets d'onde gaussiens l'un sur l'autre, pour différents moments initiaux et avec une interaction de contact  $\bar{U} = 2$  invariante par translation (b,d) ou désordonnée (c,e), dans un système de taille  $N = 80$ . (a) Les paquets d'onde initiaux (temps  $t = 0$ ) ont tous deux une largeur de 5 sites, préparés à  $x_0 = 20$ ,  $y_0 = 60$  avec un vecteur d'onde  $k_0^+ = 0$  (c'est-à-dire une vitesse de groupe nulle le long de  $x_+$ ) et soit une énergie totale  $E \neq 0$ , une quantité de mouvement  $k_0^- = \pi/4$  [cas (b) et (c) dans la Figure V.13] ou  $E = 0$ ,  $k_0^- = \pi/2$  [cas (d) et (e) dans la Figure V.13]. (b, d) Sans désordre, la fonction d'onde après collision a deux paquets d'onde, quelque peu élargis, mais centrés sur les mêmes coordonnées  $x_+$ , en raison de la conservation du moment cinétique du centre de masse - indépendamment des moments initiaux. (c) Lorsque le désordre dans l'interaction de contact rompt l'invariance par translation, et que l'énergie totale  $E \neq 0$ , nous voyons une distribution plus large des coordonnées après collision  $x_+$  et  $x_-$ . (e) Lorsque l'interaction de contact est désordonnée, et que  $E = 0$ , nous observons un élargissement de la distribution des coordonnées après collision  $x_-$ , mais seulement un léger élargissement de la distribution  $x_+$ . Ceci est dû à la dominance des états séparatrices dans le paquet d'onde initial, comme expliqué dans le texte.

Figure V.13, un exemple est indiqué sur la Figure par les symboles (d) et (e). L'état initial présente alors un recouvrement important avec les états antidiagonaux de la séparatrice, qui, comme expliqué dans la section précédente, sont étendus le long de  $x_-$  mais localisés le long

de  $x_+$ . De plus, il n'y a pratiquement aucun recouvrement avec les états diagonaux (états propres formés par des combinaisons linéaires d'ondes planes provenant des parties vertes de la séparatrice). Ainsi, l'état après collision devrait être composé principalement de modes d'ondes planes sur ou près des parties rouges de la séparatrice, avec des vitesses  $v_x \approx -v_y$ . C'est pourquoi la distribution des positions après collision dans ce cas peut être large le long de  $x_-$ , mais ne devrait pas être significativement élargie le long de  $x_+$  : le centre de masse est approximativement conservé (voir Figure V.15(e)). Pour comparaison, la distribution des positions après collision avec les mêmes paramètres, mais sans désordre dans l'interaction, est montrée dans la Figure V.15(d).

Notons que le désordre dans l'interaction conduit également à des interférences (ou des stries) dans la distribution des positions des parties réfléchies et transmises, ce qui mériterait une étude plus approfondie. Pour la même évolution temporelle et en raison de la relation de dispersion non parabolique, l'étalement naturel du paquet d'onde est beaucoup plus petit dans la Figure V.15(d) que dans la Figure V.15(b).

En résumé, les états séparatrices ont un faible taux de participation ( $P_2 \sim N/N^2 = 1/N \ll 1$  lorsque  $N \gg 1$ ) et en tant que tels pourraient être confondus avec les états cicatrices, bien connus dans le contexte du chaos quantique [184, 187]. Cependant, ils sont nettement différents. En effet, ils sont dus aux lignes d'iso-énergie de la séparatrice, qui n'existent pas dans un billard continu. De plus, ils ne sont pas liés à des orbites classiques instables et périodiques. Notre compréhension est qu'ils sont liés à des orbites classiques stables dans un billard avec un type particulier d'énergie cinétique  $H(k_x, k_y) = -2 \cos(k_x) - 2 \cos(k_y)$  au lieu de  $H(k_x, k_y) = (k_x^2 + k_y^2)/(2m)$ . Nous n'avons pas trouvé d'états cicatrices dans le modèle actuel.

## V.6 Discussion et conclusion

En l'absence de désordre, deux particules en interaction sur une chaîne peuvent avoir une dynamique cohérente comme un état lié ou un mouvement indépendant comme des états de diffusion. Lorsque l'interaction devient spatialement désordonnée, deux effets très différents sont attendus pour l'état lié moléculaire.

D'une part, si l'énergie de l'état moléculaire initial ne recouvre pas la bande atomique, la molécule devient localisée d'Anderson en raison du désordre.

D'autre part, comme le désordre dans l'interaction rompt la conservation du quasi-moment du centre de masse et étend la bande moléculaire en énergie, un état moléculaire initialement lié avec une énergie qui chevauche la bande atomique devient une résonance avec une durée de vie finie et se délocalise sur l'ensemble du système. Le désordre détruit à la fois l'état lié moléculaire et la localisation d'Anderson.

De même, quelques états de diffusion dans la bande atomique persistent même lorsque le désordre est allumé. Ils sont appelés quasi-idéaux. Les états résonants et les états quasi-idéaux ne sont pas très différents des états liés et des états de diffusion qui existent en l'absence de désordre. Leur existence est due au fait que le désordre n'est qu'un "effet de surface" dans notre modèle. On s'attend à ce qu'ils deviennent négligeables dans la limite thermodynamique car leur nombre augmente linéairement en  $N$ , pas aussi vite que les états

chaotiques en  $N^2$ .

Près du centre de la bande atomique, nous observons des états inhabituels dus à l'interaction désordonnée et liés à la présence d'une ligne d'énergie zéro séparatrice dans la relation de dispersion du réseau carré. Ces états séparatrices n'existent pas dans les billards quantiques standard (définis dans le continuum plutôt que dans un modèle de liaisons fortes). Ils présentent une localisation induite par le désordre dans l'espace réel mais pas de type Anderson (ce n'est pas un effet d'interférence). Une conséquence remarquable est qu'un paquet d'onde à énergie moyenne nulle, c'est-à-dire construit sur ces états séparatrices, ne peut pas être dispersé latéralement lorsqu'il heurte une barrière désordonnée. Le nombre d'états séparatrices ( $N/2$ ) les rend négligeables dans la limite thermodynamique.

En dehors des états résonants, quasi-idéaux et séparatrices, qui sont tous des effets de taille finie, la plupart des états de la bande atomique sont des états chaotiques. Ce sont les états typiques d'un billard torique particulier possédant une barrière désordonnée le long d'une boucle fermée qui s'enroule autour du tore. Ces états sont délocalisés (avec un rapport de participation de  $1/3$ ), ont un caractère aléatoire et présentent des filaments.

Nous discutons maintenant des réalisations expérimentales possibles du modèle  $\bar{U}$ . Le type d'interaction désordonnée que nous avons considéré pourrait être réalisé avec des atomes froids piégés dans un réseau optique. Là, l'interaction entre les atomes piégés peut être accordée magnétiquement en utilisant des résonances de Feshbach [192]. Dans une variante de cette technique, en utilisant les résonances de Feshbach optiques [193], la condition de résonance entre les états est remplie à l'aide d'un champ laser supplémentaire (ou d'une paire de champs laser). Dans ce cas, l'intensité de l'interaction peut dépendre de la position si la forme spatiale des lasers est modulée par des motifs de speckle optique.

Une autre voie expérimentale consisterait à utiliser l'analogie avec le billard quantique, c'est-à-dire à réaliser le système comme une particule unique se déplaçant en deux dimensions avec une ligne de défauts potentiels. Cela pourrait être réalisé avec des guides d'ondes photoniques fabriqués à l'aide d'une inscription laser femtoseconde, comme dans une expérience récente de Mukherjee et al. Dans cette expérience, le modèle Hubbard 1D à deux corps a été transformé en un modèle de liaisons fortes sur réseau carré en présence d'une barrière le long de la diagonale. De même, Di Liberto et al. [182] ont proposé cette approche pour simuler les effets de l'interaction dans le modèle de Su-Schrieffer-Heeger. Dans un tel dispositif expérimental, le désordre pourrait simplement être inclus en faisant varier les paramètres des guides d'ondes également le long de la diagonale. Cela semble possible en utilisant le niveau de contrôle sur les paramètres des guides d'ondes déjà démontré dans l'expérience [194].

# Conclusion

Les marches quantiques à temps discret présentent une très grande variété de comportements de par la possibilité de modifier le protocole et les opérateurs les constituant : le dé et la translation. Elles offrent alors un terrain de jeu fertile pour les physiciens. Sur le plan théorique le défi est, dans cette multitude de paramètres, de réussir à trouver les bons “ingrédients” pour obtenir des systèmes aux propriétés intéressantes.

Il est établi que dans la limite continue certaines marches quantiques reproduisent l'équation de Dirac permettant de simuler des particules relativistes. Cependant, la dynamique de l'ensemble du spectre reste plus compliquée à appréhender. Les relations de dispersion font intervenir des fonctions trigonométriques réciproques conséquence de la périodicité des quasi-énergies. Malgré cette propriété qui n'a pas d'équivalent pour les hamiltoniens statiques, la plupart des analyses développées sur les modèles de liaisons fortes peuvent être appliquées aux marches quantiques.

En appliquant un champ magnétique transverse, on peut alors tracer le spectre des quasi-énergies en fonction du flux magnétique : ce sont des papillons de “Floquet-Hofstadter” pour marches quantiques. Elles font apparaître des structures auto-similaires et un spectre singulier continu [118] aux flux irrationnels. On voit, par ailleurs, l'apparition de niveaux de Landau à bas flux qui reflètent la limite continue. Avec les trois marches étudiées aux chapitre I et II, on est capable de reproduire les trois comportements les plus connus des niveaux de Landau sous champ magnétique pour les systèmes hamiltoniens. Ces niveaux varient soit linéairement, soit en racine carrée, soit en puissance  $2/3$  du flux magnétique correspondant, respectivement, dans la relation de dispersion à champ nul à des extrema paraboliques, des points de contact de type Dirac (i.e. linéaire) et semi-Dirac (i.e. linéaire dans une direction parabolique dans l'autre). Une approche semi-classique en utilisant des paquets d'onde gaussiens permet de retrouver les orbites cyclotrons ou les “zigzags” attendus. Que ce soit pour les niveaux de Landau ou l'approche semi-classique, peu de choses nouvelles émergent des marches à temps discret par rapport à leur analogue continu. L'analyse de ces phénomènes dans le cadre des marches quantiques reste encore valable car elle ne repose que sur des études locales du spectre. Il suffit d'étudier le comportement des quasi-énergies au voisinage de la quasi-énergie considérée pour les comprendre.

À l'inverse, les problèmes d'isolants topologiques nécessitent une compréhension plus globale du spectre en fonction du flux. Ici, la différence majeure de ces papillons avec leurs équivalents statiques réside dans la périodicité du spectre en quasi-énergie. L'impossibilité de définir une quasi-énergie fondamentale et donc d'avoir un gap trivial en dessous de celui-ci (donc un invariant topologique nul dans ce gap) implique que les marches quantiques appartiennent à une autre famille d'isolants topologiques. Il est nécessaire de définir un nouvel invariant : l'invariant RLBL, différent du nombre de Chern et permettant de caractériser

l'entièreté de la topologie des marches quantiques. Cependant, cet invariant défini à la base pour des systèmes de Floquet i.e. des hamiltoniens périodiques en temps présentant également des quasi-énergies, peut se révéler différent pour deux systèmes de Floquet ayant le même hamiltonien effectif (i.e. ayant le même hamiltonien intégré sur une période mais des dynamiques à l'intérieur de cette période complètement différentes). Une marche quantique n'est définie que pour des pas de temps discrets, la dynamique entre chaque application d'opérateur de dé ou de translation n'est pas spécifiée. Pour une seule marche quantique, il peut exister potentiellement plusieurs systèmes de Floquet la reproduisant. Si l'invariant RLBL s'avère être le bon invariant pour la marche quantique, cela implique que les différents systèmes de Floquet imitant une même marche quantique auraient le même invariant alors que leur dynamique peut être différente, ce qui constitue un résultat fort. Les systèmes de Floquet reproduisant les marches quantiques pourraient alors être classés selon l'invariant RLBL en fonction de la seule connaissance de leur hamiltonien effectif. Cela semble aller à l'encontre de la définition de l'invariant RLBL qui nécessite la connaissance de la dynamique intrinsèque du système de Floquet. Il faudrait peut-être définir un nouvel invariant propre aux marches quantiques et à cette évolution intrinsèquement discrète qui permet de prendre en compte cette périodicité des quasi-énergies sans nécessiter la définition d'un hamiltonien dépendant du temps.

La notion d'énergie de Fermi dans ces systèmes présentant une périodicité en quasi-énergie est mal définie puisqu'il n'existe plus d'énergie fondamentale. L'analyse en terme de potentiel chimique (ou d'énergie de Fermi) lorsque l'on couple de tels systèmes à des réservoirs pour étudier des phénomènes de transport de charge devient alors problématique mais est néanmoins possible (voir [195, 196]).

L'un des objectifs de ce travail de thèse est de comprendre la relation qui peut exister entre les marches quantiques à temps discret et continu. On a pu voir dans les deux premiers chapitres que les analyses locales du spectre restaient pertinentes pour les marches quantiques à temps discret. Afin de continuer dans ce sens, on a voulu comprendre s'il était possible de retrouver un phénomène connu dans les systèmes hamiltoniens : les cages d'Aharonov-Bohm. Dans les chapitres III et IV, on a alors étudié des marches quantiques sur la chaîne de boucles et le pavage  $\mathcal{T}_3$ . Trouver un analogue de ce phénomène pour les marches quantiques n'a pas été trivial puisque les cages ne fonctionnent que pour certains dés sur les sites hubs. On a pu alors démontrer que l'on pouvait bloquer la propagation des marches quantiques pour certaines valeurs du flux critique du champ magnétique. Les cages pour marches quantiques possèdent une dynamique plus complexe que leurs analogues hamiltoniens, la taille des cages est plus grande, la dynamique n'est pas forcément périodique et le flux critique des cages peut-être réglé à volonté pour la chaîne de boucles. Par ailleurs, la possibilité d'utiliser deux types de dés sur les sites hubs cageants à différents flux a permis de contrôler leur extension.

L'introduction de perturbations dans le système de la chaîne de boucles a pu mettre en évidence cinq types de comportements pour le marcheur quantique :

1. Un comportement isolant où les fonctions d'onde sont localisées exponentiellement lorsque l'on met du désordre statique sur les dés des sites rims. À faible désordre, les cages se brisent mais le système reste localisé et le degré de localisation est indépendant de la force du désordre. À plus fort désordre, on retrouve le phénomène de localisation d'Anderson.

2. Un comportement isolant où les fonctions d'ondes sont à support fini lorsque l'on introduit du désordre sur les dés des sites hubs. Ici, les cages ne sont pas brisées, et les fonctions d'onde ne sont pas localisées exponentiellement. Elles sont même délocalisées mais à l'intérieur d'un domaine de taille finie dans le système.
3. On obtient un comportement diffusif classique lorsque l'on met un désordre dynamique que ce soit sur les dés des sites hubs ou rims.
4. Un comportement balistique, par exemple en mettant un flux différent du flux critique ou en introduisant un second marcheur quantique interagissant avec le premier. À noter que, dans ce dernier cas, pour que les cages soient brisées, il faut que les deux marcheurs commencent sur le même site. Ici, le système créé qui brise les cages est un état extrêmement lié (une molécule) dont la probabilité d'être séparé de plus de 4 cellules est exactement nulle.
5. Une diffusion anormale en combinant un désordre statique et dynamique. Le marcheur présente une dynamique exotique. La présence des boucles dans la chaîne permet de simuler le rôle d'une barrière de potentiel. Malgré cela, la diffusion anormale observée n'est pas le résultat d'un phénomène purement quantique et la question de savoir si un phénomène d'origine quantique dans les marches peut exhiber de la diffusion anormale (exactement comme à la transition du modèle d'Anderson 3D où un exposant de diffusion  $\gamma = 1/3$  est prédit [197]) demeure sans réponse et pourrait constituer l'objet de futures recherches.

Un autre axe de recherche intéressant serait de comprendre l'ingrédient minimal d'origine géométrique permettant la création de cages de manière systématique dans un pavage que ce soit pour le cas hamiltonien ou le cas des marches quantiques. On a pu observer des cages sur la chaîne de boucles ainsi que sur le pavage  $\mathcal{T}_3$  pour ces deux types de système. On sait, par ailleurs, que le pavage  $\mathcal{T}_4$  montre également ce phénomène d'extrême localisation au moins dans le cas hamiltonien [79]. Dans ces trois cas les pavages présentent des boucles permettant des interférences destructives de la fonction d'onde de la particule mais il n'est pas clair quelle doit être la condition minimale sur l'agencement général de ces boucles pour permettre une localisation complète de la particule.

Dans les chapitres III et IV, on a étendu l'étude des marches quantiques à des pavages autres que le réseau carré (le pavage  $\mathcal{T}_3$  et la chaîne de boucles) et on a comparé les résultats obtenus au cas hamiltonien. De la même manière, réaliser des marches quantiques sur d'autres réseaux mériterait une attention particulière afin de comprendre les éventuels points communs et différences qu'il peut y avoir entre les marches quantiques à temps continu et à temps discret. On a même pu remarquer en général que les marches quantiques à temps discret, de par leur espace interne, présentaient des dynamiques plus riches que leurs équivalents hamiltoniens. Une perspective potentiellement intéressante serait d'étudier les marches quantiques sur le pavage nid d'abeille. Dans les hamiltoniens de liaisons fortes ce pavage donne une relation de dispersion relativiste (point de contacts Dirac) et sous champ magnétique le papillon obtenu par Rammal [78] exhibe une topologie assez riche. Les propriétés remarquables du graphène (i.e. sa réalisation avec des atomes de carbone) ont alors attiré beaucoup d'attention. Quelques articles ont déjà étudié des marches à temps discret sur ce pavage en utilisant un spin de dimension 2 [198, 199] avec des protocoles assez élaborés. Des dés de dimensions 3 pour le pavage nid d'abeille ont également été étudiés [200], mais à notre connaissance il n'existe pas d'étude spectrale sans et sous champ magnétique d'une

telle marche.

Enfin, dans le dernier chapitre, l'étude d'une interaction de contact désordonnée entre deux particules sur une chaîne a mis en lumière un grand nombre de types d'états malgré la simplicité du modèle. Dans le régime où la bande moléculaire est clairement séparée de la bande atomique, on observe pour cette dernière des états chaotiques, des états quasi-idéaux et des états séparatrices. Les états chaotiques sont les états attendus en présence d'un désordre de bord, ils sont délocalisés dans les deux directions. Les états quasi-idéaux sont des états peu affectés par le désordre, ils ressemblent aux états de diffusion à désordre nul. Enfin les états séparatrices sont, a priori, un nouveau type d'états inattendus provenant de l'existence d'une séparatrice dans la relation de dispersion du réseau carré. Les états moléculaires, eux, se localisent d'Anderson sous l'effet du désordre. Un deuxième effet du désordre est d'étendre en énergie la bande moléculaire, à tel point que, dans un régime de désordre fort (ou d'interaction faible), les états moléculaires se dissocient dans la bande atomique créant alors un autres types d'états : les états résonants, une hybridation entre états moléculaires et atomiques de même énergie.

Les états séparatrices ont une dynamique particulièrement intéressante comparé à la relation de dispersion parabolique du cas continu. Celle-ci est une conséquence de la relation de dispersion originale issue du modèle de liaisons fortes :  $H(k_x, k_y) \propto \cos k_x + \cos k_y$ . Dans les modèles de chaos quantique réalisés dans le continu, on cherche souvent à relier les caractéristiques des états quantiques à l'existence de certaines orbites périodiques du mouvement classique correspondant. Cela suggère, dans le cas présent, d'étudier des mouvement classiques réglés par des hamiltoniens transcrivant les relations de dispersion des modèles quantiques sur réseau. Une étude préliminaire a montré des trajectoires originales, associées en particulier à des règles de réflexions non spéculaires. De nouvelles orbites stables apparaissent, des billards connus comme étant intégrables ou chaotiques pourraient ne plus l'être et l'étude de nouvelles constantes du mouvement devrait être envisagée. Une telle étude mériterait probablement d'être prolongée.

# A – Symétrie

L'étude des symétries est reprise du papier [52] (adaptée au cas des marches que l'on étudie).

## A.1 Symétrie de sous-réseau

Toutes les marches quantiques étudiées dans ce manuscrit (à part celle faisant intervenir la base de spin ( $|U\rangle, |R\rangle, |D\rangle, |L\rangle$ )) vivent sur un sous-réseau. En effet, si l'on part d'un état initial situé en  $x$  et  $y$  alors au pas de temps suivant le marcheur est soit en  $(x+1, y+1)$ , soit en  $(x+1, y-1)$ , soit en  $(x-1, y+1)$  ou en  $(x-1, y-1)$ . Dans tous les cas si  $x'$  et  $y'$  dénote la nouvelle position alors  $(x' + y') \bmod 2 = (x + y) \bmod 2$ . On note les 2 sous-réseaux :

$$\begin{aligned} \text{I} : (x + y) \bmod 2 &= 0 \\ \text{II} : (x + y) \bmod 2 &= 1 \end{aligned}$$

Ainsi, l'opérateur de marche quantique ne couple que des états appartenant au même sous-réseau.

Il est possible de diviser ces 2 sous-réseaux en deux autres sous-réseaux chacun tel que :

$$\begin{aligned} \text{Ia} : x \text{ pair}, y \text{ pair} \\ \text{Ib} : x \text{ impair}, y \text{ impair} \\ \text{IIa} : x \text{ impair}, y \text{ pair} \\ \text{IIb} : x \text{ pair}, y \text{ impair} \end{aligned}$$

Ainsi, l'opérateur de marche quantique transforme un état appartenant à Ia en Ib, un état appartenant à IIa en IIb et vice-versa.

Considérons maintenant l'opérateur  $\chi$  :

$$\chi = \sum_{l,m} (-1)^m |l, m\rangle \langle l, m| \otimes \mathbb{I}_2 \quad (\text{A.1})$$

qui prend la valeur 1 en Ia et IIa et  $-1$  en Ib et IIb. On en déduit que pour un état quelconque  $|\psi\rangle$

$$\chi^\dagger U \chi |\psi\rangle = -U |\psi\rangle$$

Par conséquent, puisque  $U$  est unitaire on peut l'écrire sous la forme  $U = e^{-iH_{\text{eff}}}$  et on a alors :

$$\chi^\dagger H_{\text{eff}} \chi = \pi + H_{\text{eff}}$$

L'opérateur définit équation (A.1) imprime une phase  $\pi$  sur les sites de coordonnée  $y$  impaire. Cela correspond alors à une translation de  $\pi$  du quasi-moment  $k_y$  modulo la zone de Brillouin. Ainsi, à chaque état propre  $|\psi\rangle$  de quasi-énergie  $\varepsilon$  et de quasi-moment  $k_y$  correspond un autre état propre  $\chi|\psi\rangle$  de quasi-énergie  $\pi + \varepsilon$  modulo la zone de Floquet et de quasi-moment  $k_y + \pi$  modulo la zone de Brillouin. Il n'y a rien de spécial avec la direction  $y$ , ici, on peut appliquer le même raisonnement pour la direction  $x$  et on obtient également cette symétrie.

## A.2 Symétrie chirale

Une marche quantique a une symétrie chirale si il existe un opérateur  $\Gamma$  tel que

$$\Gamma^\dagger U \Gamma = U^\dagger.$$

On en déduit alors que

$$\Gamma^\dagger H_{\text{eff}} \Gamma = -H_{\text{eff}}$$

et donc que à chaque état propre de quasi-énergie  $\varepsilon$  i.e.  $H_{\text{eff}}|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle$  correspond un état propre de quasi-énergie  $-\varepsilon$  i.e.  $H_{\text{eff}}\Gamma|\psi\rangle = -\varepsilon\Gamma|\psi\rangle$ .

### A.2.1 Marche quantique à deux états internes

La symétrie chirale ne tient pas dans le cas général pour la marche quantique à deux niveaux i.e. pour une direction  $y$  asymétrisée par rapport à la direction  $x$  et un flux magnétique non nul. Elle tient soit si le flux est nul et la direction  $y$  peut alors être asymétrique avec la direction  $x$ , ou bien pour une direction  $y$  symétrique avec la direction  $x$  ( $\theta = \pi/4$ ) et un flux magnétique qui peut être non nul.

#### a) Flux magnétique nul

En ce qui concerne l'opérateur de marche quantique à flux nul on reprend sa définition dans l'espace de Fourier (équation (I.13)) et on y applique l'opérateur de symétrie  $\Gamma = \mathbb{I}_{\text{carré}} \otimes \sigma_y$  (avec  $\sigma_y$  la matrice de Pauli suivant  $y$ ). On a alors  $\Gamma.U(\theta)\Gamma = U^*(\theta)$ , ce n'est alors pas une vraie symétrie chirale mais cela permet d'expliquer la symétrie  $\varepsilon \leftrightarrow -\varepsilon$  puisque si  $|\psi\rangle$  est un état propre de  $U$  de quasi-énergie  $\varepsilon$  i.e.  $U|\psi\rangle = e^{-i\varepsilon}|\psi\rangle$  alors

$$\begin{aligned} (U|\psi\rangle)^* &= e^{i\varepsilon}|\psi\rangle^* \\ &= \Gamma.U.\Gamma|\psi\rangle^* \\ \Leftrightarrow U.\Gamma|\psi\rangle^* &= e^{i\varepsilon}.\Gamma|\psi\rangle^* \end{aligned}$$

donc l'état  $\Gamma|\psi\rangle^*$  est état propre de  $U$  avec la quasi-énergie  $-\varepsilon$ .

#### b) Flux magnétique non nul

Dans le cas d'une marche quantique à flux non nul, l'analyse en Fourier échoue (puisque l'invariance par translation est brisée, écrire l'opérateur dans la base des quasi-moments ne le diagonalise plus). En fait, l'opérateur de marche quantique tel que défini équation (I.12) ne vérifie même pas cette symétrie. Cependant, par une permutation cyclique adaptée des

opérateurs constituants  $U$ , i.e. une translation du référentiel temporel de la marche quantique on obtient deux autres opérateurs isospectraux à  $U$  qui le vérifient. Ce sont :

$$U' = U_+.U_-, \quad U'' = U_-.U_+$$

où  $U_+$  et  $U_-$  sont deux opérateurs à demi-temps définis comme ceci :

$$U_+ = F_+.T_{y,+}.D_y(\pi/4).T_{x,+}, \quad U_- = T_{x,-}.D_x.T_{y,-}.F_-.$$

avec  $T_{d,s}$  l'opérateur de translation suivant la direction  $d$  dans l'état de spin  $|s\rangle$  :

$$T_{x,+} = \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l+1, m\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & |l, m\rangle \langle l, m| \end{pmatrix}, \quad T_{x,-} = \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l, m\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & |l-1, m\rangle \langle l, m| \end{pmatrix},$$

$$T_{y,+} = \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l, m+1\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & |l, m\rangle \langle l, m| \end{pmatrix}, \quad T_{y,-} = \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l, m\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & |l, m-1\rangle \langle l, m| \end{pmatrix}$$

et  $F_s$  l'opérateur magnétique agissant sur l'état de spin  $|s\rangle$  :

$$F_+ = \sum_{l,m} |l, m\rangle \langle l, m| \otimes \begin{pmatrix} e^{if_l} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad F_- = \sum_{l,m} |l, m\rangle \langle l, m| \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-if_l} \end{pmatrix} \quad \text{où } f_l = 2\pi\Phi l.$$

On réobtient l'opérateur de translation total suivant  $y$  et suivant  $x$  comme ceci :  $T_y = F_+.F_-.T_{y,+}.T_{y,-}$  et  $T_x = T_{x,+}.T_{x,-}$

L'opérateur de symétrie est exactement le même que dans le cas du flux nul  $\Gamma = \mathbb{I}_{\text{carré}} \otimes \sigma_y$ . En utilisant le fait que  $\Gamma.F_+.\Gamma = F_-^\dagger$ ,  $\Gamma.T_{d,+}.\Gamma = T_{d,-}^\dagger$  et  $\Gamma.D_d(\pi/4).\Gamma = -D_d(\pi/4)$  on a alors  $\Gamma.U'.\Gamma = U'^\dagger$  et  $\Gamma.U''.\Gamma = U''^\dagger$ . Dans le cas où  $\theta \neq \pi/4$  la relation  $\Gamma.D_d(\theta).\Gamma = -D_d(\theta)$  devient fautive et la symétrie est brisée.

## A.2.2 Marche quantique avec la base tensorialisée

On s'inspire de cette preuve pour trouver l'opérateur qui vérifie cette relation dans le cas des marches quantiques utilisant la base tensorialisée.

De plus, contrairement à la marche quantique à deux états internes, ici la symétrie  $\varepsilon \leftrightarrow -\varepsilon$  tient pour des valeurs de  $\theta \neq \frac{\pi}{4}$  même quand le flux est non nul. Plaçons nous dans le cas de la base tensorialisée de spin ( $|RU\rangle, |RD\rangle, |LU\rangle, |LD\rangle$ ) avec un dé  $C(\theta)$  défini équation I.15. On considère ici l'opérateur :

$$\xi = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{I}_{x,y} = -\sigma_y \otimes \sigma_y \otimes \mathbb{I}_{x,y}$$

Pour rappel l'opérateur de marche quantique s'écrit :

$$U = T_{\text{carré}}.D(\theta)$$

$$= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} e^{if_l} |l+1, m+1\rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-if_l} |l+1, m-1\rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{if_l} |l-1, m+1\rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-if_l} |l-1, m-1\rangle \end{pmatrix} \cdot \mathbb{I}_4 \otimes \langle l, m| . D(\theta)$$

Séparons la matrice de translation en 2 matrices tel que :

$$S_1 = \sum_{l,m} \begin{pmatrix} e^{ifl} |l+1, m+1\rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ifl} |l+1, m-1\rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |l, m\rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |l, m\rangle \end{pmatrix} \cdot \mathbb{I}_4 \otimes \langle l, m|$$

$$S_2 = \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l, m\rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |l, m\rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ifl} |l-1, m+1\rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ifl} |l-1, m-1\rangle \end{pmatrix} \cdot \mathbb{I}_4 \otimes \langle l, m|$$

$$U = S_1 \cdot S_2 \cdot D(\theta)$$

On peut redéfinir l'opérateur de marche quantique par une permutation cyclique de ces opérateurs le constituant sans en changer les propriétés physiques du système car cette permutation correspond seulement à une translation temporelle du référentiel. On considère maintenant :

$$U_1 = S_2 \cdot D(\theta) \cdot S_1$$

On peut vérifier qu'on a les relations suivantes :

$$\xi^\dagger \cdot S_1 \cdot \xi = S_2^\dagger \Leftrightarrow \xi^\dagger \cdot S_2 \cdot \xi = S_1^\dagger, \quad \xi^\dagger \cdot D(\theta) \cdot \xi = D^\dagger(\theta) = D(\theta)$$

Ainsi,

$$\xi^\dagger U_1 \xi = U_1^\dagger$$

### A.2.3 Marches quantiques avec la base naturelle

Dans le cas du dé  $D'(\theta)$ , il faut maintenant considérer l'opérateur

$$\zeta = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{I}_{x,y} = \sigma_y \otimes \sigma_x \otimes \mathbb{I}_{x,y}$$

En définissant de manière analogue, l'opérateur

$$U'_1 = S_2 \cdot D'(\theta) \cdot S_1$$

On a toujours  $\zeta^\dagger \cdot S_1 \cdot \zeta = S_2^\dagger$  mais maintenant  $\zeta^\dagger \cdot D'(\theta) \cdot \zeta = -D'^\dagger(\theta) = -D'(\theta)$ . Donc,

$$\zeta^\dagger U'_1 \zeta = -U'^\dagger_1$$

En utilisant la symétrie de sous-réseau  $\chi^\dagger U \chi |\psi\rangle = -U |\psi\rangle$ , on a bien une symétrie chirale :  $\zeta^\dagger \chi^\dagger U'_1 \chi \zeta = U'^\dagger_1$ .

Pour la base ( $|RU\rangle, |DR\rangle, |LU\rangle, |DL\rangle$ ), on rappelle que l'opérateur de translation s'écrit :

$$\sum_{l,m} \begin{pmatrix} e^{ifl} |l+1, m+1\rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-if_{l+1}} |l+1, m-1\rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ifl} |l-1, m+1\rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-if_{l-1}} |l-1, m-1\rangle \end{pmatrix} \cdot \mathbb{I}_4 \otimes \langle l, m|$$

Comme les termes de Peierls sont maintenant différents entre les différents spins, la décomposition de cette opérateur doit se faire de manière plus subtile. Pour cela, on introduit les opérateurs suivants :

$$\begin{aligned}
F_{RU} &= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} e^{if_{l-1}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes |l, m\rangle \langle l, m|, & F_{DR} &= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-if_l} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes |l, m\rangle \langle l, m|, \\
F_{LU} &= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-if_{l+1}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes |l, m\rangle \langle l, m|, & F_{DL} &= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-if_l} \end{pmatrix} \otimes |l, m\rangle \langle l, m| \\
S_{RU} &= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l+1, m+1\rangle \langle l, m| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |l, m\rangle \langle l, m| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |l, m\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |l, m\rangle \langle l, m| \end{pmatrix} \\
S_{DR} &= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l, m\rangle \langle l, m| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |l+1, m-1\rangle \langle l, m| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |l, m\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |l, m\rangle \langle l, m| \end{pmatrix} \\
S_{LU} &= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l, m\rangle \langle l, m| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |l, m\rangle \langle l, m| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |l-1, m+1\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |l, m\rangle \langle l, m| \end{pmatrix} \\
S_{DL} &= \sum_{l,m} \begin{pmatrix} |l, m\rangle \langle l, m| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |l, m\rangle \langle l, m| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |l, m\rangle \langle l, m| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |l-1, m-1\rangle \langle l, m| \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

On peut alors décomposer la marche comme ceci :

$$W = S_{LU} \cdot F_{LU} \cdot F_{DL} \cdot S_{DL} \cdot S_{RU} \cdot F_{RU} \cdot F_{DR} \cdot S_{DR} \cdot D(\theta)$$

$$W' = S_{LU} \cdot F_{LU} \cdot F_{DL} \cdot S_{DL} \cdot S_{RU} \cdot F_{RU} \cdot F_{DR} \cdot S_{DR} \cdot D'(\theta)$$

De la même manière, on permute cycliquement les opérateurs entre eux. On considère maintenant :

$$W_1 = S_{RU} \cdot F_{RU} \cdot F_{DR} \cdot S_{DR} \cdot D(\theta) \cdot S_{LU} \cdot F_{LU} \cdot F_{DL} \cdot S_{DL}$$

$$W'_1 = S_{RU} \cdot F_{RU} \cdot F_{DR} \cdot S_{DR} \cdot D'(\theta) \cdot S_{LU} \cdot F_{LU} \cdot F_{DL} \cdot S_{DL}$$

On peut vérifier que l'on a les relations suivantes :

$$\begin{aligned}
P \cdot \xi^\dagger \cdot P \cdot F_{RU} \cdot P \cdot \xi \cdot P &= F_{DL}^\dagger & P \cdot \zeta^\dagger \cdot P \cdot F_{RU} \cdot P \cdot \zeta \cdot P &= F_{DL}^\dagger \\
P \cdot \xi^\dagger \cdot P \cdot F_{DR} \cdot P \cdot \xi \cdot P &= F_{LU}^\dagger & P \cdot \zeta^\dagger \cdot P \cdot F_{DR} \cdot P \cdot \zeta \cdot P &= F_{LU}^\dagger \\
P \cdot \xi^\dagger \cdot P \cdot S_{RU} \cdot P \cdot \xi \cdot P &= S_{DL}^\dagger & P \cdot \zeta^\dagger \cdot P \cdot S_{RU} \cdot P \cdot \zeta \cdot P &= S_{DL}^\dagger \\
P \cdot \xi^\dagger \cdot P \cdot S_{DR} \cdot P \cdot \xi \cdot P &= S_{LU}^\dagger & P \cdot \zeta^\dagger \cdot P \cdot S_{DR} \cdot P \cdot \zeta \cdot P &= S_{LU}^\dagger \\
P \cdot \xi^\dagger \cdot P \cdot D'(\theta) \cdot P \cdot \xi \cdot P &= D'^\dagger(\theta) & P \cdot \zeta^\dagger \cdot P \cdot D(\theta) \cdot P \cdot \zeta \cdot P &= -D^\dagger(\theta)
\end{aligned}$$

Finalement,

$$\begin{aligned} P.\zeta^\dagger.P.W_1.P.\zeta.P &= -W_1^\dagger \\ P.\xi^\dagger.P.W_1'.P.\xi.P &= W_1'^\dagger \end{aligned}$$

### A.2.4 Symétries du flux

La première symétrie de flux  $(\varepsilon, \Phi) \leftrightarrow (-\varepsilon, -\Phi)$  concerne toutes les marches quantiques. En inversant le flux, on a  $U(-\Phi) = U(\Phi)^*$ . Soit  $|\psi\rangle$  un état propre de  $U(\Phi)$ ,  $U(\Phi) = e^{-i\varepsilon(\Phi)}|\psi\rangle$ . Alors,

$$\begin{aligned} U(-\Phi)|\psi\rangle^* &= U^*(\Phi)|\psi\rangle^* = (U(\Phi)|\psi\rangle)^* \\ &= \left(e^{-i\varepsilon(\Phi)}|\psi\rangle\right)^* \\ &= e^{i\varepsilon(\Phi)}|\psi\rangle^* = e^{-i\varepsilon(-\Phi)}|\psi\rangle^* \end{aligned}$$

Si  $|\psi\rangle$  est état propre de  $U(\Phi)$  de quasi-énergie  $\varepsilon$  alors  $|\psi\rangle^*$  est état propre de  $U(-\Phi)$  de quasi-énergie  $-\varepsilon$ . En combinant avec la symétrie chirale  $\varepsilon \leftrightarrow -\varepsilon$  lorsqu'elle est présente, le papillon est symétrique entre  $\Phi \leftrightarrow -\Phi$ .

On observe une autre symétrie pour les papillons tracés en utilisant la base  $(|RU\rangle, |RD\rangle, |LU\rangle, |LD\rangle)$  ou bien ceux utilisant un spin à deux niveaux. Lorsque l'on translate le flux de  $1/2$ , leurs quasi-énergies sont translatées de  $\frac{\pi}{2}$ . Cette symétrie est dû à l'opérateur :

$$\gamma = \sum_{l,m} i^{(l-1)(l+1)} |l, m\rangle \langle l, m| \otimes \mathbb{I}_s$$

Cet opérateur correspond à multiplier par  $-i$ , les états situés sur un site de coordonnée  $l$  paire.

Par ailleurs, on a pour la base de spin  $(|RU\rangle, |RD\rangle, |LU\rangle, |LD\rangle)$

$$U\left(\phi + \frac{1}{2}\right) = (-1)^{x-1}U(\phi)$$

et pour le spin à deux niveaux

$$U\left(\phi + \frac{1}{2}\right) = (-1)^xU(\phi)$$

Soit un état  $|\psi\rangle = |\psi\rangle_p + |\psi\rangle_i$ . Les indices  $i$  et  $p$  font référence au fait que l'on a décomposé l'état sur les sous-réseaux où soit la coordonnée  $l$  est pair (indice  $p$ ) soit impair (indice  $i$ ). Lorsque l'on applique l'opérateur de marche quantique sur cet état,  $|\psi\rangle_i \rightarrow |\tilde{\psi}\rangle_p$  et  $|\psi\rangle_p \rightarrow |\tilde{\psi}\rangle_i$ . La preuve dans le cas d'une base de spin  $(|RU\rangle, |RD\rangle, |LU\rangle, |LD\rangle)$  est :

$$\begin{aligned} \gamma^\dagger U\left(\phi + \frac{1}{2}\right)\gamma|\psi\rangle &= \gamma^\dagger(-1)^{x-1}U(\phi)(-i|\psi\rangle_p + |\psi\rangle_i) \\ &= \gamma^\dagger(-1)^{x-1}(-i|\tilde{\psi}\rangle_i + |\tilde{\psi}\rangle_p) \\ &= -\gamma^\dagger(i|\tilde{\psi}\rangle_i + |\tilde{\psi}\rangle_p) \\ &= -i(|\tilde{\psi}\rangle_i + |\tilde{\psi}\rangle_p) \\ &= -iU(\phi)|\psi\rangle \end{aligned}$$

Ainsi,

$$\gamma^\dagger H_{\text{eff}}(\phi + \frac{1}{2})\gamma = -\frac{\pi}{2} + H_{\text{eff}}(\phi)$$

On peut adapter facilement cette preuve dans le cas d'une marche quantique utilisant un spin à deux niveaux.



## B – Jauge améliorée

En utilisant des conditions aux bords périodiques et en se plaçant dans la jauge de Landau pour simuler l'effet d'un champ magnétique, on a remarqué que pour que le flux des plaquettes externes (celle connectant les sites de coordonnée  $x = 0$  aux sites de coordonnée  $x = N_x - 1$ , plaquettes vertes et plaquette bleu sur la Figure B.1) soit le même que celui des plaquettes situées dans le coeur du matériau, une condition sur les flux apparaissait :  $\Phi = p/N_x$  où  $p$  est un entier et  $N_x$  le nombre de site suivant  $x$ . La résolution en flux est donc limitée et ici, on propose une méthode alternative afin d'avoir une contrainte moins forte sur les flux.

Une astuce pour améliorer la résolution en flux est de changer de jauge [104–106]. On suppose que le réseau est soumis à un champ magnétique uniforme. La seule quantité physique reliée au champ que l'on mesure est son flux (et non le potentiel vecteur) donc si l'on arrive à garder un flux par plaquette uniforme sur tout le réseau, les quantités physiques mesurées comme l'énergie seront les mêmes que ce soit dans la jauge de Landau ou dans cette nouvelle jauge. Pour cela, on décide de conserver la jauge de Landau dans le coeur du matériau, mais d'ajuster les termes de Peierls sur les liens connectant les sites d'abscisse  $N_x - 1$  et 0 et les sites d'ordonnée  $N_y - 1$  et 0 qui viennent d'être créés grâce aux conditions aux bords périodiques<sup>1</sup>. Puisque l'on utilise toujours la jauge de Landau dans le coeur du matériau, les flux sur chaque plaquette noire (voir Figure B.1) sont bien les mêmes  $2\pi\Phi$ <sup>2</sup>. On doit donc avoir la même valeur également pour les plaquettes extérieures<sup>3</sup>. Par conséquent, cela va fixer la valeur des termes de Peierls sur les arêtes externes. Notons le terme de Peierls sur l'arête liant le site  $|N_x - 1, m\rangle$  au site  $|0, m\rangle$ ,  $e^{if_m}$ ,  $\forall m \in \llbracket 0, N_y - 2 \rrbracket$ . Pour les plaquettes délimitées par  $|N_x - 1, m\rangle$ ,  $|0, m\rangle$ ,  $|0, m + 1\rangle$  and  $|N_x - 1, m + 1\rangle$ <sup>4</sup>, la condition s'écrit :

$$\begin{aligned} e^{2i\pi\Phi} = e^{if_{m+0} - if_{m+1} - 2i\pi\Phi(N_x - 1)} &\Leftrightarrow f_m - f_{m+1} - 2\pi\Phi(N_x - 1) \equiv 2\pi\Phi [2\pi] \\ &\Leftrightarrow f_m - f_{m+1} \equiv 2\pi\Phi N_x [2\pi] \end{aligned}$$

Si l'on choisit  $f_0 = 0$ , on aura alors  $f_m = -2\pi\Phi N_x m$ . Considérons maintenant les plaquettes délimités par les sites  $|l, N_y - 1\rangle$ ,  $|l + 1, N_y - 1\rangle$ ,  $|l + 1, 0\rangle$  and  $|l, 0\rangle$ ,  $\forall l \in \llbracket 0, N_x - 2 \rrbracket$ <sup>5</sup>. Notons le terme de Peierls liant le site  $|l, N_y - 1\rangle$  au site  $|l, 0\rangle$ ,  $e^{igl}$ . La condition s'écrit

$$e^{2i\pi\Phi} = e^{0 + ig_{l+1} - 0 - ig_l} \Leftrightarrow g_{l+1} - g_l \equiv 2\pi\Phi [2\pi]$$

1. Lignes en pointillés et coloriées sur la Figure B.1.

2.  $e^{\frac{2i\pi q}{h} \iint \vec{B} \cdot d\vec{S}} = e^{\frac{2i\pi q}{h} \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}} = e^{0 + 2i\pi\Phi(l+1) - 0 - 2i\pi\Phi l} = e^{2i\pi\Phi}$ .

3. Plaquettes coloriées sur la Figure B.1.

4. Plaquettes vertes sur la Figure B.1.

5. Plaquettes rouges sur la Figure B.1.

On trouve  $g_l = 2\pi\Phi l$ . C'est la même expression que les termes de Peierls exprimés dans la jauge de Landau.

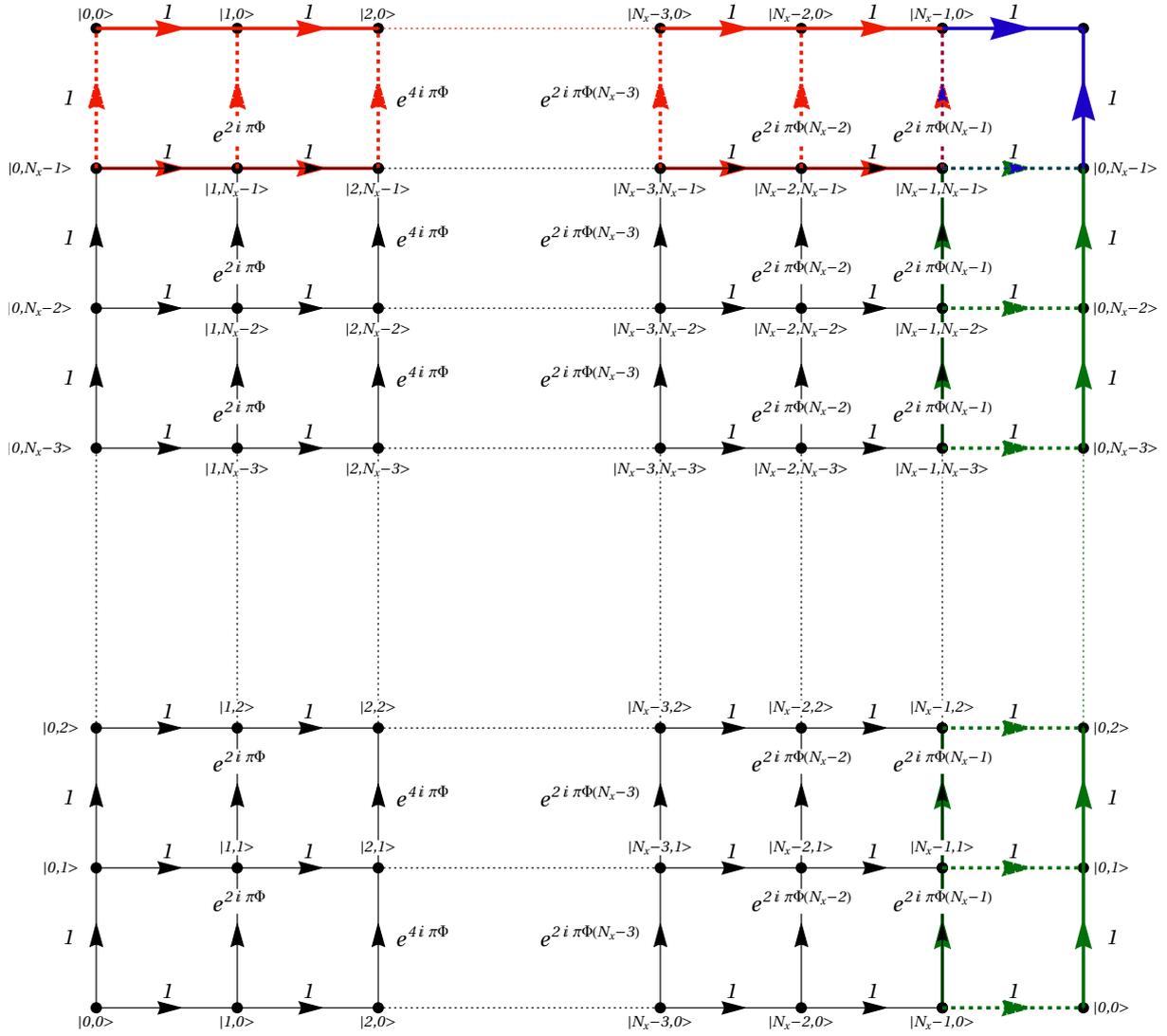


Fig. B.1 Illustration du réseau avec des conditions aux bords périodiques et la jauge utilisée pour avoir une résolution de  $N_x \cdot N_y$  flux. Les quantités sur les arêtes sont les termes de Peierls (jauge de Landau pour le coeur du matériau). Ils sont notés pour un saut allant de la gauche vers la droite pour la direction  $x$  et du bas vers le haut pour la direction  $y$ . Le flux par plaquette est alors constant et vaut :  $e^{2i\pi\Phi}$ . Les arêtes coloriées représentent les arêtes extérieures et la notation sous forme de “ket” sont les coordonnées des sites.

La dernière plaquette<sup>6</sup> à regarder est celle délimitée par les sites  $|N_x - 1, N_y - 1\rangle, |0, N_y - 1\rangle,$

6. Plaquette bleue sur la Figure B.1.

$|0, 0\rangle$  and  $|N_x - 1, 0\rangle$ . La condition s'écrit :

$$\begin{aligned}
 e^{2i\pi\Phi} = e^{i(f_{N_y-1}+g_0-f_0-g_{N_x-1})} &\Leftrightarrow f_{N_y-1} + g_0 - f_0 - g_{N_x-1} \equiv 2\pi\Phi \ [2\pi] \\
 &\Leftrightarrow -2\pi\Phi N_x(N_y - 1) + 0 - 0 - 2\pi\Phi(N_x - 1) \equiv \Phi \ [2\pi] \\
 &\Leftrightarrow \Phi N_x N_y \equiv 0 \ [1]
 \end{aligned}$$

La dernière plaquette impose donc une condition sur les flux :  $\Phi = \frac{j}{N_x N_y} = \frac{N_\Phi}{N}$ ,  $\forall j \in \llbracket 0, N_x N_y \rrbracket$ ,  $N_\Phi = \frac{BA}{\Phi_0}$  défini Section II.1.1 et  $N$  est le nombre de plaquettes,  $\mathcal{A} = Na^2$ . En fait,  $N_\Phi$  est le nombre de flux transperçant le système.

Pour tracer le papillon de Hofstadter avec cette nouvelle jauge on ne peut plus utiliser l'équation de Harper, on doit donc diagonaliser la matrice de taille  $N_x N_y \times N_x N_y$  en entier pour chaque valeur de flux autorisée. Tous les papillons de ce manuscrit sont tracés avec cette jauge améliorée afin d'avoir une meilleure résolution en flux.



# C – Equations de type Harper et papillons pour certaines marches quantiques

Dans cette Annexe on donne les équations de Harper des trois marches quantiques étudiées dans la Section II.2.3 : celle de la base naturelle. On trace également les papillons avec des bords ouverts suivant  $x$  ou avec une plaquette défectueuse. On utilise la jauge améliorée et non l'équation de type Harper pour obtenir une meilleur résolution en flux des papillons. On voit alors apparaître des états de bords : l'invariant RLBL dans chaque gap associé à ces états de bords est calculé et donné dans la section II.2.3

Dans les trois cas l'équation de type Harper peut être mise sous la forme

$$e^{-i\varepsilon} A_l = \frac{1}{2}(B_l \cdot A_{l+1} + C_l \cdot A_{l-1})$$

Elle se réécrit lorsque l'on utilise un flux rationnel  $\Phi = p/q$  avec  $p$  et  $q$  premiers entre eux :

$$e^{-i\varepsilon} \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ A_{q-2} \\ A_{q-1} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0_{4 \times 4} & B_0 & 0_{4 \times 4} & 0_{4 \times 4} & \cdots & 0_{4 \times 4} & C_0 \\ C_1 & 0_{4 \times 4} & B_1 & 0_{4 \times 4} & \cdots & 0_{4 \times 4} & 0_{4 \times 4} \\ 0_{4 \times 4} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0_{4 \times 4} \\ 0_{4 \times 4} & 0_{4 \times 4} & \cdots & 0_{4 \times 4} & C_{q-2} & 0_{4 \times 4} & B_{q-2} \\ B_{q-1} & 0_{4 \times 4} & \cdots & 0_{4 \times 4} & 0_{4 \times 4} & C_{q-1} & 0_{4 \times 4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ A_{q-2} \\ A_{q-1} \end{pmatrix}$$

Cependant, les vecteurs de Blochs  $A_l$  et les matrices  $B_l$  et  $C_l$  n'auront pas les mêmes termes pour les différentes marches.

## C.1 Marche quantique utilisant le dé $D'(\pi/4)$ et la prescription retraçante

On commence par celle imitant la base naturelle donc utilisant la prescription retraçante (voir Figure II.21-c) i.e. celle utilisant le dé  $D'(\theta)$  avec la base  $(|RU\rangle, |DR\rangle, |LU\rangle, |DL\rangle)$ . Les coefficients matriciels s'écrivent :

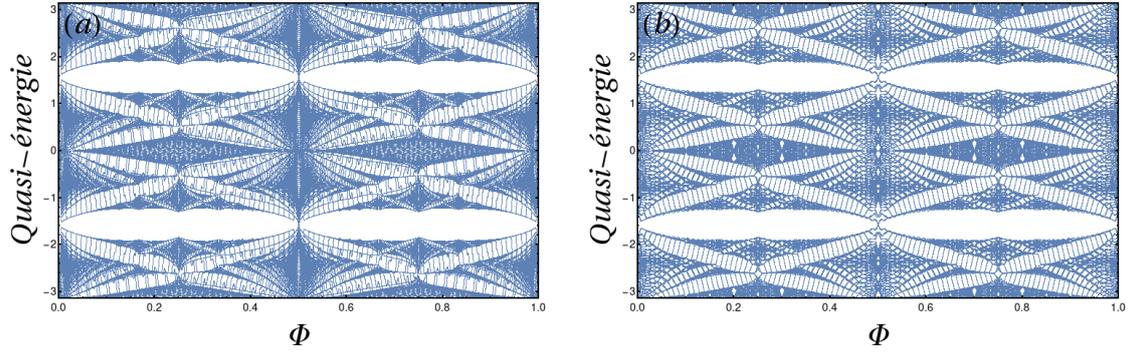


Fig. C.1 Papillon pour la marche quantique utilisant le dé  $D'(\pi/4)$  et une prescription retraçante avec un système présentant des défauts. On trace pour chaque système 10000 flux différents. (a) : Le défaut est la présence d'un bord ouvert le long de la direction  $x$  dont la prescription est illustrée Figure II.20 (on met des conditions aux bords périodiques suivant la direction  $y$ ). La taille du système dans la direction  $x$  est  $N_x = 50$  et on trace dans la direction  $y$  que les quasi-moments  $k_y$  nuls. (b) : Le défaut est une plaquette défailante lorsque l'on trace des flux interdits pour un système avec des conditions aux bords périodiques. La taille du système est  $N_x = 10$  et  $N_y = 10$ .

$$A_l = \begin{pmatrix} a_l^{RU} \\ a_l^{DR} \\ a_l^{LU} \\ a_l^{DL} \end{pmatrix}, \text{ les fonctions de Blochs, } B_l = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_l^{LU} & -b_l^{LU} & -b_l^{LU} & b_l^{LU} \\ b_l^{DL} & b_l^{DL} & -b_l^{DL} & -b_l^{DL} \end{pmatrix}$$

$$\text{et } C_l = \begin{pmatrix} b_l^{RU} & b_l^{RU} & b_l^{RU} & b_l^{RU} \\ b_l^{DR} & -b_l^{DR} & b_l^{DR} & -b_l^{DR} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ où } b_l^{RU} = e^{i(-k_x - k_y) + if_{l-1}}, b_l^{DR} = e^{i(-k_x + k_y) - if_l},$$

$$b_l^{LU} = e^{i(k_x - k_y) + if_{l+1}}, b_l^{DL} = e^{i(k_x + k_y) - if_l} \text{ et } f_l = 2\pi\Phi l$$

Les papillons pour des systèmes sans défaut sont tracés dans la section II.2.3. Ici, on trace les papillons avec soit des bords au système suivant  $x$  en utilisant la prescription des conditions aux bords ouverts illustrée Figure II.20-a. Le papillon est tracé Figure C.1-a. Soit on insère une plaquette défectueuse dans le système en conditions aux bords périodiques en autorisant des flux interdits à être tracé (voir Figure C.1-b).

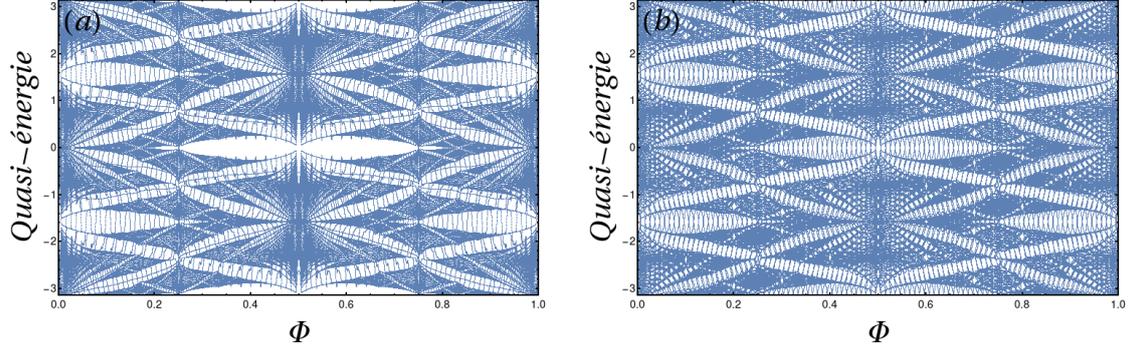


Fig. C.2 Papillon pour la marche quantique utilisant le dé  $D'(\pi/4)$  et la base tensorialisée. On trace pour chaque système 10000 flux différents. (a) : On met des bords suivant la direction  $x$ , la largeur du système est  $N_x = 50$  et on conserve des conditions aux bords périodiques suivant  $y$  (seul  $k_y = 0$  est tracé). (b) : On trace des flux interdits pour un système avec des conditions aux bords périodiques. La taille du système est  $N_x = 10$  et  $N_y = 10$ .

## C.2 Marche quantique utilisant le dé $D'(\pi/4)$ et la base tensorialisée

Pour la marche utilisant le dé  $D'(\pi/4)$  mais la prescription de la base tensorialisée ( $|RU\rangle, |RD\rangle, |LU\rangle, |LD\rangle$ ) les coefficients s'écrivent :

$$A_l = \begin{pmatrix} a_l^{RU} \\ a_l^{RD} \\ a_l^{LU} \\ a_l^{LD} \end{pmatrix}, \quad B_l = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_l^{LU} & -b_l^{LU} & -b_l^{LU} & b_l^{LU} \\ b_l^{LD} & b_l^{LD} & -b_l^{LD} & -b_l^{LD} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad C_l = \begin{pmatrix} b_l^{RU} & b_l^{RU} & b_l^{RU} & b_l^{RU} \\ b_l^{RD} & -b_l^{RD} & b_l^{RD} & -b_l^{RD} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

où  $b_l^{RU} = e^{-i(k_x+k_y)+if_{l-1}}$ ,  $b_l^{RD} = e^{i(-k_x+k_y)-if_{l-1}}$ ,  $b_l^{LU} = e^{i(k_x-k_y)+if_{l+1}}$ ,  $b_l^{LD} = e^{i(k_x+k_y)-if_{l+1}}$

On trace également les papillons correspondant à cette marche quantique avec des bords suivant  $x$  Figure C.2-a et celui avec une plaquette défectueuse Figure C.2-b.

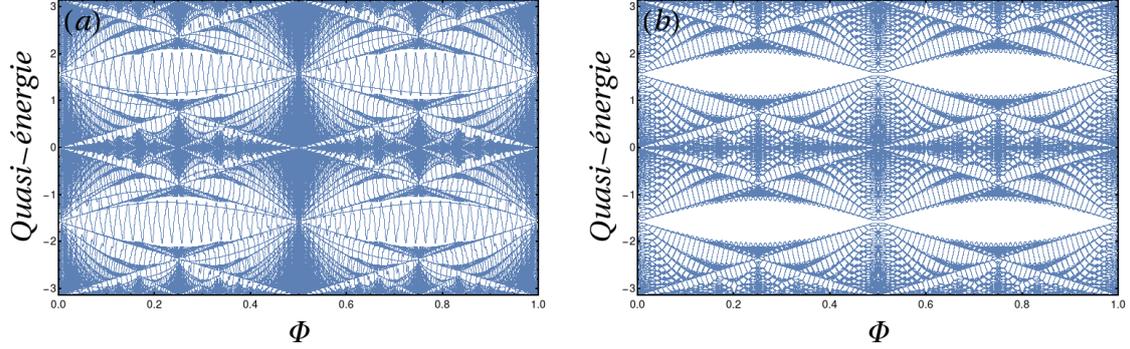


Fig. C.3 Papillon pour la marche quantique utilisant le dé  $D(\pi/4)$  et la prescription retraçante. La taille des systèmes et le nombre de flux sont identiques aux deux figures précédentes (a) : Papillon avec des bords suivant  $x$  (b) : Papillon avec une plaquette défectueuse.

### C.3 Marche quantique utilisant le dé $D(\pi/4)$ et la prescription retraçante

Enfin les coefficients de la dernière marche, celle utilisant le dé  $D(\pi/4)$  i.e. le dé de Hadamard de dimension 4 avec la base des chemins retraçants sont :

$$A_l = \begin{pmatrix} a_l^{RU} \\ a_l^{DR} \\ a_l^{DL} \\ a_l^{LU} \end{pmatrix}, \quad B_l = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_l^{DL} & -b_l^{DL} & b_l^{DL} & -b_l^{DL} \\ b_l^{LU} & b_l^{LU} & -b_l^{LU} & -b_l^{LU} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad C_l = \begin{pmatrix} b_l^{RU} & b_l^{RU} & b_l^{RU} & b_l^{RU} \\ b_l^{DR} & -b_l^{DR} & -b_l^{DR} & b_l^{DR} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

avec  $b_l^{RU} = e^{i(-k_x - k_y) + if_{l-1}}$ ,  $b_l^{DR} = e^{i(-k_x + k_y) - if_l}$ ,  $b_l^{LU} = e^{i(k_x - k_y) + if_{l+1}}$ ,  $b_l^{DL} = e^{i(k_x + k_y) - if_l}$

On trace également les papillons correspondant à cette marche quantique avec des bords suivant  $x$  Figure C.3-a et celui avec une plaquette défectueuse Figure C.3-b.

Que ce soit sur les Figures C.2 ou la Figure C.3 la présence d'états de bords dans les gaps n'est pas forcément la signature d'un invariant RLBL non nul. Si un descend et un autre monte en fonction flux, l'invariant RLBL sera trivial. D'ailleurs, si l'on ajoutait des défauts aux systèmes, l'endroit où ces deux niveaux se croise subirait une levée de dégénérescence et on verrait les états devenir topologiquement trivial i.e. ils ne relieraient plus une bande à une autre.

## D – Origine des cages pour la marche quantique sur le pavage $\mathcal{T}_3$

On commence avec un état initial sur le site  $a$  dans la cellule d'indice  $(n, m)$  avec un spin interne localisé sur l'état  $i$  où  $i$  est un entier allant de 1 à 6. L'état initial s'écrit donc  $|i, a, n, m\rangle$ . On oublie dans la suite la lettre  $a$ , tous les états écrits sous forme de ket se trouve sur un site  $a$ . Après application du dé de Grover on obtient l'état

$$\frac{1}{3}(\sum_{k \neq i} |k, n, m\rangle - 2|i, n, m\rangle) = \frac{1}{3} \sum_k |k, n, m\rangle - |i, n, m\rangle \quad (\text{D.1})$$

En utilisant la méthode de Arnoldi (par bloc i.e. on analyse tous les états internes  $i = 1, 2, \dots, 6$  du site initial en même temps), on peut démontrer l'existence des cages. D'abord, on considère le premier terme de l'équation (D.1). Après deux pas de temps, la fonction d'onde se sépare en deux parties, la première partie revient sur le site initial et est donc proportionnelle aux six états initiaux. L'itération d'Arnoldi la supprime par orthogonalisation des états. La deuxième partie atteint les sites  $a$  voisins du site  $a$  initial (voir états coloriés en rouge sur la Figure D.1-a). Chacun de ces six sites atteint est peuplé par deux états internes successifs avec un signe -1 entre les deux amplitudes de probabilité (voir Figure D.1-a). Ils correspondent aux deux chemins possibles pour atteindre ce site (soit par le site  $b$  soit par le site  $c$  et le signe -1 provient du flux  $\Phi = 1/2$  encerclé).

Les états sur ces sites sont des vecteurs propres de  $G_6$ . Par conséquent, le dé agit comme un "mur" et renvoie les états à l'intérieur de l'étoile. Deux pas de temps plus tard, ces états peuvent avoir pris trois chemins possibles (les sites rims ont trois voisins). Soit ils sont revenus sur le site initial ou sur le site de bord sur lequel ils étaient et donc la procédure d'Arnoldi les supprime. La troisième possibilité est d'aller sur le site  $a$  situé sur la branche voisine de l'étoile. Au temps  $t = 4$ , sur chaque site  $a$  situé aux extrémités de chaque branche de l'étoile, il y a deux états provenant des sites  $a$  situés sur les branches voisines qui viennent le peupler. Le signe relatif entre ces deux états est -1 puisque ils entourent à eux deux trois plaquettes. L'état est donc proportionnel à celui obtenu au temps  $t = 2$ , l'algorithme de Arnoldi termine pour le 1er terme de l'équation.

Le second terme de l'équation (D.1) pour un état interne  $i$  spécifique est envoyé après deux pas de temps sur 3 sites  $a$  (voir états en rouge de la Figure D.1-b) dont un est le site initial (que l'on peut donc oublier). On peut reproduire la même analyse pour les 2 autres sites atteints. Le premier terme de leur équation formera une cage en étoile autour de ces nouveaux sites. Le second terme, après deux pas de temps, donnera exactement les 3 même sites  $a$  (états en rouge de la Figure D.1-b). L'itération d'Arnoldi terminera donc et donne

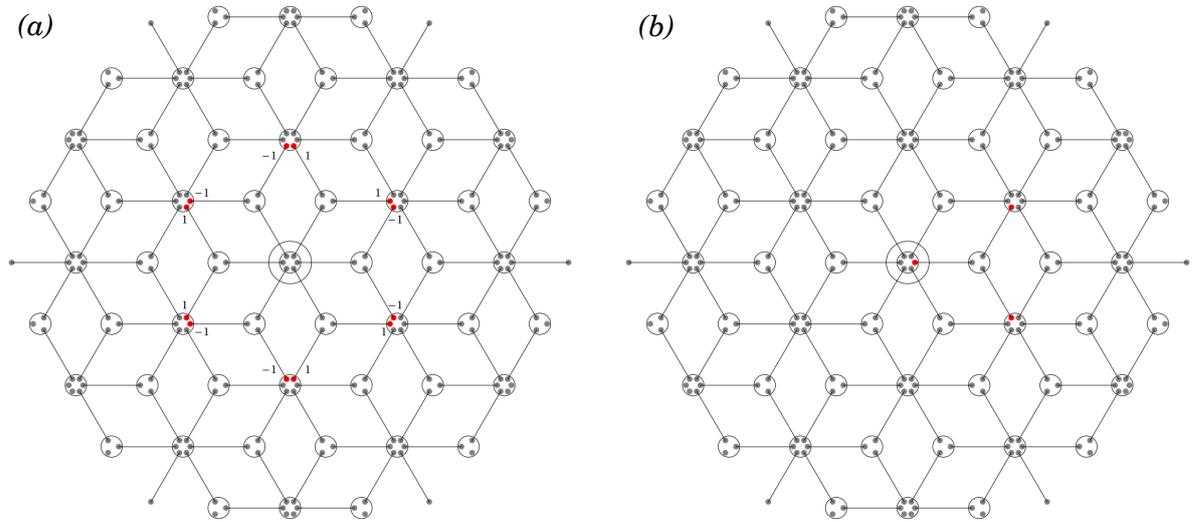


Fig. D.1 (a) : Représentation graphique du premier terme de l'équation (D.1) après deux pas de temps et procédure d'Arnoldi (orthogonalisation de l'état avec les états déjà visités). Les états en rouge sont les états avec une amplitude de probabilité non nulle proportionnelle dont le signe relatif pour deux états sur le même site est  $-1$ . (b) : Représentation graphique du second terme de l'équation (D.1) après deux pas de temps pour une configuration interne initial  $i = 1$ . Les trois états en rouge ont une amplitude de probabilité non nulle. Le site encerclé est l'état initial.

une cage de rayon maximal deux cellules unités autour du site de départ (voir sites coloriés III.12).

## E – Calcul de la variance pour un désordre dynamique sur les sites rims.

Dans cette Annexe, on retrouve les résultats numériques du désordre dynamique sur les sites rims pour un désordre maximal  $\Delta\theta = 2\pi$  (voir section IV.1.2-b)) en utilisant le formalisme de la matrice densité [144]. Pour arriver au résultat numérique de la Figure IV.7-b on fera deux hypothèses que l'on vérifiera numériquement le reste du calcul est exact analytiquement.

L'évolution de la matrice densité est donnée par  $\rho(t+1) = U(t).\rho(t).U^\dagger(t)$ . Calculons d'abord l'opérateur de marche quantique. On suppose que le marcheur quantique est initialement localisé sur un site hub dans une certaine configuration interne. Afin de n'avoir qu'un état à 4 niveaux par cellule (au lieu de 8), on s'intéresse à l'évolution de l'opérateur de marche quantique aux temps pairs quand le marcheur est sur les sites hubs. On calcule l'opérateur de marche quantique agrégé sur deux pas de temps  $\hat{W}(t) = \hat{U}(2t+1).\hat{U}(2t)$ . Le calcul est fait dans le cas d'un dé de Grover  $G_4$  au flux  $\Phi = 1/2$ , le système sans désordre est donc cageant.

$$\hat{W}(t) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} 0 & c_+ & -c_- & 0 \\ c_+ & 0 & 0 & -c_- \\ 0 & c_- & -c_+ & 0 \\ c_- & 0 & 0 & -c_+ \end{pmatrix} \otimes |i, a\rangle \langle i, a| + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -s_- & s_+ & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -s_+ & s_- & 0 \end{pmatrix} \otimes |i+1, a\rangle \langle i, a| \\ + \begin{pmatrix} s_- & 0 & 0 & -s_+ \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_+ & 0 & 0 & -s_- \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes |i-1, a\rangle \langle i, a|$$

où  $|i, a\rangle$  désigne le site hub  $a$  ayant la cellule d'indice  $i$ , les matrices représentent l'espace interne des spins écrit dans la base  $\{|R^+\rangle, |L^+\rangle, |R^-\rangle, |L^-\rangle\}$  et  $c_+, c_-, s_+$  et  $s_-$  sont des notations raccourcis pour  $c_+ = \frac{\cos\theta_b + \cos\theta_c}{2}$ ,  $c_- = \frac{\cos\theta_b - \cos\theta_c}{2}$ ,  $s_+ = \frac{\sin\theta_b + \sin\theta_c}{2}$  et  $s_- = \frac{\sin\theta_b - \sin\theta_c}{2}$  où  $\theta_b$  et  $\theta_c$  sont choisis indépendamment à chaque pas de temps dans la boîte  $[\theta_0 - \Delta\theta/2, \theta_0 + \Delta\theta/2]$ . De l'évolution de la fonction d'onde on déduit l'évolution de la matrice densité qui est  $\rho_W(t+1) = W(t).\rho_W(t).W^\dagger(t)$ .

Le problème est invariant par translation (d'espace). On peut utiliser la fonction génératrice (équivalent à une transformée de Fourier discrète) :

$$P^{\alpha\beta}(t, w, z) = \sum_{i,j} \rho_{i,j}^{\alpha\beta}(t) w^{\frac{i+j}{2}} z^{i-j}$$

où  $\alpha, \beta = R^+, R^-, L^+, L^-$  et  $\rho_{i,j}^{\alpha\beta}(t) = \langle i, a | \rho_W^{\alpha\beta}(t) | j, a \rangle$ . Grâce à l'hermiticité de la matrice densité  $(\rho_{i,j}^{\alpha\beta})^\dagger(t) = (\rho_{j,i}^{\beta\alpha})^*(t) = \rho_{i,j}^{\alpha\beta}(t)$ , les fonctions génératrices correspondantes vérifient la relation  $P^{\alpha\beta}(t, w, z) = (P^{\beta\alpha}(t, w, 1/z))^*$ . En particulier pour les termes diagonaux, il n'y a pas de dépendance en  $z$ . On a donc 16 équations (mais seulement 10 indépendantes grâce à cette dernière relation) de la forme :

$$P^{\alpha\beta}(t+1, w, z) = \sum_{\alpha', \beta'} f_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'}(t, w, z) P^{\alpha'\beta'}(t, w, z) \quad (\text{E.1})$$

où  $f_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'}(t, w, z) = \frac{a}{w} + \frac{b}{z^2} + \frac{c}{\sqrt{wz}} + d \frac{z}{\sqrt{w}} + e + f \frac{\sqrt{w}}{z} + g \frac{z}{\sqrt{w}} + h z^2 + i w$  où  $a, b, c, d, e, f, g, h, i$  dépendent des indices  $\alpha', \beta', \alpha, \beta$  et des variables aléatoires  $\theta_b(2t+1)$  et  $\theta_c(2t+1)$ . La variance de la marche quantique s'exprime avec les fonctions génératrices :

$$\begin{aligned} \sigma^2(t) &\equiv \sum_i \sum_\alpha i^2 |\langle i, a, \alpha | \psi(t) \rangle|^2 - \left( \sum_i \sum_\alpha i |\langle i, a, \alpha | \psi(t) \rangle|^2 \right)^2 \\ &= \partial_w^2 \text{Tr}(P^{\alpha\beta}(t, 1, 0)) + \partial_w \text{Tr}(P^{\alpha\beta}(t, 1, 0)) - \left( \partial_w \text{Tr}(P^{\alpha\beta}(t, 1, 0)) \right)^2 \end{aligned}$$

où  $\alpha = R^+, L^+, R^-, L^-$  et la trace est prise sur l'espace des degrés de libertés internes.

À partir d'ici, on va faire deux hypothèses que l'on vérifiera numériquement mais dont la preuve formelle n'est pas donnée. Dans la section IV.1.2, on s'intéresse à l'écart-type moyenné sur le désordre i.e. on prend d'abord la racine de la variance puis on moyenne ensuite. On verra par la suite que  $P^{\alpha\beta}(t, 1, 0)$  est facilement calculable une fois que la moyenne sur le désordre est prise. Cependant, pour le calcul de l'écart-type la fonction racine n'étant pas linéaire, il n'est a priori pas possible d'invertir la moyenne avec cette fonction. On s'intéressera donc par la suite à calculer la variance moyennée sur le désordre et non plus l'écart-type. Par ailleurs, on vérifie numériquement, que  $\sqrt{\sigma^2} \simeq \bar{\sigma}$  à  $10^{-2}$  près.

On moyenne maintenant la variance sur le désordre :

$$\overline{\sigma^2(t)} = \overline{\partial_w^2 \text{Tr}(P^{\alpha\beta}(t, 1, 0))} + \overline{\partial_w \text{Tr}(P^{\alpha\beta}(t, 1, 0))} - \overline{(\partial_w \text{Tr}(P^{\alpha\beta}(t, 1, 0)))^2} \quad (\text{E.2})$$

$$= \partial_w^2 \text{Tr}(\overline{P^{\alpha\beta}}(t, 1, 0)) + \partial_w \text{Tr}(\overline{P^{\alpha\beta}}(t, 1, 0)) - \overline{(\partial_w \text{Tr}(P^{\alpha\beta}(t, 1, 0)))^2} \quad (\text{E.3})$$

Pour les deux premiers termes de l'équation (E.2) on peut échanger la moyenne sur le désordre et les dérivées suivant  $w$  ainsi que la trace car ce sont des opérateurs linéaires, ce qui donne l'équation (E.3). Pour le dernier terme cela n'est a priori pas possible à cause du carré. Les deux premiers termes correspondent au moment d'ordre 2 de la distribution de la fonction d'onde :

$$\mu_2(t) \equiv \sum_i \sum_\alpha i^2 |\langle i, a, \alpha | \psi(t) \rangle|^2 = \partial_w^2 \text{Tr}(P^{\alpha\beta}(t, 1, 0)) + \partial_w \text{Tr}(P^{\alpha\beta}(t, 1, 0))$$

$$\overline{\mu_2(t)} = \partial_w^2 \text{Tr}(\overline{P^{\alpha\beta}}(t, 1, 0)) + \partial_w \text{Tr}(\overline{P^{\alpha\beta}}(t, 1, 0))$$

Le dernier terme correspond à la position moyenne de la fonction d'onde au carré moyennée sur le désordre que l'on notera :

$$\overline{\mu_1^2(t)} = \overline{(\partial_w \text{Tr}(P^{\alpha\beta}(t, 1, 0)))^2}$$

On a donc :

$$\overline{\sigma^2(t)} = \overline{\mu_2(t)} - \overline{\mu_1^2(t)} \quad (\text{E.4})$$

La seconde hypothèse consiste alors à intervertir le carré de la position moyenne du marcheur et la moyenne sur le désordre :

$$\overline{\sigma^2(t)} \simeq \overline{\mu_2(t)} - \overline{\mu_1(t)}^2 = \partial_w^2 \text{Tr}(\overline{P^{\alpha\beta}}(t, 1, 0)) + \partial_w \text{Tr}(\overline{P^{\alpha\beta}}(t, 1, 0)) - \left( \partial_w \text{Tr}(\overline{P^{\alpha\beta}}(t, 1, 0)) \right)^2 \quad (\text{E.5})$$

On vérifie numériquement que la différence entre les équations (E.4) et (E.5) est de  $10^{-11}$ .

On cherche donc maintenant à calculer  $\overline{P^{\alpha\beta}}(t, w, z)$ . En utilisant l'équation (E.1), la fonction  $f_{\alpha,\beta,\alpha',\beta'}(t, w, z)$  dépendant seulement des variables aléatoires  $\theta_b$  et  $\theta_c$  au temps  $2t + 1$ ,  $P^{\alpha\beta}(t, w, z)$  dépend alors seulement de ces variables mais aux temps  $2t' + 1$  avec  $t' < t$ . Les deux quantités sont donc indépendantes et les fonctions  $\overline{f_{\alpha,\beta,\alpha',\beta'}}(w, z)$  une fois moyennées sur le désordre sont indépendantes du temps. L'équation temporelle moyennée sur le désordre devient alors :

$$\overline{P^{\alpha\beta}}(t + 1, w, z) = \sum_{\alpha',\beta'} \overline{f_{\alpha,\beta,\alpha',\beta'}}(w, z) \overline{P^{\alpha'\beta'}}(t, w, z).$$

Le problème est maintenant invariant par translation dans le temps, on peut donc utiliser la fonction génératrice sur la variable temporelle (équivalent à une transformée de Laplace discrète) :

$$Q^{\alpha\beta}(s, w, z) = \sum_{t=0}^{\infty} \overline{P^{\alpha\beta}}(t, w, z) s^t$$

et l'équation sur  $Q$  peut être écrite :

$$Q^{\alpha\beta}(s, w, z) = P^{\alpha\beta}(0, w, z) + s \sum_{\alpha',\beta'} \overline{f_{\alpha,\beta,\alpha',\beta'}}(w, z) Q^{\alpha'\beta'}(s, w, z)$$

On doit donc résoudre un problème d'algèbre linéaire. Par simplicité, on prendra dans la suite un désordre maximal  $\Delta\theta = 2\pi$ . Dans ce cas particulier, on remarque que les inconnues  $Q^{R^+R^+}(s, w, z)$ ,  $Q^{L^+L^+}(s, w, z)$ ,  $Q^{R^-R^-}(s, w, z)$  et  $Q^{L^-L^-}(s, w, z)$  forment un sous-groupe d'équations ne dépendant pas des autres inconnues. Afin de simplifier les notations, on désigne maintenant  $Q^{R^+} = Q^{R^+R^+}(s, w, z)$ ,  $Q^{L^+} = Q^{L^+L^+}(s, w, z)$ ,  $Q^{R^-} = Q^{R^-R^-}(s, w, z)$  et  $Q^{L^-} = Q^{L^-L^-}(s, w, z)$ .

$$\begin{cases} Q^{R^+} = |a_0|^2 + \frac{s}{4w} [Q^{R^+} + Q^{L^-} + (Q^{L^+} + Q^{R^-})w] \\ Q^{L^+} = |b_0|^2 + \frac{s}{4} [Q^{R^+} + Q^{L^-} + (Q^{L^+} + Q^{R^-})w] \\ Q^{R^-} = |c_0|^2 + \frac{s}{4w} [Q^{R^+} + Q^{L^-} + (Q^{L^+} + Q^{R^-})w] \\ Q^{L^-} = |d_0|^2 + \frac{s}{4} [Q^{R^+} + Q^{L^-} + (Q^{L^+} + Q^{R^-})w] \end{cases}$$

où  $(a_0, b_0, c_0, d_0)$  est la configuration initial de spin dans la base  $(|R^+\rangle, |L^+\rangle, |R^-\rangle, |L^-\rangle)$  situé sur le site  $a$  ayant pour indice de cellule  $i = 0$ . L'état initial est normalisé  $|a_0|^2 + |b_0|^2 + |c_0|^2 + |d_0|^2 = 1$ . En sommant sur les solutions des 4 inconnues on trouve  $\text{Tr}(\overline{Q^{\alpha\beta}}(s, w, z))$ . On déduit alors que :

$$\begin{aligned}
 \sum_t \overline{\mu_1(t)} s^t &= \partial_w \text{Tr}(Q^{\alpha\beta}(s, 1, 0)) & ; & \quad \sum_t \overline{\mu_2(t)} s^t = \partial_w^2 \text{Tr}(Q^{\alpha\beta}(s, 1, 0)) + \partial_w \text{Tr}(Q^{\alpha\beta}(s, 1, 0)) \\
 &= \frac{s(|a_0|^2 - |b_0|^2 - |c_0|^2 + |d_0|^2)}{2(1-s)} & ; & \quad = \frac{s}{2(1-s)^2} \\
 &= \frac{s(|a_0|^2 - |b_0|^2 - |c_0|^2 + |d_0|^2)}{2} \sum_{p=0}^{\infty} s^p & ; & \quad = \frac{s}{2} \sum_{m,n=0}^{\infty} s^{n+m} \\
 &= \frac{|a_0|^2 - |b_0|^2 - |c_0|^2 + |d_0|^2}{2} \sum_{p=1}^{\infty} s^p & ; & \quad = \frac{s}{2} \sum_p (p+1) s^p \\
 & & & \quad = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{p}{2} s^p
 \end{aligned}$$

où dans l'avant dernière ligne de droite  $p = n + m$ . Ici, l'équation (E.1) est calculée pour l'opérateur de marche quantique agrégé sur deux pas de temps  $\hat{W}(t)$ . On doit donc divisé par deux le temps pour se remettre dans l'unité de temps originale et on trouve :

$$\sum_t \overline{\mu_2(t)} s^t = \sum_{t=1}^{\infty} \frac{t}{4} s^t$$

On a alors pour  $t > 1$  :

$$\overline{\sigma^2(t)} \simeq \frac{t - (|a_0|^2 - |b_0|^2 - |c_0|^2 + |d_0|^2)^2}{4}$$

Il est clair à partir de ce calcul que la variance est linéaire en temps. Le calcul a été possible grâce à l'invariance par translation (d'espace) du problème et l'indépendance des variables aléatoires à des temps différents. Dans la limite des grands temps, on retrouve enfin le résultat du fit numérique de la Figure IV.7-b :

$$\overline{\sigma(t)} \simeq \sqrt{\overline{\sigma^2(t)}} \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sqrt{t}}{2}$$

## F – Stabilités des sous-espaces pour deux marcheurs en interaction

Dans cette annexe, on donne une explication de la stabilité des sous-espaces  $\{|n, \varepsilon, n+2, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$ ,  $\{|n, \varepsilon, n+1, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$   $\oplus$   $\{|n+1, \varepsilon, n, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  et  $\{|n, \varepsilon, n, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon', n}$  sous interaction. Afin de clarifier le propos, on redonne Figure F.1 les états propres à un corps de la marche quantique sur la chaîne de boucles.

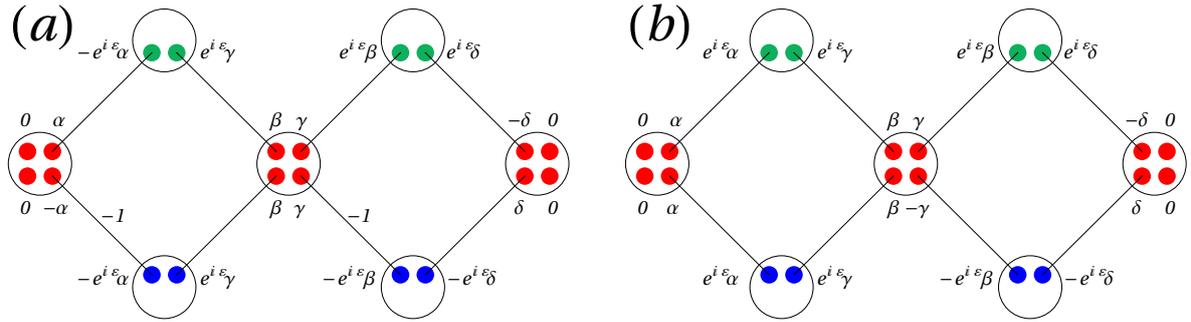


Fig. F.1 Vecteurs propres d'extension minimale de la marche quantique sur chaîne de boucles (a) : au flux critique  $\Phi_c = 1/2$  pour le dé de Grover (b) : au flux critique  $\Phi_c = 0$  pour le dé de Hadamard. La jauge choisie porte une phase de Peierls sur l'arête connectant le site  $a$  au site  $c$  de droite.  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  et  $\delta$  sont des coefficients intervenant dans les différentes amplitudes de probabilité des vecteurs propres et dépendants de la quasi-énergie  $\varepsilon$  correspondante. Ils sont résumés dans le Tableau III.2.

Pour les états  $|n, \varepsilon_1, n+2, \varepsilon_2\rangle$ , les marcheurs quantiques ne se chevauchent que sur les sites  $(a, a)$  de la cellule d'indice  $(n+1, n+1)$  correspondant à un site hub sur le bord de l'état propre à un corps pour chaque marcheur quantique. Il s'agit du site hub de droite pour le vecteur propre du premier marcheur quantique  $|n, \varepsilon_1\rangle$  (avec une probabilité d'amplitude proportionnelle à  $\delta$  sur la Figure F.1) et du site hub de gauche pour le vecteur propre du second marcheur quantique  $|n+2, \varepsilon_2\rangle$  (avec une probabilité d'amplitude proportionnelle à  $\alpha$  sur la Figure F.1). Les états de ce site sont des vecteurs propres du dé sur le site hub). Ensuite, l'interaction multiplie ce site par une phase globale. Par conséquent, ces états sur le site  $(a, a, n+1, n+1)$  sont toujours des vecteurs propres et leur évolution ne s'échappera pas de leur ancienne cage. Cependant, l'état tout entier  $|n, \varepsilon_1, n+2, \varepsilon_2\rangle$  n'est plus un état propre à cause de la phase d'interaction globale prise sur le site hub  $(n+1, n+1)$ . Après un pas de temps, il devient une combinaison linéaire de la famille  $\{|n, \varepsilon, n+2, \varepsilon'\rangle\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$ . Le même

raisonnement fonctionne pour  $|n, \varepsilon_1, n - 2, \varepsilon_2\rangle$ .

Pour les états  $|n, \varepsilon_1, n, \varepsilon_2\rangle$  associés à  $|\psi_0\rangle$ , les marcheurs quantiques se chevauchent sur 7 sites. 3 sites  $(a, a)$  de cellules d'indice  $(n - 1, n - 1)$ ,  $(n, n)$  et  $(n + 1, n + 1)$  et 2 sites  $(b, b)$  et 2 sites  $(c, c)$  de cellules d'indice  $(n - 1, n - 1)$  et  $(n, n)$ . L'interaction multiplie ces sites par un  $e^{i\phi}$  global. En revanche, les sites  $(b, c)$  et  $(c, b)$  ne sont pas affectés par cette phase. Cette asymétrie des sites rim-rim (c'est-à-dire entre les sites  $(b, b)$ ,  $(c, c)$  d'une part et les sites  $(b, c)$  et  $(c, b)$  d'autre part) conduit à la destruction des cages. En effet, par exemple les sites rim-rim de la cellule  $(n, n)$ , conduisent au vecteur  $|L^-, L^-\rangle$  sur le site  $(a, a, n + 1, n + 1)$  après une application de l'opérateur de marche quantique sans interaction. Ce vecteur est un vecteur propre du dé sur les sites  $(a, a)$ . Par conséquent, il est renvoyé à l'intérieur de la cage. Lorsque l'on allume l'interaction, une partie de la fonction d'onde sur les sites  $(a, a, n + 1, n + 1)$  provenant de ces sites rim-rim sera proportionnelle aux vecteurs  $|L^+, L^+\rangle$ . Cet état n'est pas un vecteur propre du dé sur le site hub. Au prochain pas de temps, il peuplera l'état  $|n + 1, \varepsilon'_1, n + 1, \varepsilon'_2\rangle$ , entraînant la fuite des marcheurs quantiques hors de son ancienne cage. Pour les états  $|n, \varepsilon_1, n + 1, \varepsilon_2\rangle$ , les marcheurs quantiques se chevauchent sur 2 sites  $(a, a)$  des cellules d'indice  $(n, n)$  et  $(n + 1, n + 1)$  et sur les sites  $(b, b)$  et  $(c, c)$  de la cellule d'indice  $(n, n)$ . A priori, à cause de cette asymétrie sur les sites rim-rim, les cages ne devraient plus tenir. Cependant, il apparaît que dans ce cas, la partie fuyante est exclusivement proportionnelle à l'état sur les sites  $(a, a)$  des fonctions d'onde  $\{|n, \varepsilon, n - 1, \varepsilon'\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$ . Dans l'autre sens, la partie interagissante de  $|n, \varepsilon_1, n - 1, \varepsilon_2\rangle$  se retrouve proportionnelle aux vecteurs de la famille  $\{|n, \varepsilon, n + 1, \varepsilon'\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$ . Par conséquent, le sous-espace  $\{|n, \varepsilon, n + 1, \varepsilon'\}_{\varepsilon, \varepsilon'} \oplus \{|n + 1, \varepsilon, n, \varepsilon'\}_{\varepsilon, \varepsilon'}$  reste stable pour tout  $n$  donné. On obtient alors de nouveaux états cages dans un sous-espace plus grand.

## G – Référentiel du centre de masse sur réseau carré

Dans le chapitre V, on utilise la correspondance entre le problème à deux particules sur une chaîne et la dynamique d'une seule particule sur un réseau carré. Dans cette Annexe, nous décrivons le changement de base du référentiel canonique  $(\vec{e}_x, \vec{e}_y)$  au référentiel du centre de masse  $(\vec{e}_+, \vec{e}_-)$ , qui s'écrit :

$$\begin{cases} \vec{e}_+ = \vec{e}_x + \vec{e}_y, & \|\vec{e}_+\| = \sqrt{2} \\ \vec{e}_- = \frac{\vec{e}_x - \vec{e}_y}{2}, & \|\vec{e}_-\| = 1/\sqrt{2}. \end{cases}$$

Dans cette base orthogonale, mais non normée, du centre de masse, les coordonnées du site  $(x, y) \in \mathbb{Z}^2$  sont remplacées par le centre de masse  $x_+ = \frac{x+y}{2}$  et la coordonnée relative  $x_- = x - y$ . Les vecteurs  $(\vec{e}_+, \vec{e}_-)$  génèrent un réseau rectangulaire qui ne partage que la moitié des sites du réseau carré initial. Cela conduit à des coordonnées entières et demi-entières pour les sites du réseau carré :  $x_+$  prend des valeurs entières lorsque  $x_-$  est pair et des valeurs demi-entières lorsque  $x_-$  est impair.

Dans l'espace réciproque, le référentiel réciproque canonique  $\vec{e}_x^* = 2\pi\vec{e}_x$  et  $\vec{e}_y^* = 2\pi\vec{e}_y$ , permet d'écrire les vecteurs d'onde  $\vec{k} = k_x^*\vec{e}_x^* + k_y^*\vec{e}_y^* = k_x\vec{e}_x + k_y\vec{e}_y$ , et la première zone de Brillouin associée est définie par  $(k_x^*, k_y^*)$  tous deux dans l'intervalle  $[-1/2, 1/2[$  ou de manière équivalente,  $(k_x, k_y) = 2\pi(k_x^*, k_y^*)$  tous deux dans l'intervalle  $[-\pi, \pi[$ . Le référentiel réciproque associé aux coordonnées du centre de masse se lit :

$$\begin{cases} \vec{e}_+^* = \pi\vec{e}_+ = \frac{\vec{e}_x^* + \vec{e}_y^*}{2}, & \|\vec{e}_+^*\| = \pi\sqrt{2} \\ \vec{e}_-^* = 4\pi\vec{e}_- = \vec{e}_x^* - \vec{e}_y^*, & \|\vec{e}_-^*\| = 2\sqrt{2}\pi \end{cases}$$

Travailler avec un patch fini  $N \times N$  avec des conditions aux limites périodiques revient à sélectionner un ensemble fini de vecteurs  $\vec{k}$  autorisés, dont les coordonnées  $(k_x, k_y)$  à l'intérieur de la première zone de Brillouin [région grise dans la Figure G.1(b)] se lisent  $2\pi j_{x,y}/N$  avec  $(j_x, j_y)$  dans l'intervalle  $[-N/2, N/2 - 1]$  pour  $N$  pair et  $[-(N-1)/2, (N-1)/2]$  pour  $N$  impair.

Dans le référentiel réciproque du centre de masse, ces vecteurs  $\vec{k}$  autorisés sont les suivants  $\vec{k} = k_+^*\vec{e}_+^* + k_-^*\vec{e}_-^* = k_+\vec{e}_+/2 + 2k_-\vec{e}_-$  avec :

$$\begin{cases} k_+ = 2\pi(j_x + j_y)/N \\ k_- = \pi(j_x - j_y)/N \end{cases}$$

avec  $(j_x, j_y)$  dans le même intervalle que ci-dessus.

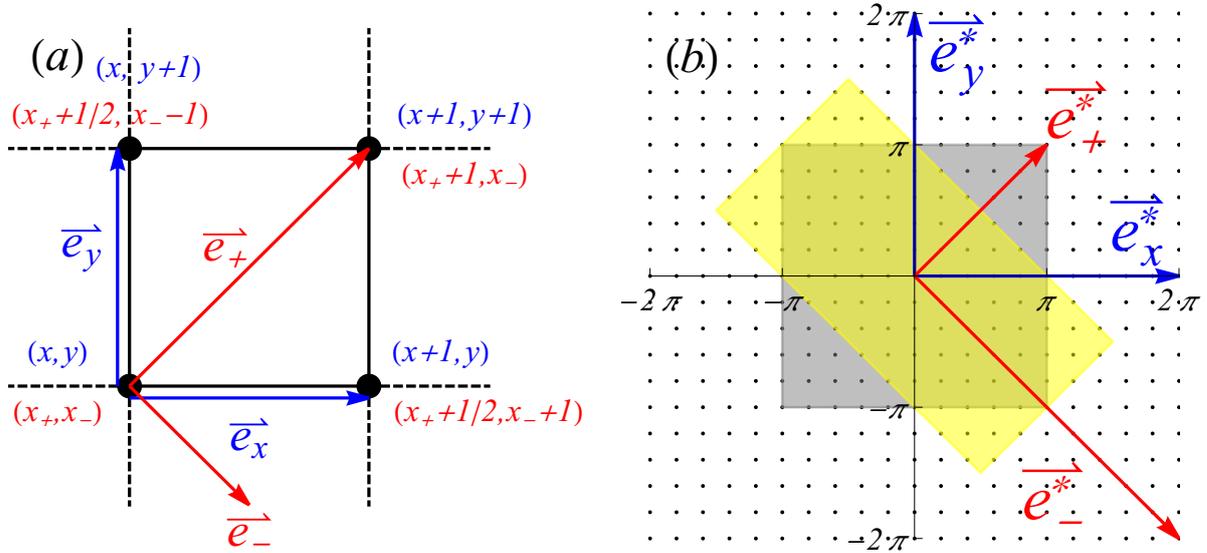


Fig. G.1 (a) Portion du réseau carré avec les coordonnées et vecteurs de base pour le référentiel naturel  $(x, y)$  en bleu et le référentiel du centre de masse  $(x_+, x_-)$  en rouge. (b) Première zone de Brillouin du réseau réciproque en gris. Les vecteurs duaux de chaque référentiel sont indiqués, en bleu (rouge) pour le référentiel naturel (centre de masse). Les points représentent les valeurs autorisées prises par le vecteur d'onde pour un système de taille finie avec  $N = 10$ . Une autre zone de Brillouin mieux adaptée à  $k_+$  et  $k_-$  est indiquée en jaune.

Les deux référentiels dans l'espace direct  $(\vec{e}_x, \vec{e}_y)$  et  $(\vec{e}_+, \vec{e}_-)$  sont représentés sur la Figure G.1(a), et les deux référentiels réciproques  $\{\vec{e}_x^*, \vec{e}_y^*\}$  et  $\{\vec{e}_+^*, \vec{e}_-^*\}$  ainsi que les vecteurs  $\vec{k}$  autorisés (avec  $N = 10$ ) dans la première zone de Brillouin sont affichés sur la Figure G.1(b).

Les valeurs extrêmes prises par une coordonnée du référentiel réciproque du centre de masse lors du parcours de la première zone de Brillouin [région grise de la Figure G.1(b)] dépendent de l'autre coordonnée. En pratique, cela rend les calculs plus difficiles. Cependant, il est possible de définir de manière équivalente une autre zone de Brillouin [région jaune sur la Figure G.1(b)], dans laquelle les deux coordonnées s'étendent sur  $[-\pi, \pi[$ . Les coordonnées  $(k_+, k_-)$  autorisées sont maintenant les suivantes :

$$\begin{cases} k_+ = 2\pi K/N \\ k_- = \pi q/N \end{cases}$$

où  $K$  prend des valeurs entières dans  $[-N/2, N/2 - 1]$  et  $q \in [-N, N - 1]$  prend des valeurs paires (resp. impaires) lorsque  $K$  est pair (resp. impair).

# H – Comportement du rapport de participation inverse en fonction de la taille du système

La localisation des fonctions propres peut être mesurée à l’aide du rapport de participation inverse (IPR) défini par l’équation (V.7). L’IPR des fonctions propres par rapport à la taille du système  $N$  montre des comportements différents selon le degré et la nature de la localisation. Lorsque l’on augmente la taille du système, les fonctions d’onde complètement délocalisées sur l’ensemble du système devraient avoir un  $\text{IPR} \sim 1/N^2$ ; celles localisées le long d’une seule direction devraient avoir un  $\text{IPR} \sim 1/N$ ; et les fonctions d’onde complètement localisées devraient avoir un  $\text{IPR} \sim N^0$  pour de grands  $N$ .

Sans désordre, les fonctions propres de la bande atomique sont les fonctions d’onde de diffusion qui se comportent en  $1/N^2$ , le fit montre un rapport de participation  $P_2 \simeq 63\%$  [voir Figure H.1(a)] (on utilise des conditions aux limites “twistées” afin d’éviter la dégénérescence). Ce résultat numérique correspond au calcul analytique du rapport de participation, en utilisant l’équation (V.6) pour  $\bar{U} \rightarrow \infty$ , qui donne  $2/3 \simeq 67\%$ . Le second fit de la Figure H.1(a) montre une dépendance en  $1/N$  qui correspond aux états moléculaires délocalisés le long de la direction du centre de masse et localisés le long de la direction du mouvement relatif.

Avec le désordre, les états moléculaires deviennent localisés d’Anderson, de sorte que leur IPR ne dépend plus de  $N$  [voir Figure H.1(b)]. Les états atomiques restent délocalisés et leur IPR se comporte en  $1/N^2$ . Dans ce régime (les deux bandes ne se recouvrent pas), ces derniers sont soit des états quasi-idéaux ( $P_2 \sim 67\%$ ), soit des états chaotiques ( $P_2 \sim 33\%$ ). On remarque que la distribution des IPR [voir Figure H.1(b)] est plus grande que dans le cas sans désordre. La valeur moyenne du rapport de participation est de  $P_2 \sim 46\%$ . Le rapport de participation des états chaotiques ( $1/F \simeq 33\%$ ) peut être obtenu analytiquement à partir de la théorie des matrices aléatoires (avec  $F = 3$  pour le GOE), voir par exemple [184].

Lorsque les deux bandes se recouvrent ( $\bar{U} - W < 4$ ), le désordre est fortement ressenti par les états atomiques (voir section V.4). La Figure H.1(c) montre un IPR pour les états atomiques se comportant comme  $N^{-2}$ , avec un rapport de participation  $P_2 \sim 28\%$  non loin des  $33\%$  attendu pour les états chaotiques. La différence vient probablement du fait que tous les états atomiques ne sont pas des états chaotiques : il existe aussi des états quasi-idéaux, résonants et séparatrices. Leur effet devrait disparaître dans la limite thermodynamique.

Les états séparatrices lorsqu’ils ne se couplent pas avec d’autres états atomiques devraient présenter un comportement en  $1/N$  pour l’IPR car ils sont localisés dans la direction du centre

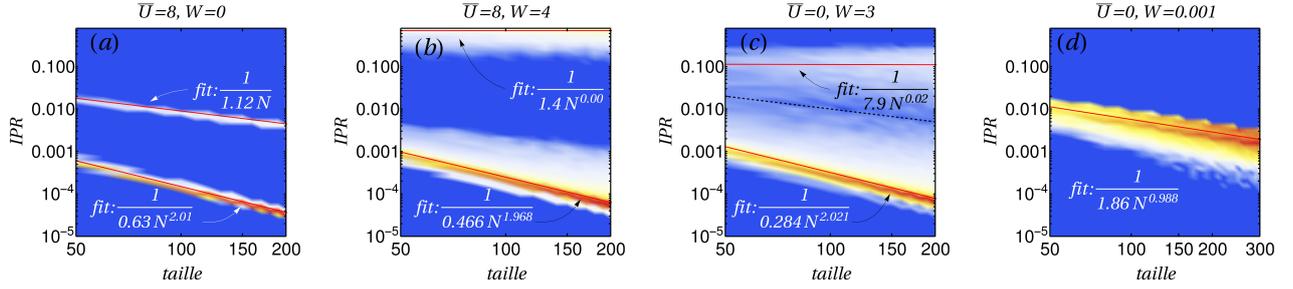


Fig. H.1 Graphique (en échelle logarithmique sur les deux axes) du rapport de participation inverse (IPR) des fonctions propres en fonction de la taille du système  $N$  pour différentes valeurs d'interaction moyenne  $\bar{U}$  et de désordre  $W$ . (a), (b) et (c) : Spectre d'énergie complet pour des tailles de système allant de  $N = 50$  à  $N = 200$  par incrément de 10. (a)  $\bar{U} = 8$ ,  $W = 0$ ; (b)  $\bar{U} = 8$ ,  $W = 4$ ; et (c)  $\bar{U} = 0$ ,  $W = 3$ . (d) : Uniquement les états séparatrices à  $\bar{U} = 0$  et  $W = 0,001$  entre  $N = 50$  et  $N = 300$  par incrément de 10. Les fits linéaires en rouge mettent en évidence trois types de comportement :  $I_2 = 1/(P_2 N^2)$  (2D-délocalisé),  $\sim 1/N$  (1D-délocalisé) et  $\sim N^0$  (localisé). La ligne pointillée noire en (c) délimite la région entre les états localisés et délocalisés 2D.

de masse et délocalisés dans la direction du mouvement relatif. Nous savons qu'ils sont liés aux états à l'énergie  $E = 0$  lorsque  $\bar{U} = W = 0$ . Pour les suivre, nous perturbons légèrement le système ( $W = 0.001$  et  $\bar{U} = 0$ ) pour rester dans le régime où les états séparatrices et atomiques ne résonnent pas [voir Figure H.1(d)] et trouvons effectivement le comportement attendu en  $1/N$ .

# I – Perturbation à l'ordre 1 des solutions de l'ansatz de Bethe

Dans cette Annexe, nous utilisons la théorie des perturbations sur la force du désordre  $W$  pour étudier l'effet du potentiel d'interaction  $U$  (avec une moyenne à  $\bar{U}$  et des fluctuations  $W$ ) sur les états propres exacts du problème à deux particules connu à  $\bar{U}$  non nul mais  $W = 0$ . Par commodité, nous décrivons le système comme la dynamique d'une particule unique sur une grille bidimensionnelle (avec des conditions aux limites périodiques), avec un potentiel désordonné sur la diagonale.

Les cas  $\bar{U} = 0$  et  $\bar{U} \neq 0$  devraient conduire à des résultats quantitatifs différents. En effet, la diagonale désordonnée perturbe les fonctions propres de  $\bar{U} = 0$  (ondes planes) beaucoup plus intensément que les fonctions propres de  $\bar{U} \neq 0$  (états de diffusion) car leur poids sur la diagonale est plus important.

## I.1 $\bar{U} = 0$

On commence par considérer le cas  $\bar{U} = 0$  et suivons les étapes de [179]. La perturbation au premier ordre en énergie est donnée par l'élément de matrice de l'opérateur de perturbation  $U$  entre les vecteurs propres non perturbés, c'est-à-dire les ondes planes obtenues à  $W = 0$ . Dans notre cas, le potentiel est sur une diagonale, alors que dans [179], il est le long des quatre bords d'un billard carré. Le poids d'une onde plane sur un site est de  $1/N^2$ . L'écart type de l'énergie est l'écart-type  $\sigma$  de la variable  $\mathcal{U} = \sum_{x=1}^N U_x$  où  $U_x$  sont les potentiels diagonaux aléatoires choisis uniformément dans  $[-W, +W]$ . On a  $\sigma(\mathcal{U}) = W\sqrt{N}/\sqrt{3}$  où  $N$  est la longueur de la barrière désordonnée. Nous obtenons donc une perturbation typique en énergie de  $W.N^{-3/2}$ , qui doit être comparée à l'écart moyen entre niveaux  $\sim N^{-2}$ . Dans la limite thermodynamique  $N \rightarrow \infty$ , comme  $W.N^{-3/2} \gg N^{-2}$ , chaque état sera sensible aux niveaux d'énergie voisins et nous aboutirons finalement aux statistiques GOE. De plus, en tenant compte du fait que la DoS n'est pas plate mais présente un maximum à  $E = 0$  et des minima aux bords de la bande  $E = \pm 4$  (voir Figure V.4), les derniers états à être affectés par le désordre sont ceux proches des bords de la bande. En effet, les états quasi-idéaux (c'est-à-dire les états qui ne sont presque pas affectés par le désordre) se trouvent principalement près des bords de bande.

## 1.2 $\bar{U} \neq 0$

On considère ensuite le cas  $\bar{U} \neq 0$ . Lorsque  $W = 0$  et avec des conditions aux limites périodiques, les états de diffusion à  $\bar{U}$  fini sont donnés par l'ansatz de Bethe [166, 170] et s'écrivent :

$$\psi_{\text{sc}}(x, y) = Ce^{ik_+x_+} [\sin(\kappa_-x_-) - \frac{4}{\bar{U}} \cos \frac{k_+}{2} \sin \kappa_- \cos(\kappa_-x_-)],$$

où  $C = \sqrt{2}/(N\sqrt{1 + 16/\bar{U}^2 \cos^2 \frac{k_+}{2} \sin^2 \kappa_-})$  est la constante de normalisation,  $k_+ = k_x + k_y = 2\pi K/N$  et  $K \in \llbracket -N/2, N/2 - 1 \rrbracket$ . La quantité  $\kappa_-$  est la solution de l'équation de l'ansatz de Bethe :  $\kappa_-N = 2\pi\lambda + \theta$  où  $\lambda \in \llbracket -N/2, N/2 - 1 \rrbracket$  et  $\theta$  est telle que :

$$e^{i\theta} = -\frac{1 + 4i/\bar{U} \cos(k_+/2) \sin \kappa_-}{1 - 4i/\bar{U} \cos(k_+/2) \sin \kappa_-}.$$

À l'ordre zéro dans  $\bar{U}$ , on a  $\kappa_- \simeq 2\pi\lambda/N = k_-$  et la constante de normalisation  $C \simeq \sqrt{2}/N$ .

Le poids des vecteurs propres sur un site désordonné ( $x_- = 0$ ) est  $C^2 16\bar{U}^{-2} \cos^2 \frac{k_+}{2} \sin^2 \kappa_-$ . Par un calcul similaire à celui effectué dans le cas de  $\bar{U} = 0$ , la perturbation au premier ordre se comporte en  $W\bar{U}^{-2} \cos^2 \frac{k_+}{2} \sin^2 \kappa_- N^{-3/2}$ . Le nombre de solutions de Bethe pour lesquelles la perturbation au premier ordre est inférieure à l'écart moyen moyen entre niveaux  $\propto 1/N^2$  dépend de la valeur de  $k_+$ . Ces dernières satisfont la condition :

$$\cos^2 \frac{k_+}{2} \sin^2 \kappa_- \ll \bar{U}^2 W^{-1} N^{-1/2}.$$

On distingue deux régimes : (1) lorsque  $k_+$  est loin de  $\pi$ , (2) lorsque  $k_+$  est proche de  $\pi$ . Pour le premier cas, nous trouvons que parmi les  $N - 1$  états de diffusion, un nombre de niveaux proportionnel à  $N^{3/4}$  ne s'hybride pas avec d'autres niveaux. Pour le deuxième cas, l'intervalle est divisé en deux. Dans le premier intervalle, le nombre de solutions de Bethe non affectées par d'autres niveaux est sous linéaire  $\propto N^{1-p}$ , avec  $p > 0$ . Dans le second intervalle, ce dernier croît linéairement, cependant, l'intervalle se réduit à 0 lorsque  $N \rightarrow \infty$ .

(1) : Si  $k_+$  est suffisamment éloigné de  $\pi$  pour que  $\cos^2 k_+/2 = a \sim 1$  pas trop proche de 0 alors  $|\sin \kappa_-| \ll \bar{U}W^{-1/2}N^{-1/4}$ . En conséquence le sinus étant petit pour  $N \rightarrow \infty$  et  $\kappa_- \sim 2\pi\lambda/N$ , parmi les  $N$  solutions de Bethe de valeur fixe  $k_+$ , seul un nombre croissant comme  $\propto \bar{U}W^{-1/2}N^{3/4}$  ne s'hybride pas avec les autres niveaux.

(2) : Si  $k_+ = \pi - 2\pi r/N$  avec  $r$  un entier tel que  $0 \leq r \leq r_1$  avec  $2\pi r_1/N \ll 1$  et  $r_1$  est la borne supérieure de  $r$ . En dessous, l'approximation suivante est valide :  $\cos(k_+/2) \sim r^2/N^2$  et  $|\sin \kappa_-| \ll \bar{U}W^{-1/2}N^{7/4}r^{-2}$ . Lorsque  $r > r_1$ , on se retrouve alors dans le premier cas (1). Nous voulons estimer  $r_0$ , le nombre de  $k_+$  pour lequel l'ensemble des  $N$  solutions de Bethe correspondantes ne s'hybrident pas avec les niveaux voisins. Il est satisfait lorsque  $\bar{U}W^{-1/2}N^{7/4}r^{-2} > 1 \Rightarrow r < \sqrt{\bar{U}W^{-1/4}N^{7/8}} = r_0$ . Dans la suite, il sera nécessaire d'obtenir une borne supérieure  $r'_0$  sur ce  $r_0$  donc on relâche la contrainte et on demande  $\bar{U}W^{-1/2}N^{7/4}r^{-2} > \bar{U}W^{-1/2}N^{-p}$  où  $p > 0$ , la borne supérieure est  $r'_0 = N^{7/8+p/2}$ . Pour  $r_1 \geq r \geq r'_0$ ,  $|\sin \kappa_-| \ll \bar{U}W^{-1/2}N^{7/4}r^{-2} \leq \bar{U}W^{-1/2}N^{-p} \Rightarrow \lambda \ll N^{1-p}$ . Nous nous attendons à ce que le nombre de solutions de Bethe qui ne s'hybrident pas évolue comme  $N^{1-p}$ . Nous choisissons  $p < 1/4$  et obtenons à la limite thermodynamique que  $r_1 > r'_0$ .

En résumé, nous voulons estimer le nombre total de solutions de Bethe  $S = \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} f(2\pi j/N)$  pour lesquelles la perturbation à l'ordre 1 de l'énergie ne la fait pas croiser les niveaux d'énergie voisins, où  $f$  est la fonction qui compte ces solutions de Bethe à  $k_+$  fixe. Nous obtenons 3 comportements typiques différents pour  $f$  en fonction de la valeur de  $k_+ = 2\pi j/N = \pi - 2\pi r/N \Rightarrow j = N/2 - r$ . Nous définissons  $j_0 = N/2 - r_0$  et  $j_1 = N/2 - r_1$ .  $f_0$  est le comportement de  $f(2\pi j/N)$  pour  $0 \leq |j| < j_1$  calculé dans le premier cas (1).  $f_1$  et  $f_2$  décrivent le comportement de  $f(2\pi j/N)$  respectivement dans l'intervalle  $j_1 \leq |j| \leq j_0$  et  $j_1 < |j| \leq N/2$  calculé dans le second régime (2). Alors

$$S < \sum_{|j|=0}^{j_1-1} f_0 + \sum_{|j|=j_1}^{j_0} f_1 + \sum_{|j|=j_0+1}^{N/2} f_2,$$

où  $f_0 \propto \bar{U}W^{-1/2}N^{3/4}$ ,  $f_1 \propto N^{1-p}$  et  $f_2 = N$ . Le nombre de termes dans la première et la deuxième somme est proportionnel à  $N$ . Dans la troisième somme, le nombre de termes est proportionnel à  $r'_0 = N^{7/8+p/2}$ . Pour  $0 < p < 1/2$ ,  $S$  se comporte en  $N^\alpha$  où  $\alpha < 2$ . Par conséquent, à la limite thermodynamique, ces états, qui ne voient pas les niveaux voisins, ne seront pas majoritaires.

Ce résultat est très différent du cas  $\bar{U} = 0$ . Lorsque  $\bar{U} = 0$  et à la limite thermodynamique, chaque état finira par s'hybrider et conduira à la statistique GOE. À  $\bar{U} \neq 0$ , certains états ne s'hybrident pas. Comme leur nombre se comporte  $N^\alpha$  avec  $\alpha < 2$ , ils sont minoritaires par rapport au nombre total  $N^2$  d'états propres du problème.



# Bibliographie

- [1] S. S. SCHWEBER ; «Feynman and the visualization of space-time processes» ; *Reviews of Modern Physics* **58**, p. 449–508 (1986). 1
- [2] R. P. FEYNMAN & A. R. HIBBS ; *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw Hill) (1965). 1, 42
- [3] R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON & M. SANDS ; *The Feynman Lectures on Physics Vol. I* (The New Millennium Edition) (1963). [https://www.feynmanlectures.caltech.edu/I\\_toc.html](https://www.feynmanlectures.caltech.edu/I_toc.html). 1
- [4] R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON & M. SANDS ; *The Feynman Lectures on Physics Vol. II* (The New Millennium Edition) (1971). [https://www.feynmanlectures.caltech.edu/II\\_toc.html](https://www.feynmanlectures.caltech.edu/II_toc.html). 1
- [5] R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON & M. SANDS ; *The Feynman Lectures on Physics Vol. III* (The New Millennium Edition) (1974). [https://www.feynmanlectures.caltech.edu/III\\_toc.html](https://www.feynmanlectures.caltech.edu/III_toc.html). 1
- [6] R. P. FEYNMAN ; «Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics» ; *Reviews of Modern Physics* **20**, p. 367–387 (1948). 1, 35
- [7] Y. AHARONOV, L. DAVIDOVICH & N. ZAGURY ; «Quantum random walks» ; *Physical Review A* **48**, p. 1687–1690 (1993). 1
- [8] D. A. MEYER ; «From quantum cellular automata to quantum lattice gases» ; *quant-ph/9604003v2*. 1, 17
- [9] P. ARRIGHI ; «An overview of Quantum Cellular Automata» ; (2019) *1904.12956v2*. 1
- [10] T. FARRELLY ; «A review of Quantum Cellular Automata» ; *Quantum* **4**, p. 368 (2020). 1
- [11] E. FARHI & S. GUTMANN ; «Quantum computation and decision trees» ; *Physical Review A* **58**, p. 915–928 (1998). 1
- [12] A. AMBAINIS, E. BACH, A. NAYAK, A. VISHWANATH & J. WATROUS ; «One-dimensional quantum walks» ; dans «Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing - STOC '01», (ACM Press) (2001). 1
- [13] A. M. CHILDS ; «Universal Computation by Quantum Walk» ; *Physical Review Letters* **102** (2009). 1
- [14] N. B. LOVETT, S. COOPER, M. EVERITT, M. TREVERS & V. KENDON ; «Universal quantum computation using the discrete-time quantum walk» ; *Physical Review A* **81** (2010). 1

- [15] M. S. UNDERWOOD & D. L. FEDER; «Universal quantum computation by discontinuous quantum walk»; *Physical Review A* **82** (2010). 1
- [16] A. M. CHILDS, D. GOSSET & Z. WEBB; «Universal Computation by Multiparticle Quantum Walk»; *Science* **339**, p. 791–794 (2013). 1
- [17] F. W. STRAUCH; «Connecting the discrete- and continuous-time quantum walks»; *Physical Review A* **74** (2006). 1
- [18] L. K. GROVER; «A fast quantum mechanical algorithm for database search»; [quant-ph/9605043v3](https://arxiv.org/abs/quant-ph/9605043v3). 1
- [19] A. AMBAINIS, J. KEMPE & A. RIVOSH; «Coins Make Quantum Walks Faster»; [quant-ph/0402107v1](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0402107v1). 1
- [20] A. AMBAINIS; «Quantum Walk Algorithm for Element Distinctness»; *SIAM Journal on Computing* **37**, p. 210–239 (2007). 2
- [21] F. ARUTE, K. ARYA, R. BABBUSH, D. BACON, J. C. BARDIN, R. BARENS, R. BISWAS, S. BOIXO, F. G. S. L. BRANDAO, D. A. BUELL, B. BURKETT, Y. CHEN, Z. CHEN, B. CHIARO, R. COLLINS, W. COURTNEY, A. DUNSWORTH, E. FARHI, B. FOXEN, A. FOWLER, C. GIDNEY, M. GIUSTINA, R. GRAFF, K. GUERIN, S. HABEGGER, M. P. HARRIGAN, M. J. HARTMANN, A. HO, M. HOFFMANN, T. HUANG, T. S. HUMBLE, S. V. ISAKOV, E. JEFFREY, Z. JIANG, D. KAFRI, K. KECHEDZHI, J. KELLY, P. V. KLIMOV, S. KNYSH, A. KOROTKOV, F. KOSTRITSA, D. LANDHUIS, M. LINDMARK, E. LUCERO, D. LYAKH, S. MANDRÀ, J. R. McCLEAN, M. McEWEN, A. MEGRANT, X. MI, K. MICHELSEN, M. MOHSENI, J. MUTUS, O. NAAMAN, M. NEELEY, C. NEILL, M. Y. NIU, E. OSTBY, A. PETUKHOV, J. C. PLATT, C. QUINTANA, E. G. RIEFFEL, P. ROUSHAN, N. C. RUBIN, D. SANK, K. J. SATZINGER, V. SMELYANSKIY, K. J. SUNG, M. D. TREVITHICK, A. VAINSENER, B. VILLALONGA, T. WHITE, Z. J. YAO, P. YEH, A. ZALCMAN, H. NEVEN & J. M. MARTINIS; «Quantum supremacy using a programmable superconducting processor»; *Nature* **574**, p. 505–510 (2019). 2
- [22] H.-S. ZHONG, H. WANG, Y.-H. DENG, M.-C. CHEN, L.-C. PENG, Y.-H. LUO, J. QIN, D. WU, X. DING, Y. HU, P. HU, X.-Y. YANG, W.-J. ZHANG, H. LI, Y. LI, X. JIANG, L. GAN, G. YANG, L. YOU, Z. WANG, L. LI, N.-L. LIU, C.-Y. LU & J.-W. PAN; «Quantum computational advantage using photons»; *Science* **370**, p. 1460–1463 (2020). ISSN 0036-8075. <https://science.sciencemag.org/content/370/6523/1460>; <https://science.sciencemag.org/content/370/6523/1460.full.pdf>. 2
- [23] A. J. BRACKEN, D. ELLINAS & I. SMYRNAKIS; «Free-Dirac-particle evolution as a quantum random walk»; *Physical Review A* **75** (2007). 2
- [24] C. M. CHANDRASHEKAR, S. BANERJEE & R. SRIKANTH; «Relationship between quantum walks and relativistic quantum mechanics»; *Physical Review A* **81** (2010). 2, 21
- [25] C. M. CHANDRASHEKAR; «Two-state quantum walk on two- and three-dimensional lattices»; [1103.2704v4](https://arxiv.org/abs/1103.2704v4). 2
- [26] C. M. CHANDRASHEKAR; «Two-component Dirac-like Hamiltonian for generating quantum walk on one-, two- and three-dimensional lattices»; *Scientific Reports* **3** (2013). 2, 21
- [27] G. M. D'ARIANO & P. PERINOTTI; «Derivation of the Dirac equation from principles of information processing»; *Physical Review A* **90** (2014). 2

- [28] P. ARRIGHI, V. NESME & M. FORETS; «The Dirac equation as a quantum walk : higher dimensions, observational convergence»; *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **47**, p. 465 302 (2014). 2, 17
- [29] T. C. FARRELLY & A. J. SHORT; «Discrete spacetime and relativistic quantum particles»; *Physical Review A* **89** (2014). 2
- [30] A. BISIO, G. M. D'ARIANO & A. TOSINI; «Quantum field as a quantum cellular automaton : The Dirac free evolution in one dimension»; *Annals of Physics* **354**, p. 244–264 (2015). 2
- [31] G. M. D'ARIANO, M. ERBA & P. PERINOTTI; «Isotropic quantum walks on lattices and the Weyl equation»; *Physical Review A* **96** (2017). 2
- [32] L. MLODINOW & T. A. BRUN; «Discrete spacetime, quantum walks, and relativistic wave equations»; *Physical Review A* **97** (2018). 2
- [33] M. MANIGHALAM & M. KON; «Continuum Limits of the 1D Discrete Time Quantum Walk»; [1909.07531v2](#). 2
- [34] M. MAEDA & A. SUZUKI; «Continuous limits of linear and nonlinear quantum walks»; *Reviews in Mathematical Physics* **32**, p. 2050 008 (2019). 2
- [35] J. YEPEZ; «Quantum lattice gas model of Dirac particles in 1+1 dimensions»; [1307.3595v1](#). 2
- [36] A. BISIO, G. M. D'ARIANO, P. PERINOTTI & A. TOSINI; «Weyl, Dirac and Maxwell Quantum Cellular Automata»; *Foundations of Physics* **45**, p. 1203–1221 (2015). 2
- [37] A. BISIO, G. M. D'ARIANO & P. PERINOTTI; «Quantum cellular automaton theory of light»; *Annals of Physics* **368**, p. 177–190 (2016). 2
- [38] G. M. D'ARIANO & P. PERINOTTI; «Quantum cellular automata and free quantum field theory»; *Frontiers of Physics* **12** (2016). 2
- [39] L. MLODINOW & T. A. BRUN; «Quantum field theory from a quantum cellular automaton in one spatial dimension and a no-go theorem in higher dimensions»; *Physical Review A* **102** (2020). 2
- [40] P. ARNAULT & F. DEBBASCH; «Landau levels for discrete-time quantum walks in artificial magnetic fields»; *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **443**, p. 179–191 (2016). 2, 21, 57
- [41] P. ARNAULT & F. DEBBASCH; «Quantum walks and discrete gauge theories»; *Physical Review A* **93** (2016). 2
- [42] P. ARNAULT, G. D. MOLFETTA, M. BRACHET & F. DEBBASCH; «Quantum walks and non-Abelian discrete gauge theory»; *Physical Review A* **94** (2016). 2
- [43] J. YEPEZ; «Quantum lattice gas algorithmic representation of gauge field theory»; dans M. T. GRUNEISEN, M. DUSEK & J. G. RARITY (rédacteurs), «Quantum Information Science and Technology II», (SPIE) (2016). 2
- [44] P. ARRIGHI, C. BÉNY & T. FARRELLY; «A quantum cellular automaton for one-dimensional QED»; *Quantum Information Processing* **19** (2020). 2
- [45] P. ARRIGHI, S. FACCHINI & M. FORETS; «Quantum walking in curved spacetime»; [1505.07023v2](#). 2

- [46] P. ARRIGHI, G. D. MOLFETTA & S. FACCHINI; «Quantum walking in curved spacetime : discrete metric»; [1711.04662v4](#). 2
- [47] P. ARNAULT & F. DEBBASCH; «Quantum walks and gravitational waves»; [Annals of Physics](#) **383**, p. 645–661 (2017). 2
- [48] P. ARRIGHI, G. D. MOLFETTA, I. MARQUEZ-MARTIN & A. PEREZ; «From curved spacetime to spacetime-dependent local unitaries over the honeycomb and triangular Quantum Walks»; [Scientific Reports](#) **9** (2019). 2
- [49] T. KITAGAWA, M. S. RUDNER, E. BERG & E. DEMLER; «Exploring topological phases with quantum walks»; [Physical Review A](#) **82** (2010). 2, 19, 77
- [50] T. KITAGAWA, E. BERG, M. RUDNER & E. DEMLER; «Topological characterization of periodically driven quantum systems»; [Physical Review B](#) **82** (2010). 2, 77
- [51] D. R. HOFSTADTER; «Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields»; [Physical Review B](#) **14**, p. 2239–2249 (1976). 2, 37, 77
- [52] M. SAJID, J. K. ASBÓTH, D. MESCHÉDE, R. F. WERNER & A. ALBERTI; «Creating anomalous Floquet Chern insulators with magnetic quantum walks»; [Physical Review B](#) **99** (2019). 2, 22, 57, 58, 99, 163
- [53] J. KEMPE; «Quantum random walks : An introductory overview»; [Contemporary Physics](#) **44**, p. 307–327 (2003). 5, 85
- [54] B. TREGENNA, W. FLANAGAN, R. MAILE & V. KENDON; «Controlling discrete quantum walks : coins and initial states»; [New Journal of Physics](#) **5**, p. 83–83 (2003). 5, 13, 25
- [55] S. E. VENEGAS-ANDRACA; «Quantum walks : a comprehensive review»; [Quantum Information Processing](#) **11**, p. 1015–1106 (2012). 5
- [56] I. BIALYNICKI-BIRULA; «Weyl, Dirac, and Maxwell equations on a lattice as unitary cellular automata»; [Physical Review D](#) **49**, p. 6920–6927 (1994). 17
- [57] S. SUCCI & R. BENZI; «Lattice Boltzmann equation for quantum mechanics»; [Physica D: Nonlinear Phenomena](#) **69**, p. 327–332 (1993). 17
- [58] T. G. WONG; «Grover search with lackadaisical quantum walks»; [Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical](#) **48**, p. 435304 (2015). 19
- [59] C. D. FRANCO, M. M. GETTRICK & T. BUSCH; «Mimicking the Probability Distribution of a Two-Dimensional Grover Walk with a Single-Qubit Coin»; [Physical Review Letters](#) **106** (2011). 19
- [60] C. D. FRANCO, M. M. GETTRICK, T. MACHIDA & T. BUSCH; «Alternate two-dimensional quantum walk with a single-qubit coin»; [Physical Review A](#) **84** (2011). 19
- [61] T. D. MACKAY, S. D. BARTLETT, L. T. STEPHENSON & B. C. SANDERS; «Quantum walks in higher dimensions»; [Journal of Physics A: Mathematical and General](#) **35**, p. 2745–2753 (2002). 25
- [62] P. DIETL, F. PIÉCHON & G. MONTAMBAUX; «New Magnetic Field Dependence of Landau Levels in a Graphenelike Structure»; [Physical Review Letters](#) **100** (2008). 35, 74

- [63] B. C. TRAVAGLIONE & G. J. MILBURN; «Implementing the quantum random walk»; *Physical Review A* **65** (2002). 35
- [64] F. ZÄHRINGER, G. KIRCHMAIR, R. GERRITSMAN, E. SOLANO, R. BLATT & C. F. ROOS; «Realization of a Quantum Walk with One and Two Trapped Ions»; *Physical Review Letters* **104** (2010). 35
- [65] H. SCHMITZ, R. MATJESCHK, C. SCHNEIDER, J. GLUECKERT, M. ENDERLEIN, T. HUBER & T. SCHAEZT; «Quantum Walk of a Trapped Ion in Phase Space»; *Physical Review Letters* **103** (2009). 35
- [66] R. CÔTÉ, A. RUSSELL, E. E. EYLER & P. L. GOULD; «Quantum random walk with Rydberg atoms in an optical lattice»; *New Journal of Physics* **8**, p. 156–156 (2006). 35
- [67] M. KARSKI, L. FORSTER, J.-M. CHOI, A. STEFFEN, W. ALT, D. MESCHEDE & A. WIDERA; «Quantum Walk in Position Space with Single Optically Trapped Atoms»; *Science* **325**, p. 174–177 (2009). 35
- [68] M. GENSKE, W. ALT, A. STEFFEN, A. H. WERNER, R. F. WERNER, D. MESCHEDE & A. ALBERTI; «Electric Quantum Walks with Individual Atoms»; *Physical Review Letters* **110** (2013). 35
- [69] A. SCHREIBER, K. N. CASSEMIRO, V. POTOČEK, A. GÁBRIS, P. J. MOSLEY, E. ANDERSSON, I. JEX & C. SILBERHORN; «Photons Walking the Line : A Quantum Walk with Adjustable Coin Operations»; *Physical Review Letters* **104** (2010). 35
- [70] A. SCHREIBER, A. GÁBRIS, P. P. ROHDE, K. LAIHO, M. ŠTEFAŇÁK, V. POTOČEK, C. HAMILTON, I. JEX & C. SILBERHORN; «A 2D Quantum Walk Simulation of Two-Particle Dynamics»; *Science* **336**, p. 55–58 (2012). 35
- [71] A. PERUZZO, M. LOBINO, J. C. F. MATTHEWS, N. MATSUDA, A. POLITI, K. POULIOS, X.-Q. ZHOU, Y. LAHINI, N. ISMAIL, K. WORHOFF, Y. BROMBERG, Y. SILBERBERG, M. G. THOMPSON & J. L. OBRIEN; «Quantum Walks of Correlated Photons»; *Science* **329**, p. 1500–1503 (2010). 35
- [72] M. A. BROOME, A. FEDRIZZI, B. P. LANYON, I. KASSAL, A. ASPURU-GUZZIK & A. G. WHITE; «Discrete Single-Photon Quantum Walks with Tunable Decoherence»; *Physical Review Letters* **104** (2010). 35
- [73] L. SANSONI, F. SCIARRINO, G. VALLONE, P. MATALONI, A. CRESPI, R. RAMPONI & R. OSELLAME; «Two-Particle Bosonic-Fermionic Quantum Walk via Integrated Photonics»; *Physical Review Letters* **108** (2012). 35
- [74] O. KÁLMÁN, T. KISS & P. FÖLDI; «Quantum walk on the line with quantum rings»; *Physical Review B* **80** (2009). 35
- [75] S. DADRAS, A. GRESCH, C. GROISEAU, S. WIMBERGER & G. S. SUMMY; «Quantum Walk in Momentum Space with a Bose-Einstein Condensate»; *Physical Review Letters* **121** (2018). 35
- [76] A. D’ERRICO, F. CARDANO, M. MAFFEI, A. DAUPHIN, R. BARBOZA, C. ESPOSITO, B. PICCIRILLO, M. LEWENSTEIN, P. MASSIGNAN & L. MARRUCCI; «Two-dimensional topological quantum walks in the momentum space of structured light»; *Optica* **7**, p. 108 (2020). 35

- [77] F. H. CLARO & G. H. WANNIER ; «Magnetic subband structure of electrons in hexagonal lattices» ; *Physical Review B* **19**, p. 6068–6074 (1979). 37
- [78] R. RAMMAL ; «Landau level spectrum of Bloch electrons in a honeycomb lattice» ; *Journal de Physique* **46**, p. 1345–1354 (1985). 37, 161
- [79] J. VIDAL, R. MOSSERI & B. DOUÇOT ; «Aharonov-Bohm Cages in Two-Dimensional Structures» ; *Physical Review Letters* **81**, p. 5888–5891 (1998). 37, 79, 82, 88, 161
- [80] M. GOERBIG & P. LEDERER ; «Electrons bidimensionnels sous champ magnétique fort : la physique des effets Hall quantiques» ; (2021). 38
- [81] R. PEIERLS ; «Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen» ; *Zeitschrift für Physik* **80**, p. 763–791 (1933). 38
- [82] P. A. M. DIRAC ; «The quantum theory of the electron» ; *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **117**, p. 610–624 (1928). 40
- [83] J. W. MCCLURE ; «Diamagnetism of Graphite» ; *Physical Review* **104**, p. 666–671 (1956). 41
- [84] J. DALIBARD ; «Cours : Champs magnétiques artificiels, chapitre 4 : l’effet Aharonov-Bohm» ; (2013). [https://www.college-de-france.fr/media/jean-dalibard/UPL1830608146483679312\\_Cours\\_2014.compressed.pdf](https://www.college-de-france.fr/media/jean-dalibard/UPL1830608146483679312_Cours_2014.compressed.pdf). 42, 43, 44
- [85] R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON & M. SANDS ; *The Feynman lectures on Physics Vol. III, chapitre 21 : The Schrödinger Equation in a Classical Context : A Seminar on Superconductivity* (The New Millennium Edition) (1974). [https://www.feynmanlectures.caltech.edu/III\\_21.html](https://www.feynmanlectures.caltech.edu/III_21.html). 42
- [86] Y. AHARONOV & D. BOHM ; «Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory» ; *Physical Review* **115**, p. 485–491 (1959). 43
- [87] R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON & M. SANDS ; *The Feynman Lectures on Physics Vol. II, chapitre 15 : the Vector Potential* (The New Millennium Edition) (1971). [https://www.feynmanlectures.caltech.edu/III\\_21.html](https://www.feynmanlectures.caltech.edu/III_21.html). 43
- [88] R. G. CHAMBERS ; «Shift of an Electron Interference Pattern by Enclosed Magnetic Flux» ; *Physical Review Letters* **5**, p. 3–5 (1960). 44
- [89] A. TONOMURA, T. MATSUDA, R. SUZUKI, A. FUKUHARA, N. OSAKABE, H. UMEZAKI, J. ENDO, K. SHINAGAWA, Y. SUGITA & H. FUJIWARA ; «Observation of Aharonov-Bohm Effect by Electron Holography» ; *Physical Review Letters* **48**, p. 1443–1446 (1982). 44
- [90] A. TONOMURA, N. OSAKABE, T. MATSUDA, T. KAWASAKI, J. ENDO, S. YANO & H. YAMADA ; «Evidence for Aharonov-Bohm effect with magnetic field completely shielded from electron wave» ; *Physical Review Letters* **56**, p. 792–795 (1986). 44
- [91] A. TONOMURA ; «Applications of electron holography» ; *Reviews of Modern Physics* **59**, p. 639–669 (1987). 44
- [92] J. M. LUTTINGER ; «The Effect of a Magnetic Field on Electrons in a Periodic Potential» ; *Physical Review* **84**, p. 814–817 (1951). 44
- [93] W. KOHN ; «Theory of Bloch Electrons in a Magnetic Field : The Effective Hamiltonian» ; *Physical Review* **115**, p. 1460–1478 (1959). 44

- [94] A. ALTLAND & B. SIMONS; *Condensed Matter Field Theory, Chapitre 3 : Applications of the Feynman path integral. pages : 115-124* (Cambridge University Press) (2010). 44
- [95] J. IBAÑEZ-AZPIROZ, A. EIGUREN, A. BERGARA, G. PETTINI & M. MODUGNO; «Breakdown of the Peierls substitution for the Haldane model with ultracold atoms»; *Physical Review A* **90** (2014). 47
- [96] M. AIDELSBURGER, M. ATALA, M. LOHSE, J. T. BARREIRO, B. PAREDES & I. BLOCH; «Realization of the Hofstadter Hamiltonian with Ultracold Atoms in Optical Lattices»; *Physical Review Letters* **111** (2013). 47
- [97] H. MIYAKE, G. A. SIVILOGLOU, C. J. KENNEDY, W. C. BURTON & W. KETTERLE; «Realizing the Harper Hamiltonian with Laser-Assisted Tunneling in Optical Lattices»; *Physical Review Letters* (2013). 1308.1431v3. 47
- [98] J. STRUCK, M. WEINBERG, C. ÖLSCHLÄGER, P. WINDPASSINGER, J. SIMONET, K. SENGSTOCK, R. HÖPPNER, P. HAUKE, A. ECKARDT, M. LEWENSTEIN & L. MATHEY; «Engineering Ising-XY spin-models in a triangular lattice using tunable artificial gauge fields»; *Nature Physics* **9**, p. 738–743 (2013). 47
- [99] C. R. DEAN, L. WANG, P. MAHER, C. FORSYTHE, F. GHAHARI, Y. GAO, J. KATOCH, M. ISHIGAMI, P. MOON, M. KOSHINO, T. TANIGUCHI, K. WATANABE, K. L. SHEPARD, J. HONE & P. KIM; «Hofstadter's butterfly and the fractal quantum Hall effect in moiré superlattices»; *Nature* **497**, p. 598–602 (2013). 47
- [100] B. PANNETIER, J. CHAUSSY, R. RAMMAL & J. C. VILLEGIER; «Experimental Fine Tuning of Frustration : Two-Dimensional Superconducting Network in a Magnetic Field»; *Physical Review Letters* **53**, p. 1845–1848 (1984). 47
- [101] C. ALBRECHT, J. H. SMET, K. VON KLITZING, D. WEISS, V. UMANSKY & H. SCHWEIZER; «Evidence of Hofstadter's Fractal Energy Spectrum in the Quantized Hall Conductance»; *Physical Review Letters* **86**, p. 147–150 (2001). 47
- [102] P. G. HARPER; «The General Motion of Conduction Electrons in a Uniform Magnetic Field, with Application to the Diamagnetism of Metals»; *Proc. Phys. Soc. A* **68**, p. 874 (1955). 48
- [103] S. AUBRY & G. ANDRÉ; «Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices»; dans «Proceedings, VIII International Colloquium on Group-Theoretical Methods in Physics. 3», (1980). 48
- [104] J. ZAK; «Group-Theoretical Consideration of Landau Level Broadening in Crystals»; *Physical Review* **136**, p. A776–A780 (1964). 50, 171
- [105] E. M. LIFSHITZ & L. P. PITAEVSKII; *Statistical Physics, Part 2 : Theory of the Condensed State, Vol. 9, Sec. 60* (1980). 50, 171
- [106] J.-N. FUCHS & J. VIDAL; «Hofstadter butterfly of a quasicrystal»; *Physical Review B* **94** (2016). 50, 171
- [107] A. RAUH; «On the broadening of Landau levels in crystals»; *physica status solidi (b)* **69**, p. K9–K13 (1975). 52
- [108] J.-N. FUCHS, R. MOSSERI & J. VIDAL; «Landau level broadening, hyperuniformity, and discrete scale invariance»; *Physical Review B* **100** (2019). 52

- [109] M. WILKINSON; «Critical properties of electron eigenstates in incommensurate systems»; *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **391**, p. 305–350 (1984). 52
- [110] J.-N. FUCHS, R. MOSSERI & J. VIDAL; «Landau levels in quasicrystals»; *Physical Review B* **98** (2018). 52
- [111] D. TONG; «Lectures on the Quantum Hall Effect, chapitre 2 : the Integer Quantum Hall Effect»; (2016). <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/qhe/two.pdf>. 55
- [112] B. I. HALPERIN; «Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential»; *Physical Review B* **25**, p. 2185–2190 (1982). 55
- [113] D. J. THOULESS, M. KOHMOTO, M. P. NIGHTINGALE & M. DEN NIJS; «Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential»; *Physical Review Letters* **49**, p. 405–408 (1982). 56
- [114] İ. YALÇINKAYA & Z. GEDIK; «Two-dimensional quantum walk under artificial magnetic field»; *Physical Review A* **92** (2015). 57
- [115] C. CEDZICH, T. GEIB, A. H. WERNER & R. F. WERNER; «Quantum walks in external gauge fields»; . [1808.10850v1](https://arxiv.org/abs/1808.10850v1). 57
- [116] M. S. RUDNER, N. H. LINDNER, E. BERG & M. LEVIN; «Anomalous Edge States and the Bulk-Edge Correspondence for Periodically Driven Two-Dimensional Systems»; *Physical Review X* **3** (2013). 64, 66
- [117] J. K. ASBÓTH & A. ALBERTI; «Spectral Flow and Global Topology of the Hofstadter Butterfly»; *Physical Review Letters* **118** (2017). 65
- [118] C. CEDZICH, J. FILLMAN, T. GEIB & A. H. WERNER; «Singular continuous Cantor spectrum for magnetic quantum walks»; *Letters in Mathematical Physics* **110**, p. 1141–1158 (2020). 77, 159
- [119] C. NAUD, G. FAINI & D. MAILLY; «First observation of Aharonov-Bohm cages in 2-D normal metal networks»; [cond-mat/0006400v3](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0006400v3). 79
- [120] C. C. ABILIO, P. BUTAUD, T. FOURNIER, B. PANNETIER, J. VIDAL, S. TEDESCO & B. DALZOTTO; «Magnetic Field Induced Localization in a Two-Dimensional Superconducting Wire Network»; *Physical Review Letters* **83**, p. 5102–5105 (1999). 79
- [121] I. M. POP, K. HASSELBACH, O. BUISSON, W. GUICHARD, B. PANNETIER & I. PROTOPOV; «Measurement of the current-phase relation in Josephson junction rhombi chains»; *Physical Review B* **78** (2008). 79
- [122] A. BERMUDEZ, T. SCHAETZ & D. PORRAS; «Synthetic Gauge Fields for Vibrational Excitations of Trapped Ions»; *Physical Review Letters* **107** (2011). 79
- [123] G. MÖLLER & N. R. COOPER; «Correlated Phases of Bosons in the Flat Lowest Band of the Dice Lattice»; *Physical Review Letters* **108** (2012). 79
- [124] S. MUKHERJEE, M. D. LIBERTO, P. ÖHBERG, R. R. THOMSON & N. GOLDMAN; «Experimental Observation of Aharonov-Bohm Cages in Photonic Lattices»; *Physical Review Letters* **121** (2018). 79, 99
- [125] J. VIDAL, B. DOUCOT, R. MOSSERI & P. BUTAUD; «Interaction induced delocalisation for two particles in a periodic potential»; . [cond-mat/0005215v2](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0005215v2). 79, 99, 101, 117, 124

- [126] W. E. ARNOLDI; «The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem»; *Quarterly of Applied Mathematics* **9**, p. 17–29 (1951). 82
- [127] R. HAYDOCK; «The recursive solution of the Schrödinger equation»; *Computer Physics Communications* **20**, p. 11–16 (1980). 82
- [128] H. PERRIN, J.-N. FUCHS & R. MOSSERI; «Tunable Aharonov-Bohm-like cages for quantum walks»; *Physical Review B* **101** (2020). 84
- [129] A. AMBAINIS; «Quantum walks and their algorithmic applications»; *International Journal of Quantum Information* **01**, p. 507–518 (2003). 84, 99
- [130] J. VIDAL, P. BUTAUD, B. DOUCOT & R. MOSSERI; «How to escape Aharonov-Bohm cages?»; . *cond-mat/0103611v1*. 101, 102, 103, 106, 107, 110
- [131] A. AHLBRECHT, V. B. SCHOLZ & A. H. WERNER; «Disordered quantum walks in one lattice dimension»; *Journal of Mathematical Physics* **52**, p. 102 201 (2011). 101
- [132] C. M. CHANDRASHEKAR; «Disordered-quantum-walk-induced localization of a Bose-Einstein condensate»; *Physical Review A* **83** (2011). 101
- [133] C. M. CHANDRASHEKAR; «Disorder induced localization and enhancement of entanglement in one- and two-dimensional quantum walks»; *1212.5984v2*. 101
- [134] R. VIEIRA, E. P. M. AMORIM & G. RIGOLIN; «Entangling power of disordered quantum walks»; *Physical Review A* **89** (2014). 101
- [135] M. A. PIRES & S. M. D. QUEIRÓS; «Negative correlations can play a positive role in disordered quantum walks»; *2008.08867v1*. 101
- [136] A. JOYE & M. MERKLI; «Dynamical Localization of Quantum Walks in Random Environments»; *1004.4130v1*. 101
- [137] P. W. ANDERSON; «Absence of Diffusion in Certain Random Lattices»; *Physical Review* **109**, p. 1492–1505 (1958). 101, 102, 132
- [138] P. RIBEIRO, P. MILMAN & R. MOSSERI; «Aperiodic Quantum Random Walks»; *Physical Review Letters* **93** (2004). 101, 102, 111
- [139] R. VIEIRA, E. P. M. AMORIM & G. RIGOLIN; «Dynamically Disordered Quantum Walk as a Maximal Entanglement Generator»; *Physical Review Letters* **111** (2013). 101
- [140] S. CHAKRABORTY, A. DAS, A. MALLICK & C. M. CHANDRASHEKAR; «Quantum Ratchet in Disordered Quantum Walk»; *Annalen der Physik* **529**, p. 1600 346 (2017). 101
- [141] E. ABRAHAMS, P. W. ANDERSON, D. C. LICCIARDELLO & T. V. RAMAKRISHNAN; «Scaling Theory of Localization : Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions»; *Physical Review Letters* **42**, p. 673–676 (1979). 102, 132
- [142] P. W. ANDERSON, D. J. THOULESS, E. ABRAHAMS & D. S. FISHER; «New method for a scaling theory of localization»; *Physical Review B* **22**, p. 3519–3526 (1980). 102
- [143] M. P. SÖRENSEN & T. SCHNEIDER; «Level-spacing statistics for the Anderson model in one and two dimensions»; *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **82**, p. 115–119 (1991). 103
- [144] P. RIBEIRO; «Private Communication»; . 113, 181

- [145] A. GERALDI, S. DE, A. LANEVE, S. BARKHOFEN, J. SPERLING, P. MATALONI & C. SILBERHORN; «Transient subdiffusion via disordered quantum walks»; *Physical Review Research* **3** (2021). 114
- [146] B. DANACI, İ. YALÇINKAYA, B. ÇAKMAK, G. KARPAT, S. P. KELLY & A. L. SUBAŞI; «Disorder-free localization in quantum walks»; *Physical Review A* **103** (2021). 114
- [147] S. ALEXANDER, J. BERNASCONI, W. R. SCHNEIDER & R. ORBACH; «Excitation dynamics in random one-dimensional systems»; *Reviews of Modern Physics* **53**, p. 175–198 (1981). 114, 115
- [148] J. BOUCHAUD, A. COMTET, A. GEORGES & P. L. DOUSSAL; «Anomalous diffusion in random media of any dimensionality»; *Journal de Physique* **48**, p. 1445–1450 (1987). 114
- [149] A. AHLBRECHT, A. ALBERTI, D. MESCHEDE, V. B. SCHOLZ, A. H. WERNER & R. F. WERNER; «Bound Molecules in an Interacting Quantum Walk»; [1105.1051v1](https://arxiv.org/abs/1105.1051v1). 122
- [150] S. D. BERRY & J. B. WANG; «Two-particle quantum walks : Entanglement and graph isomorphism testing»; *Physical Review A* **83** (2011). 122, 125
- [151] A. BISIO, G. D’ARIANO, N. MOSCO, P. PERINOTTI & A. TOSINI; «Solutions of a Two-Particle Interacting Quantum Walk»; *Entropy* **20**, p. 435 (2018). 122
- [152] A. VERGA & R. G. ELIAS; «Entanglement and interaction in a topological quantum walk»; *SciPost Physics* **5** (2018). 122, 125
- [153] A. D. VERGA; «Interacting quantum walk on a graph»; *Physical Review E* **99** (2019). 122
- [154] L. A. TOIKKA; «Disorder-induced two-body localized state in interacting quantum walks»; *Physical Review B* **101** (2020). 122, 125, 131, 133
- [155] M. MALISHAVA, I. VAKULCHYK, M. FISTUL & S. FLACH; «Floquet Anderson localization of two interacting discrete time quantum walks»; *Physical Review B* **101** (2020). 122
- [156] J. VON NEUMANN; *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* (Princeton University Press) (1955). 124
- [157] I. CARNEIRO, M. LOO, X. XU, M. GIRERD, V. KENDON & P. L. KNIGHT; «Entanglement in coined quantum walks on regular graphs»; *New Journal of Physics* **7**, p. 156–156 (2005). 124
- [158] O. MALOYER & V. KENDON; «Decoherence versus entanglement in coined quantum walks»; *New Journal of Physics* **9**, p. 87–87 (2007). 124
- [159] C. LIU & N. PETULANTE; «On the von Neumann entropy of certain quantum walks subject to decoherence»; *Mathematical Structures in Computer Science* **20**, p. 1099–1115 (2010). 124
- [160] M. ANNABESTANI, M. R. ABOLHASANI & G. ABAL; «Asymptotic entanglement in 2D quantum walks»; *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **43**, p. 075 301 (2010). 124
- [161] Y. OMAR, N. PAUNKOVIĆ, L. SHERIDAN & S. BOSE; «Quantum walk on a line with two entangled particles»; *Physical Review A* **74** (2006). 125

- [162] H. PERRIN, J. K. ASBÓTH, J.-N. FUCHS & R. MOSSERI; «Two particles on a chain with disordered interaction : Localization and dissociation of bound states and mapping to chaotic billiards»; <https://arxiv.org/pdf/2106.09603.pdf>; 2106.09603v1. 131
- [163] M. C. GUTZWILLER; «Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals»; *Physical Review Letters* **10**, p. 159–162 (1963). 131
- [164] J. KANAMORI; «Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals»; *Progress of Theoretical Physics* **30**, p. 275–289 (1963). 131
- [165] J. HUBBARD; «Electron correlations in narrow energy bands»; *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **276**, p. 238–257 (1963). 131
- [166] E. H. LIEB & F. Y. WU; «Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension»; *Physical Review Letters* **20**, p. 1445–1448 (1968). 131, 192
- [167] M. GREINER, O. MANDEL, T. ESSLINGER, T. W. HÄNSCH & I. BLOCH; «Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms»; *Nature* **415**, p. 39–44 (2002). 131
- [168] R. JÖRDENS, N. STROHMAIER, K. GÜNTER, H. MORITZ & T. ESSLINGER; «A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice»; *Nature* **455**, p. 204–207 (2008). 131
- [169] S. WILL, T. BEST, U. SCHNEIDER, L. HACKERMÜLLER, D.-S. LÜHMANN & I. BLOCH; «Time-resolved observation of coherent multi-body interactions in quantum phase revivals»; *Nature* **465**, p. 197–201 (2010). 131
- [170] M. CAFFAREL & R. MOSSERI; «Hubbard model on d-dimensional hypercubes : Exact solution for the two-electron case»; *Physical Review B* **57**, p. R12 651–R12 654 (1998). 132, 135, 136, 192
- [171] K. WINKLER, G. THALHAMMER, F. LANG, R. GRIMM, J. H. DENSCHLAG, A. J. DALEY, A. KANTIAN, H. P. BÜCHLER & P. ZOLLER; «Repulsively bound atom pairs in an optical lattice»; *Nature* **441**, p. 853–856 (2006). 132, 136
- [172] E. T. GOODWIN; «Electronic states at the surfaces of crystals»; *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **35**, p. 221–231 (1939). 132, 135
- [173] F. FORSTMANN; «The concepts of surface states»; *Progress in Surface Science* **42**, p. 21–31 (1993). 132, 135
- [174] G. F. KOSTER & J. C. SLATER; «Wave Functions for Impurity Levels»; *Physical Review* **95**, p. 1167–1176 (1954). 132, 135
- [175] R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON & M. SANDS; *The Feynman lectures on Physics Vol. III, chapitre 13 : Propagation in crystal lattice* (The New Millennium Edition) (1974). [https://www.feynmanlectures.caltech.edu/III\\_13.html](https://www.feynmanlectures.caltech.edu/III_13.html). 132, 135
- [176] M. C. GUTZWILLER; *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer Science+Business Media, LLC) (1990). 133, 141
- [177] E. J. HELLER & S. TOMSOVIC; «Postmodern Quantum Mechanics»; *Physics Today* **46**, p. 38–46 (1993). 133

- [178] N. PAVLOFF & M. S. HANSEN ; «Effects of surface roughness on the electronic structure of metallic clusters» ; *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters* **24**, p. 57–63 (1992). 133
- [179] E. CUEVAS, E. LOUIS & J. A. VERGÉS ; «Model of Quantum Chaotic Billiards : Spectral Statistics and Wave Functions in Two Dimensions» ; *Physical Review Letters* **77**, p. 1970–1973 (1996). 133, 137, 138, 140, 141, 143, 191
- [180] F. LIBISCH, C. STAMPFER & J. BURGDÖRFER ; «Graphene quantum dots : Beyond a Dirac billiard» ; *Physical Review B* **79** (2009). 133
- [181] M. WIMMER, A. R. AKHMEROV & F. GUINEA ; «Robustness of edge states in graphene quantum dots» ; *Physical Review B* **82** (2010). 133
- [182] M. D. LIBERTO, A. RECATI, I. CARUSOTTO & C. MENOTTI ; «Two-body physics in the Su-Schrieffer-Heeger model» ; *Physical Review A* **94** (2016). 133, 158
- [183] F. WEGNER ; «Inverse participation ratio in  $2 + \varepsilon$  dimensions» ; *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter and Quanta* **36**, p. 209–214 (1980). 138
- [184] L. KAPLAN ; «Scars in quantum chaotic wavefunctions» ; *Nonlinearity* **12**, p. R1–R40 (1999). 141, 157, 189
- [185] P. O’CONNOR, J. GEHLEN & E. J. HELLER ; «Properties of random superpositions of plane waves» ; *Physical Review Letters* **58**, p. 1296–1299 (1987). 141
- [186] M. BERRY ; *Semiclassical Mechanics of regular and irregular motion’ in Les Houches Lecture Series Session XXXVI* (North Holland, Amsterdam) (1983). 141
- [187] E. J. HELLER ; «Bound-State Eigenfunctions of Classically Chaotic Hamiltonian Systems : Scars of Periodic Orbits» ; *Physical Review Letters* **53**, p. 1515–1518 (1984). 141, 157
- [188] A. GEORGES ; «The beauty of impurities : Two revivals of Friedel’s virtual bound-state concept» ; *Comptes Rendus Physique* **17**, p. 430–446 (2016). 141
- [189] E. AKKERMANS & G. MONTAMBAUX ; *Mesoscopic Physics of Electrons and Photons* (Cambridge University Press) (2007). 142
- [190] M. V. BERRY & M. TABOR ; «Level clustering in the regular spectrum» ; *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **356**, p. 375–394 (1977). 142, 145
- [191] I. LIFSHITZ ; «The energy spectrum of disordered systems» ; *Advances in Physics* **13**, p. 483–536 (1964). 145, 147
- [192] C. CHIN, R. GRIMM, P. JULIENNE & E. TIESINGA ; «Feshbach resonances in ultracold gases» ; *Reviews of Modern Physics* **82**, p. 1225–1286 (2010). 158
- [193] K. ENOMOTO, K. KASA, M. KITAGAWA & Y. TAKAHASHI ; «Optical Feshbach Resonance Using the Intercombination Transition» ; *Physical Review Letters* **101** (2008). 158
- [194] S. MUKHERJEE, M. VALIENTE, N. GOLDMAN, A. SPRACKLEN, E. ANDERSSON, P. ÖHBERG & R. R. THOMSON ; «Observation of pair tunneling and coherent destruction of tunneling in arrays of optical waveguides» ; *Physical Review A* **94** (2016). 158
- [195] M. MOSKALETS & M. BÜTTIKER ; «Floquet scattering theory of quantum pumps» ; *Physical Review B* **66** (2002). 160

- [196] J. ATTEIA; *Topologie et transport électronique dans des systèmes de Dirac sous irradiation*; Thèse de doctorat; Université de Bordeaux, LOMA - Laboratoire Ondes et Matière d'Aquitaine (2018). <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-02426217>. 160
- [197] T. OHTSUKI & T. KAWARABAYASHI; «Anomalous Diffusion at the Anderson Transitions»; *Journal of the Physical Society of Japan* **66**, p. 314–317 (1997). 161
- [198] P. ARRIGHI, G. D. MOLFETTA, I. MÁRQUEZ-MARTÍN & A. PÉREZ; «Dirac equation as a quantum walk over the honeycomb and triangular lattices»; *Physical Review A* **97** (2018). 161
- [199] G. JAY, F. DEBBASCH & J. B. WANG; «Dirac quantum walks on triangular and honeycomb lattices»; *Physical Review A* **99** (2019). 161
- [200] B. F. VENANCIO, F. M. ANDRADE & M. G. E. DA LUZ; «Unveiling and exemplifying the unitary equivalence of discrete time quantum walk models»; *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **46**, p. 165302 (2013). 161





---

**Sujet : Marches quantiques sous champ magnétique  
et cages d’Aharonov-Bohm**

---

**Résumé :** Les marches quantiques à temps discret (MQTD) sont une généralisation quantique des marches aléatoires classiques. À deux dimensions d’espace et sous un champ magnétique transverse, le tracé des quasi-énergies d’une MQTD en fonction du flux magnétique donne un papillon de Floquet-Hofstadter, qui est le diagramme de phase d’un isolant topologique. Pour indexer ses gaps, un nouvel invariant topologique (appelé RLBL) doit être défini qui tient compte de la périodicité des quasi-énergies. Pour certains réseaux (chaîne de boucles, pavage  $T_3$ ), la MQTD présente également des cages d’Aharonov-Bohm qui correspondent à une localisation extrême du marcheur en raison d’une interférence magnétique destructive. Ces cages nécessitent des dés spécifiques mais présentent une dynamique plus riche que celle des modèles de liaisons fortes. L’extension spatiale des cages peut être contrôlée. L’introduction de perturbations, telles que du désordre statique ou dynamique sur les dés ou des interactions, conduit à briser ces cages et induit des comportements différents: localisation exponentielle, diffusion, diffusion anormale ou encore propagation balistique. Enfin, un dernier chapitre est consacré à l’étude du modèle de Hubbard à deux corps sur une chaîne avec une interaction désordonnée. En raison du désordre, les états moléculaires peuvent se localiser d’Anderson ou se dissocier par hybridation avec une bande atomique. Les états atomiques présentent des signatures du “chaos quantique”. Nous trouvons également des états qui sont localisés le long d’une seule direction que l’on nomme “états séparatrices” et qui n’ont pas d’équivalent dans les billards quantiques usuels.

**Mots clés :** Marches quantiques, papillon de Hofstadter, désordre, cages d’Aharonov-Bohm

---

**Subject : Quantum walks under magnetic field  
and Aharonov-Bohm cages**

---

**Abstract:** Discrete time quantum walks (DTQW) are a quantum generalization of classical random walks. In two space dimensions and under a transverse magnetic field, the plot of the quasi-energies of a DTQW as a function of the magnetic flux gives a Floquet-Hofstadter butterfly, which is the phase diagram of a topological insulator. To index its gaps, a new topological invariant (called RLBL) must be defined which takes into account the periodicity of the quasi-energies. For some lattices (diamond chain,  $T_3$  tiling), the DTQW also presents Aharonov-Bohm cages which correspond to an extreme location of the walker due to a destructive magnetic interference. These cages require specific dice but exhibit richer dynamics than the tight-binding models. The spatial extension of the cages can be controlled. The introduction of perturbations, such as static or dynamic disorder on the dice or interactions, leads to the breaking of these cages and induces different behaviors: exponential localization, diffusion, anomalous diffusion or ballistic propagation. Eventually a last chapter is devoted to the study of the Hubbard two-body model on a chain with a disordered interaction. Due to disorder, molecular states can be Anderson localised or dissociate by hybridization with the atomic band. Atomic states exhibit signatures of “quantum chaos”. We also find states that are localized along a single direction that are called “separatrix states” and that have no equivalent in the usual quantum billiards.

**Keywords :** Quantum walks, Hofstadter butterfly, disorder, Aharonov-Bohm cages