



HAL
open science

Les réseaux quantiques non-linéaires

Vincent J.C. Pouthier

► **To cite this version:**

Vincent J.C. Pouthier. Les réseaux quantiques non-linéaires. DEA. réseaux quantiques non-linéaires, Université de Franche-Comté Besançon, 2013, pp.95. cel-00921418

HAL Id: cel-00921418

<https://cel.hal.science/cel-00921418>

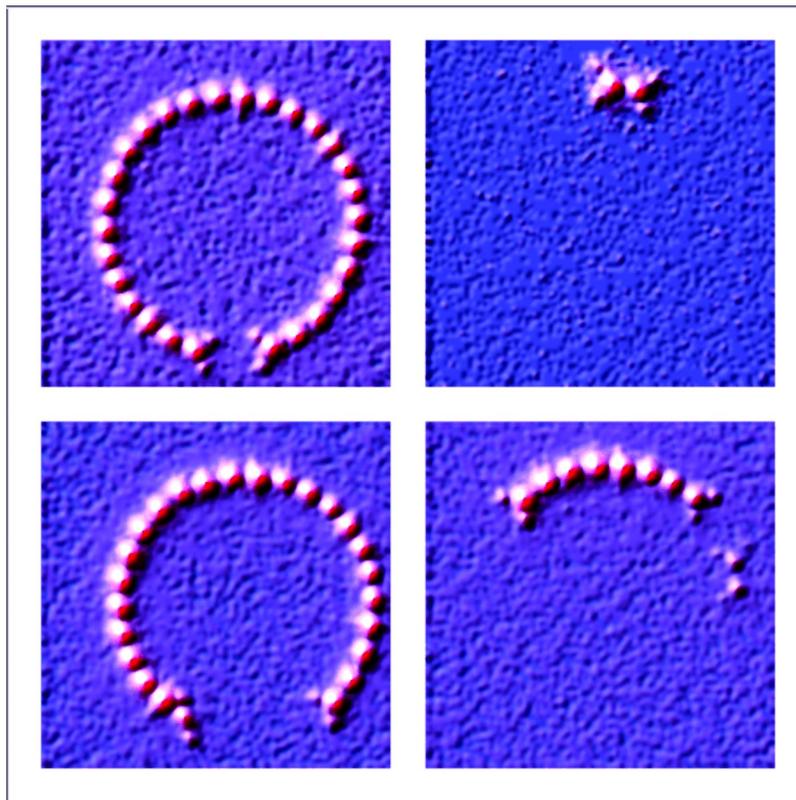
Submitted on 20 Dec 2013

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.



RÉSEAUX QUANTIQUES NON LINÉAIRES



Vincent Pouthier

Institut UTINAM-UMR 6213 CNRS
UFR des Sciences et Techniques, Besançon

Table des matières

1	Introduction	7
2	Le modèle de Hubbard pour Bosons	11
2.1	Vibrations internes collectives d'un réseau moléculaire	12
2.1.1	Description du modèle	12
2.1.2	Approximation harmonique : notion de bosons libres	13
2.1.3	Effet anharmonique : interaction entre bosons	16
2.1.4	Modèle de Hubbard pour bosons	18
2.2	Quelques exemples de modèles de Hubbard pour bosons	19
2.2.1	Condensats de Bose-Einstein sur réseaux optiques	19
2.2.2	Modèle de Holstein	20
2.3	Exercices	23
2.3.1	Oscillateur anharmonique	23
2.3.2	Approximation des ondes tournantes	23
2.3.3	Hamiltonien de Hubbard dans la base des ondes planes	24
2.3.4	Magnons dans les chaînes de spins	24
3	Dynamique classique	27
3.1	Equation non linéaire de Schrödinger	27
3.1.1	Principe de correspondance	27

3.1.2	Equation non linéaire de Schrödinger	30
3.2	Approximation continue : le soliton	30
3.3	Phénomène d'auto-piégeage sur réseau	32
3.3.1	Le problème du dimère non linéaire	33
3.3.2	Auto-localisation dans un réseau 1D	35
3.4	Exercices	38
3.4.1	Equations de Heisenberg	38
3.4.2	Le modèle d'Holstein adiabatique	38
3.4.3	Equation non linéaire de Schrödinger	39
3.4.4	Le dimère	40
3.4.5	Approximation de Hartree	40
4	Etats liés à deux bosons	43
4.1	Le modèle de Hubbard	43
4.2	Méthode des états nombres	44
4.2.1	Conservation du nombre de Bosons	44
4.2.2	Invariance translationnelle	45
4.3	États à un boson	45
4.4	États à deux bosons	47
4.4.1	Equation de Schrödinger	47
4.4.2	Etats à deux bosons libres	50
4.4.3	Etats à deux bosons liés	51
4.4.4	Spectre du modèle de Hubbard	52
4.5	Conclusion	53
4.6	Exercices	54

4.6.1	Loi de conservation	54
4.6.2	Invariance par translation	54
4.6.3	Fonction d'onde d'un état lié	54
4.6.4	Auto-piégeage partiel	54
4.6.5	Fonction de corrélation de la densité	55
4.6.6	Réseau équivalent	56
4.6.7	Etats liés : développement dans la base non symétrisée	56
5	Etats liés à v bosons : une approche approximative	59
5.1	Le modèle du réseau équivalent	59
5.1.1	Position du problème	59
5.1.2	Observations numériques	61
5.1.3	Représentation de H dans \mathcal{E}'_v	62
5.2	Etats à v bosons	63
5.2.1	Approche numérique	63
5.2.2	Théorie des perturbations	63
5.3	Résultats numériques	67
5.4	Exercices	70
5.4.1	Etats liés à 2 bosons	70
5.4.2	Auto-piégeage sur le dimère quantique	70
5.4.3	Localisation dans un réseau semi-infini	72
A	Introduction à la seconde quantification	75
A.1	Comment fonctionne la première quantification	76
A.2	Comment fonctionne la seconde quantification	77
A.3	Généralisation à un ensemble de bosons indiscernables	78

B	Phénomène de localisation	81
C	Etats cohérents de bosons	83
C.1	Définition	83
C.2	Génération d'un état cohérent	83
C.3	Action de b et b^\dagger	84
C.4	Produit scalaire et relation de fermeture	84
C.5	Représentation d'un opérateur	85
D	Intégrale de Chemin	87
D.1	Intégrale de chemin et états cohérents	88
D.2	Principe de moindre action et limite quasi-classique	89
E	Etats à deux bosons : procédure exacte	91

Chapitre 1

Introduction

Par définition, à l'échelle microscopique, la matière apparaît discrète puisqu'elle est constituée d'entités élémentaires atomiques ou moléculaires. De plus, les lois qui gouvernent sa dynamique possèdent généralement un caractère fortement non linéaire, l'hypothèse de linéarité ayant bien souvent été introduite dans un souci de simplification. Par conséquent, c'est tout naturellement qu'une recherche très active s'est développée durant ces vingt dernières années autour de l'étude des propriétés des réseaux non linéaires [1, 2, 3, 4].

Dans ce contexte, il a été montré que la superposition des effets non linéaires et de la nature discrète de la matière est à l'origine de l'apparition de solutions spécifiques appelées modes localisés intrinsèques [5, 6, 7, 8]. Dans un réseau anharmonique et invariant par translation, les modes localisés intrinsèques correspondent à des solutions génériques périodiques en temps et localisées dans l'espace. Leur existence et leur stabilité ne requièrent pas que la dynamique du réseau soit intégrable ce qui en fait des solutions générales et robustes. Puisque les modes localisés intrinsèques engendrent une accumulation locale de l'énergie, ils sont supposés jouer un rôle fondamental dans les propriétés de stockage énergétique dans les réseaux. Ils sont à l'origine d'un phénomène remarquable appelé auto-piégeage : l'excitation initiale d'un site du réseau n'entraîne pas la propagation de l'énergie qui reste piégée à l'endroit où elle a été déposée [9]. L'exemple typique du phénomène d'auto-localisation est celui décrit par l'équation non linéaire de Schrödinger discrète (DNLS) sur réseau. Cette équation possède un caractère relativement universel puisqu'elle permet de décrire une multitude de situations physiques telles que le transport d'énergie dans les protéines [11], la propagation de pulses lumineux dans les réseaux de fibres optiques [12, 13] ou la dynamique du grand polaron dans le système électron-phonon [14, 15]. Tous ces systèmes sont donc sujets au phénomène d'auto-localisation de l'énergie. De plus, selon les conditions, les modes localisés peuvent se propager le long du réseau donnant ainsi naissance à un soliton discret. Le soliton représente un paquet d'ondes solitaire insensible à la dispersion capable de se propager sans se déformer. De tels objets non linéaires pourraient alors jouer un rôle clé dans les phénomènes de transport de l'énergie, de la charge et de l'information à l'échelle nanoscopique.

Maintenant que l'apparition de modes localisés intrinsèques est un phénomène bien connu, une attention toute particulière est portée sur la caractérisation de l'équivalent quantique

du phénomène d'auto-piégeage sur lequel on ne sait finalement que peu de chose [10]. Parmi les études quantiques, beaucoup sont basées sur l'analyse de l'Hamiltonien de Hubbard pour Bosons qui apparaît comme le pendant quantique d'une dynamique classique décrite par l'équation non linéaire de Schrödinger. Ce type d'Hamiltonien joue un rôle fondamental en physique puisqu'il permet de caractériser la dynamique d'une multitude de systèmes et en particulier celle des condensats d'atomes froids (condensat de Bose-Einstein -BEC) piégés sur des réseaux optiques [16, 17, 18]. Le domaine des atomes froids est un champ de recherche dynamique, dont l'activité a été dopée par l'observation en 1995 de la condensation de Bose-Einstein en phase gazeuse. Ce phénomène se produit dans un gaz d'atomes bosoniques à très basse température, où on constate que les atomes occupent tous le même état quantique, formant ainsi une *onde de matière macroscopique*. Le succès de ce domaine tient largement au fait qu'il permet d'aborder des problèmes fondamentaux de la mécanique quantique et de la physique de la matière condensée dans des systèmes très bien caractérisés expérimentalement, et avec les techniques de précision de la physique atomique et de l'optique quantique. Si les expériences se sont d'abord attachées à caractériser leurs propriétés, les BEC sont maintenant considérés comme des *simulateurs quantiques analogiques* permettant d'aborder des problèmes plus généraux. Dans ce contexte, des bosons en interaction confinés dans un réseau optique constituent une réalisation presque idéale d'un modèle de Hubbard et offrent donc la possibilité d'étudier la dynamique quantique non linéaire avec l'avantage d'un contrôle très précis des paramètres décrivant cette dynamique.

Dans ce contexte, la non linéarité des propriétés dynamiques d'un réseau ou d'un gaz de bosons sur réseau soulève une question fondamentale de la mécanique quantique. Des objets tels que les solitons ou les modes localisés intrinsèques peuvent-ils émerger d'une théorie quantique? En effet, d'un point de vue classique, la non linéarité est à l'origine d'objets non linéaires qui permettent la localisation de l'énergie sur un réseau invariant par translation. Cependant, dans un système quantique une telle propriété semble impossible. Le théorème de Bloch s'applique et énonce que les vecteurs propres sont des ondes planes si bien que des phénomènes de dispersion doivent apparaître. La seule possibilité pour obtenir une localisation consiste à briser l'invariance par translation comme dans le cas des systèmes possédant des défauts, des systèmes de taille finie ou encore des systèmes désordonnés. Ainsi, puisque que la mécanique classique est une limite de la mécanique quantique, on peut se demander quelle est l'origine quantique des objets non linéaires présents dans une théorie classique.

Le but de ces quelques notes est d'apporter certains éléments de réponse à cette question à travers l'étude d'un modèle générique, le modèle de Hubbard pour Bosons. Après avoir présenté le modèle sur l'exemple d'une chaîne d'oscillateurs anharmoniques, nous nous attacherons à décrire ces propriétés classiques pour introduire les notions de solitons et de modes localisés intrinsèques. Nous appréhenderons ensuite son étude quantique de manière à définir le concept d'états liés, sortes d'analogues quantiques du soliton, qui émergent de la combinaison de la mécanique quantique et de la non linéarité.

Bibliographie

- [1] C. Falvo, *Dynamique vibrationnelle multi-quanta dans les réseaux quantiques non linéaires : polarons et bi-polarons dans les bio-polymères et les nanostructures moléculaires*, (Thèse, Besançon , 2006).
- [2] *Order and Chaos in Nonlinear Physical Systems*, Edited by S. Lundqvist, N.H. March and M.P. Tosi (Plenum press, New York, 1988).
- [3] A. Scott, *Nonlinear Science - Emergence and dynamics of Coherent structures* (Oxford University Press, New York, 1999).
- [4] *Energy Localization and Transfer*, Edited by T. Dauxois, A. Litvak-Hinenzon, R. MacKay and A. Spanoudaki (World Scientific, Singapore 2004).
- [5] A. J. Sievers, S. Takeno, Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988).
- [6] S. Aubry, Physica D **103**, 201 (1997).
- [7] S. Flach and C.R. Willis, Phys. Rep. **295**, 181 (1998).
- [8] R.S. MacKay, Physica A **288**, 174 (2000).
- [9] J.C. Eilbeck, P.S. Lomdahl, A.C. Scott, Physica D **16**, 318 (1985).
- [10] V. Fleurov, Chaos **13**, 676 (2003).
- [11] A. S. Davydov and N. I. Kisluka, Phys. Status Solidi **59**, 465 (1973); Zh. Eksp. Teor. Fiz **71**, 1090 (1976) [Sov. Phys. JETP **44**, 571 (1976)].
- [12] R. Morandotti, U. Peschel, J.S. Aitchison, H.S. Eisenberg and Y. Silberberg, Phys. Rev. Lett. **83**, 2726 (1999).
- [13] S. F. Mingaleev, Y. S. Kivshar, and R. A. Sammut, Phys. Rev. E **62**, 5777 (2000).
- [14] D.W. Brown and Z. Ivic, Phys. Rev. B **40**, 9876 (1989).
- [15] Z. Ivic, D. Kostic, Z. Przulj, and D. Kapor, J. Phys. : Condens. Matter **9**, 413 (1997).
- [16] G. Kalosakas and A.R. Bishop, Phys. Rev. A **65** 043616 (2002).
- [17] G. Kalosakas, A.R. Bishop, and V.M. Kenkre, Phys. Rev. A **68** 023602 (2003).
- [18] G. Kalosakas, A.R. Bishop, and V.M. Kenkre, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **36** 3233 (2003).

Chapitre 2

Le modèle de Hubbard pour Bosons

A l'origine, le modèle de Hubbard fut introduit en théorie de la matière condensée pour décrire des électrons sur un réseau qui interagissent uniquement lorsqu'ils se trouvent sur le même site. Ce modèle a été défini en 1963 presque simultanément par John Hubbard, Martin C. Gutzwiller et Junjiro Kanamori. Il est parfois appelé le modèle de Hubbard-Gutzwiller-Kanamori pour cette raison. Cependant, dans sa théorie du super échange dans les isolants anti-ferromagnétiques, P. W. Anderson avait déjà utilisé des approximations consistant à négliger la répulsion des électrons ne se trouvant pas sur le même site. Ces approximations sont analogues à celle utilisées dans la construction du modèle de Hubbard, et on pourrait argumenter que le modèle devrait s'appeler modèle de Hubbard-Gutzwiller-Kanamori-Anderson.

Le choix d'une interaction de très courte portée (alors que la répulsion coulombienne entre électrons est à longue portée) est une façon approchée de prendre en compte les effets d'écrantage dus aux électrons des couches internes des atomes, qui ont pour effet de réduire la portée des interactions effectives entre les électrons. Il est remarquable que même avec une interaction aussi simplifiée, le modèle de Hubbard possède un diagramme de phase très riche. L'étude de ce modèle, ou de modèles reliés, constitue de ce fait une branche importante de la théorie de la matière condensée. Les aspects les plus importants du modèle de Hubbard sont la possibilité de décrire une transition de phase entre un état métallique et un état isolant sous l'effet d'un dopage ou d'une pression, la possibilité d'obtenir des phases ferromagnétiques (Effet Nagaoka ou modèles de Hubbard avec bandes plates), et l'existence de phases anti-ferromagnétiques itinérantes ou localisées.

Dans le même esprit, le modèle de Hubbard pour bosons fournit une description des propriétés physiques d'un ensemble de bosons en interaction sur un réseau. Ce modèle, ou des versions approchées, se retrouve dans une multitude de situations physiques : atomes froids en interaction sur un réseau optique, phonons optiques haute fréquence dans les réseaux anharmoniques, excitations magnétiques dans les chaînes de spins ...etc. Nous allons ici l'introduire simplement en considérant le problème de la chaîne d'oscillateurs anharmoniques, problème qui permet l'étude de la dynamique des vibrations internes collectives d'un réseau moléculaire. Une approche plus générale de la dynamique d'un ensemble de bosons est détaillée dans l'annexe A qui présente une introduction à la seconde quantification.

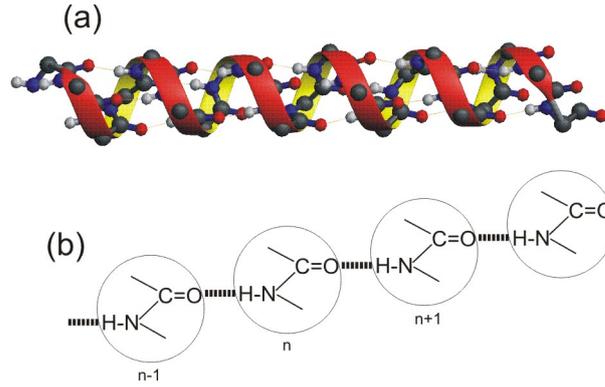


FIGURE 2.1 – Exemple de vibrations internes collectives dans une hélice- α qui présente une structure quasi-périodique le long de laquelle sont distribuées des unités peptidiques H-N-C=O reliées les unes aux autres par des liaisons hydrogène. (a) Représentation 3D d’une hélice- α . (b) Sous réseau particulier d’unités peptidiques connectées par les liaisons hydrogène.

2.1 Vibrations internes collectives d’un réseau moléculaire

2.1.1 Description du modèle

On considère un réseau moléculaire 1D invariant par translation, muni de conditions aux limites périodiques et formé de N sites $n = 1, \dots, N$ régulièrement distribués. Chaque site n est occupé par un groupement moléculaire qui possède un mode de vibration interne spécifique. Au niveau du site n , ce mode interne rend compte de la dynamique d’une coordonnée normale de vibration Q_n qui désigne le déplacement du mode autour de sa position d’équilibre ($Q_n = 0$). Cette dynamique est gouvernée par un potentiel intramoléculaire $V(Q_n)$ dont le minimum définit l’équilibre. L’énergie cinétique du n -ième mode de vibration est donnée par $P_n^2/2m$ où P_n désigne le moment conjugué à la coordonnée Q_n et où m est la masse réduite du n -ième groupement moléculaire (Voir Fig. 2.1 : dans une hélice- α , les groupements C=O sont distribués régulièrement. L’étirement de chaque liaison C=O caractérise un mode normal de vibration de haute fréquence appelé amide-I).

Dans un réseau moléculaire, la cohésion est assurée par un ensemble d’interactions entre les différents constituants du système. Ces interactions favorisent un couplage dynamique entre modes voisins, si bien que la coordonnée Q_n sera corrélée aux coordonnées voisines Q_m . Pour simplifier la discussion, nous supposons que cette interaction provient des couplages dipôle-dipôle entre les constituants du réseau. L’énergie potentielle d’interaction entre deux modes internes plus proches voisins Q_n et Q_{n+1} sera donc de la forme WQ_nQ_{n+1} , W étant une constante de couplage inversement proportionnelle au cube de la distance entre deux groupements voisins.

Dans ces conditions, la dynamique de l’ensemble des modes internes couplés est gouvernée

par l'Hamiltonien H défini par :

$$H = \sum_n \frac{P_n^2}{2m} + V(Q_n) + \sum_n W Q_n Q_{n+1} \quad (2.1)$$

Les positions Q_n et les impulsions P_n sont ici des opérateurs usuels qui respectent les relations de commutation canoniques (RCC) :

$$\begin{aligned} [Q_n, Q_m] &= 0 \\ [P_n, P_m] &= 0 \\ [Q_n, P_m] &= i\hbar\delta_{nm} \end{aligned} \quad (2.2)$$

2.1.2 Approximation harmonique : notion de bosons libres

L'approximation harmonique fait référence à une *dynamique linéaire*. Le potentiel intramoléculaire $V(Q_n)$, développé à l'ordre le plus bas autour de l'équilibre, montre une dépendance quadratique vis-à-vis de la coordonnée Q_n :

$$V(Q_n) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 Q_n^2 \quad (2.3)$$

où ω_0 est la pulsation de chaque vibration interne. Dès lors, l'Hamiltonien du réseau se réduit à celui d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques couplés :

$$H = \sum_n \frac{P_n^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 Q_n^2 + \sum_n W Q_n Q_{n+1} \quad (2.4)$$

Cette forme hamiltonienne suggère l'introduction des opérateurs création b_n^\dagger et annihilation b_n définis par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} Q_n &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}(b_n^\dagger + b_n) \\ P_n &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega_0}{2}}(b_n^\dagger - b_n) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Compte tenu des RCC, ces opérateurs vérifient les relations de commutation :

$$\begin{aligned} [b_n, b_m] &= 0 \\ [b_n^\dagger, b_m^\dagger] &= 0 \\ [b_n, b_m^\dagger] &= \delta_{nm} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Dès lors, après quelques manipulations, l'Hamiltonien H s'écrit :

$$H = \sum_n \hbar\omega_0 \left(b_n^\dagger b_n + \frac{1}{2} \right) + \sum_n \hbar\Phi (b_{n+1} + b_{n+1}^\dagger)(b_n + b_n^\dagger) \quad (2.7)$$

où $\Phi = W/2m\omega_0$ est une constante qui mesure la force du couplage latéral entre modes voisins.

Le premier terme de l'Hamiltonien H (Eq.(2.7)) décrit un ensemble d'oscillateurs harmoniques indépendants. Soit $h_n = \hbar\omega_0(b_n^\dagger b_n + 1/2)$ l'Hamiltonien du n -ième oscillateur. Les états propres de h_n sont les vecteurs propres $|v_n\rangle$ de l'opérateur nombre $b_n^\dagger b_n$ dont les valeurs propres sont les entiers positifs $v_n = 0, 1, 2, \dots$. Ces vecteurs propres, appelés états nombre $|0_n\rangle, |1_n\rangle, |2_n\rangle, \dots, |v_n\rangle, \dots$ sont associés aux énergies propres $\hbar\omega_0/2, 3\hbar\omega_0/2, 5\hbar\omega_0/2, \dots, (2v_n + 1)\hbar\omega_0/2, \dots$ etc. Ils forment une base qui sous-tend l'espace des états \mathcal{E}_n . On passe alors d'un état $|v_n\rangle$ à un état $|v_n \pm 1\rangle$ via l'action des opérateurs b_n^\dagger et b_n selon les relations usuelles :

$$\begin{aligned} b_n |v_n\rangle &= \sqrt{v_n} |v_n - 1\rangle \\ b_n^\dagger |v_n\rangle &= \sqrt{v_n + 1} |v_n + 1\rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

Selon le langage de la seconde quantification, h_n décrit un ensemble de bosons indépendants, un boson¹ étant la quasi-particule associée à un quantum d'énergie $\hbar\omega_0$. Plus précisément, l'état $|v_n\rangle$ correspond à la présence de v_n bosons indiscernables et indépendants localisés sur le n -ième site du réseau. L'opérateur b_n^\dagger crée un boson sur le site n alors que l'opérateur b_n détruit un boson sur ce même site n . Muni de l'état vide à zéro boson $|0_n\rangle$, l'espace des états \mathcal{E}_n est entièrement généré en appliquant l'opérateur de création b_n^\dagger :

$$|v_n\rangle = \frac{b_n^{\dagger v_n}}{\sqrt{v_n!}} |0_n\rangle \quad (2.9)$$

Le nombre de bosons n'étant ni fixé, ni limité, la dimension de l'espace des états est infinie.

Dans ce contexte, le premier terme de l'Hamiltonien H (Eq.(2.7)) décrit un ensemble de bosons localisés sur les différents sites du réseau. Les états correspondants sont des produits tensoriels entre les différents états nombre. Ils s'écrivent :

$$|v_1, v_2, \dots, v_N\rangle = |v_1\rangle \otimes |v_2\rangle \otimes \dots \otimes |v_N\rangle \quad (2.10)$$

où le vecteur $|v_1, v_2, \dots, v_N\rangle$ caractérise v_1 bosons sur le site 1, v_2 bosons sur le site 2 ... les bosons états indépendants. L'ensemble de ces vecteurs forment une base dite locale qui sous-tend l'espace des états de H noté \mathcal{E} .

Le second terme de l'Hamiltonien H (Eq.(2.7)) caractérise le couplage latéral entre les modes plus proches voisins. Par contre, il ne décrit pas une interaction entre bosons. Il rend compte du fait que les bosons ne sont pas immobiles mais sont capables de se délocaliser le long du réseau. Plus précisément, deux contributions apparaissent. Le mouvement des bosons est assuré par les termes dits résonants de la forme $\Phi(b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1})$. Par exemple, en agissant sur un état $|\dots, v_n, v_{n+1}, \dots\rangle$, le terme $\Phi b_{n+1}^\dagger b_n$ génère l'état $|\dots, v_n - 1, v_{n+1} + 1, \dots\rangle$. Un quantum d'énergie $\hbar\omega_0$ disparaît sur le site n alors qu'un quantum d'énergie $\hbar\omega_0$ apparaît sur le site $n + 1$. Tout se passe comme si un boson avait sauté du site n vers le site $n + 1$ sous l'action d'une constante de saut Φ .

Par contre, les termes dits non résonants de la forme $\Phi(b_n b_{n+1} + b_n^\dagger b_{n+1}^\dagger)$ décrivent soit la destruction, soit la création de deux bosons sur deux sites voisins. Ces termes ne conservent pas le nombre de bosons et ne rendent pas compte d'un déplacement. Bien qu'ils puissent être traités exactement en réalisant une transformation de Bogoliubov, ils peuvent être négligés

1. Dans le cas de vibrations internes couplées, le boson en question est appelé vibron.

lorsque l'énergie d'un boson $\hbar\omega_0$ est grande devant la constante de saut $\hbar\Phi$. On dit que l'on se trouve dans le cadre de l'approximation des ondes tournantes, approximation totalement licite pour des vibrations intramoléculaires sur réseau (Voir les exercices).

Dans ces conditions, l'Hamiltonien H qui gouverne la dynamique linéaire des vibrations internes collectives, décrit en fait un ensemble de bosons indépendants capables de se délocaliser librement le long du réseau. En supposant que le niveau fondamental définit l'origine des énergies, il se réécrit sous la forme simple suivante :

$$H = \sum_n \hbar\omega_0 b_n^\dagger b_n + \hbar\Phi(b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1}) \quad (2.11)$$

De par l'invariance translationnelle du réseau, la diagonalisation de H est obtenue en réalisant une transformation de Bloch. Pour cela, on introduit de nouveaux opérateurs bosons définis par :

$$\begin{aligned} b_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{-ikn} b_n \\ b_k^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{+ikn} b_n^\dagger \end{aligned} \quad (2.12)$$

où k est un vecteur d'onde réduit qui prend N valeurs dans la première zone de Brillouin (par exemple, pour N impair, on peut poser $k = 2\pi p/N$ avec $p = -(N-1)/2, \dots, (N-1)/2$). A partir des relations de commutation Eq.(2.6), les nouveaux opérateurs vérifient :

$$\begin{aligned} [b_k, b_{k'}] &= 0 \\ [b_k^\dagger, b_{k'}^\dagger] &= 0 \\ [b_k, b_{k'}^\dagger] &= \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (2.13)$$

En réalisant la transformation de Bloch, l'hamiltonien H s'écrit finalement :

$$H = \sum_k \hbar\omega_k b_k^\dagger b_k \quad (2.14)$$

avec

$$\omega_k = \omega_0 + 2\Phi \cos(k) \quad (2.15)$$

L'Hamiltonien H s'exprime donc comme la somme des Hamiltoniens de N oscillateurs harmoniques découplés. Il fait alors référence à un ensemble de Bosons libres et indépendants qui sont totalement délocalisés le long des site du réseau. Plus précisément, les états propres du k -ième oscillateur sont des états nombre $|0_k\rangle, |1_k\rangle, \dots, |v_k\rangle, \dots$, d'énergie $0, \hbar\omega_k, \dots, v_k\hbar\omega_k, \dots$. Les états nombres forment une base qui sous-tend l'espace des états \mathcal{E}_k . L'état $|v_k\rangle$ est vecteur propre de l'opérateur nombre $b_k^\dagger b_k$ dont la valeur propre est un entier positif et on passe d'un état $|v_k\rangle$ à un état $|v_k \pm 1\rangle$ via l'action des opérateurs b_k^\dagger et b_k .

L'état $|v_k\rangle$ correspond à la présence de v_k bosons indiscernables et indépendants d'énergie $\hbar\omega_k$ et de quasi-impulsion $\hbar k$. Les énergies permises forment une bande de largeur 4Φ centrée sur ω_0 et, à la différence de l'impulsion d'une particule réelle, la quasi-impulsion d'un boson est bornée puisque le vecteur d'onde k est contenu dans la première zone de Brillouin. Ainsi les opérateurs b_k^\dagger et b_k décrivent respectivement la création et l'annihilation d'un boson de

vecteur d'onde k , alors que les opérateurs b_n^\dagger et b_n représentaient la création et l'annihilation d'un boson localisé sur le site n .

Dans ce contexte, les états propres de H sont des produits tensoriels d'états nombre :

$$|v_{k_1}, v_{k_2}, v_{k_3}, \dots\rangle = |v_{k_1}\rangle \otimes |v_{k_2}\rangle \otimes |v_{k_3}\rangle \dots \quad (2.16)$$

Un vecteur $|v_{k_1}, v_{k_2}, v_{k_3}, \dots\rangle$ caractérise v_{k_1} bosons de vecteur d'onde k_1 , v_{k_2} bosons de vecteur d'onde k_2 ... les bosons états indépendants. Ces vecteurs forment une base dite étendue qui sous-tend l'espace des états \mathcal{E} . Le nombre de bosons n'étant ni fixé, ni limité, la dimension de l'espace des états est infinie. L'énergie et l'impulsion d'un tel état sont alors la somme des énergies et des impulsions de l'ensemble des bosons excités :

$$\begin{aligned} E_{v_{k_1}, v_{k_2}, v_{k_3}, \dots} &= \sum_k v_k \hbar \omega_k \\ P_{v_{k_1}, v_{k_2}, v_{k_3}, \dots} &= \sum_k v_k \hbar k \end{aligned} \quad (2.17)$$

2.1.3 Effet anharmonique : interaction entre bosons

Le formalisme précédent, bien que relativement simple, est à l'origine du traitement quantique des excitations collectives de la matière condensée et du champ électromagnétique, les bosons en questions s'appelant phonons, vibrons, plasmons, magnons ou photons. Mais celui-ci repose sur l'approximation harmonique qui conduit à des équations du mouvement classiques linéaires. Que se passe-t-il lorsque l'on tient compte de la non linéarité de la dynamique, c'est-à-dire de l'anharmonicité du potentiel ? Pour appréhender ce problème, nous allons considérer le modèle de l'oscillateur anharmonique pour lequel le potentiel intramoléculaire s'écrit² :

$$V(Q) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 Q^2 + \frac{1}{3!} \lambda_3 Q^3 + \frac{1}{4!} \lambda_4 Q^4 \quad (2.18)$$

où λ_3 et λ_4 définissent les anharmonicités cubiques et quartiques. Dès lors, en introduisant les opérateurs création et annihilation, l'Hamiltonien de la vibration interne devient :

$$h = \hbar \omega_0 b^\dagger b + \hbar \gamma_3 (b^\dagger + b)^3 + \hbar \gamma_4 (b^\dagger + b)^4 \quad (2.19)$$

avec

$$\hbar \gamma_\mu = \mu! \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0} \right)^{\mu/2} \lambda_\mu \quad (2.20)$$

Pour traiter les effets anharmoniques, nous allons utiliser la théorie des perturbations standard. Pour cela, nous supposons que l'anharmonicité cubique est un ordre de grandeur plus forte que l'anharmonicité quartique si bien que h se réécrit en fonction du paramètre perturbatif λ sous la forme :

$$h = h_0 + \lambda \Delta h_1 + \lambda^2 \Delta h_2 + \dots \quad (2.21)$$

2. Nous allons ici considérer un seul mode si bien que l'indice n ne sera pas spécifié.

avec

$$\begin{aligned}
 h_0 &= \hbar\omega_0 b^\dagger b \\
 \Delta h_1 &= \hbar\gamma_3 (b^\dagger + b)^3 \\
 \Delta h_2 &= \hbar\gamma_4 (b^\dagger + b)^4
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

La théorie des perturbations repose sur l'introduction d'une transformation unitaire $U = \exp(S)$, où $S = -S^\dagger$ définit le générateur anti-hermitien de la transformation. Celle-ci génère un nouveau point de vue dans lequel la dynamique du système est décrite par un Hamiltonien effectif $\hat{h} = UhU^\dagger$. Le point fondamental est que U est choisie de façon à ce que \hat{h} soit diagonal dans la base non perturbée des états nombre de l'oscillateur harmonique. Dès lors, les valeurs propres de h coïncident avec celles de \hat{h} et les vecteurs propres correspondants s'obtiennent en appliquant la transformation inverse sur les états non perturbés. Comme il est impossible de calculer exactement la transformation unitaire U , on réalise un développement limité du générateur en posant $S = \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \dots$ où S_q est d'ordre q par rapport au couplage. On détermine alors les différents ordres S_q en imposant i) que \hat{h} soit diagonal dans la base non perturbée à l'ordre des perturbations désiré et que ii) S_q soit purement non diagonal dans la base non perturbée (choix de jauge qui fixe la phase de la transformation U).

Ainsi, sous l'action de la transformation, l'hamiltonien de l'oscillateur anharmonique devient³ :

$$\begin{aligned}
 \hat{h} &= h_0 \\
 &+ \lambda(\Delta h_1 + [S_1, h_0]) \\
 &+ \lambda^2(\Delta h_2 + [S_2, h_0] + [S_1, \Delta h_1] + \frac{1}{2}[S_1, [S_1, h_0]]) \\
 &+ \dots
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

A l'ordre deux des perturbations, la diagonalisation de \hat{h} et les contraintes sur le générateur imposent les relations suivantes :

$$\begin{aligned}
 [h_0, S_1] &= \Delta h_1 \\
 [h_0, S_2] &= \Delta h_2^{(ND)} + \frac{1}{2}[S_1, \Delta h_1]^{(ND)} \\
 \hat{h} &= h_0 + \Delta h_2^{(D)} + \frac{1}{2}[S_1, \Delta h_1]^{(D)}
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

où les indices D et ND signifient partie diagonale et partie non diagonale dans la base non perturbée. Après quelques calculs longs et fastidieux, on obtient finalement :

$$\begin{aligned}
 S_1 &= \frac{\gamma_3}{3\omega_0} [b^{\dagger 3} - b^3 + 9(b^{\dagger 2}b - b^\dagger b^2 + b^\dagger - b)] \\
 S_2 &= \frac{1}{4} \left[\frac{\gamma_4}{\omega_0} + 3\left(\frac{\gamma_3}{\omega_0}\right)^2 \right] [b^{\dagger 4} - b^4] + \left[\frac{\gamma_4}{\omega_0} - 3\left(\frac{\gamma_3}{\omega_0}\right)^2 \right] [2b^{\dagger 3}b - 2b^\dagger b^3 + 3b^{\dagger 2} - 3b^2]
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

Ces expressions conduisent à l'hamiltonien transformé :

$$\hat{h} = \hbar(\omega_0 - 2A)b^\dagger b - \hbar Ab^\dagger b^\dagger bb \tag{2.26}$$

3. On utilise l'identité de Baker-Hausdorff $e^S A e^{-S} = A + [S, A]/1! + [S, [S, A]]/2! + \dots$

où nous avons négligé les termes constants qui renormalisent l'énergie du vide uniquement et où $A > 0$ définit le paramètre d'anharmonicité :

$$A = \frac{30\gamma_3^2}{\omega_0} - 6\gamma_4 \quad (2.27)$$

Comme le montre l'Eq. (2.26), l'effet de l'anharmonicité est double. D'une part, elle entraîne un décalage de la fréquence harmonique vers le rouge : $\omega_0 \rightarrow \hat{\omega}_0 = \omega_0 - 2A$. D'autre part, elle induit une correction de la séquence des niveaux d'énergie qui montrent une dépendance linéaire et quadratique par rapport au nombre quantique vibrationnel v . Cette séquence s'écrit :

$$E_v = \hbar\hat{\omega}_0 v - \hbar A v(v-1) \quad (2.28)$$

Dans le langage de la seconde quantification, l'hamiltonien \hat{h} ne décrit plus un ensemble de bosons indépendants. En fait, l'anharmonicité est la source d'une interaction entre bosons. Les bosons ne sont plus libres mais ils interagissent par paires. Ainsi, lorsque v bosons sont présents, il existe $v(v-1)/2$ paires différentes. Chaque boson possède une énergie $\hbar\hat{\omega}_0$ et chaque paire conduit à une énergie d'interaction de $-2A$. A ce stade, on notera que pour le problème des vibrations intramoléculaires, $A > 0$ si bien que l'interaction entre bosons est attractive. Mais d'autres situations peuvent apparaître.

On notera que l'hamiltonien Eq.(2.26) a subi un changement de point de vue. Il est diagonal dans la base non perturbée et est exprimé en fonction des opérateurs harmoniques. Cependant, ses vecteurs propres ne sont pas les états quantiques réels puisque la transformation U , bien que ne changeant pas les valeurs propres, modifie les vecteurs propres. Pour revenir aux vrais états quantiques du système, il est donc nécessaire de considérer la transformation inverse.

2.1.4 Modèle de Hubbard pour bosons

Le modèle de Hubbard pour bosons émerge de l'Hamiltonien qui gouverne la dynamique sur réseau d'un ensemble de modes intramoléculaires anharmoniques couplés. Cet Hamiltonien s'écrit :

$$H = \sum_n \left(\frac{P_n^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 Q_n^2 + \frac{1}{3!} \lambda_3 Q_n^3 + \frac{1}{4!} \lambda_4 Q_n^4 \right) + \sum_n W Q_n Q_{n+1} \quad (2.29)$$

Pour simplifier l'expression de H , on introduit tout d'abord les opérateurs création b_n^\dagger et annihilation b_n . Ensuite, on traite les effets de l'anharmonicité du potentiel intramoléculaire de chaque mode interne en généralisant la transformation unitaire perturbative. Ce faisant, on réalise un changement de point de vue si bien que l'on modifie le couplage latéral entre modes plus proches voisins. Dès lors, en ne considérant que les contributions principales de l'Hamiltonien transformé, on en déduit que la dynamique est gouvernée par l'Hamiltonien général⁴ :

$$H = \sum_n \hbar\omega_0 b_n^\dagger b_n - \hbar A b_n^\dagger b_n^\dagger b_n b_n + \hbar\Phi (b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1}) \quad (2.30)$$

4. Pour simplifier nous avons conservé la notation ω_0 plutôt que $\hat{\omega}_0$

L'équation (2.30) définit un Hamiltonien de Hubbard pour bosons. Il décrit la dynamique d'un ensemble de bosons en interaction sur un réseau 1D. Chaque boson peut occuper un site du réseau auquel cas il possède une énergie propre $\hbar\omega_0$. De plus, chaque boson a la capacité de se délocaliser le long du réseau comme par effet tunnel. On note alors Φ la constante de saut qui traduit la capacité d'un boson à transiter d'un site n vers un site $n \pm 1$. Cependant, lorsque deux bosons occupent le même site, ils ne sont plus indépendants mais présentent une interaction plus ou moins importante. Cette interaction est attractive si $A > 0$ ou répulsive si $A < 0$.

On voit alors apparaître clairement l'importance de cette interaction qui s'oppose à la délocalisation des bosons. Les états propres de H ne correspondent plus à des excitations d'ondes planes comme dans le cas harmonique. En fait, l'Hamiltonien H ne peut plus être diagonalisé aussi facilement et nous verrons par la suite comment caractériser ses états propres qui résultent de la compétition entre l'effet tunnel et l'interaction.

2.2 Quelques exemples de modèles de Hubbard pour bosons

2.2.1 Condensats de Bose-Einstein sur réseaux optiques

Un condensat de Bose-Einstein piégé sur un réseau optique 1D est obtenu suite à l'interférence de deux faisceaux laser de même longueur d'onde se propageant selon deux directions opposées. Par définition, un tel condensat est réalisé à une très basse température si bien qu'il décrit un état de la matière formé de bosons dont une fraction macroscopique occupe l'état quantique fondamental du système. Dans ces conditions, les propriétés quantiques de ce gaz de Bosons sont relativement bien décrites par un modèle de Hubbard pour bosons :

$$H = \sum_n \epsilon b_n^\dagger b_n + J[b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1}] + \frac{U}{2} b_n^\dagger b_n^\dagger b_n b_n \quad (2.31)$$

Pour définir les différents termes qui interviennent dans l'expression de H , il convient tout d'abord de mentionner que chaque atome de masse M , dans le champ laser stationnaire, ressent un potentiel optique individuel $V_{op}(x)$ (Fig. 2.2). Ce potentiel optique se décompose en une distribution périodique de potentiels individuels. Chaque potentiel individuel est localisé autour d'un site n du réseau. Dans le n -ième potentiel $V_n(x)$, un atome se trouve piégé autour du site n . Il peut alors occuper une série d'états liés dont les fonctions d'ondes $\phi_{n\alpha}(x)$ sont essentiellement localisées autour du site n . Puisque dans le condensat les bosons occupent l'état fondamental du système, seul le niveau fondamental noté $\phi_n(x)$ est peuplé. On note alors b_n et b_n^\dagger les opérateurs d'annihilation et de création d'un boson dans l'état fondamental du potentiel individuel localisé sur le site n .

Dans ce contexte, le paramètre ϵ représente grossièrement l'énergie du niveau fondamental

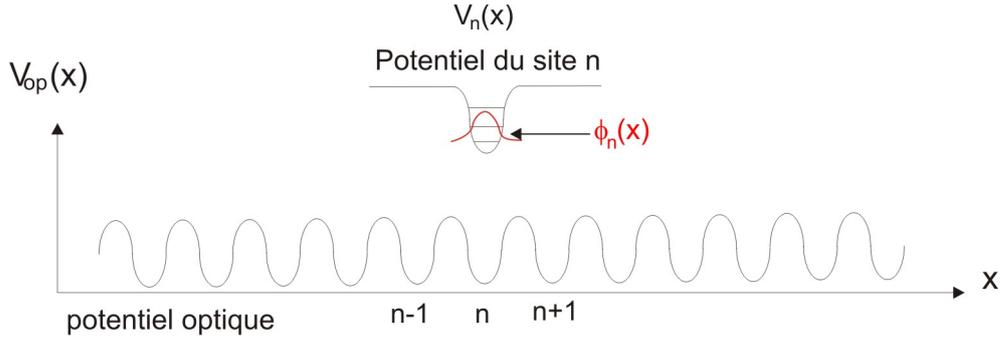


FIGURE 2.2 – Potentiel optique et potentiel local.

du potentiel individuel localisé autour du site n :

$$\epsilon = \int dx \phi_n^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_x^2 + V_{op}(x) \right] \phi_n(x) \quad (2.32)$$

Ensuite, le recouvrement entre deux fonctions d'ondes localisées sur deux sites différents traduit la capacité qu'à un boson de sauter de site en site par effet tunnel à travers le potentiel optique. Si l'on ne considère que les transitions entre sites plus proches voisins, on note alors J l'amplitude de réalisation d'un tel effet tunnel :

$$J = \int dx \phi_n^*(x) V_{op}(x) \phi_{n\pm 1}(x) \quad (2.33)$$

Finalement, le terme fonction de U est relatif aux interactions entre bosons. De manière générale, les interactions entre les constituants d'un gaz de bosons sont relativement bien décrites par un potentiel à deux corps $W(x, x')$. Un tel potentiel autorisant des états liés entre atomes, l'équilibre thermodynamique à très basse température correspond plutôt à un état solide. Par conséquent, le condensat gazeux est un état métastable dans lequel les interactions traduisent uniquement des processus de diffusion faisant suite à des collisions entre atomes. Pour représenter simplement ces processus de collision, le modèle usuel consiste à assimiler le potentiel $W(x, x')$ à un potentiel de contact donné par :

$$W(x, x') = g\delta(x - x') \quad (2.34)$$

où g mesure l'intensité du couplage. En négligeant le recouvrement des fonctions d'ondes localisées sur des sites différents, le paramètre de couplage U est alors défini par :

$$U = g \int dx |\phi_n(x)|^4 \quad (2.35)$$

En général $U > 0$ ce qui traduit une interaction répulsive lorsque deux atomes occupent le même site du réseau optique.

2.2.2 Modèle de Holstein

Le modèle de Holstein décrit un ensemble de bosons libres et indépendants délocalisés sur un réseau 1D qui interagissent avec un environnement dissipatif formé par les phonons

optiques basse fréquence du réseau. L'Hamiltonien de Holstein est défini par :

$$H = \sum_n \hbar\omega_0 b_n^\dagger b_n + \hbar\Phi(b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1}) + \sum_n \hbar\Omega_0 a_n^\dagger a_n + \sum_n \hbar\Delta_0(a_n^\dagger + a_n)b_n^\dagger b_n \quad (2.36)$$

Le premier terme caractérise les bosons libres. Le second terme est l'Hamiltonien des phonons optiques. Les opérateurs a_n et a_n^\dagger sont les opérateurs phonons associés à la vibration externe de fréquence Ω_0 localisée sur le site n du réseau. Le dernier terme représente l'interaction boson-phonon.

Dans la limite non adiabatique ($\Omega_0 \gg \Phi$) du couplage fort ($\Delta_0 \gg \Phi$), l'interaction boson-phonon l'emporte sur l'énergie cinétique bosonique. La diagonalisation partielle de H s'effectue alors en réalisant une transformation unitaire dite de Lang-Firsov définie par :

$$U_{LF} = \exp\left(+\sum_n \frac{\Delta_0}{\Omega_0}(a_n^\dagger - a_n)b_n^\dagger b_n\right) \quad (2.37)$$

La transformation de Lang-Firsov permet d'éliminer partiellement le couplage boson-phonon. Elle génère un nouveau point de vue dans lequel la dynamique est décrite par l'Hamiltonien transformé $\tilde{H} = U_{LF} H U_{LF}^\dagger$ qui s'écrit :

$$\tilde{H} = \sum_n \hbar(\omega_0 - E_B)b_n^\dagger b_n - \hbar E_B b_n^\dagger b_n^\dagger b_n b_n + \hbar\Phi \sum_n (\theta_{n+1}^\dagger \theta_n b_{n+1}^\dagger b_n + c.c) + \sum_n \hbar\Omega_0 a_n^\dagger a_n \quad (2.38)$$

où $\hbar E_B = \hbar\Delta_0^2/\Omega_0$ est l'énergie de liaison du petit polaron et où θ_n est l'opérateur d'habillage :

$$\theta_n = \exp\left(-\frac{\Delta_0}{\Omega_0}(a_n^\dagger - a_n)\right) \quad (2.39)$$

Dans ce nouveau point de vue, un état local décrit un polaron qui définit une quasi-particule composite qui mélange les degrés de liberté bosoniques et phononiques. Le polaron caractérise un boson habillé par un nuage virtuel de phonons. Ce nuage rend compte du fait que de par la présence de l'opérateur θ_n , les phonons ne sont plus dans un état nombre bien défini mais plutôt dans un état cohérent quasi-classique, le nombre de phonons n'étant plus fixé.

Comme $\Phi \neq 0$, la transformation de Lang-Firsov n'est pas exacte et un couplage résiduel polaron-phonon apparaît. Ce couplage, encodé dans les opérateurs d'habillage, présente une forte non linéarité par rapport aux variables phonons. Il est donc difficile à appréhender. Pour surmonter ce problème, en première approximation, on réalise souvent une théorie de champ moyen en supposant que les phonons forment un bain à l'équilibre thermodynamique à la température T . Cette procédure permet de définir l'Hamiltonien bosonique effectif H_{eff} qui s'écrit :

$$H_{eff} = \sum_n \hbar(\omega_0 - E_B)b_n^\dagger b_n - \hbar E_B b_n^\dagger b_n^\dagger b_n b_n + \hbar\tilde{\Phi}(b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1}) \quad (2.40)$$

où $\tilde{\Phi} = \Phi \exp(-S)$, S étant le facteur de rétrécissement de bande qui s'écrit en fonction du nombre moyen de phonons $\bar{n}_0 = (\exp(\hbar\Omega_0/kT) - 1)^{-1}$:

$$S = \frac{E_B}{\Omega_0}(2\bar{n}_0 + 1) \quad (2.41)$$

Compte tenu du couplage avec les phonons, les bosons ne se déplacent plus librement mais ils deviennent habillés par un nuage virtuel de phonons. Cet habillage entraîne une

renormalisation de l'énergie locale des bosons ($\omega_0 \rightarrow \omega_0 - E_B$) et une réduction de la constante de saut ($\Phi \rightarrow \tilde{\Phi}$). De plus, lorsque deux bosons se trouvent sur un même site, ils ne sont plus indépendants. Ils interagissent de manière attractive, interaction qui résulte du recouvrement entre leur nuage virtuel de phonons. Ce couplage boson-boson est alors encodé dans le terme $\hbar E_B b_n^\dagger b_n^\dagger b_n b_n$ qui confère à l'Hamiltonien une structure identique à celle du modèle de Hubbard pour bosons.

A ce stade on notera que le même phénomène apparaît dans le système électron-phonon. Une interaction attractive prend place entre deux électrons habillés par un nuage virtuel de phonons. S'opposant à la répulsion coulombienne, cette attraction permet la formation de paires de Cooper à l'origine de la supraconductivité.

2.3 Exercices

2.3.1 Oscillateur anharmonique

Soit un oscillateur anharmonique dont l'hamiltonien h est défini par :

$$h = \hbar\omega_0 b^\dagger b + \hbar\gamma_3 (b^\dagger + b)^3 + \hbar\gamma_4 (b^\dagger + b)^4 \quad (2.42)$$

En utilisant la théorie des perturbations d'ordre 2, montrer que l'énergie corrigée de l'état nombre $|v\rangle$ de l'oscillateur harmonique associé s'écrit :

$$E_v = \hbar(3\gamma_4 - 11\frac{\gamma_3^2}{\omega_0}) + \hbar(\omega_0 - 2A)v - \hbar Av(v-1) \text{ avec } A = 30\frac{\gamma_3^2}{\omega_0} - 6\gamma_4 \quad (2.43)$$

On supposera que l'anharmonicité cubique est un ordre de grandeur plus forte que l'anharmonicité quartique.

2.3.2 Approximation des ondes tournantes

On considère un ensemble de N modes intramoléculaires couplés sur un réseau 1D. Dans l'approximation harmonique, la dynamique est gouvernée par l'Hamiltonien :

$$H = \sum_n \frac{P_n^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 Q_n^2 + \sum_n W Q_n Q_{n+1} \quad (2.44)$$

1) Soit la transformation de Bloch définie par :

$$\begin{aligned} Q_n &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k Q_k e^{ikn} \\ P_n &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k P_k e^{-ikn} \end{aligned} \quad (2.45)$$

Montrer que l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = \sum_k \frac{P_k^\dagger P_k}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega_k^2 Q_k^\dagger Q_k \quad (2.46)$$

avec

$$\Omega_k^2 = \omega_0^2 + 2\frac{W}{m} \cos(k) \quad (2.47)$$

2) On introduit les opérateurs suivants :

$$\begin{aligned} B_k &= \sqrt{\frac{m\Omega_k}{2\hbar}} Q_k + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\Omega_k}} P_k^\dagger \\ B_k^\dagger &= \sqrt{\frac{m\Omega_k}{2\hbar}} Q_k^\dagger - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\Omega_k}} P_k \end{aligned} \quad (2.48)$$

Montrer que B_k et B_k^\dagger définissent des opérateurs bosons. En déduire l'expression de l'Hamiltonien :

$$H = \sum_k \hbar \Omega_k (B_k^\dagger B_k + 1/2) \quad (2.49)$$

3) Montrer que dans la limite $\omega_0 \gg \Phi$ on retrouve le modèle décrit dans le paragraphe 2.1.2 avec $\Omega_k \approx \omega_k = \omega_0 + 2\Phi \cos(k)$.

2.3.3 Hamiltonien de Hubbard dans la base des ondes planes

Soit un ensemble de bosons dont la dynamique est décrite par un modèle de Hubbard :

$$H = \sum_n \hbar \omega_0 b_n^\dagger b_n - \hbar A b_n^\dagger b_n^\dagger b_n b_n + \hbar \Phi (b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1}) \quad (2.50)$$

Soit b_k et b_k^\dagger les opérateurs bosons qui diagonalisent H en l'absence du couplage.

$$\begin{aligned} b_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{-ikn} b_n \\ b_k^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{+ikn} b_n^\dagger \end{aligned} \quad (2.51)$$

Ces opérateurs définissent des bosons libres qui se propagent le long du réseau. Quelle est l'influence de l'interaction boson-boson sur de tels états d'ondes planes ?

2.3.4 Magnons dans les chaînes de spins

Soit un ensemble de N spins S régulièrement distribués sur les sites $n = 1, \dots, N$ d'un réseau 1D. La dynamique des spins est gouvernée par un Hamiltonien de Heisenberg qui s'écrit :

$$H = - \sum_n J \vec{S}_n \vec{S}_{n+1} \quad (2.52)$$

où \vec{S}_n est le spin S attaché au site n . Il possède les propriétés usuelles suivantes : les valeurs propres de la composante $S_{z,n}$ sont quantifiées et valent $-S, -S + 1, \dots, S - 1, S$; la valeur propre de $||\vec{S}_n||^2$ vaut $S(S + 1)$; les composantes $S_{x,n}$, $S_{y,n}$, et $S_{z,n}$ satisfont les relations de commutation propres au moment cinétique ($[S_{x,n}, S_{y,n}] = iS_{z,n} \dots$ etc.).

1) Soient $S_{\pm,n}$ les opérateurs définis par :

$$S_{\pm,n} = S_{x,n} \pm iS_{y,n} \quad (2.53)$$

Montrer que H s'écrit sous la forme :

$$H = - \sum_n \frac{J}{2} (S_{+,n} S_{-,n+1} + S_{-,n} S_{+,n+1}) + JS_{z,n} S_{z,n+1} \quad (2.54)$$

2) Pour étudier la dynamique du système et introduire les notions d'onde de spins et de magnons, il convient de réaliser la transformation de Holstein-Primakoff qui exprime les opérateurs spins en fonction d'opérateurs bosons, les bosons en question s'appelant des magnons :

$$\begin{aligned} S_{+,n} &= \sqrt{2S - a_n^\dagger a_n} a_n \\ S_{-,n} &= a_n^\dagger \sqrt{2S - a_n^\dagger a_n} \\ S_{z,n} &= S - a_n^\dagger a_n \end{aligned} \quad (2.55)$$

avec $[a_n, a_n^\dagger] = 1$. On notera que l'espace des états du spin est de dimension $(2S + 1)$ alors que celui de l'oscillateur est de dimension infini. Ce dernier inclut des états non physiques pour lesquels $S_{z,n}$ prend les valeurs $-S - 1, -S - 2, \dots$. Cependant, de par la définition des opérateurs $S_{\pm,n}$, les états non physiques ne se couplent pas avec les états physiques. Il n'y a donc aucun problème de définition ce qui revient à restreindre notre attention aux états nombres variant de 0 à $2S$.

En réalisant un développement limité par rapport à $1/S$, montrer que :

$$\begin{aligned} S_{+,n} &= \sqrt{2S} a_n - \frac{1}{\sqrt{8S}} a_n^\dagger a_n a_n \\ S_{-,n} &= \sqrt{2S} a_n^\dagger - \frac{1}{\sqrt{8S}} a_n^\dagger a_n^\dagger a_n \end{aligned} \quad (2.56)$$

3) En déduire que l'Hamiltonien se met sous la forme :

$$\begin{aligned} H &\approx -NJS^2 + \sum_n 2JS a_n^\dagger a_n - JS(a_n^\dagger a_{n+1} + a_{n+1}^\dagger a_n) - \sum_n J a_{n+1}^\dagger a_n^\dagger a_{n+1} a_n \\ &+ \sum_n \frac{J}{4} (a_n^\dagger [a_{n+1}^\dagger a_{n+1} + a_n^\dagger a_n] a_{n+1} + a_{n+1}^\dagger [a_{n+1}^\dagger a_{n+1} + a_n^\dagger a_n] a_n) \end{aligned} \quad (2.57)$$

4) Interpréter les différentes contributions de cet Hamiltonien en termes de bosons délocalisés et d'interaction entre bosons.

Chapitre 3

Dynamique classique

Avant d'étudier les caractéristiques quantiques du modèle de Hubbard pour bosons, nous allons brièvement introduire quelques notions simples pour comprendre ces propriétés classiques ou quasi-classiques. Cette démarche, qui n'est pas essentielle pour comprendre la théorie quantique, permettra de familiariser le lecteur avec certains concepts clés en dynamique des réseaux non linéaires comme par exemple ceux de solitons, de modes localisés intrinsèques et d'auto-piégeage.

3.1 Equation non linéaire de Schrödinger

3.1.1 Principe de correspondance

La limite classique du modèle de Hubbard s'obtient naturellement en utilisant le formalisme des intégrales de chemins basées sur les états cohérents de bosons. Cette approche est présentée dans les annexes B et C. Ici, pour introduire de manière simple l'équivalent classique du modèle de Hubbard, nous allons reprendre le problème de l'interaction entre un ensemble de N modes intramoléculaires régulièrement distribués sur un réseau 1D. Dans l'approximation harmonique, la dynamique du système est décrite par la fonction de Hamilton :

$$\mathcal{H} = \sum_n \frac{\mathcal{P}_n^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \mathcal{Q}_n^2 + \sum_n W \mathcal{Q}_n \mathcal{Q}_{n+1} \quad (3.1)$$

où les $\mathcal{Q}_n(t)$ sont maintenant des coordonnées généralisées classiques et où les $\mathcal{P}_n(t)$ sont les variables conjuguées associées. L'évolution temporelle des coordonnées généralisées est alors gouvernée par les équations de Hamilton :

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{P}}_n &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathcal{Q}_n} = -m\omega_0^2 \mathcal{Q}_n - W(\mathcal{Q}_{n+1} + \mathcal{Q}_{n-1}) \\ \dot{\mathcal{Q}}_n &= +\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathcal{P}_n} = \frac{1}{m} \mathcal{P}_n \end{aligned} \quad (3.2)$$

Pour résoudre les équations du mouvement, nous allons réaliser un changement de variables de manière à introduire les équivalents classiques des opérateurs création b_n^\dagger et annihilation b_n . Ainsi, on pose :

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}_n(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} [\psi_n^*(t) + \psi_n(t)] \\ \mathcal{P}_n(t) &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega_0}{2}} [\psi_n^*(t) - \psi_n(t)]\end{aligned}\quad (3.3)$$

où les $\psi_n(t)$ définissent N nouvelles coordonnées généralisées qui sont maintenant des nombres complexes (il y a donc $2N$ variables). Après quelques manipulations algébriques relativement simples, les équations du mouvement en fonction de ces nouvelles variables s'écrivent :

$$\begin{aligned}i\dot{\psi}_n &= +\omega_0\psi_n + \Phi(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) \\ i\dot{\psi}_n^* &= -\omega_0\psi_n^* - \Phi(\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^* + \psi_{n+1} + \psi_{n-1})\end{aligned}\quad (3.4)$$

A ce stade, nous allons simplifier les équations du mouvement en invoquant l'approximation des ondes tournantes. En effet, dans le cas harmonique, la fréquence ω_0 domine l'évolution temporelle, et il apparaît naturel d'introduire un changement de variables de façon à éliminer les termes d'évolution libre. Posons alors :

$$\psi_n(t) = \varphi_n(t)e^{-i\omega_0 t}\quad (3.5)$$

Avec les nouvelles variables $\varphi_n(t)$, les équations du mouvement deviennent :

$$\begin{aligned}i\dot{\varphi}_n &= +\Phi(\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1}) + \Phi(\varphi_{n+1}^* + \varphi_{n-1}^*)e^{+2i\omega_0 t} \\ i\dot{\varphi}_n^* &= -\Phi(\varphi_{n+1}^* + \varphi_{n-1}^*) + \Phi(\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1})e^{-2i\omega_0 t}\end{aligned}\quad (3.6)$$

Les termes non résonants sont ceux oscillants rapidement et qui par conséquent, ont une influence négligeable sur la dynamique du système lorsque $\omega_0 \gg \Phi$. Nous utiliserons donc l'approximation des ondes tournantes qui consiste à négliger ces processus non résonants. En d'autres termes, si l'on reprend les équations du mouvement Eq.(3.4), l'évolution des coordonnées $\psi_n(t)$ est gouvernée par les équations simplifiées suivantes :

$$\begin{aligned}i\dot{\psi}_n &= +\omega_0\psi_n + \Phi(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) \\ i\dot{\psi}_n^* &= -\omega_0\psi_n^* - \Phi(\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*)\end{aligned}\quad (3.7)$$

Dans ce contexte, on s'aperçoit que les équations du mouvement Eq.(3.7) se déduisent des équations de Hamilton appliquées à la fonction Hamiltonienne suivante :

$$\mathcal{H} = \sum_n \hbar\omega_0\psi_n^*\psi_n + \hbar\Phi(\psi_{n+1}^*\psi_n + \psi_n^*\psi_{n+1})\quad (3.8)$$

Les équations de Hamilton correspondantes s'écrivent :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\sqrt{\hbar}\psi_n}{\partial t} &= +\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial i\sqrt{\hbar}\psi_n^*} \\ \frac{\partial i\sqrt{\hbar}\psi_n^*}{\partial t} &= -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\sqrt{\hbar}\psi_n}\end{aligned}\quad (3.9)$$

En d'autres termes, en fonction des variables complexes $\psi_n(t)$ et après avoir réalisé l'approximation des ondes tournantes, tout se passe comme si la dynamique classique était décrite par des coordonnées généralisées $x_n = \sqrt{\hbar}\psi_n$ et par des impulsions $p_n = i\sqrt{\hbar}\psi_n^*$. La théorie quantique qui découle de cette dynamique classique s'obtient tout naturellement en utilisant le principe de correspondance. A la coordonnée x_n on associe l'opérateur \hat{x}_n et à l'impulsion p_n on associe l'opérateur \hat{p}_n , ces opérateurs vérifiant les RCC $[\hat{x}_n, \hat{p}_n] = i\hbar$. Réaliser une telle opération revient finalement à faire la correspondance suivante :

$$\begin{aligned}\psi_n &\rightarrow b_n \\ \psi_n^* &\rightarrow b_n^\dagger\end{aligned}\tag{3.10}$$

avec

$$[b_n, b_n^\dagger] = 1\tag{3.11}$$

En utilisant cette correspondance, on retrouve l'Hamiltonien Eq. (2.11) qui décrit un ensemble de bosons libres sur réseau :

$$H = \sum_n \omega_0 b_n^\dagger b_n + \Phi(b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1})\tag{3.12}$$

A partir des considérations précédentes, il est possible de définir un principe de correspondance général de manière à générer la dynamique classique associée à la dynamique quantique d'un ensemble de bosons sur réseau. Ainsi, considérons un ensemble de bosons dont les propriétés sont décrites par un Hamiltonien $H(\{b_n^\dagger\}, \{b_n\})$ qui dépend des opérateurs création b_n^\dagger et annihilation b_n . Cet Hamiltonien est supposé ordonné normalement, c'est-à-dire que les opérateurs créations sont toujours à gauche des opérateurs annihilations. Dans ce cas, les propriétés classiques du système sont décrites par un ensemble de coordonnées généralisées complexes ψ_n . L'Hamiltonien classique correspondant s'obtient à partir de H en faisant correspondre à b_n^\dagger la variable ψ_n^* et à b_n la variable ψ_n :

$$\mathcal{H}(\psi_n^*, \psi_n) \equiv H(b_n^\dagger, b_n)\tag{3.13}$$

Les équations du mouvements sont alors définies par :

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_n^*}\tag{3.14}$$

A ce stade, on notera que l'interprétation physique des grandeurs $\psi_n(t)$ dépend du problème considéré. Pour les modes de vibration intramoléculaire couplés, elle trouve son origine à travers la notion d'états cohérents quasi-classiques de l'oscillateur harmonique. Les états cohérents d'un oscillateur sont les états tels que les moyennes quantiques d'observables spécifiques (coordonnée de vibration, énergie) se comportent comme les grandeurs classiques associées. Ainsi, ψ_n peut être considéré comme une mesure de l'amplitude du mouvement de l'oscillateur quantique qui occupe le site n du réseau. Dans le cas d'une description basée sur la seconde quantification, c'est-à-dire quand le modèle quantique fait référence à un ensemble de bosons, $|\psi_n|^2$ mesure typiquement le nombre moyen de bosons présents sur le site n . L'amplitude ψ_n représente alors une sorte de fonction d'onde macroscopique quasi-classique normée à v_B , le nombre total de bosons présents. Enfin, il y a certaines situations pour lesquelles ψ_n correspond réellement à la fonction d'onde d'une particule lorsqu'une théorie semi-classique est utilisée pour étudier la dynamique. C'est typiquement ce qu'il se passe pour l'étude du polaron issue de l'interaction entre une particule et un champ de phonons. Dans ce cas, ψ_n est normée à l'unité.

3.1.2 Equation non linéaire de Schrödinger

Soit un ensemble de bosons en interaction sur un réseau 1D. La dynamique quantique des bosons est alors gouvernée par un Hamiltonien de Hubbard défini par :

$$H = \sum_n \omega_0 b_n^\dagger b_n - A b_n^\dagger b_n^\dagger b_n b_n + \Phi (b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1}) \quad (3.15)$$

En vertu du principe de correspondance, les propriétés classiques du fluide de bosons sont encodées dans un ensemble de N coordonnées complexes $\psi_n(t)$ dont la dynamique est gouvernée par l'Hamiltonien classique suivant :

$$\mathcal{H} = \sum_n \hbar \omega_0 \psi_n^* \psi_n - A \psi_n^* \psi_n^* \psi_n \psi_n + \hbar \Phi (\psi_{n+1}^* \psi_n + \psi_n^* \psi_{n+1}) \quad (3.16)$$

L'évolution temporelle des coordonnées complexes est alors régie par les équations du mouvement qui s'écrivent :

$$i\dot{\psi}_n = \omega_0 \psi_n - 2A |\psi_n|^2 \psi_n + \Phi (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) \quad (3.17)$$

L'équation (3.17) correspond à la version discrète de l'équation non linéaire de Schrödinger (DNLS = discret nonlinear Schrödinger equation). On la retrouve pour décrire une multitude de situations. En optique non linéaire, l'équation non linéaire de Schrödinger (NLS) permet de décrire la propagation d'une onde le long d'une fibre optique. NLS apparaît également en physique des condensats de Bose-Einstein où elle est connue sous le nom d'équation de Gross-Pitaevskii. Sous sa forme discrète, DNLS est utilisée pour étudier le transport d'énergie dans les protéines, la propagation de pulses lumineux dans les réseaux de fibres optiques ou la dynamique du grand polaron dans les systèmes électron-phonon.

A ce stade, il convient de noter une propriété importante de DNLS : la grandeur $\sum_n |\psi_n(t)|^2$ est une constante du mouvement indépendante du temps. Selon l'interprétation que l'on a de $\psi_n(t)$, ceci traduit par exemple la normalisation d'une fonction d'onde ou la conservation d'un nombre total de bosons.

Par la suite, pour simplifier la discussion, nous ferons l'hypothèse que DNLS est l'équation de Schrödinger d'une particule sur réseau. La grandeur $\psi_n(t)$ sera vue comme l'amplitude de probabilité de présence de la particule sur le site n du réseau, amplitude normée à l'unité selon la relation $\sum_n |\psi_n(t)|^2 = 1$.

3.2 Approximation continue : le soliton

Puisque DNLS ne peut être résolue de manière analytique, une solution localisée dans l'espace émerge de l'approximation du continuum qui consiste à ne considérer que les variations de grande longueur d'onde. La procédure est donc la suivante.

Tout d'abord, il existe une solution localisée si le terme de dispersion et le terme non linéaire sont de même signe. Si dans notre cas on suppose $\Phi > 0$ et $A > 0$, alors cette condition est vérifiée en effectuant le changement de variable $\psi_n = (-1)^n u_n$. Avec les nouvelles

vatriables u_n , DNLS devient ¹ :

$$i\partial_t u_n = \omega_0 u_n - 2A|u_n|^2 u_n - \Phi(u_{n+1} + u_{n-1}) \quad (3.18)$$

Si $A = 0$, la solution élémentaire de cette équation est une onde plane de vecteur d'onde k et de pulsation $\omega_k = \omega_0 - 2\Phi \cos(k)$. Pour $A \neq 0$, nous allons chercher une solution qui possède la forme d'une onde plane inhomogène dont l'amplitude $\alpha_n(t)$ réelle varie lentement dans l'espace :

$$u_n(t) = \alpha_n(t) e^{i(kn - \tilde{\omega}_k t)} \quad (3.19)$$

En injectant cette solution dans l'équation Eq.(3.18), on obtient :

$$i\partial_t \alpha_n + \tilde{\omega}_k \alpha_n = \omega_0 \alpha_n - 2A\alpha_n^3 - \Phi \cos(k)(\alpha_{n+1} + \alpha_{n-1}) - i\Phi \sin(k)(\alpha_{n+1} - \alpha_{n-1}) \quad (3.20)$$

Dans la limite du continuum, $\alpha_n(t)$ devient une fonction de la coordonnée d'espace continue $\alpha(x, t)$. En séparant parité réelle et partie imaginaire, l'Eq.(3.20) devient :

$$\partial_t \alpha(x, t) = -2\Phi \sin(k) \partial_x \alpha(x, t) \quad (3.21)$$

$$(\tilde{\omega}_k - \omega_k) \alpha(x, t) = -2A\alpha^3(x, t) - \Phi \cos(k) \partial_{xx} \alpha(x, t) \quad (3.22)$$

La première équation Eq.(3.21) montre que l'enveloppe correspond à une onde qui se propage à la vitesse $v_k = 2\Phi \sin(k)$ qui n'est autre que la vitesse de groupe d'une onde plane de vecteur d'onde k . La seconde équation Eq.(3.22) spécifie la forme de l'enveloppe qui s'écrit ² :

$$\alpha(x, t) = \frac{\alpha_0}{\cosh(\mu(x - v_k t))} \quad (3.23)$$

où les paramètres μ et α_0 sont tels que :

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_k &= \omega_k - \mu^2 \Phi \cos(k) \\ \mu^2 \Phi \cos(k) &= A\alpha_0^2 \end{aligned} \quad (3.24)$$

Finalement, on détermine l'ensemble des paramètres en considérant la condition de normalisation de la fonction d'onde $\psi_n(t)$. On a alors ³ :

$$\int dx \alpha^2(x, t) = 1 \rightarrow \frac{2\alpha_0^2}{\mu} = 1 \quad (3.25)$$

On en déduit :

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{A}{2\Phi \cos(k)} \\ \alpha_0^2 &= \frac{A}{4\Phi \cos(k)} \\ \tilde{\omega}_k &= \omega_k - \frac{A^2}{4\Phi \cos(k)} \end{aligned} \quad (3.26)$$

1. On utilisera les notations de la physique non linéaire : $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$, $\partial_x = \frac{\partial}{\partial x}$ et $\partial_{xx} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
2. On notera que la fonction $\alpha(x, t)$ vérifie $\partial_{xx} \alpha(x, t) = \mu^2 \alpha(x, t) - 2(\mu^2/\alpha_0^2) \alpha^3(x, t)$
3. On utilisera le résultat suivant : $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \cosh^{-2}(x) = 2$

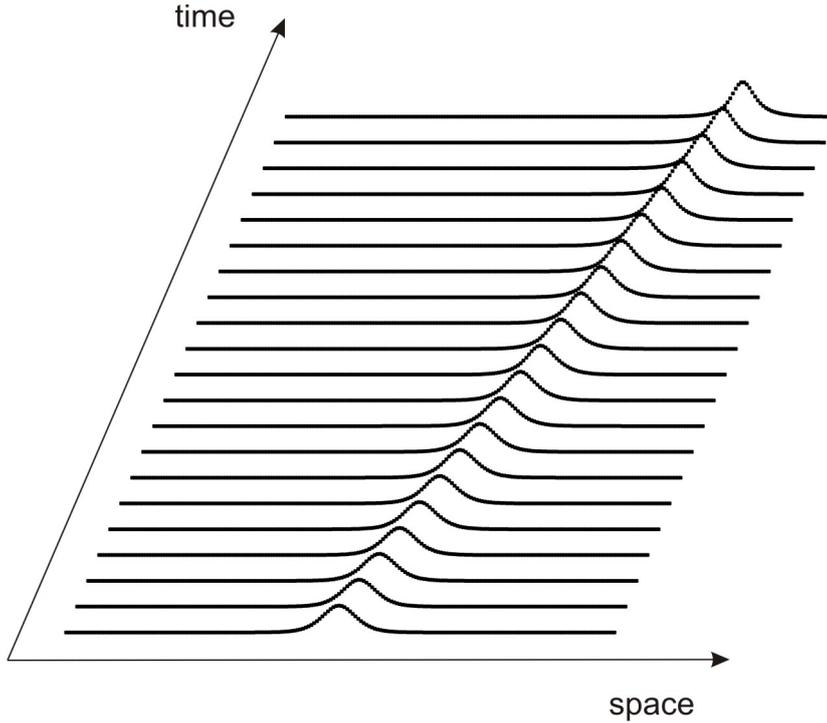


FIGURE 3.1 – Exemple de propagation d’un soliton pour DNLS avec $A = 0.25\Phi$.

Par conséquent, le solution approximative de DNLS dans la limite $k \rightarrow 0$ s’écrit finalement :

$$\psi_n(t) \approx (-1)^n \sqrt{\frac{A}{4\Phi}} \frac{e^{i(kn - \tilde{\omega}_k t)}}{\cosh\left(\frac{A}{2\Phi}(x - v_k t)\right)} \quad (3.27)$$

Cette solution décrit une onde solitaire appelé soliton. Le soliton apparaît comme un paquet d’ondes dont l’enveloppe, en forme de cloche, se propage à la vitesse v_k sans se déformer. Cependant, le profil du soliton varie au cours du temps compte tenu du fait que la vitesse de phase $\tilde{\omega}_k/k$ diffère de la vitesse de déplacement de l’enveloppe. La conservation de la forme de l’enveloppe est une propriété entièrement caractérisée par le paramètre non linéaire A . On constate notamment que plus A est fort plus l’amplitude du soliton est importante et plus sa largeur est faible. Inversement, lorsque A tend vers zéro, le paquet d’onde s’étend à l’infini et l’amplitude de l’onde devient infiniment petite : en d’autres termes le soliton tend vers une onde plane. D’un point de vue physique, la formation du soliton résulte du fait que la dispersion du milieu est contrebalancée par la non-linéarité de la dynamique. En effet, la dispersion conduit à l’étalement du paquet d’onde alors que la non-linéarité, qui entraîne un couplage entre les différents modes, permet le rétrécissement du paquet d’onde.

3.3 Phénomène d’auto-piégeage sur réseau

En dehors de l’approximation du continuum, DNLS n’a pas de solution analytique. La nature discrète brise l’intégrabilité due à une réduction des propriétés de symétrie qui prend son origine dans le passage de la symétrie d’invariance par translation du continu vers le dis-

cret. Or, une perte de symétrie implique généralement un enrichissement des solutions. Ainsi, au cours des années 80, l'étude de la version discrète de l'équation non linéaire de Schrödinger a révélé l'existence de solutions particulières appelées à l'époque « soliton discret ». De telles solutions apparaissaient alors comme la manifestation du phénomène d'auto-piégeage. Ce n'est que quelques années plus tard que Sievers et Takeno montrèrent que l'auto-piégeage était un cas particulier d'un phénomène beaucoup plus général correspondant à l'apparition de solutions spatialement localisées et périodiques en temps. De telles solutions, appelées modes localisés intrinsèques ou « breathers discrets », sont des objets qui ont été fortement étudiés ces dernières années. Issus de l'interdépendance entre le non linéaire et la nature discrète du réseau, ils possèdent la propriété surprenante de créer de la localisation dans des systèmes invariants par translation. Leur existence et leur stabilité ne nécessitent pas la propriété d'intégrabilité et bien que généralement attachés à un site du réseau, les « breathers » peuvent devenir mobiles dans certains cas.

3.3.1 Le problème du dimère non linéaire

Avant de considérer le schéma général du réseau 1D, on se propose d'étudier le cas simple du dimère non linéaire. On considère donc, deux sites de même nature, couplés et repérés par les indices 1 et 2. Dans ce cas, DNLS s'écrit :

$$\begin{aligned} i\dot{\psi}_1 &= \omega_0\psi_1 - 2A|\psi_1|^2\psi_1 + \Phi\psi_2 \\ i\dot{\psi}_2 &= \omega_0\psi_2 - 2A|\psi_2|^2\psi_2 + \Phi\psi_1 \end{aligned} \quad (3.28)$$

Pour simplifier la résolution du système d'équations couplées, nous allons introduire un changement de variable basé sur le formalisme de la matrice densité. Pour cela, introduisons l'opérateur densité défini par :

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} = |\psi_1|^2 & \rho_{12} = \psi_1^*\psi_2 \\ \rho_{21} = \psi_2^*\psi_1 & \rho_{22} = |\psi_2|^2 \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

Les éléments diagonaux de l'opérateur densité définissent les populations des sites 1 et 2. Les éléments non diagonaux, quant à eux, caractérisent les cohérences quantiques entre les sites 1 et 2 associées à la capacité que possèdent la particule de se délocaliser entre les deux sites. À partir de cette matrice densité, on définit les nouvelles variables suivantes :

$$\begin{aligned} x &= \rho_{11} - \rho_{22} \\ u &= \operatorname{Re}(\rho_{12}) \\ v &= \operatorname{Im}(\rho_{12}) \end{aligned} \quad (3.30)$$

où x désigne la différence de population entre les deux sites 1 et 2. Les grandeurs u et v caractérisent les cohérences quantiques entre les deux sites. Dans ce contexte, on montre facilement que le système d'équations de Schrödinger non linéaires se met sous la forme :

$$\begin{aligned} \dot{x} &= 4\Phi v \\ \dot{u} &= -\Phi x - 2Axu \\ \dot{v} &= 2Axv \end{aligned} \quad (3.31)$$

Pour résoudre ce système, nous allons supposer qu'initialement on crée la particule sur le site 1. Par conséquent, à $t = 0$, on a $x = 1$, $u = v = 0$. Dans ce contexte, on obtient les identités suivantes :

$$u\dot{u} + v\dot{v} + \frac{1}{4}x\dot{x} = 0 \quad (3.32)$$

$$x\dot{x} - \frac{4\Phi}{2A}\dot{u} = 0 \quad (3.33)$$

La première équation Eq.(3.32) définit une intégrale du mouvement qui se conserve au cours du temps. Compte tenu des conditions initiales, elle s'exprime sous la forme :

$$u^2 + v^2 + \frac{1}{4}x^2 = \frac{1}{4} \quad (3.34)$$

La seconde équation Eq. (3.33) permet d'exprimer la variable u en fonction de la différence de population x . Dès lors, il est possible d'obtenir une équation unique caractérisant l'évolution temporelle de la différence de population x . Cette équation se met sous la forme :

$$\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} \text{ avec } V(x) = \frac{A^2}{2} + \frac{1}{2}[4\Phi^2 - 2A^2]x^2 + \frac{1}{2}A^2x^4 \quad (3.35)$$

Cette équation est donc formellement identique à l'équation du mouvement d'un corpuscule de masse unité dans le potentiel $V(x)$. Dans ce contexte, l'intégrale du mouvement devient une équation de conservation de l'énergie qui se met sous la forme :

$$\frac{(4\Phi v)^2}{2} + V(x) = V(1) \quad (3.36)$$

Tout ce passe comme si x représentait la position d'une masse ponctuelle fictive classique en évolution dans le potentiel $V(x)$ (voir Fig. 3.2). La partie imaginaire de la cohérence v est alors proportionnelle à la vitesse de cette masse ponctuelle. La forme du potentiel $V(x)$ dépend fondamentalement du paramètre non linéaire A . En effet, la dérivée du potentiel s'annule aux points $x = 0$ et $x = \pm\sqrt{1 - 2\Phi^2/A^2}$. Par conséquent, si $|A| < \sqrt{2}\Phi$, le potentiel $V(x)$ présente un unique minimum localisé en $x = 0$. A l'inverse, si $|A| > \sqrt{2}\Phi$, le potentiel $V(x)$ possède la forme d'un double puits. Il est maximum en $x = 0$ et présente deux minima aux points $x = \pm\sqrt{1 - 2\Phi^2/A^2}$. A partir de ce comportement, on constate que la trajectoire de la masse ponctuelle fictive sera une fonction du paramètre non linéaire A .

Ainsi, dans le puits de potentiel simple, on ne peut qu'observer une oscillation sinusoidale de la masse ponctuelle fictive. Sachant que à $t = 0$ on a $x = 1$, on peut facilement prévoir que x va varier de 1 à -1. En terme de probabilité de présence de la particule décrite par NLS, on voit que celle-ci sera parfaitement délocalisée entre les 2 sites puisque la différence de population oscillera successivement entre 1 et -1.

Dans le double puits, deux situations peuvent se produire conduisant à deux trajectoires différentes. Si son énergie est suffisante pour dépasser la barrière de potentiel en $x = 0$, la masse ponctuelle fictive effectuera comme précédemment des oscillations entre -1 et 1. Dans ce cas, la probabilité de présence pour la particule décrite par NLS sera encore délocalisée entre les deux sites. Par contre, si l'énergie de la masse ponctuelle fictive est insuffisante pour

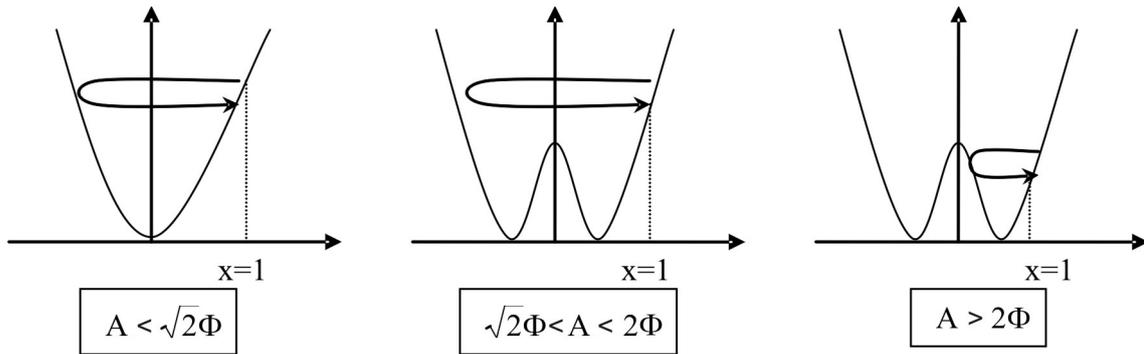


FIGURE 3.2 – Représentation de la dynamique non linéaire par une masse ponctuelle fictive classique en mouvement dans un double puits.

passer la barrière, elle sera piégée au voisinage du minimum du puits de potentiel dans lequel elle est localisée. Cette situation correspondra à la localisation de l'énergie au niveau du site sur lequel elle a été initialement déposée.

Grâce à l'analogie avec le mouvement d'une masse ponctuelle fictive, on peut quantifier ces différentes situations. En effet on obtient facilement que la hauteur de la barrière de potentiel est $A^2/2$. De plus, on peut facilement calculer l'énergie totale du système. On en déduit $E = V(1) = 2\Phi^2$. Par conséquent, on en déduit la valeur critique du paramètre non linéaire responsable du changement de régime de trajectoire : $A_C = 2\Phi$

En résumé, si $A < 2\Phi$, l'énergie sera complètement délocalisée entre les deux sites 1 et 2. Par contre, si $A > 2\Phi$, l'énergie sera piégée sur le site sur lequel on l'a déposée à l'instant initial. On parle d'auto-piégeage de l'énergie. Par contre, si $A = 2\Phi$ on ne peut conclure en extrapolant que l'énergie est juste suffisante pour passer la barrière mais avec une sorte de point d'équilibre entre les 2 sites.

3.3.2 Auto-localisation dans un réseau 1D

Si le modèle du dimère permet de réaliser des développements analytiques pour comprendre le phénomène d'auto-localisation de l'énergie, ce n'est pas le cas de DNLS sur réseau. Nous avons alors procédé à une simulation numérique de l'équation DNLS pour illustrer le comportement dynamique et le processus d'auto-piégeage.

Ainsi, nous avons réalisé l'expérience numérique suivante : à $t = 0$, nous déposons de l'énergie sur le site n_0 situé au centre du réseau. La "fonction d'onde initiale" est donc définie par $\psi_n(t = 0) = \delta_{nn_0}$. A l'aide d'un code numérique, nous avons propagé DNLS et visualisé l'évolution de la fonction d'onde au site centrale n_0 au cours du temps. Les résultats obtenus pour différentes valeurs du paramètre non linéaire A sont illustrés sur la figure 3.3.

Comme dans le cas du dimère, on constate qu'il existe une valeur critique A_C du paramètre de non linéarité définissant une bifurcation dans le comportement dynamique de la fonction d'onde au site central. Lorsque $A < A_C$, on constate que la probabilité de présence

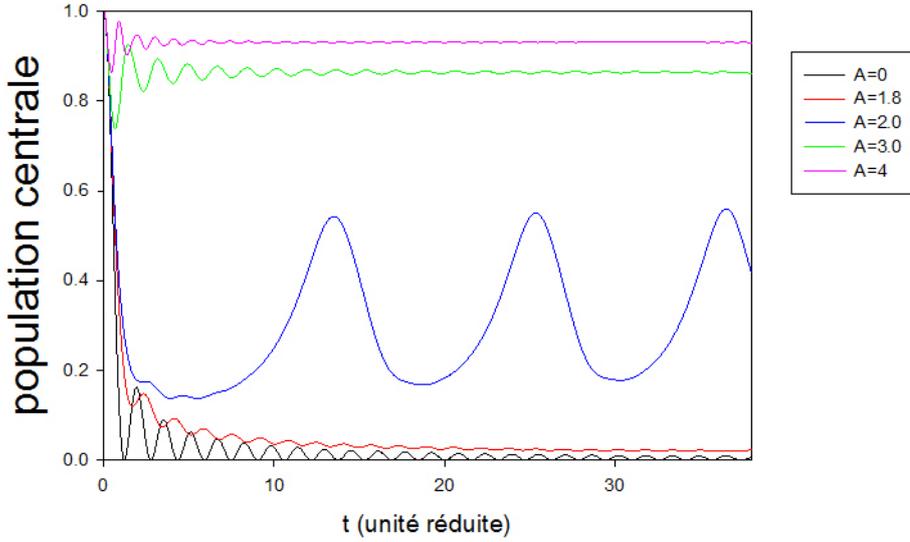


FIGURE 3.3 – Evolution temporelle de l'énergie du site excité $|\psi_{n_0}(t)|^2$.

de l'énergie sur le site excité décroît irréversiblement au cours du temps pour finalement s'annuler. Elle présente des oscillations amorties qui sont révélatrices d'une propagation cohérente de l'énergie le long du réseau. Quelques calculs simples permettent de montrer que si $A = 0$ on a :

$$|\psi_{n_0}(t)|^2 = J_0^2(2\Phi t) \quad (3.37)$$

où $J_0(z)$ est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre 0. A titre d'exemple, la figure 3.4 montre comment l'énergie se délocalise dans un réseau linéaire ($A = 0$).

Lorsque $A > A_C$, l'énergie oscille beaucoup moins vite que dans le cas précédent. De plus la probabilité de présence ne tend plus vers zéro mais converge vers une valeur de plus en plus forte au fur et à mesure que A augmente. En d'autres termes, une partie de l'énergie initiale reste localisée autour du site central, formant un objet dynamique, tandis que l'autre partie de l'énergie est transmise au reste de la chaîne.

Pour caractériser la bifurcation, c'est-à-dire la valeur critique A_C , nous avons étudié le comportement asymptotique de la valeur moyenne de la probabilité de présence centrale, notée $\langle |\psi_{n_0}|^2 \rangle$, en fonction de A . Le résultat de notre simulation montre que la valeur critique A_C est voisine de $1.75\Phi - 1.8\Phi$, c'est-à-dire, légèrement inférieure à la valeur critique 2Φ du dimère. Pour $A < A_C$, la population centrale moyenne est quasiment nulle : il y a bien délocalisation de l'énergie. A l'inverse, pour $A > A_C$, la valeur de la population centrale moyenne augmente lorsque A augmente. Cette augmentation est d'autant plus rapide que $A \approx A_C$ traduisant la localisation d'énergie.

En fait, l'excitation du site central entraîne la formation d'un mode localisé intrinsèque (discrete breather). Ce mode localisé possède sa propre dynamique interne. Bien que spatialement localisé, cet objet évolue au cours du temps. Cette dynamique est due aux interactions non linéaires entre sites voisins si bien que le mode est associé à plusieurs fréquences. La dynamique du breather est illustrée Fig. 3.5 pour $A = 2.0\Phi$ et $A = 3.0\Phi$. Lorsque $A = 2.0\Phi$,

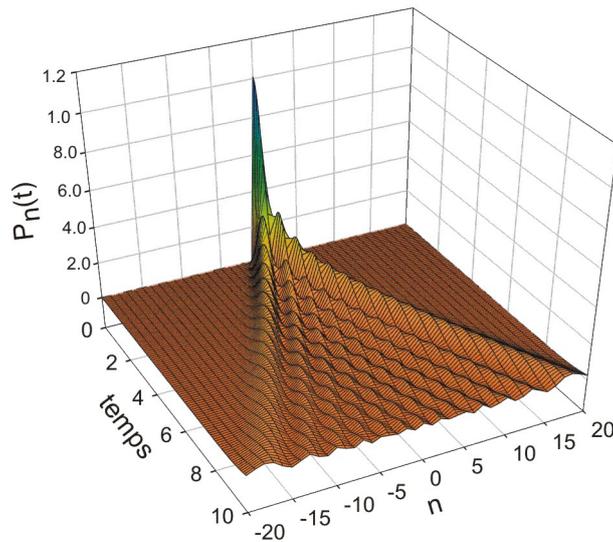


FIGURE 3.4 – Evolution spatio-temporelle de l'énergie $P_n(t) = |\psi_n(t)|^2$ dans un réseau linéaire ($A = 0$).

on voit clairement l'apparition d'un phénomène de respiration de la probabilité de présence du site centrale, effet qui est à l'origine du nom breather. A l'inverse, pour $A = 3.0\Phi$, la non linéarité est si forte que la probabilité de présence devient quasiment indépendante du temps.

Par conséquent, le mode localisé intrinsèque décrit un " objet " non linéaire spatialement localisé et périodique dans le temps ayant en quelque sorte un mouvement de respiration. Ces résultats, relatif à l'équation de Schrödinger non linéaire, se généralisent à l'ensemble des systèmes dynamiques non linéaires et discrets. Dans ces systèmes, la non linéarité est la source d'une multitude de solutions dynamiques exotiques (Breathers, Multi-Breathers, Etats liés, Solitons ...) qui semblent jouer un rôle très important dans les phénomènes de transport et de stockage de l'énergie dans les milieux physiques, chimiques et biologiques.

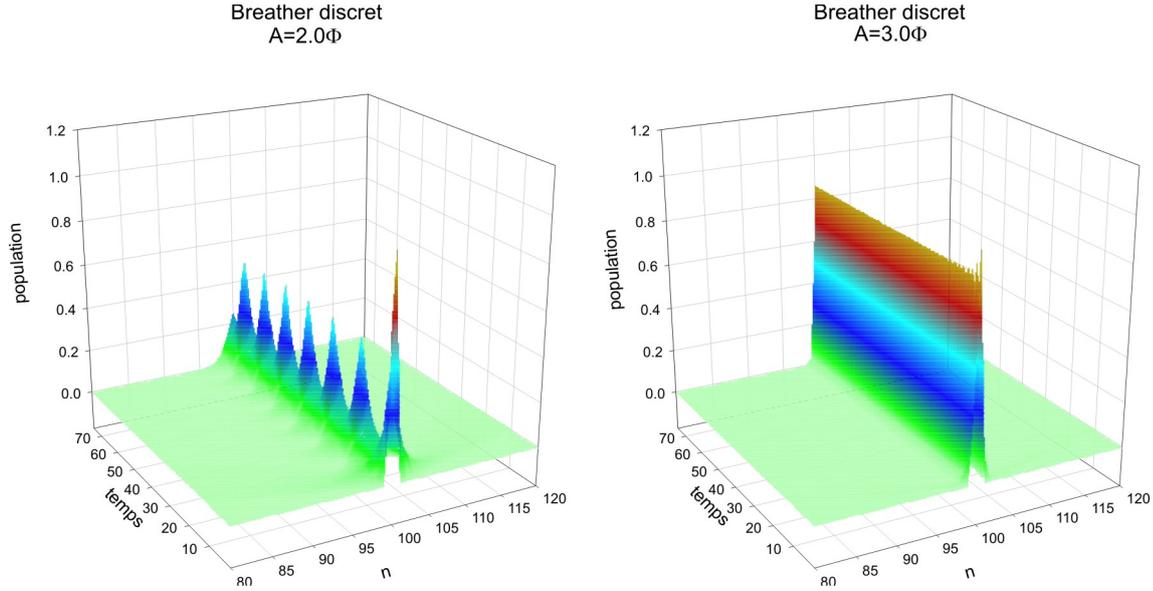


FIGURE 3.5 – Evolution spatio-temporelle de l'énergie $P_n(t) = |\psi_n(t)|^2$ dans un réseau non linéaire ($A \neq 0$).

3.4 Exercices

3.4.1 Equations de Heisenberg

A partir du modèle de Hubbard pour bosons, montrer l'isomorphisme entre les équations de Heisenberg de l'opérateur d'annihilation $b_n(t)$ et l'équation non linéaire de Schrödinger pour la coordonnée classique $\psi_n(t)$.

3.4.2 Le modèle d'Holstein adiabatique

Soit un électron se propageant le long d'un réseau 1D formé par les sites $n = 1, \dots, N$. La dynamique de l'électron est décrite par un modèle de liaisons fortes. Lorsque l'électron occupe le site n , il se trouve dans une orbitale atomique $|\varphi_n\rangle$ d'énergie E_0 . Il saute alors de site en site sous l'action d'une constante de saut J . L'Hamiltonien de l'électron est alors défini par :

$$H_e = \sum_n E_0 |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| - J (|\varphi_{n+1}\rangle \langle \varphi_n| + |\varphi_n\rangle \langle \varphi_{n+1}|) \quad (3.38)$$

L'électron interagit avec les vibrations du réseau dont la dynamique est décrite par un modèle de Einstein. Chaque site n de masse M effectue des petits mouvements d'amplitude u_n et de pulsation Ω_0 autour de sa position d'équilibre. L'Hamiltonien des vibrations est donné par :

$$H_v = \sum_n \frac{1}{2} M \dot{u}_n^2 + \frac{1}{2} M \Omega_0^2 u_n^2 \quad (3.39)$$

Enfin, le couplage électron-vibration traduit le fait que l'énergie de la n -ième orbitale atomique $|\varphi_n\rangle$ fluctue autour de E_0 compte tenu du mouvement du n -ième site. L'Hamiltonien

de couplage s'écrit :

$$V = \sum_n \chi u_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (3.40)$$

1) On cherche l'état de l'électron sous la forme :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t) |\varphi_n\rangle \quad (3.41)$$

Montrer que la fonction d'onde $\psi_n(t)$ vérifie l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \partial_t \psi_n(t) = (E_0 + \chi u_n) \psi_n(t) - J(\psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t)) \quad (3.42)$$

2) La masse des noyaux du réseau étant beaucoup plus importante que celle de l'électron, on réalise une séparation des mouvements. La première étape consiste à décrire la dynamique des vibrations en utilisant la mécanique classique. Dans ce cas, en vertu du théorème de Hellmann-Feynman, l'énergie potentielle des vibrations s'écrit :

$$W = \sum_n \frac{1}{2} M \Omega_0^2 u_n^2 + \langle \psi | V | \psi \rangle \quad (3.43)$$

En déduire les équations du mouvements classiques :

$$M \ddot{u}_n = -M \Omega_0^2 u_n - \chi |\psi_n(t)|^2 \quad (3.44)$$

3) En négligeant l'énergie cinétique des noyaux (mouvements lents), montrer que la fonction d'onde vérifie l'équation non linéaire de Schrödinger :

$$i\hbar \partial_t \psi_n(t) = E_0 \psi_n(t) - 2A |\psi_n(t)|^2 \psi_n(t) - J(\psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t)) \quad (3.45)$$

Quelle est la valeur de A ?

3.4.3 Equation non linéaire de Schrödinger

1) Quels que soient $P > 0$ et $Q > 0$, on considère l'équation de Schrödinger non linéaire :

$$i\partial_t \psi(x, t) = -P \partial_{xx} \psi(x, t) - Q |\psi(x, t)|^2 \psi(x, t) \quad (3.46)$$

Montrer qu'elle admet la solution stationnaire suivante :

$$\psi(x, t) = e^{-i\omega t} \varphi(x) \text{ avec } \varphi(x) = \frac{\alpha}{\cosh(\mu x)} \quad (3.47)$$

2) Quels que soient $P > 0$ et $Q > 0$, on considère l'équation de Schrödinger non linéaire :

$$i\partial_t \psi(x, t) = -P \partial_{xx} \psi(x, t) + Q |\psi(x, t)|^2 \psi(x, t) \quad (3.48)$$

Montrer qu'elle admet la solution stationnaire suivante :

$$\psi(x, t) = e^{-i\omega t} \varphi(x) \text{ avec } \varphi(x) = \alpha \tanh(\mu x) \quad (3.49)$$

3.4.4 Le dimère

Reprendre le problème du dimère de façon à démontrer les propriétés établies au paragraphe 3.3.1

3.4.5 Approximation de Hartree

Soit un ensemble de v bosons en interaction sur un réseau 1D dont la dynamique est décrite par un modèle de Hubbard :

$$H = \sum_n \omega_0 b_n^\dagger b_n - A b_n^\dagger b_n^\dagger b_n b_n + \Phi (b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1}) \quad (3.50)$$

On s'intéresse aux états quantiques à v bosons. On recherche alors cet état sous la forme générale suivante :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{v!}} \sum_{n_1=1}^N \sum_{n_2=1}^N \dots \sum_{n_v=1}^N f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t) b_{n_1}^\dagger b_{n_2}^\dagger \dots b_{n_v}^\dagger |\emptyset\rangle \quad (3.51)$$

où $f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t)$ est une fonction d'onde symétrique et normée à l'unité :

$$\sum_{n_1=1}^N \sum_{n_2=1}^N \dots \sum_{n_v=1}^N |f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t)|^2 = 1 \quad (3.52)$$

1) On se propose de déterminer l'équation de Schrödinger que vérifie la fonction d'onde $f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t)$. Pour cela, nous allons étudier l'influence de chaque contribution de l'Hamiltonien de Hubbard.

1.1) Terme d'énergie - En ne considérant que la contribution de H proportionnelle à ω_0 , montrer que l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\partial_t f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t) = v\omega_0 f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t) \quad (3.53)$$

1.2) Terme de saut - En ne considérant que la contribution de H proportionnelle à Φ , montrer que l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\begin{aligned} i\partial_t f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t) &= \Phi [f_v(n_1 + 1, n_2, \dots, n_v; t) + f_v(n_1 - 1, n_2, \dots, n_v; t)] \\ &+ \Phi [f_v(n_1, n_2 + 1, \dots, n_v; t) + f_v(n_1, n_2 - 1, \dots, n_v; t)] \\ &\dots \\ &+ \Phi [f_v(n_1, n_2, \dots, n_v + 1; t) + f_v(n_1, n_2, \dots, n_v - 1; t)] \end{aligned} \quad (3.54)$$

1.3) Terme de couplage entre bosons - En ne considérant que la contribution de H proportionnelle à A , montrer que l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\partial_t f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t) = -2A \sum_{i=1}^v \sum_{j=i+1}^v \delta_{n_i, n_j} f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t) \quad (3.55)$$

On notera que pour faire les différents calculs, on pourra par exemple fixer le nombre de bosons à $v = 3$.

1.4) En déduire l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned}
i\partial_t f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t) &= v\omega_0 f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t) \\
&+ \Phi[f_v(n_1 + 1, n_2, \dots, n_v; t) + f_v(n_1 - 1, n_2, \dots, n_v; t)] \\
&+ \Phi[f_v(n_1, n_2 + 1, \dots, n_v; t) + f_v(n_1, n_2 - 1, \dots, n_v; t)] \\
&\dots \\
&+ \Phi[f_v(n_1, n_2, \dots, n_v + 1; t) + f_v(n_1, n_2, \dots, n_v - 1; t)] \\
&- 2A \sum_{i=1}^v \sum_{j=i+1}^v \delta_{n_i, n_j} f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t)
\end{aligned} \tag{3.56}$$

Soit le Lagrangien défini par :

$$\begin{aligned}
L &= \sum_{n_1=1}^N \sum_{n_2=1}^N \dots \sum_{n_v=1}^N i f_v^*(n_1, n_2, \dots, n_v; t) \partial_t f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t) \\
&- v\omega_0 f_v^*(n_1, n_2, \dots, n_v; t) f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t) \\
&- \Phi f_v^*(n_1, n_2, \dots, n_v; t) [f_v(n_1 + 1, n_2, \dots, n_v; t) + f_v(n_1 - 1, n_2, \dots, n_v; t)] \\
&- \Phi f_v^*(n_1, n_2, \dots, n_v; t) [f_v(n_1, n_2 + 1, \dots, n_v; t) + f_v(n_1, n_2 - 1, \dots, n_v; t)] \\
&\dots \\
&- \Phi f_v^*(n_1, n_2, \dots, n_v; t) [f_v(n_1, n_2, \dots, n_v + 1; t) + f_v(n_1, n_2, \dots, n_v - 1; t)] \\
&+ 2A \sum_{i=1}^v \sum_{j=i+1}^v \delta_{n_i, n_j} f_v^*(n_1, n_2, \dots, n_v; t) f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t)
\end{aligned} \tag{3.57}$$

Les équations de Lagrange associées s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{f}_v} = \frac{\partial L}{\partial f_v} \tag{3.58}$$

Vérifier que ces équations de Lagrange conduisent à l'équation de Schrödinger.

2) L'approximation de Hartree suppose que chaque boson interagit avec le champ moyen créé par l'ensemble des autres bosons. On postule alors que la fonction d'onde s'écrit comme le produit de v fonctions d'onde identiques :

$$f_v(n_1, n_2, \dots, n_v; t) = \psi_{n_1}(t) \psi_{n_2}(t) \dots \psi_{n_v}(t) \tag{3.59}$$

où $\psi_n(t)$ est une fonction d'onde à un boson normée à l'unité. Montrer que le Lagrangien devient :

$$L = v \sum_{n=1}^N i \psi_n^*(t) \dot{\psi}_n(t) - \omega_0 |\psi_n(t)|^2 + A(v-1) |\psi_n(t)|^4 - \Phi \psi_n^*(t) [\psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t)] \tag{3.60}$$

En utilisant les équations de Lagrange, montrer que la fonction d'onde à un boson vérifie l'équation non linéaire de Schrödinger :

$$i\partial_t \psi_n(t) = \omega_0 \psi_n - 2A(v-1) |\psi_n|^2 \psi_n + \Phi(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) \tag{3.61}$$

Chapitre 4

Etats liés à deux bosons

Les concepts de solitons discrets et/ou de modes localisés intrinsèques sont explicitement classiques. Ces objets apparaissent dans les réseaux classiques anharmoniques du fait de la compétition entre les effets non linéaires et la nature discrète du système. Nous allons maintenant reprendre l'étude du modèle de Hubbard pour bosons et réaliser une étude quantique du problème. Cependant, plutôt que de présenter des résultats très généraux, nous allons focaliser notre attention sur les premiers états quantiques sensibles à la non linéarité. Ces états, appelés états liés à deux bosons, constituent en quelque sorte les équivalents quantiques des modes localisés intrinsèques.

4.1 Le modèle de Hubbard

On considère un ensemble de bosons identiques et indiscernables en interaction sur un réseau 1D dont la dynamique quantique est décrite par l'Hamiltonien de Hubbard défini par¹ :

$$H = \sum_n \omega_0 b_n^\dagger b_n - A b_n^\dagger b_n^\dagger b_n b_n + \Phi (b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1}) \quad (4.1)$$

D'après les notations introduites au chapitre 2, b_n^\dagger et b_n sont des opérateurs de création et d'annihilation qui respectivement créent et détruisent un boson sur le site n du réseau. Lorsqu'un boson occupe un site particulier il possède un énergie ω_0 . Par contre, les bosons ne sont pas indépendants mais ils interagissent par paires. Lorsqu'ils occupent un même site, une interaction apparaît, d'amplitude A . Sans perte de généralité, on supposera ces interactions attractive : $A > 0$. Enfin, les bosons sont capables de se délocaliser le long du réseau en sautant de site en site. On note alors Φ la constante de saut entre sites plus proches voisins.

Soit \mathcal{E} l'espace des états et soit $|\emptyset\rangle$ l'état vide décrivant une situation dans laquelle aucun boson n'est présent. L'espace \mathcal{E} est alors entièrement généré en appliquant les opérateurs créations sur le vide. Une telle opération génère la base des états nombre $|v_1, v_2, \dots, v_N\rangle$ qui

1. A partir de maintenant, pour simplifier les notations, nous travaillerons en unité $\hbar = 1$.

caractérise v_1 bosons sur le site 1, v_2 bosons sur le site 2 ... v_N bosons sur le site N .

4.2 Méthode des états nombres

Pour déterminer les états quantiques du modèle de Hubbard, nous allons utiliser la méthode dite des états nombre. Cette méthode est basée sur l'utilisation de deux propriétés essentielles du modèle de Hubbard, à savoir, la conservation du nombre total de bosons et l'invariance translationnelle.

4.2.1 Conservation du nombre de Bosons

L'Hamiltonien de Hubbard H commute avec l'opérateur nombre de bosons $\mathcal{N} = \sum_n b_n^\dagger b_n$. En vertu des équations d'évolution de Heisenberg, ceci implique que le modèle de Hubbard conserve le nombre total de bosons. Le nombre total de bosons est donc une constante du mouvement et ces valeurs propres, qui sont des entiers $v = 0, 1, 2, \dots$, forment des bons nombres quantiques. En d'autres termes, l'Hamiltonien H peut être représenté comme une succession de blocs indépendants, chaque bloc faisant référence à un nombre de bosons particulier.

De par cette propriété, l'espace des états se décompose en la somme directe suivante :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \oplus \mathcal{E}_1 \oplus \mathcal{E}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{E}_v \oplus \dots \quad (4.2)$$

où \mathcal{E}_v définit le sous-espace à v bosons. Ainsi, \mathcal{E}_0 est le sous-espace à zéro boson. Ce n'est autre que le vide de dimension 1 sous-tendu par le vecteur $|\emptyset\rangle$. De même \mathcal{E}_1 spécifie le sous-espace à un boson de dimension N ... etc. De manière générale, le dimension $D(v)$ du sous-espace \mathcal{E}_v à v bosons représente le nombre de façon de répartir v bosons indiscernables sur N sites :

$$D(v) = \frac{(v + N - 1)!}{v!(N - 1)!} \quad (4.3)$$

On notera que la dimension de ce sous-espace devient rapidement très importante lorsque N ou v deviennent grands et $D(v)$ croît typiquement selon une loi de puissance $D(v) \sim N^v/v!$ lorsque $N \gg v$. On en déduit :

$$Dim(\mathcal{E}) = \sum_{v=0}^{\infty} D(v) \quad (4.4)$$

Dans ce contexte, plutôt que de diagonaliser H directement, on pourra procéder à une succession de diagonalisation des restrictions de H au sous-espaces à 1 boson, à 2 bosons, à 3 bosons Ceci simplifie grandement le problème compte tenu de la croissance exponentielle de la taille de l'espace des états en fonction du nombre de bosons.

4.2.2 Invariance translationnelle

La seconde propriété importante de H est son invariance par translation. En effet, pour un réseau contenant N sites avec conditions aux limites périodiques, H commute avec l'opérateur translation T . L'action de T sur un état nombre $|v_1, v_2, \dots, v_{N-1}, v_N\rangle$ est définie par :

$$T|v_1, v_2, \dots, v_{N-1}, v_N\rangle = |v_N, v_1, \dots, v_{N-2}, v_{N-1}\rangle \quad (4.5)$$

T est un opérateur unitaire ($T^\dagger = T^{-1}$) qui possède N valeurs propres τ de norme unité. On définit alors le vecteur d'onde k en posant $\tau = e^{ik}$. Puisque les conditions aux limites périodiques imposent $T^N = 1$, le vecteur d'onde k est quantifié selon la relation $k = 2\pi p/N$. Il prend donc N valeurs à l'intérieur de la première zone de Brillouin $k \in [-\pi, \pi]$. Ainsi, lorsque N est impair on a $p = -(N-1)/2, \dots, (N-1)/2$ et lorsque N est pair on a $p = -N/2, \dots, N/2 - 1$.

Pour chaque sous-espace \mathcal{E}_v , il existe alors une base appelée base de Bloch dans laquelle l'opérateur T est diagonal. Les vecteurs correspondants, indexés par le vecteur d'onde k qui est un bon nombre quantique, offrent une représentation de H sous la forme de N blocs indépendants. L'utilisation de cette base permet ainsi de réduire la dimension de \mathcal{E}_v de façon à obtenir les valeurs propres et les états propres à v bosons en diagonalisant séparément chaque bloc de H .

4.3 États à un boson

Lorsqu'un seul boson est présent, l'interaction ne joue bien sûr aucun rôle si bien que le problème se réduit à celui d'une particule qui se propage librement le long du réseau. L'espace des états \mathcal{E}_1 , de dimension N , est sous-tendu par la base locale $\{|n\rangle\}$. Un vecteur particulier $|n\rangle$ décrivant la présence d'un boson sur le site n , il est défini par :

$$|n\rangle = b_n^\dagger |\emptyset\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 1_n, \dots, 0_N\rangle \quad (4.6)$$

Dans ces conditions, les états à un boson $|\psi\rangle$ se développent sur la base locale selon la relation :

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \psi(n) |n\rangle \quad (4.7)$$

où $\psi(n)$ est la fonction d'onde stationnaire du boson. L'équation de Schrödinger indépendante du temps $H|\psi\rangle = \omega|\psi\rangle$ devient :

$$(\omega_0 - \omega)\psi(n) + \Phi(\psi(n+1) + \psi(n-1)) = 0 \quad (4.8)$$

En imposant des conditions aux limites périodiques $\psi(n+N) = \psi(n)$, les solutions sont des ondes planes de la forme² :

$$\psi_k(n) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikn} \quad (4.10)$$

2. Les ondes de Bloch forment une base étendue notée $\{|k\rangle\}$. Un vecteur $|k\rangle$ quelconque se développe sur

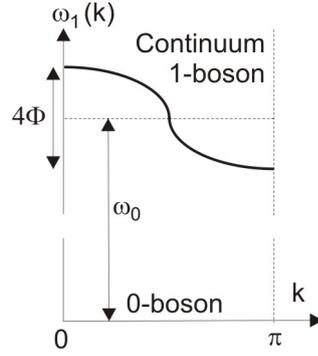


FIGURE 4.1 – Représentation du spectre des états à un boson.

avec (N impair) :

$$k = \frac{2\pi p}{N}, \quad p = -\frac{(N-1)}{2}, \dots, \frac{(N-1)}{2} \quad (4.11)$$

Les énergies propres sont alors données par :

$$\omega_1(k) = \omega_0 + 2\Phi \cos(k), \quad (4.12)$$

Les états à un boson sont donc des ondes planes dont les énergies $\omega_1(k)$ appartiennent à une bande qui s'étend entre $\omega_0 - 2\Phi$ et $\omega_0 + 2\Phi$. De tels états décrivent une délocalisation du boson le long du réseau. Pour une onde plane de vecteur d'onde k , cette propagation s'effectuera à la vitesse de groupe v_k définie par :

$$v_k = \partial_k \omega_1(k) = -2\Phi \sin(k) \quad (4.13)$$

La bande permise contenant N états étendus, le nombre d'états dont l'énergie est comprise entre ω et $\omega + d\omega$ est donné par la densité d'états $g(\omega)$. L'expression de la densité s'obtient à partir de la densité de vecteur d'onde $g(k) = 1/2\pi$ à l'intérieur de la première zone de Brillouin : $g(\omega)d\omega = 2g(k)dk$, où le facteur 2 provient du fait que $\omega_1(k) = \omega_1(-k)$. On en déduit :

$$g(\omega) = \frac{1}{\pi v_k} \Rightarrow g(\omega) = \frac{1}{\pi \sqrt{4\Phi^2 - (\omega - \omega_0)^2}} \quad (4.14)$$

On notera que la densité d'états est normalisée à l'unité : $\int g(\omega)d\omega = 1$. Elle montre deux divergences sur les bords de bande qui traduisent l'annulation de la vitesse de groupe.

la base locale $\{|n\rangle\}$ selon la relation :

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikn} |n\rangle \quad (4.9)$$

$\psi_k(n)$ est donc la n -ième composante de l'état de Bloch $|k\rangle$ dans la base locale.

4.4 États à deux bosons

4.4.1 Equation de Schrödinger

La dimension du sous-espace à deux bosons \mathcal{E}_2 est égale à $N(N+1)/2$. Elle définit le nombre de façon de distribuer 2 bosons indiscernables sur N sites. Dès lors, pour représenter H dans le sous-espace \mathcal{E}_2 , une base locale s'obtient en appliquant deux opérateurs de création sur le vide :

$$b_{n_1}^\dagger b_{n_2}^\dagger |\emptyset\rangle = \begin{cases} |0_1, \dots, 1_{n_1}, \dots, 1_{n_2}, \dots, 0_N\rangle & \text{si } n_1 \neq n_2 \\ \sqrt{2}|0_1, \dots, 2_{n_1}, \dots, \dots, 0_N\rangle & \text{si } n_1 = n_2 \end{cases} \quad (4.15)$$

Ce faisant, il convient d'être prudent et de ne pas compter deux fois un même vecteur. En effet, de par l'indiscernabilité des bosons, deux états $b_{n_1}^\dagger b_{n_2}^\dagger |\emptyset\rangle$ et $b_{n_2}^\dagger b_{n_1}^\dagger |\emptyset\rangle$ sont identiques. Dans ces conditions, pour travailler avec une base locale orthonormée qui tient compte du fait que les états doivent être symétriques par permutations des deux bosons, nous allons définir les vecteurs suivants :

$$|n_1, n_2\rangle = \begin{cases} b_{n_1}^\dagger b_{n_2}^\dagger |\emptyset\rangle & \text{si } n_2 > n_1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} b_{n_1}^{\dagger 2} |\emptyset\rangle & \text{si } n_1 = n_2 \end{cases} \quad (4.16)$$

Par convention, on choisira la contrainte $n_2 \geq n_1$ de manière à ne pas comptabiliser deux fois un même vecteur. Puisque n_1 varie de 1 à N et que $n_2 \geq n_1$, on a bien $N(N+1)/2$ vecteurs indépendants $|n_1, n_2\rangle$ qui forment une base qui sous-tend \mathcal{E}_2 .

Dans ce contexte, les états quantiques à deux bosons se développent sur la base locale selon la relation :

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1} \sum_{n_2 \geq n_1} \psi(n_1, n_2) |n_1, n_2\rangle \quad (4.17)$$

où $\psi(n_1, n_2)$ représente l'amplitude de probabilité qu'un boson occupe le site n_1 et que l'autre boson occupe le site n_2 . La représentation de l'équation de Schrödinger $H|\psi\rangle = \omega|\psi\rangle$ conduit à un ensemble d'équations indexées par les différentes valeurs des entiers n_1 et n_2 . Lorsque les deux bosons sont suffisamment espacés l'un de l'autre, c'est-à-dire lorsque $n_2 \geq n_1 + 2$, ils n'interagissent pas à travers le terme non linéaire. Ils se comportent comme deux particules libres se déplaçant sur le réseau indépendamment l'une de l'autre si bien que l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$(2\omega_0 - \omega)\psi(n_1, n_2) + \Phi[\psi(n_1, n_2 + 1) + \psi(n_1, n_2 - 1)] + \Phi[\psi(n_1 + 1, n_2) + \psi(n_1 - 1, n_2)] = 0 \quad (4.18)$$

Lorsque les deux bosons se trouvent sur des sites voisins, c'est-à-dire lorsque $n_2 = n_1 + 1$, on obtient l'équation :

$$(2\omega_0 - \omega)\psi(n_1, n_1 + 1) + \sqrt{2}\Phi[\psi(n_1, n_1) + \psi(n_1 + 1, n_1 + 1)] + \Phi[\psi(n_1, n_1 + 2) + \psi(n_1 - 1, n_1 + 1)] = 0 \quad (4.19)$$

Les deux bosons n'interagissent toujours pas mais à cause de l'indiscernabilité le terme $\sqrt{2}$ modifie l'amplitude de la transition vers les états où les deux bosons sont sur le même site.

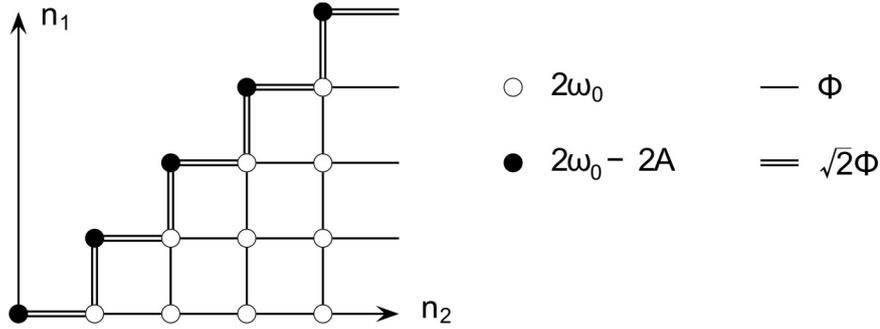


FIGURE 4.2 – L'équation de Schrödinger pour deux bosons en interaction sur un réseau 1D est isomorphe à l'équation de Schrödinger pour une particule fictive en mouvement sur un réseau 2D.

Finalement lorsque les deux bosons se trouvent sur le même site, ils interagissent par le biais du terme non linéaire et l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$(2\omega_0 - 2A - \omega)\psi(n_1, n_1) + \sqrt{2}\Phi[\psi(n_1, n_1 + 1) + \psi(n_1 - 1, n_1)] = 0 \quad (4.20)$$

La fonction d'onde $\psi(n_1, n_2)$ décrit l'évolution de deux bosons évoluant sur un réseau 1D. Cependant, comme le montrent les Eqs.(4.18), (4.19) et (4.20), elle peut être considérée comme la fonction d'onde d'une unique particule fictive en mouvement sur un réseau bidimensionnel (2D). Cette particule se propage de site en site selon une description de liaisons fortes, où chaque site est caractérisé par les coordonnées n_1 et n_2 . Puisque l'indiscernabilité des bosons impose la restriction $n_1 \leq n_2$, le réseau équivalent est semi-infini. Dans le coeur du réseau, l'énergie de chaque site est donnée par $2\omega_0$ et la particule fictive passe d'un site à l'autre à travers la constante de saut Φ . Mais lorsque l'on se rapproche du bord $n_1 = n_2$, deux types de défauts apparaissent. D'une part, les transitions qui mènent au bord du réseau correspondent à un couplage $\sqrt{2}\Phi$. D'autre part, l'énergie des sites de bord est corrigée par le facteur $-2A$. L'isomorphisme entre les Eqs.(4.18), (4.19) et (4.20) et un modèle de liaisons fortes sur un réseau 2D est illustré sur la figure 4.2.

Cette équivalence permet d'envisager la forme des états propres. Tout d'abord, le processus de délocalisation de la particule fictive dans le coeur du réseau 2D décrit une situation dans laquelle les deux bosons se propagent librement et indépendamment l'un de l'autre. Les états associés à ce type de processus sont appelés **états libres**. Ensuite, il est bien connu en physique du solide qu'un défaut a pour conséquence de créer un état localisé. Par conséquent, la présence d'une ligne de défauts dans le réseau 2D entraîne l'apparition, pour la particule fictive, d'états localisés au voisinage de cette ligne mais parfaitement étendus selon la direction spécifiée par l'équation $n_1 = n_2$. Dans le point de vue des deux bosons, ces états localisés sont appelés **états liés** puisqu'ils traduisent une localisation de la distance de séparation entre les deux bosons. Ceux-ci forment alors une paire qui se comporte comme une unique particule capable de se délocaliser le long du réseau physique 1D.

A ce stade, la détermination des états à deux bosons est facilitée par l'utilisation de l'invariance translationnelle. En effet, pour le réseau fictif 2D, la figure 4.2 montre clairement l'invariance du système lorsque l'on incrémente d'une même quantité les deux coordonnées n_1 et n_2 . Cette transformation correspond à une translation du centre de masse des deux

bosons le long du réseau physique. Par conséquent, l'invariance translationnelle traduit la délocalisation du centre de masse des deux quanta, que l'état considéré soit un état libre ou un état lié. En tenant compte de ce mécanisme, il est alors possible de réduire la dimension du sous-espace à deux bosons, et donc celle du réseau équivalent sur lequel se déplace la particule fictive. Pour cela, introduisons deux coordonnées : n_1 la position du premier boson et $m = n_2 - n_1$ la distance entre les deux bosons. Si n_1 peut prendre les N valeurs décrivant les sites du réseaux, les conditions aux limites périodiques restreignent l'interdistance m à ne pas dépasser la demi-longueur du réseau. Définir une interdistance au-delà de cette distance ne peut avoir de sens. Ainsi m varie de 0 à $(N - 1)/2$, si bien que la fonction d'onde est bien décomposée sur une base de dimension $N(N + 1)/2$. On notera que la description utilisée dans cet exposé s'applique uniquement pour les valeurs impaires de N , le cas N pair nécessitant un traitement légèrement différent. Cependant, à la limite $N \rightarrow \infty$, la parité de N ne joue aucun rôle spécifique.

Puisque la fonction d'onde est invariante lorsque les deux bosons effectuent une translation sur le réseau, elle possède la forme d'une onde de Bloch du type³ :

$$\psi(n_1, n_2 = n_1 + m) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ik(n_1 + m/2)} \psi_k(m) \quad (4.22)$$

où k désigne le vecteur d'onde associé à la coordonnée du centre de masse $(n_1 + n_2)/2 = n_1 + m/2$ et où $\psi_k(m)$ est la fonction d'onde résiduelle associée à la distance de séparation entre les deux bosons. Compte tenu des conditions aux limites périodiques, k prend les N valeurs :

$$k = \frac{2p\pi}{N}, \quad p = -\frac{N-1}{2}, \dots, \frac{N-1}{2} \quad (4.23)$$

Le vecteur d'onde k est un bon nombre quantique si bien que l'équation de Schrödinger pourra être résolue pour chaque valeur de k . Ainsi, pour un valeur de k fixée, l'application de la transformation Eq. (4.22) aux Eqs. (4.18), (4.19) et (4.20) permet d'obtenir une équation de Schrödinger pour la fonction d'onde résiduelle $\psi_k(m)$. Cependant, cette équation dépend explicitement des valeurs de m et trois situations apparaissent :

$$\begin{aligned} 2\omega_0\psi_k(m) + \Phi_k[\psi_k(m+1) + \psi_k(m-1)] &= \omega\psi_k(m) \quad \text{si } m \geq 2 \\ 2\omega_0\psi_k(1) + \sqrt{2}\Phi_k\psi_k(0) + \Phi_k\psi_k(2) &= \omega\psi_k(1) \quad \text{si } m = 1 \\ (2\omega_0 - 2A)\psi_k(0) + \sqrt{2}\Phi_k\psi_k(1) &= \omega\psi_k(0) \quad \text{si } m = 0 \end{aligned} \quad (4.24)$$

où $\Phi_k = 2\Phi \cos(k/2)$.

Pour résoudre le problème, nous allons nous placer dans la limite $N \rightarrow \infty$. Le cas N fini avec conditions aux limites périodiques est détaillé dans l'annexe D. Dès lors, l'Eq. (4.24) montrent que la fonction d'onde $\psi_k(m)$ de l'interdistance m entre les deux bosons est isomorphe à celle d'une unique particule fictive se propageant sur le réseau 1D semi-infini représenté sur la figure 4.3. Sur ce réseau, la dynamique de la particule fictive est gouvernée

3. Le développement en ondes de Bloch du centre de masse des deux bosons traduit l'introduction d'une base intermédiaire notée $\{|k, m\rangle\}$. Un vecteur $|k, m\rangle$ quelconque se développe sur la base locale $\{|n_1, n_2 = n_1 + m\rangle\}$ selon la relation :

$$|k, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n_1} e^{ik(n_1 + m/2)} |n_1, n_1 + m\rangle \quad (4.21)$$

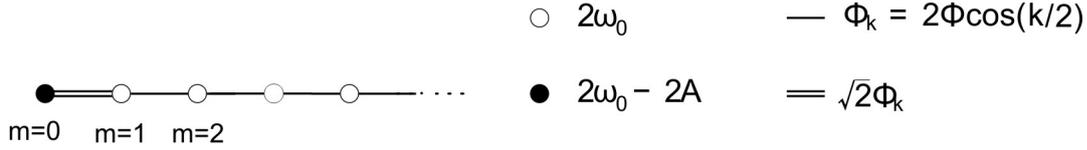


FIGURE 4.3 – L'équation de Schrödinger pour l'interdistance entre les deux bosons en interaction sur un réseau 1D est isomorphe à l'équation de Schrödinger pour une particule fictive en mouvement sur un réseau 1D.

par un modèle de liaisons fortes qui possède les propriétés suivantes. Dans le coeur du réseau ($m \geq 2$), l'énergie de chaque site est $2\omega_0$ et le couplage entre sites voisins est Φ_k . Par contre, vers le bord, le réseau 1D équivalent présente deux défauts : l'énergie du site $m = 0$ est déplacée d'un facteur $-2A$ et le couplage entre les sites $m = 0$ et $m = 1$ est $\sqrt{2}\Phi_k$.

Dans ces conditions, l'Eq. (4.24) permet de déterminer l'ensemble des états. Puisque le problème se réduit à l'étude d'un réseau de taille semi-infini qui possède deux défauts, il est naturel d'introduire une fonction d'onde ayant deux paramètres. D'une part, loin du bord, cette fonction d'onde doit décrire une particule fictive sur un réseau localement invariant par translation. Elle doit donc contenir des ondes planes. D'autre part, le défaut correspondant à la modulation de la constante de saut entre les sites $m = 0$ et $m = 1$ va perturber la fonction d'onde au voisinage du bord. Par conséquent, nous allons chercher une solution de la forme :

$$\psi_k(m) = \begin{cases} \alpha & \text{pour } m = 0 \\ \beta e^{iqm} & \text{pour } m \geq 1 \end{cases} \quad (4.25)$$

où le paramètre q joue le rôle du vecteur d'onde de la particule fictive. Dès lors, en étudiant l'équation de Schrödinger dans le coeur du réseau équivalent, nous obtenons la relation de dispersion suivante :

$$\omega_2(k, q) = 2\omega_0 + 2\Phi_k \cos q \quad (4.26)$$

Dans ce contexte, deux types d'états émergent selon les valeurs possibles du vecteur d'onde.

4.4.2 États à deux bosons libres

Dans le coeur du réseau, l'analyse de l'Eq. (4.24) montre que le vecteur d'onde q est réel. Il peut prendre un ensemble de valeurs qui appartiennent à la première zone de Brillouin du réseau. Un tel vecteur d'onde décrit donc une délocalisation de la particule fictive dont la fonction d'onde se comporte comme une onde plane légèrement modifiée au voisinage du bord du réseau. Compte tenu de l'expression de Φ_k , l'énergie d'un tel état est définie par :

$$\omega_2(k, q) = 2\omega_0 + 4\Phi \cos(k/2) \cos q \equiv 2\omega_0 + 2\Phi \cos(k/2 + q) + 2\Phi \cos(k/2 - q) \quad (4.27)$$

En réalisant le changement de variables $k = k_1 + k_2$ et $q = (k_2 - k_1)/2$ on obtient finalement

$$\omega_2(k, q) \equiv 2\omega_0 + 2\Phi \cos k_1 + 2\Phi \cos k_2 = \omega_1(k_1) + \omega_1(k_2) \quad (4.28)$$

Ce résultat montre clairement que les états propres correspondant décrivent la propagation de deux ondes planes indépendantes de vecteur d'onde k_1 et k_2 . En d'autres termes, la propagation de la particule fictive traduit une délocalisation de l'interdistance entre les deux bosons. Tout se passe comme si les deux bosons étaient libres et évoluaient indépendamment l'un de l'autre. De tels états sont appelés états à deux bosons libres et correspondent grossièrement aux états à deux bosons en l'absence d'interaction.

4.4.3 Etats à deux bosons liés

Lorsque $A \neq 0$, la présence d'un défaut d'énergie sur le site $m = 0$ suggère que la particule fictive puisse se trouver dans un état localisé. Un tel état correspond à une valeur complexe du vecteur d'onde q . En effet, si l'on injecte la solution Eq. (4.25) dans l'équation de Schrödinger pour $m = 0$ et $m = 1$ on obtient le système 2×2 suivants :

$$\begin{aligned} - & (2A + 2\Phi_k \cos(q))\alpha + \sqrt{2}\Phi_k e^{iq}\beta = 0 \\ + & \sqrt{2}\Phi_k\alpha - \Phi_k\beta = 0 \end{aligned} \quad (4.29)$$

Les solutions de ce système sont non triviales si et seulement si :

$$\sin(q) = -i \frac{A}{\Phi_k} \quad (4.30)$$

Cette équation admet une solution complexe $q = \pi + i/\xi$ avec :

$$\sinh(1/\xi) = \frac{A}{\Phi_k} \quad (4.31)$$

Après normalisation, la fonction d'onde s'écrit :

$$\psi_k(m) \begin{cases} \alpha & \text{pour } m = 0 \\ (-1)^m \sqrt{2}\alpha e^{-m/\xi} & \text{pour } m \geq 1 \end{cases} \quad (4.32)$$

avec

$$\alpha = \left(\frac{A}{\sqrt{A^2 + 4\Phi^2 \cos^2(k/2)}} \right)^{1/2} \quad (4.33)$$

Sachant que pour l'état localisé on a $\cos(q) = -\cosh(1/\xi) = -\sqrt{1 + A^2/\Phi_k^2}$, son énergie s'écrit :

$$\omega_2(k, L) = 2\omega_0 + 4\Phi \cos(k/2) \cos q \equiv 2\omega_0 - 2\sqrt{A^2 + 4\Phi^2 \cos^2(k/2)} \quad (4.34)$$

Dans le réseau 1D équivalent, l'Eq. (4.32) décrit un état localisé au voisinage du bord $m = 0$. Il correspond à une décroissance exponentielle de la fonction d'onde spécifiée par la longueur de localisation ξ . Cette localisation traduit la formation d'un état lié dans lequel les deux bosons sont piégés l'un vers l'autre. La longueur de localisation est alors une mesure de la distance moyenne entre les deux bosons de la paire. La non linéarité gouverne le degré de localisation et plus A augmente, plus la longueur de localisation ξ diminue. On peut remarquer également que cette longueur dépend du vecteur d'onde k . Pour A donné, elle est maximale en $k = 0$ et devient nulle lorsque $k = \pi$.

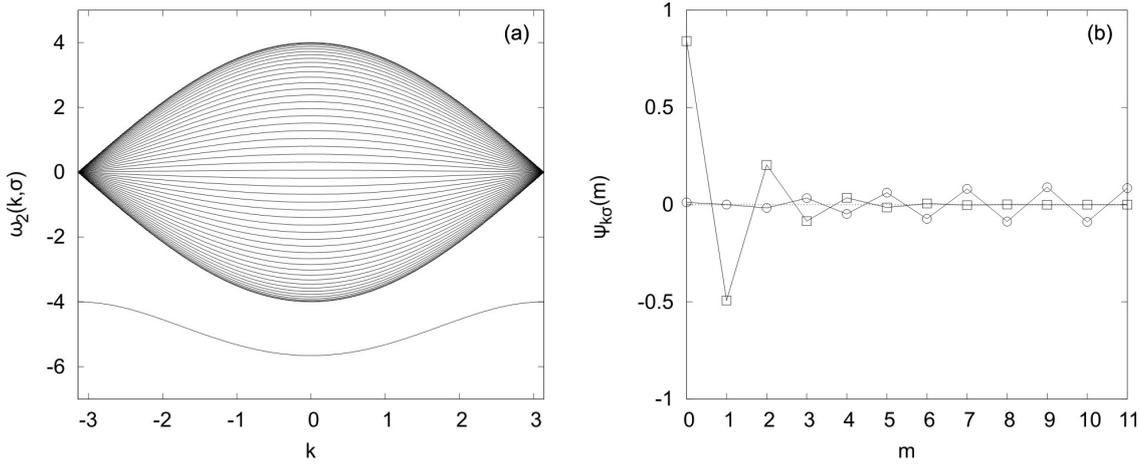


FIGURE 4.4 – Fréquences propres (a) et vecteurs propres (b) de l’hamiltonien de Hubbard pour $v = 2$, $\omega_0 = 0$ et $A = 2\Phi$. Les vecteurs propres sont donnés pour $k = 0$. En carré vide est représenté l’état lié, en rond vide est illustré un état libre.

4.4.4 Spectre du modèle de Hubbard

Dans le sous-espace des états à deux bosons, les états propres de l’Hamiltonien de Hubbard sont notés $|\psi_{k\sigma}\rangle$. L’indice k définit le vecteur d’onde associé à la délocalisation du centre de masse des deux bosons. L’indice σ , qui prend $(N + 1)/2$ valeurs, caractérise la partie de la fonction d’onde associée à l’interdistance entre les deux bosons. Un état propre $|\psi_{k\sigma}\rangle$ se développe alors sur la base locale $|n_1, n_2\rangle$ selon la relation :

$$|\psi_{k\sigma}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \sum_m \psi_{k\sigma}(m) e^{ik(n+m/2)} |n, n+m\rangle \quad (4.35)$$

Le spectre du modèle de Hubbard est alors formé par les énergies propres associées $\omega_2(k, \sigma)$ dont l’allure est illustrée sur la figure 4.4. L’ensemble des états libres forme un continuum qui s’étend de $2\omega_0 - 4\Phi$ à $2\omega_0 + 4\Phi$. Les énergies associées correspondent à la somme des énergies de deux bosons indépendants. Par contre, les états liés se regroupent dans une bande localisée en dessous du continuum sur l’ensemble de la zone de Brillouin. La largeur de cette bande est définie par :

$$\Delta\omega = 2\sqrt{A^2 + 4\Phi^2} - 2A \quad (4.36)$$

D’un point de vue dynamique, les états liés décrivent une paire de bosons qui se comporte comme une unique particule délocalisée sur le réseau et dont les énergies permises appartiennent à une bande. La dynamique de la paire est essentiellement gouvernée par la non linéarité qui confère aux états liés le nom de breathers quantiques. En effet, si l’on crée initialement une paire en un point du réseau, son centre de masse va se délocaliser sur une échelle de temps inversement proportionnelle à la largeur de la bande. Par conséquent, plus la non linéarité est importante, plus la bande est étroite et donc plus le temps nécessaire à la paire pour se délocaliser est important. Typiquement, pour $A \gg \Phi$, la paire restera localisée sur le site initial durant un temps de l’ordre de $A/4\Phi^2$.

Néanmoins, à l’inverse du breather classique, l’invariance translationnelle du réseau empêche

toute localisation de l'énergie de par le phénomène de dispersion. La paire finira donc par se délocaliser le long du réseau, délocalisation qui sera accompagnée d'un étalement irréversible du paquet d'ondes correspondant. En effet chaque mode du paquet va se propager à une vitesse différente donnée par :

$$v_k = \partial_k \omega_2(k, L) = \frac{2\Phi^2 \sin(k)}{\sqrt{A^2 + 4\Phi^2 \cos^2(k/2)}} \quad (4.37)$$

On remarquera une fois encore que la non linéarité s'oppose à la dispersion puisque lorsque A augmente, la vitesse de chaque mode tend vers zéro.

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré que la non linéarité modifie fondamentalement la dynamique des bosons sur un réseau 1D. Elle brise l'indépendance entre les bosons et favorise l'émergence d'états spécifiques : les états liés à deux bosons. Ces états, explicitement sensibles à la non linéarité, traduisent une localisation de l'interdistance bosonique qui entraîne le piégeage des bosons les uns vers les autres. En ce sens les états liés apparaissent clairement comme le pendant quantique des breathers ou des solitons. Cependant, contrairement aux solutions classiques ou semi-classiques, l'invariance translationnelle du réseau entraîne une délocalisation du centre de masse des bosons liés qui est décrit par une onde plane. Ce centre de masse subit donc irréversiblement le phénomène de dispersion ce qui empêche toute localisation spatiale de l'énergie. Mais l'anharmonicité contrôle ce mécanisme si bien que plus la non linéarité sera importante, plus la dynamique de l'état lié sera lente.

4.6 Exercices

4.6.1 Loi de conservation

Montrer que l'Hamiltonien de Hubbard commute avec l'opérateur nombre total de bosons $\mathcal{N} = \sum_n b_n^\dagger b_n$. En déduire qu'il a conservation du nombre total de bosons.

4.6.2 Invariance par translation

Soit T l'opérateur translation dont l'action sur un état nombre s'écrit :

$$T|v_1, v_2, \dots, v_N\rangle = |v_N, v_1, \dots, v_{N-1}\rangle \quad (4.38)$$

Montrer que T est unitaire et qu'il vérifie la relation $Tb_n^\dagger = b_{n+1}^\dagger T$. En déduire que l'Hamiltonien de Hubbard commute avec T .

4.6.3 Fonction d'onde d'un état lié

La fonction d'onde d'un état lié s'écrit :

$$\psi_k(m) = \alpha e^{-m/\xi} [(-1)^m \sqrt{2} + (1 - \sqrt{2})\delta_{m,0}] \quad (4.39)$$

1) Sachant que $\sinh(1/\xi) = A/\Phi_k$, avec $\Phi_k = 2\Phi \cos(k/2)$, montrer que

$$\alpha = \sqrt{\tanh(1/\xi)} = \left(\frac{A}{\sqrt{A^2 + 4\Phi^2 \cos^2(k/2)}} \right)^{1/2} \quad (4.40)$$

2) Montrer que la moyenne quantique de m dans l'état $\psi_k(m)$ est :

$$\langle m \rangle = \frac{1}{\sinh(2/\xi)} \quad (4.41)$$

Exprimer $\langle m \rangle$ en fonction de A et Φ .

4.6.4 Auto-piégeage partiel

1) A $t = 0$, on suppose que l'on crée un seul boson sur le site n_0 . Montrer que la probabilité que le boson occupe le site n_0 à l'instant t est définie par (on parle de probabilité de survie) :

$$P_{n_0}^{(1)}(t) = J_0^2(2\Phi t) \quad (4.42)$$

où $J_0(z)$ est la fonction de Bessel de première espèce qui s'écrit :

$$J_0(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{iz \cos(k)} \quad (4.43)$$

2) On suppose que l'on crée deux bosons sur le site n_0 . Dans la limite $A \gg \Phi$, montrer que la probabilité que les deux bosons occupent le site n_0 à l'instant t est s'écrit :

$$P_{n_0}^{(2)}(t) = J_0^2 \left(2 \frac{\Phi^2}{A} t \right) \quad (4.44)$$

Pour établir ce résultat, on montrera que les deux bosons se comportent comme une unique particule qui se délocalise le long du réseau selon une constante de saut effective $\Phi_{eff} = -\Phi^2/A$.

3) Sachant que le premier zéro de la fonction de Bessel $J_0(z)$ apparaît pour $z = 2.40$, montrer que deux bosons liés restent beaucoup plus longtemps localisés que deux bosons libres.

4.6.5 Fonction de corrélation de la densité

Soit un ensemble de bosons dont la dynamique est décrite par un Hamiltonien de Hubbard H sur réseau. Soit $|\psi\rangle$ un état propre de H . On se propose de calculer $\mathcal{C}_\psi(r)$, la fonction de corrélation de la densité de bosons dans l'état $|\psi\rangle$ définie par :

$$\mathcal{C}(r) = \sum_n \langle \psi | b_{n+r}^\dagger b_{n+r} b_n^\dagger b_n | \psi \rangle \quad (4.45)$$

avec $r \geq 0$.

1) On se place tout d'abord dans le sous-espace à un boson. On considère alors un état $|\psi\rangle$ dont la fonction d'onde $\psi_k(n)$ dans la base locale $|n\rangle = b_n^\dagger |\emptyset\rangle$ décrit une onde plane de vecteur d'onde k :

$$\psi_k(n) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikn} \quad (4.46)$$

Montrer que dans ce cas, la fonction de corrélation de la densité s'écrit :

$$\mathcal{C}(r) = \delta_{r,0} \quad (4.47)$$

2) On se place maintenant dans le sous-espace à deux bosons. On considère alors un état $|\psi\rangle$ dont la fonction d'onde $\psi_k(n_1, n_2)$ dans la base locale $|n_1, n_2\rangle$ (avec $n_2 \geq n_1$) est définie par :

$$\psi_k(n_1, n_2) = \frac{1}{\sqrt{N}} \psi_k(m) e^{ik(n_2+m/2)} \text{ avec } m = n_2 - n_1 \quad (4.48)$$

Montrer que la fonction de corrélation de la densité s'écrit :

$$\mathcal{C}(r) = \begin{cases} 2(1 + |\psi_k(m=0)|^2) & \text{si } r = 0 \\ |\psi_k(m=r)|^2 & \text{si } r \neq 0 \end{cases} \quad (4.49)$$

En déduire que pour $r > 0$ on a typiquement :

$$\mathcal{C}(r) \approx \begin{cases} \frac{1}{N} & \text{pour un état libre} \\ e^{-r/\xi} & \text{pour un état lié} \end{cases} \quad (4.50)$$

Comme expliquez-vous ces différents résultats ?

4.6.6 Réseau équivalent

En réalisant la transformation de Holstein-Primakoff, l'Hamiltonien des magnons d'une chaîne de spins s'écrit (voir les exercices du chapitre 2) :

$$\begin{aligned} H \approx & -NJS^2 + \sum_n 2JSa_n^\dagger a_n - JS(a_n^\dagger a_{n+1} + a_{n+1}^\dagger a_n) - \sum_n Ja_{n+1}^\dagger a_n^\dagger a_{n+1} a_n \\ & + \sum_n \frac{J}{4} (a_n^\dagger [a_{n+1}^\dagger a_{n+1} + a_n^\dagger a_n] a_{n+1} + a_{n+1}^\dagger [a_{n+1}^\dagger a_{n+1} + a_n^\dagger a_n] a_n) \end{aligned} \quad (4.51)$$

Montrer que la dynamique des états à deux magnons est isomorphe à celle d'une unique particule en mouvement sur un réseau 2D que l'on déterminera.

4.6.7 Etats liés : développement dans la base non symétrisée

Le but de cet exercice est de retrouver les résultats relatifs aux états à deux bosons liés mais en développant la fonction d'onde sur une base non symétrisée qui ne tient pas compte de l'indiscernabilité des bosons.

1) Un état à deux bosons $|\psi\rangle$ s'écrit sous la forme générale suivante :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \psi(n_1, n_2) b_{n_1}^\dagger b_{n_2}^\dagger |\emptyset\rangle \quad (4.52)$$

où $\psi(n_1, n_2)$ est la fonction d'onde des deux bosons. Par définition, seules les fonctions d'onde symétriques par échange des deux bosons ont une signification physique :

$$\psi(n_1, n_2) = \psi(n_2, n_1) \quad (4.53)$$

Montrer que la normalisation de l'état $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ implique :

$$\sum_{n_1} \sum_{n_2} |\psi(n_1, n_2)|^2 = 1 \quad (4.54)$$

2) Montrer que l'équation de Schrödinger $H|\psi\rangle = \omega|\psi\rangle$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \omega\psi(n_1, n_2) &= 2\omega_0\psi(n_1, n_2) - 2A\delta_{n_1, n_2}\psi(n_1, n_2) \\ &+ \Phi[\psi(n_1 + 1, n_2) + \psi(n_1 - 1, n_2) + \psi(n_1, n_2 + 1) + \psi(n_1, n_2 - 1)] \end{aligned} \quad (4.55)$$

3) On réalise le changement de variables suivant :

$$\begin{aligned}\bar{n} &= \frac{n_1 + n_2}{2} \text{ centre de masse} \\ m &= n_2 - n_1 \text{ interdistance qui ici peut être positive ou négative}\end{aligned}\quad (4.56)$$

Déterminer l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde $\psi(\bar{n}, m)$. Chercher ensuite une solution sous la forme d'une onde de Bloch vis-à-vis de la coordonnée du centre de masse :

$$\psi(\bar{n}, m) = \psi_k(m)e^{ik\bar{n}} \quad (4.57)$$

où $\psi_k(m)$ est la fonction d'onde de l'interdistance m . Montrer qu'elle vérifie :

$$\omega\psi_k(m) = (2\omega_0 - 2A\delta_{m,0})\psi_k(m) + \Phi_k[\psi_k(m+1) + \psi_k(m-1)] \quad (4.58)$$

avec $\Phi_k = 2\Phi \cos(k/2)$

4) Nous allons chercher une solution de la forme :

$$\psi_k(m) = (-1)^m \alpha e^{-\kappa|m|} \quad (4.59)$$

i) Montrer que :

$$\alpha = \sqrt{\tanh(\kappa)} \quad (4.60)$$

ii) En étudiant l'équation de Schrödinger pour $|m| > 1$, montrer que :

$$\omega = 2\omega_0 - 2\Phi_k \cosh(\kappa) \quad (4.61)$$

iii) En étudiant l'équation de Schrödinger pour $|m| = 0$, montrer que :

$$\sinh(\kappa) = \frac{A}{\Phi_k} \quad (4.62)$$

A partir de ces résultats, retrouver les caractéristiques des états liés (fonction d'onde, longueur de localisation, énergie) en fonction des paramètres physiques Φ et A .

Chapitre 5

Etats liés à v bosons : une approche approximative

De manière générale, le modèle de Hubbard pour bosons peut être résolu dans les deux situations asymptotiques suivantes. Dans la limite classique, lorsque le nombre de bosons excités est relativement grand, la dynamique est gouvernée par l'équation non linéaire de Schrödinger. Celle-ci montre le phénomène d'auto-piégeage à travers l'existence de modes localisés intrinsèques. A l'inverse, lorsque le nombre de bosons se réduit à un ou deux, le modèle de Hubbard admet une solution quantique exacte. En particulier, la non linéarité favorise l'émergence d'états liés à deux bosons qui apparaissent comme le pendant quantique des modes localisés intrinsèques. Dans un état lié, les deux bosons sont piégés l'un vers l'autre. Ils forment une paire qui se comporte comme une unique particule capable de se délocaliser sur le réseau.

Malheureusement, la généralisation de ces processus à un plus grand nombre de bosons n'est pas simple et, a priori, il n'existe pas de théories rigoureuses permettant de caractériser les états à plus de deux bosons. Cependant, sur la base de diverses simulations numériques du modèle de Hubbard, il est possible de formuler une théorie approximative permettant de caractériser les états liés à v bosons, et ce quel que soit v . Comme nous allons l'exposer dans ce chapitre, cette méthode n'est pas générale mais elle repose sur une théorie des perturbations qui s'applique dans le cas d'une forte non linéarité.

5.1 Le modèle du réseau équivalent

5.1.1 Position du problème

L'élaboration d'une théorie des perturbations et l'utilisation de simulations numériques ont permis de montrer que le modèle de Hubbard avec interaction attractive possède des états liés particuliers quel que soit le nombre de bosons. En effet, lorsque v bosons sont présents dans un réseau fortement non linéaire, le spectre supporte toujours une bande de

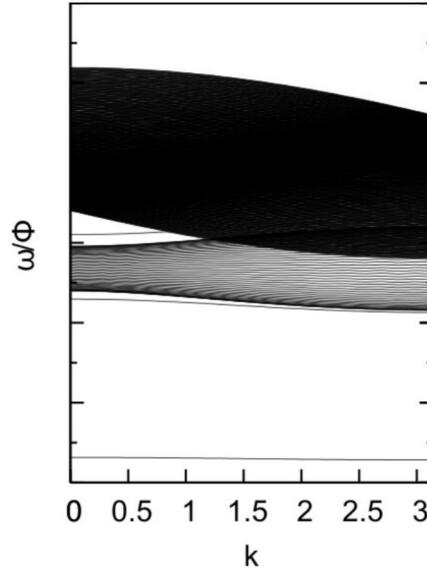


FIGURE 5.1 – Spectre du modèle de Hubbard centré sur $3\omega_0$ pour $N = 91$, $v = 3$ et $A = 3\Phi$. Le spectre présente deux continua et trois bandes isolés. Le continuum de haute énergie caractérise les états libres qui décrivent 3 bosons indépendants. Le continuum de basse énergie quant à lui décrit les états où deux bosons sont piégés alors que le troisième boson évolue librement. À l'inverse, les bandes isolées réfèrent à des états liés. La bande de basse énergie définit la bande solitonique qui contient les états à 3 bosons liés. Les deux autres bandes décrivent des états liés pour lesquels deux bosons sont piégés sur un même site alors que le troisième boson est localisé sur un site plus proche voisin.

basse énergie, appelée bande solitonique, qui contient l'ensemble des états liés à v bosons. Dans de tels états, les v bosons sont localisés les uns vers les autres et se comportent comme une unique particule qui se délocalise le long du réseau selon une constante de saut effective (voir figure 5.1).

Par conséquent, d'un point de vue dynamique, lorsque l'on crée v quanta sur un même site à un instant initial, seule la bande solitonique est significativement excitée. On observe alors la localisation d'un agrégat de v bosons sur une échelle de temps qui est d'autant plus longue que la non linéarité et le nombre de bosons sont élevés. Cet effet, qui est la signature quantique du phénomène d'auto-piégeage, disparaît finalement sur des temps très longs compte tenu du mécanisme de dispersion.

Pour caractériser la bande solitonique, il convient de résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps associée à l'Hamiltonien de Hubbard. Cependant, nous ferons l'hypothèse qu'une telle démarche s'inscrit dans une étude dynamique de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Le choix des conditions initiales nous permettra alors d'allumer uniquement la bande solitonique. Ainsi, nous ferons les hypothèses suivantes :

1) On considère un ensemble de bosons dont la dynamique est gouvernée par un Hamiltonien de Hubbard avec interaction attractive :

$$H = \sum_n \omega_0 b_n^\dagger b_n - A b_n^\dagger b_n^\dagger b_n b_n + \Phi (b_{n+1}^\dagger b_n + b_n^\dagger b_{n+1}) \quad (5.1)$$

2) Pour analyser le phénomène d'auto-piégeage quantique, nous supposons qu'initialement v bosons sont créés sur un site n_0 particulier du réseau physique. L'état initial du système sera alors défini par :

$$|\psi(t=0)\rangle = \frac{b_{n_0}^{\dagger v}}{\sqrt{v!}}|\emptyset\rangle \quad (5.2)$$

3) Puisque H conserve le nombre total de bosons, l'évolution de l'état du système s'effectuera à l'intérieur du sous-espace à v bosons \mathcal{E}_v de dimension $D(v) = (v + N - 1)!/v!(N - 1)!$:

$$|\psi(t)\rangle \in \mathcal{E}_v \quad \forall t \quad (5.3)$$

4) Nous considérerons le cas où la non linéarité est forte devant la dispersion :

$$A \gg \Phi \quad (5.4)$$

5.1.2 Observations numériques

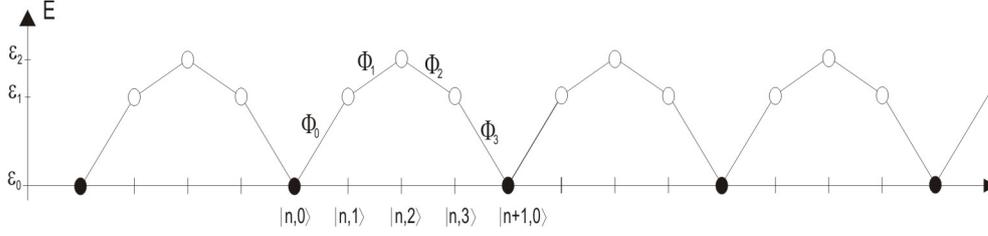
Le sous-espace \mathcal{E}_v est sous-tendu par une base dont les vecteurs peuvent être regroupés en deux familles. La première famille contient l'ensemble des vecteurs qui décrivent v bosons relativement *éloignés* les uns des autres. Ces vecteurs se combinent pour générer les continua qui décrivent les états libres du spectre de H . La seconde famille fait référence à l'ensemble des vecteurs qui caractérisent v bosons qui sont proches les uns des autres. En se superposant, ces vecteurs donnent naissance aux bandes d'états liés. Dans ce contexte, à partir de l'observations des simulations numériques, il est possible de montrer que pour $A \gg \Phi$, la dynamique qui suit l'excitation initiale de v bosons sur un site fait principalement intervenir les états de la base qui décrivent v bosons proches les uns des autres. On en déduit la propriété suivante :

Propriété :

Dans la limite $A \gg \Phi$, lorsque v bosons sont initialement localisés sur un site particulier, la dynamique gouvernée par l'Hamiltonien de Hubbard H est relativement bien décrite par la restriction de H au sous-espace \mathcal{E}'_v de \mathcal{E}_v qui est généré par l'ensemble des vecteurs caractérisant v bosons distribués sur 2 sites. Le sous-espace \mathcal{E}'_v , de dimension $D'(v) = N \times v$, est alors sous-tendu par la base $\{|n, p\rangle\}$ définie par :

$$|n, p\rangle = |0_1, \dots, 0_{n-1}, (v-p)_n, p_{n+1}, 0_{n+2}, \dots, 0_N\rangle \quad (5.5)$$

Un vecteur $|n, p\rangle$ caractérise $v-p$ bosons sur le site n et p bosons sur le site $n+1$. L'indice n parcourt le réseau alors que l'indice p varie de 0 à $v-1$. On notera que le vecteur $|n, v\rangle$ n'existe pas car on aurait 0 bosons sur le site n et v bosons sur le site $n+1$. Or une telle situation est déjà décrite par le vecteur $|n+1, 0\rangle$.

FIGURE 5.2 – Modèle du réseau équivalent pour $v = 4$.

5.1.3 Représentation de H dans \mathcal{E}'_v

Dans la base $\{|n, p\rangle\}$, les éléments diagonaux de l'Hamiltonien $\epsilon_p = \langle n, p | H | n, p \rangle$ correspondent à l'énergie de $v - p$ bosons sur le site n et de p bosons sur le site $n + 1$. De par l'interaction entre bosons, on a :

$$\epsilon_p = \omega_0(v - p) - A(v - p)(v - p - 1) + \omega_0 p - Ap(p - 1) \quad (5.6)$$

Soit, en posant $\epsilon_0 = \omega_0 v - Av(v - 1)$:

$$\epsilon_p = \epsilon_0 + 2Ap(v - p) \quad (5.7)$$

Sous l'action du latéral, c'est-à-dire lorsque l'on tient compte de la délocalisation des bosons, un vecteur $|n, p\rangle$ se couple avec un vecteur $|n, p + 1\rangle$. L'élément de matrice correspondant, noté $\Phi_p = \langle n, p | H | n, p + 1 \rangle = \langle n, p + 1 | H | n, p \rangle$, est défini par :

$$\Phi_p = \Phi \sqrt{(v - p)(p + 1)} \quad (5.8)$$

On notera la symétrie $\Phi_p = \Phi_{v-p-1}$. On remarquera alors que la constante qui correspond à la transition entre $|n, v - 1\rangle$ et $|n + 1, 0\rangle$ est égale à $\Phi_{v-1} = \Phi_0 = \sqrt{v}\Phi$.

Dans le sous-espace \mathcal{E}_2 , nous avons montré au cours du chapitre précédent l'équivalence entre la dynamique de 2 bosons sur un réseau physique 1D et celle d'une unique particule en mouvement sur un réseau de dimension 2. Dans la restriction \mathcal{E}'_v , une telle équivalence existe mais apparaît grandement simplifiée puisque le réseau équivalent est maintenant 1D. En effet, on remarque facilement que la représentation de H dans le sous-espace \mathcal{E}'_v correspond à un modèle de liaisons fortes pour une unique particule sur le réseau 1D représenté sur la figure 5.2. Sur ce réseau, lorsque la particule occupe un site (n, p) , elle possède une énergie ϵ_p . Elle est alors capable de sauter entre deux sites plus proches voisins sous l'action d'une constante de saut Φ_p .

L'introduction du réseau équivalent nous permet de passer du problème à N -corps de v bosons en interaction sur un réseau physique 1D au problème simple d'une unique particule fictive décrite par un modèle de liaisons fortes sur un réseau 1D. Dès lors, créer initialement v bosons sur le site n_0 traduit le fait de préparer la particule fictive sur le site $(n_0, 0)$ du réseau équivalent. Caractériser la dynamique dans le réseau réel revient alors à étudier la délocalisation de la particule fictive le long du réseau équivalent.

5.2 Etats à v bosons

5.2.1 Approche numérique

La figure 5.2 révèle que le réseau équivalent est invariant par translation. Il décrit une distribution périodique de cellules primitives contenant v sites. Ainsi, la n -ième cellule étant caractérisée par les sites $|n, p\rangle$ avec $p = 0, \dots, v - 1$, il apparaît naturel de représenter l'hamiltonien dans une base d'ondes planes $|k, p\rangle$ définie par :

$$|k, p\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikn} |n, p\rangle \quad (5.9)$$

Dans cette base de Bloch, chaque bloc $H(k)$ caractérisé par le vecteur d'onde k est représenté par une matrice ($v \times v$) qui s'écrit :

$$H(k) = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & \Phi_0 & 0 & \dots & 0 & \Phi_0 e^{-ik} \\ \Phi_0 & \epsilon_1 & \Phi_1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \Phi_1 & \epsilon_2 & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \dots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \Phi_{v-3} & \epsilon_{v-2} & \Phi_{v-2} \\ \Phi_0 e^{ik} & 0 & \dots & 0 & \Phi_{v-2} & \epsilon_{v-1} \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

A ce stade, seule une diagonalisation numérique permet de résoudre le problème général. Une telle procédure conduit à v valeurs propre $\omega_\alpha(k)$, avec $\alpha = 1, \dots, v$, et à v vecteurs propres. Chaque valeur propre définit une relation de dispersion qui représente une bande permise pour la particule fictive en mouvement sur le réseau équivalent. Cependant, si l'on revient au problème de départ, il apparaît que la bande de plus basse fréquence, notée $\omega_s(k)$, représente la bande solitonique. L'analyse des vecteurs propres révèle alors que cette bande décrit des états à v bosons fortement liés faisant principalement intervenir les états de la base qui décrivent v bosons sur un même site.

5.2.2 Théorie des perturbations

Lorsque $A \gg \Phi$, les états $|n, 0\rangle$ d'énergie ϵ_0 sont fortement non résonants avec les états $|n', p\rangle$ d'énergie ϵ_p tels que $p \neq 0$. Par conséquent, un état $|n, 0\rangle$ aura plutôt tendance à s'hybrider avec un état voisin $|n+1, 0\rangle$ à travers l'ensemble des états $|n, p\rangle$ avec $p = 1, v-2$. Une telle hybridation sera à l'origine de la bande solitonique qui se réduit aux états de Bloch qui sont principalement des superpositions des états $|n, 0\rangle$.

Pour étudier la bande solitonique, nous allons utiliser une théorie des perturbations qui consiste à traiter de manière approximative le couplage entre un état $|n, 0\rangle$ et l'ensemble des états voisins $|n \pm 1, p\rangle$ avec $p \neq 0$ de façon à mettre en lumière l'existence d'une interaction effectif entre $|n, 0\rangle$ et $|n \pm 1, 0\rangle$. Cette approche, relativement générale, combine méthode des

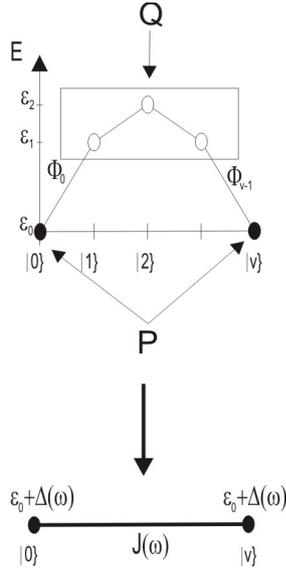


FIGURE 5.3 – Modèle du réseau équivalent pour le dimère quantique.

projecteurs et théorie des fonctions de Green. Ainsi, plutôt que de l'appliquer directement au réseau, nous allons la développer pour le cas du dimère quantique. La généralisation au cas du réseau sera alors immédiate.

Le dimère quantique

Le problème du dimère quantique correspond simplement à la restriction du modèle de Hubbard à un système de deux sites plus proches voisins. Dans le sous-espace à v bosons, une bonne base permettant de représenter la dynamique sera notée $|p\rangle$, avec $p = 0, \dots, v$. Un vecteur $|p\rangle$ décrit alors $v - p$ bosons sur le site 1 et p bosons sur le site 2. On notera la correspondance entre la base $|p\rangle$ du dimère et la base $|n, p\rangle$ du réseau avec $|n, p\rangle = |p\rangle$ pour $p = 0, v - 1$ et $|n + 1, 0\rangle = |v\rangle$, pour $n = 1$ par exemple. Dans cette base, la représentation de l'Hamiltonien de Hubbard est définie par :

$$H = \sum_{p=0}^v \epsilon_p |p\rangle \langle p| + \sum_{p=0}^{v-1} (\Phi_p |p\rangle \langle p+1| + |p+1\rangle \langle p|) \quad (5.11)$$

Comme illustré sur la figure 5.3, la dynamique de v bosons sur le dimère est équivalente à un modèle de liaisons fortes pour un unique particule fictive en mouvement sur un réseau de taille finie contenant $v + 1$ sites. On notera que ce réseau correspond à une cellule primitive du réseau équivalent de la figure 5.2

Pour étudier le couplage effectif entre les états $|0\rangle$ et $|v\rangle$ à travers l'ensemble des états $|p\rangle$, avec $p = 1, \dots, v - 1$, nous allons découper le sous-espace à v bosons en deux sous-espaces. Comme illustré sur la figure 5.3 le premier sous-espace, noté \mathcal{E}_P , est sous-tendu par les états pertinents $|0\rangle$ et $|v\rangle$. Par contre, le second sous-espace, noté \mathcal{E}_Q , est sous-tendu par l'ensemble des vecteurs restants $|p\rangle$ avec $p = 1, \dots, v - 1$. On introduit alors les projecteurs

suivants :

$$\begin{aligned} P &= |0\rangle\{0| + |v\rangle\{v| \\ Q &= \sum_{p=1}^{v-1} |p\rangle\{p| \end{aligned} \quad (5.12)$$

L'opérateur P réalise une projection sur \mathcal{E}_P alors que Q effectue une projection sur \mathcal{E}_Q . On a évidemment $PQ = QP = 0$ et $P^2 = P$, $Q^2 = Q$ et $P + Q = 1$. On note alors \mathcal{H}_P la restriction de H à \mathcal{E}_P , \mathcal{H}_Q la restriction de H à \mathcal{E}_Q et \mathcal{V} le couplage entre les deux sous-espaces :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_P &= \epsilon_0|0\rangle\{0| + \epsilon_v|v\rangle\{v| \\ \mathcal{H}_Q &= \sum_{p=1}^{v-1} \epsilon_p|p\rangle\{p| + \sum_{p=1}^{v-2} \Phi_p(|p\rangle\{p+1| + |p+1\rangle\{p|) \\ \mathcal{V} &= \Phi_0(|0\rangle\{1| + |1\rangle\{0|) + \Phi_{v-1}(|v\rangle\{v-1| + |v-1\rangle\{v|) \end{aligned} \quad (5.13)$$

Soit $|\psi\rangle$ l'état quantique de la particule fictive sur le réseau équivalent et ψ_p la fonction d'onde correspondante : $\psi_p = \{p|\psi\rangle$. A partir de l'équation de Schrödinger $H|\psi\rangle = \omega|\psi\rangle$, notre but est d'utiliser une méthode de projection pour obtenir une équation approximative uniquement pour les composantes ψ_0 et ψ_v . Pour cela, on introduit la relation de fermeture $P + Q = 1$ dans l'équation de Schrödinger et on réalise une projection sur P et sur Q par la gauche. On obtient alors le système d'équations vectorielles couplées :

$$\begin{aligned} PH(P + Q)|\psi\rangle &= \omega P|\psi\rangle \\ QH(P + Q)|\psi\rangle &= \omega Q|\psi\rangle \end{aligned} \quad (5.14)$$

En exprimant formellement $Q|\psi\rangle$ en fonction de $P|\psi\rangle$ à partir de la seconde équation et en injectant l'expression obtenue dans la première équation, on obtient finalement :

$$(\mathcal{H}_P + PVQ\mathcal{G}_Q(\omega)QVP)|\psi\rangle = \omega P|\psi\rangle \quad (5.15)$$

où $\mathcal{G}_Q(\omega) = (\omega - \mathcal{H}_Q)^{-1}$ est la fonction de Green associée à la restriction de H au sous-espace \mathcal{E}_Q .

Ainsi, tout se passe comme si la dynamique des états $|0\rangle$ et $|v\rangle$ était gouvernée par un Hamiltonien effectif. Cette Hamiltonien entraîne une renormalisation $\Delta(\omega)$ de l'énergie des états $|0\rangle$ et $|v\rangle$. Il induit également un couplage effectif $\mathcal{J}(\omega)$ entre les états. Dans ces conditions, en projetant l'équation (5.15) sur les états $|0\rangle$ et $|v\rangle$, on en déduit l'équation de Schrödinger effective :

$$\begin{aligned} (\epsilon_0 + \Delta(\omega))\psi_0 + \mathcal{J}(\omega)\psi_v &= \omega\psi_0 \\ (\epsilon_0 + \Delta(\omega))\psi_v + \mathcal{J}(\omega)\psi_0 &= \omega\psi_v \end{aligned} \quad (5.16)$$

avec :

$$\begin{aligned} \Delta(\omega) &= \Phi_0^2\{1|\mathcal{G}_Q(\omega)|1\} = \Phi_{v-1}^2\{v-1|\mathcal{G}_Q(\omega)|v-1\} \\ \mathcal{J}(\omega) &= \Phi_0\Phi_{v-1}\{1|\mathcal{G}_Q(\omega)|v-1\} = \Phi_0\Phi_{v-1}\{v-1|\mathcal{G}_Q(\omega)|v\} \end{aligned} \quad (5.17)$$

où nous avons utilisé le fait que la fonction de Green, Φ_p et ϵ_p sont symétriques.

L'expression explicite de $\Delta(\omega)$ et $\mathcal{J}(\omega)$ requiert l'évaluation de $\mathcal{G}_Q(\omega)$. Pour cela, nous allons utiliser un développement des perturbations dont le principe est le suivant. Dans le sous-espace \mathcal{E}_Q , on considère que tous les couplages Φ_p entre les différents états sont une perturbation $\Delta\mathcal{H}_Q$ d'un hamiltonien diagonal \mathcal{H}_{0Q} . Ceci permet de réaliser un développement de la fonction de Green dit de Dyson en fonction de la fonction de Green non perturbée $\mathcal{G}_{0Q}(\omega) = (\omega - \mathcal{H}_{0Q})^{-1}$:

$$\mathcal{G}_Q(\omega) = \mathcal{G}_{0Q}(\omega) + \mathcal{G}_{0Q}(\omega)\Delta\mathcal{H}_Q\mathcal{G}_{0Q}(\omega) + \mathcal{G}_{0Q}(\omega)\Delta\mathcal{H}_Q\mathcal{G}_{0Q}(\omega)\Delta\mathcal{H}_Q\mathcal{G}_{0Q}(\omega) + \dots \quad (5.18)$$

Ensuite, nous fixons l'énergie ω à la valeur ϵ_0 de l'énergie des états $|0\rangle$ et $|v\rangle$. Ce faisant, on en déduit :

$$\begin{aligned} \Delta &\approx \frac{\Phi_0^2}{\epsilon_0 - \epsilon_1} \\ \mathcal{J} &\approx \frac{\Phi_0\Phi_1\Phi_2\dots\Phi_{v-1}}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)(\epsilon_0 - \epsilon_2)\dots(\epsilon_0 - \epsilon_{v-1})} \end{aligned} \quad (5.19)$$

Compte tenu des expressions de ϵ_p et de Φ_p , on a finalement :

$$\begin{aligned} \Delta &\approx -\frac{v}{v-1} \times \frac{\Phi^2}{2A} \text{ pour } v > 1 \\ \mathcal{J} &\approx (-1)^{v-1} \frac{v\Phi^v}{(v-1)!(2A)^{v-1}} \end{aligned} \quad (5.20)$$

La théorie des perturbations montre donc que le dimère quantique possède deux états liés d'énergie $\omega_{\pm} = \epsilon_0 + \Delta \pm \mathcal{J}$. Les fonctions d'ondes correspondantes sont des superpositions linéaires des états $|0\rangle$ et $|v\rangle$ qui décrivent respectivement v bosons sur le premier site et v bosons sur le second site. Dans un état lié, les v bosons sont piégés les uns sur les autres. Ils forment alors une unique entité semblable à un unique particule capable de se délocaliser entre les deux sites du dimère.

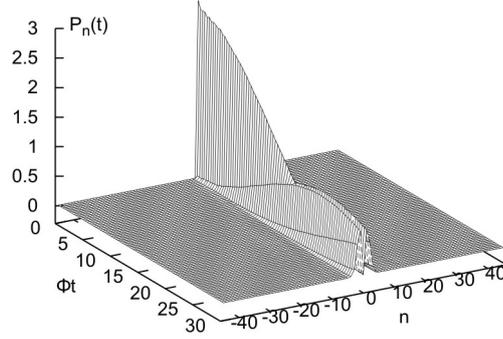
Le réseau 1D

La généralisation de la théorie des perturbations au cas du réseau 1D est relativement triviale. Elle révèle que chaque état $|n, 0\rangle$ interagit avec les états voisins $|n \pm 1, 0\rangle$ via la constante de saut effective \mathcal{J} . De plus, l'énergie de chaque état $|n, 0\rangle$ est corrigée d'une quantité 2Δ , le facteur deux provenant du fait que l'état $|n, p\rangle$ interagit de manière non résonante avec l'ensemble des états intermédiaires $|n, p\rangle$ et $|n-1, p\rangle$, avec $p = 1, \dots, v-1$. Dans ces conditions, la projection de la fonction d'onde $\psi_n = \langle n, 0 | \psi \rangle$ sur les états pertinents vérifie l'équation de Schrödinger :

$$(\epsilon_0 + 2\Delta)\psi_n + \mathcal{J}(\psi_{n-1} + \psi_{n+1}) = \omega\psi_n \quad (5.21)$$

Les solutions de l'Eq.(5.21) sont des ondes planes de vecteur d'onde k dont les énergies $\omega_s(k)$ définissent la bande solitonique :

$$\omega_s(k) \approx \epsilon_0 + 2\Delta + 2\mathcal{J} \cos(k) \quad (5.22)$$

FIGURE 5.4 – Evolution spatio-temporelle du nombre moyen de bosons pour $v = 3$.

Soit :

$$\omega_s(k) \approx \omega_0 v - Av(v-1) - v \frac{\Phi^2}{A} + 2 \frac{(-1)^{v-1} v \Phi^v}{(v-1)!(2A)^{v-1}} \cos(k) \quad (5.23)$$

Ainsi, lorsque $A \gg \Phi$, les états $|n, 0\rangle$ qui décrivent v bosons sur un site particulier n se couplent les uns aux autres pour produire la bande solitonique qui décrit les états à v bosons liés. Dans un tel état, les v bosons sont quasiment piégés les uns sur les autres. Ils se comportent alors comme une unique particule dont la dynamique est décrite par un modèle de liaisons fortes qui possède comme paramètre l'énergie de site $\epsilon_0 + 2\Delta$ et la constante de saut \mathcal{J} .

Par conséquent, en accord avec le théorème de Bloch pour un réseau invariant par translation, les v bosons forment un paquet d'énergie capable de se délocaliser le long du réseau. Il n'y a donc pas d'auto-piégeage au sens strict du terme. Cependant, la constante de saut qui gouverne la délocalisation des v bosons liés varie comme :

$$\mathcal{J} = (-1)^{v-1} \Phi \frac{v}{(v-1)!} \left(\frac{\Phi}{2A} \right)^{v-1} \quad (5.24)$$

\mathcal{J} est donc d'autant plus faible que la non linéarité est importante et que le nombre de bosons est grand. Cela signifie que les v bosons resteront partiellement localisés sur le site sur lequel ils ont été créés sur un échelle de temps qui sera d'autant plus longue que la non linéarité sera importante et que le nombre de bosons sera grand. On peut alors voir un tel effet comme la manifestation quantique du phénomène d'auto-piégeage.

5.3 Résultats numériques

Pour illustrer les conséquences sur la dynamique de l'excitation de la bande solitonique, la figure 5.4 montre l'évolution spatio-temporelle du nombre moyen de bosons $P_n(t) = \langle \Psi(t) | b_n b_n^\dagger | \Psi(t) \rangle$ après la création de $v = 3$ sur le site central n_0 d'un réseau contenant $N = 91$ sites. La non linéarité est fixée à $A = 3\Phi$.

La figure montre que la population du site initial $P_{n_0}(t)$ décroît très lentement au cours du temps. Elle atteint 50 % de sa valeur initiale pour un temps de l'ordre de $t = 13.5\Phi^{-1}$. Lorsque

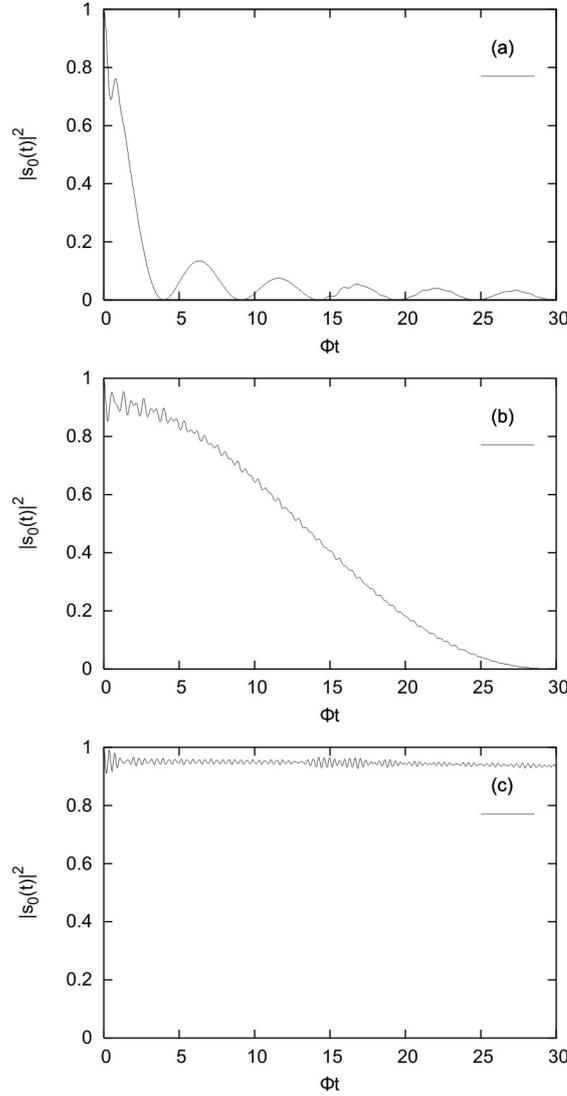


FIGURE 5.5 – Evolution temporelle de la probabilité de survie de l'état initial pour (a) $v = 2$, (b) $v = 3$ et (c) $v = 4$.

$A = 0$, ce temps caractéristique est typiquement 10 fois court ce qui indique clairement que la non linéarité favorise la localisation de l'énergie sur une échelle de temps importante. Néanmoins, l'énergie se propage aux temps longs et la population bosonique se délocalise le long du réseau. Mais cette propagation correspond à un processus relativement lent.

La figure 5.5 montre l'évolution temporelle de la probabilité de survie de l'état initial pour $v = 2$ (figure a), $v = 3$ (figure b) et $v = 4$ (figure c). Le nombre de sites est fixé à $N = 29$ et $A = 3\Phi$. Après la création à $t = 0$ de v bosons sur le site central n_0 , la probabilité de survie $S_0(t)$ est la probabilité d'observer les v bosons sur le site n_0 à l'instant t .

La figure montre que $S_0(t)$ décroît lentement au cours du temps ce qui indique encore une fois que l'énergie reste localisée sur le site initial sur une échelle de temps qui croît avec le nombre de bosons. Par exemple, le premier zéro de la probabilité de survie apparaît à $t = 4\Phi^{-1}$ et à $t = 30\Phi^{-1}$ pour $v = 2$ et 3, respectivement. Lorsque $v = 4$, $S_0(t)$ est presque

constante sur l'échelle de temps montrée sur la figure.

Si l'on assimile l'état lié à v bosons à une unique particule qui se délocalise le long du réseau avec une constante de saut effective \mathcal{J} , le probabilité de survie de l'état initial varie typiquement comme :

$$S_0(t) = J_0^2(2\mathcal{J}t) \quad (5.25)$$

où $J_0(z)$ est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre zéro. Sachant que le premier zéro de la fonction de Bessel apparaît pour $z = 2.40$, on en déduit que $S_0(t)$ passe une première fois par zéro pour $t^* = 1.2\mathcal{J}^{-1}$. Soit :

$$\Phi t^* = 1.4 \frac{(v-1)!}{v} \left(\frac{2A}{\Phi} \right)^{v-1} \quad (5.26)$$

Pour $A = 3\Phi$, on en déduit $t^* = 4.2\Phi^{-1}$ et à $t^* = 33.6\Phi^{-1}$ pour $v = 2$ et 3 , en très bon accord avec les résultats numériques. De plus, pour $v = 4$ on obtient $t^* = 453.6\Phi^{-1}$, un temps 100 fois plus long que pour $v = 2$!

5.4 Exercices

5.4.1 Etats liés à 2 bosons

- 1) Dans le cas $v = 2$, déterminer la matrice $H(k)$ Eq.(5.10) et calculer ses valeurs propres.
- 2) Le bande solitonique correspond à la valeur propre de plus basse énergie. Déterminer son expression dans la limite $A \gg \Phi$. Montrer que l'on retrouve le développement en série de Taylor de la relation de dispersion des états à deux bosons liés (Eq.(4.34)).

5.4.2 Auto-piégeage sur le dimère quantique

Soient v bosons en interaction sur deux sites $n = 1$ et $n = 2$ dont la dynamique est décrite par un modèle de Hubbard. A $t = 0$, les v bosons sont initialement créés sur le site $n = 1$. Pour d'étudier le phénomène d'auto-piégeage quantique, on se propose de caractériser la probabilité $P(t)$ d'observer les v bosons sur le site $n = 1$ à l'instant $t > 0$.

1) Préambule

Soit un système quantique dont la dynamique est gouvernée par un Hamiltonien H . On note $U(t)$ l'opérateur d'évolution et $G(\omega)$ la fonction de Green définis par :

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp(-iHt) \\ G(\omega) &= (\omega - H)^{-1} \end{aligned} \quad (5.27)$$

Montrer que l'amplitude de probabilité d'observer le système dans un état $|f\rangle$ à $t > 0$ sachant qu'il était dans un état $|i\rangle$ à $t = 0$ s'écrit :

$$U_{fi}(t) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \text{Im} G_{fi}(\omega + i0^+) \quad (5.28)$$

où pour assurer la convergence de l'intégrale, nous avons sous-entendu que la fréquence ω se comportait comme un nombre complexe $\omega \equiv \omega + i\epsilon$ avec ϵ un nombre réel que l'on fait tendre vers zéro par valeur positive.

Pour obtenir l'égalité, on utilisera la relation :

$$\frac{1}{\omega + i0^+ - \omega_q} = PP \frac{1}{\omega - \omega_q} - i\pi\delta(\omega - \omega_q) \quad (5.29)$$

où PP désigne la partie principale. Au sens de Cauchy, la partie principale de certaines intégrales impropres est définie par :

$$PP \int_a^b f(x)dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_a^{c-\epsilon} f(x)dx + \int_{c+\epsilon}^b f(x)dx \quad (5.30)$$

où c représente la singularité de $f(x)$, c'est-à-dire $f(c) = \pm\infty$. Dans ce contexte, la partie principale de $1/x$ est définie comme une distribution qui, agissant sur une fonction $u(x)$,

s'exprime en fonction de la partie principale de Cauchy suivante :

$$PP\left(\frac{1}{x}\right)u(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{|x|>\epsilon} \frac{u(x)}{x} dx \quad (5.31)$$

2) On considère le problème du dimère quantique développé dans le paragraphe 5.2.2. En utilisant la méthode des projecteurs, montrer que la restriction de la fonction de Green du dimère au sous-espace sous tendu par les vecteurs $|0\rangle$ et $|v\rangle$ s'écrit :

$$PG(\omega)P = P(\omega - \mathcal{H}_P - \Sigma(\omega))^{-1}P \quad (5.32)$$

avec

$$\Sigma(\omega) = P\mathcal{V}Q\mathcal{G}_Q(\omega)Q\mathcal{V}P \quad (5.33)$$

3) En réalisant un développement perturbatif, montrer que :

$$\begin{aligned} \Sigma_{00}(\omega) &= \Sigma_{vv}(\omega) \approx \frac{v\Phi^2}{\omega - \epsilon_1} \\ \Sigma_{0v}(\omega) &= \Sigma_{v0}(\omega) \approx \mathcal{J} \end{aligned} \quad (5.34)$$

4) Pour simplifier l'écriture, nous supposons que ϵ_0 est la référence des énergies. Cela revient à poser $\epsilon_0 = 0$ dans les équations si bien que ω devient $\omega - \epsilon_0$ et ϵ_1 devient $\epsilon_1 - \epsilon_0$. Dans ce cas, montrer que la fonction de Green $PG(\omega)P$ est une matrice 2×2 qui s'écrit :

$$PG(\omega)P = \begin{pmatrix} \omega - \Sigma_{00}(\omega) & -\mathcal{J} \\ -\mathcal{J} & \omega - \Sigma_{00}(\omega) \end{pmatrix}^{-1} \quad (5.35)$$

En déduire que :

$$G_{00}(\omega) = \frac{1}{2} \frac{\omega - \epsilon_1}{(\omega - \omega_{1+})(\omega - \omega_{1-})} + \frac{1}{2} \frac{\omega - \epsilon_1}{(\omega - \omega_{2+})(\omega - \omega_{2-})} \quad (5.36)$$

avec :

$$\begin{aligned} \omega_{1\pm} &= \frac{\epsilon_1 + \mathcal{J}}{2} \pm \frac{\epsilon_1 - \mathcal{J}}{2} \sqrt{1 + \frac{4v\Phi^2}{(\epsilon_1 - \mathcal{J})^2}} \\ \omega_{2\pm} &= \frac{\epsilon_1 - \mathcal{J}}{2} \pm \frac{\epsilon_1 + \mathcal{J}}{2} \sqrt{1 + \frac{4v\Phi^2}{(\epsilon_1 + \mathcal{J})^2}} \end{aligned} \quad (5.37)$$

5) En utilisant la relation entre la fonction de Green et l'opérateur d'évolution, montrer que l'amplitude de probabilité de trouver v bosons sur le site $n = 1$ à $t > 0$ sachant qu'ils occupaient le site $n = 1$ à $t = 0$ s'écrit :

$$\begin{aligned} U_{00}(t) &= \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_{1+} - \epsilon_1}{\omega_{1+} - \omega_{1-}} \right) e^{-i\omega_{1+}t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_{1-} - \epsilon_1}{\omega_{1-} - \omega_{1+}} \right) e^{-i\omega_{1-}t} \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_{2+} - \epsilon_1}{\omega_{2+} - \omega_{2-}} \right) e^{-i\omega_{2+}t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_{2-} - \epsilon_1}{\omega_{2-} - \omega_{2+}} \right) e^{-i\omega_{2-}t} \end{aligned} \quad (5.38)$$

En réalisant un développement limité dans la limite $A \gg \Phi$, en déduire l'expression suivante :

$$U_{00}(t) \approx x e^{-i\epsilon_1 t} + (1-x) e^{+ix\epsilon_1 t} \cos(\mathcal{J}t) \quad (5.39)$$

avec

$$x = \frac{v\Phi^2}{\epsilon_1^2} \quad (5.40)$$

6) Montrer que la probabilité d'observer les v bosons sur le site $n = 1$ à $t > 0$ est définie par :

$$P(t) \approx (1-2x) \cos^2(\mathcal{J}t) + 2x \cos(\epsilon_1 t) \quad (5.41)$$

Comment interprétez-vous cette relation ?

5.4.3 Localisation dans un réseau semi-infini

Dans ce problème, on se propose d'étudier le phénomène de localisation d'un état lié à v bosons sur l'extrémité $n = 0$ d'un réseau semi-infini composé des sites $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. La dynamique sera décrite par un modèle de Hubbard avec $\Phi > 0$ et $A > 0$ et on considérera la limite d'un réseau fortement non linéaire : $A \gg \Phi$. Notre but est de montrer que la bande solitonique peut présenter un état à v bosons localisés selon la valeur du nombre de bosons.

1) Dans l'esprit du cours exposé dans ce chapitre, on suppose initialement la création de v bosons sur un site particulier. Dans ce cas, la dynamique est restreinte au sous-espace \mathcal{E}'_v de \mathcal{E}_v sous-tendu par la base $|n, p\rangle$ avec $n = 0, 1, 2, \dots$ et $p = 0, 1, \dots, v-1$. La dynamique des v bosons est alors isomorphe à un modèle de liaisons fortes pour une unique particule fictive en mouvement sur un réseau équivalent. Quelle est la nature de ce réseau et quelles sont les caractéristiques du modèle de liaisons fortes.

2) Afin de caractériser la bande solitonique, on considère la projection $\psi_n = (n, 0|\psi\rangle$ d'un état propre à v bosons liés $|\psi\rangle$ sur les vecteurs de base pertinents $|n, 0\rangle$. En utilisant les résultats de la théorie des perturbations, montrer que pour $n \geq 0$ les ψ_n vérifient l'équation de Schrödinger :

$$(\epsilon_0 + 2\Delta - \Delta\delta_{n,0})\psi_n + \mathcal{J}(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) = \omega\psi_n \quad (5.42)$$

avec :

$$\begin{aligned} \epsilon_0 &= v\omega_0 - v(v-1)A \\ \Delta &\approx -\frac{v}{v-1} \times \frac{\Phi^2}{2A} \\ \mathcal{J} &\approx \frac{(-1)^{v-1} v \Phi^v}{(v-1)!(2A)^{v-1}} \end{aligned} \quad (5.43)$$

On notera que $\Delta = 0$ pour $v = 1$.

En déduire l'équivalence avec un modèle de liaisons fortes sur un réseau 1D semi-infini qui présente un défaut ponctuel sur le site $n = 0$.

3) On recherche une solution localisée sur le bord $n = 0$ de la forme :

$$\psi_n = \alpha e^{i\mu n} e^{-\kappa n} \quad (5.44)$$

avec $\kappa > 0$. En étudiant l'équation de Schrödinger pour $n > 0$, montrer que μ ne peut être égal que à 0 ou à π . En déduire que l'énergie de cet état vérifie :

$$\omega = \epsilon_0 + 2\Delta + 2\mathcal{J} \cos(\mu) \cosh(\kappa) \quad (5.45)$$

En étudiant l'équation de Schrödinger pour $n = 0$, montrer que μ et κ sont donnés par l'équation :

$$e^{-i\mu} e^{\kappa} = \frac{|\Delta|}{\mathcal{J}} \quad (5.46)$$

En déduire que $\mu = 0$ si $\mathcal{J} > 0$ ($v = 1, 3, 5, \dots$) et que $\mu = \pi$ si $\mathcal{J} < 0$ ($v = 2, 4, 6, \dots$).

4) Montrer qu'il existe un état localisé si et seulement si :

$$\frac{|\Delta|}{\mathcal{J}} > 1 \quad (5.47)$$

Comment expliquer physiquement cette contrainte ?

5) En déduire l'existence d'un nombre de bosons critique v^* tel que si $v \leq v^*$ il n'y a pas d'état localisé alors que si $v > v^*$ il y a un état localisé. Montrer que si $v > v^*$, la longueur de localisation de l'état localisé est donnée par :

$$\xi^{-1} = \ln \left[(v-2)! \left(\frac{2A}{\Phi} \right)^{v-2} \right] \quad (5.48)$$

D'un point de vue dynamique, que se passe-t-il si l'on crée initialement v bosons sur le site $n = 0$?

Annexe A

Introduction à la seconde quantification

La première quantification de la mécanique non relativiste de la particule ponctuelle consiste à remplacer la position x de la particule et son impulsion p par des opérateurs X et P agissant sur un espace de Hilbert. Les règles de commutation de ces opérateurs sont établies par analogie avec la formulation de la mécanique analytique à l'aide des crochets de Poisson. Les éléments ou vecteurs de l'espace de Hilbert décrivent les configurations possibles ou états du système à une particule. La représentation dans l'espace des coordonnées d'un tel état est ce que l'on appelle une fonction d'onde. Cette fonction d'onde est une amplitude de probabilité, c'est-à-dire une fonction complexe de la position x et du temps t , $\psi(x, t)$, dont le carré du module est la probabilité de trouver la particule au point x , à l'instant t . La fonction d'onde est solution de l'équation de Schrödinger, qui est une équation aux dérivées partielles.

Le processus de seconde quantification¹ consiste à traiter $\psi(x, t)$, l'état du système une première fois quantifié, non plus comme une fonction mais comme un opérateur relatif au système qui est alors quantifié une seconde fois. Dans ce cas x et p ne sont plus traités comme des opérateurs mais comme des indices continus du nouvel opérateur. Cette théorie quantique des champs permet de réconcilier les deux grandes approches de la physique classique, qui semblaient totalement incompatibles, celle du point matériel et celle du champ. Le concept de champ quantique réconcilie les concepts classiques de particules de matière et de champs d'interaction et introduit les concepts nouveaux de champs de matière et de particules d'interaction.

Pourquoi cette théorie de seconde quantification peut-elle être qualifiée de théorie quantique des champs ? Parce que l'on peut considérer la fonction d'onde de la théorie de première quantification, qui n'est rien d'autre qu'une fonction ordinaire définie sur tout l'espace-temps, comme un champ classique, qui, au travers du processus de seconde quantification est devenu un champ quantique, solution d'une équation de champ opératorielle. L'intérêt essentiel de la seconde quantification est que cette équation de champ garde la même forme quand on

1. Voir G. Cohen-Tannoudji dans *Le Temps et sa Flèche*, édité par E. Klein, M. Spiro, M. Paty (Editions Frontières 1994).

passé d'un système à une particule à un système à deux, trois ou un nombre quelconque de particules. Cette propriété est très utile quand on veut rendre relativiste la théorie, puisqu'en relativité, le nombre de particules n'est pas conservé. Dans la théorie quantique relativiste des champs, les opérateurs décrivant des champs quantiques sont des opérateurs de création ou d'annihilation de particules. L'espace de Hilbert sur lequel agissent ces opérateurs est ce que l'on appelle un espace de Fock, c'est-à-dire un empilement infini d'espaces de Hilbert, communiquant par l'intermédiaire des opérateurs champs et comportant le vide, espace à zéro particule, l'espace à une particule, l'espace à deux particules, etc.

A.1 Comment fonctionne la première quantification

La dynamique classique d'une particule de masse m , de coordonnée x et de vitesse v est décrite par l'équation de Newton :

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = - \frac{dV(x)}{dx} \quad (\text{A.1})$$

L'équation (A.1) se déduit du formalisme de Lagrange en introduisant le Lagrangien défini par :

$$L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \quad (\text{A.2})$$

Les équations du mouvement s'obtiennent aisément en appliquant les équations de Lagrange qui découlent du principe de moindre action :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L}{\partial x} \quad (\text{A.3})$$

Le passage du formalisme de Lagrange à celui de Hamilton s'effectue en introduisant le moment conjugué à la coordonnée x :

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m \dot{x} \quad (\text{A.4})$$

Finalement, l'Hamiltonien de la particule correspond à la transformation de Legendre du Lagrangien :

$$H(x, p) = \dot{x}p - L(x, \dot{x}) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (\text{A.5})$$

A ce stade, la procédure de quantification consiste à associer à la coordonnée x et à l'impulsion p les opérateurs X et P . Par analogie avec la notion de crochets de Poisson, ces opérateurs vérifient les relations de commutations canoniques (RCC) :

$$[X, P] = i\hbar \quad (\text{A.6})$$

Les opérateurs X et P agissent dans un espace de Hilbert appelé espace des états. Dans cet espace, l'état de la particule est décrit par un vecteur d'état dont la représentation coordonnée est la fonction d'onde de la particule. L'évolution de cette fonction d'onde est gouvernée par l'équation de Schrödinger, qui, en représentation coordonnée, s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t) \quad (\text{A.7})$$

A.2 Comment fonctionne la seconde quantification

De façon générale, la théorie usuelle de la mécanique dite de *première quantification* devient relativement inadaptée pour l'étude des systèmes formés d'un grand nombre de particules indiscernables. En effet, cette théorie est basée sur la connaissance et la caractérisation de l'état quantique du système, c'est-à-dire de sa fonction d'onde. Or, pour un ensemble de particules indiscernables, cette fonction d'onde devient très complexe essentiellement à cause de ses propriétés de symétrie. L'un des principes fondamentaux de la mécanique quantique est que la fonction d'onde d'un ensemble de particules est soit symétrique (bosons) soit antisymétrique (fermions) par permutation de deux particules. Par conséquent, même pour un ensemble de particules indépendantes, la fonction d'onde du système ne se réduit pas au simple produit des fonctions d'ondes mais elle fait intervenir une somme de tels produits sur l'ensemble des permutations possibles.

Pour remédier à cela, la théorie dite de *seconde quantification* fut développée. Dans cette théorie, la fonction d'onde $\psi(x, t)$ devient un champ, appelé *champ de matière*. La seconde quantification est alors la quantification de ce champ. Par analogie avec la quantification du champ électromagnétique, elle donne naissance à la notion d'opérateurs création et annihilation. Cependant, les objets créés ou détruits ne sont pas des photons mais des particules, bosons ou fermions. On ne va donc plus explicitement s'intéresser aux états quantiques du système mais au nombre de particules qui occupent ces états. Les processus physiques vont alors se traduire par la destruction ou la création de particules dans des états particuliers.

Pour illustrer très simplement comment s'établit la seconde quantification, nous allons repartir du problème simple d'une unique particule dans un potentiel $V(x)$. Maintenant, la fonction d'onde joue le rôle d'un objet classique dont la dynamique est décrite par l'équation de Schrödinger Eq.(A.7). Cette équation est équivalente à l'équation fondamentale de la dynamique pour un système classique formé par un ensemble **infini** de degrés de liberté. En effet, dans la définition *classique* de $\psi(x, t)$, x joue le rôle d'un indice continu. Pour simplifier cette approche nous allons tout d'abord discrétiser le système en supposant que x ne peut prendre que N valeurs discrètes n (ceci devient évident lorsque l'on travaille sur réseau). Le champ de matière devient alors la donnée d'un ensemble de N coordonnées $\psi_n(t)$. Plus précisément, comme la fonction d'onde est complexe, tout se passe comme si nous devions décrire la dynamique de $2N$ variables indépendantes ψ_n et ψ_n^* . Dans ces conditions, l'équation de Schrödinger Eq.(A.7) devient :

$$i\hbar\dot{\psi}_n = -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n) + V_n\psi_n \quad (\text{A.8})$$

La procédure de quantification est alors équivalente à celle précédemment décrite. Ainsi, la première question que l'on doit se poser est de savoir s'il existe un Lagrangien permettant de retrouver l'équation dynamique. Le Lagrangien en question s'écrit :

$$L(\psi_n, \dot{\psi}_n, \psi_n^*, \dot{\psi}_n^*) = \sum_n i\hbar\dot{\psi}_n^*\dot{\psi}_n - \frac{\hbar^2}{2m}(\dot{\psi}_{n+1}^* - \dot{\psi}_n^*)(\dot{\psi}_{n+1} - \dot{\psi}_n) - V_n\psi_n\dot{\psi}_n^* \quad (\text{A.9})$$

Les équations de Lagrange sont alors exprimées de la façon suivante :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_n} = \frac{\partial L}{\partial \psi_n} \quad (\text{A.10})$$

Un simple calcul montre clairement que les équations Eq.(A.10) conduisent à l'équation de Schrödinger sous sa forme discrète Eq.(A.8). Dans ce contexte, le moment conjugué associé à la coordonnée ψ_n s'écrit :

$$\pi_n = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_n} = i\hbar\psi_n^* \quad (\text{A.11})$$

Par transformé de Legendre, la fonction de Hamilton décrivant la dynamique du champ de matière s'écrit :

$$H(\psi_n, \pi_n) = \sum_n \frac{\hbar^2}{2m} |\psi_{n+1} - \psi_n|^2 + V_n |\psi_n|^2 \quad (\text{A.12})$$

Soit, sous forme continue :

$$H(\psi(x), \pi(x)) = \int dx \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi(x)|^2 + V(x)|\psi(x)|^2 \quad (\text{A.13})$$

En réalisant une intégration par partie, on obtient finalement :

$$H(\psi(x), \pi(x)) = \int dx \left(-\psi^*(x) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \psi^*(x) V(x) \psi(x) \right) \quad (\text{A.14})$$

A ce stade, la procédure de quantification consiste à associer à la *coordonnée* $\psi(x)$ et à l'*impulsion* $i\hbar\psi^*(x)$ les opérateurs $\Psi(x)$ et $i\hbar\Psi^\dagger(x)$. Par analogie avec la première quantification, ces opérateurs vérifient les relations de commutations canoniques (RCC) (voir l'équation Eq.(A.6)) :

$$[\Psi(x), i\hbar\Psi^\dagger(x)] = i\hbar \rightarrow [\Psi(x), \Psi^\dagger(x)] = 1 \quad (\text{A.15})$$

Dans le formalisme de la seconde quantification, $\Psi(x)$ s'appelle l'opérateur champ. Par analogie avec la description opératorielle de l'oscillateur harmonique, on voit clairement que les RCC Eq.(A.15) définissent des opérateurs créations et annihilations. Ainsi, l'opérateur champ $\Psi^\dagger(x)$ crée une particule au point x alors que l'opérateur $\Psi(x)$ détruit une particule au point x . Finalement, dans ces conditions, l'Hamiltonien décrivant la dynamique du champ de matière quantifié s'écrit, en vertu du principe de correspondance :

$$H = \int dx \Psi^\dagger(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x) \quad (\text{A.16})$$

A.3 Généralisation à un ensemble de bosons indiscernables

Soit un ensemble de N particules identiques placées dans un potentiel $V(x)$. L'Hamiltonien de ces N particules est donc la somme des Hamiltoniens individuels :

$$H = \sum_i h_i \quad (\text{A.17})$$

où h_i désigne l'Hamiltonien de la particule i . Il décrit une particule dans un potentiel $V(x)$ et s'écrit :

$$h = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (\text{A.18})$$

A ce stade, nous allons supposé connu les états individuels de la particule dans le potentiel $V(x)$. Soit $\phi_\alpha(x)$ les fonctions d'onde et ϵ_α les énergies propres associées :

$$h\phi_\alpha(x) = \epsilon_\alpha\phi_\alpha(x) \quad (\text{A.19})$$

Dans ces conditions, le formalisme de la seconde quantification consiste à décrire cet ensemble de particules par un opérateur champ de matière. L'Hamiltonien s'exprime simplement comme la *moyenne dans l'opérateur champ* de l'Hamiltonien h à une particule :

$$H = \int dx \Psi^\dagger(x) h(x, \partial_x) \Psi(x) \quad (\text{A.20})$$

L'opérateur champ est alors développé sur la base des fonctions d'onde à une particule de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \sum_\alpha \phi_\alpha(x) b_\alpha \\ \Psi^\dagger(x) &= \sum_\alpha \phi_\alpha^*(x) b_\alpha^\dagger \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Compte tenu de la loi de commutation du champ de matière (Eq.(A.15)) et supposant que les fonctions d'onde à une particule sont orthonormées, on montre facilement que les opérateurs b_α et b_α^\dagger vérifient les lois de commutations de l'oscillateur harmonique :

$$[b_\alpha, b_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha,\beta} \quad (\text{A.22})$$

Dans le formalisme de la seconde quantification, b_α et b_α^\dagger sont des opérateurs annihilation et création. Leur rôle est de détruire ou de créer des particules dans l'état individuel de fonction d'onde $\phi_\alpha(x)$. Ainsi, ces opérateurs n'agissent plus sur les coordonnées des particules mais ils font varier le nombre de particules se trouvant dans tel ou tel état individuel. Plus précisément, ils agissent sur des vecteurs $|n_\alpha, n_\beta, \dots\rangle$, appelés états nombres, appartenant à un espace vectoriel appelé espace de Fock. L'état $|n_\alpha, n_\beta, \dots\rangle$ décrit alors une situation dans laquelle n_α bosons se trouvent dans l'état individuel $\phi_\alpha(x)$, n_β bosons se trouvent dans l'état individuel $\phi_\beta(x)$, ... etc. L'action des opérateurs création et annihilation sur de tels états est définie par :

$$\begin{aligned} b_\alpha |n_\alpha, n_\beta, \dots\rangle &= \sqrt{n_\alpha} |n_\alpha - 1, n_\beta, \dots\rangle \\ b_\alpha^\dagger |n_\alpha, n_\beta, \dots\rangle &= \sqrt{n_\alpha + 1} |n_\alpha + 1, n_\beta, \dots\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

La représentation par l'espace de Fock marque un changement de point de vue : on ne s'intéresse plus aux états dans lesquels se trouvent les particules mais aux nombres d'occupation qui caractérisent l'état du système. Pour des bosons de même espèce, le nombre d'occupation est arbitraire. Par contre, pour des fermions de même espèce, ce nombre est égal à 0 ou à 1. Les nombres d'occupation peuvent alors être accrus ou diminués sans que s'introduisent des corrélations en l'absence d'interaction. Le champ quantique devient le nouvel objet fondamental qui rend compte de la dualité onde/corpuscule en mécanique quantique. Finalement, l'Hamiltonien du système de particules se réduit à une somme d'oscillateurs harmoniques pour chaque état individuel :

$$H = \int dx \Psi^\dagger(x) h(x, \partial_x) \Psi(x) = \sum_\alpha \epsilon_\alpha b_\alpha^\dagger b_\alpha \quad (\text{A.24})$$

Remarque

On peut généraliser aisément cette procédure en réalisant un développement des opérateurs champs sur un ensemble de fonctions d'onde $\chi(x)$ qui ne sont pas fonctions propres de l'Hamiltonien individuel. Dans ces conditions, l'Hamiltonien devient :

$$H = \sum_{i,j} \epsilon_{ij} b_i^\dagger b_j \text{ avec } \epsilon_{ij} = \int dx \chi_i^*(x) h(x, \partial_x) \chi_j(x) \quad (\text{A.25})$$

Jusqu'à présent, les interactions entre bosons furent négligées. Supposons donc maintenant que les bosons interagissent par l'intermédiaire d'un potentiel à deux corps $W(x_1, x_2)$. On montre dans ce cas que l'Hamiltonien décrivant la dynamique du champ de matière présente un terme additionnel. Il s'écrit maintenant :

$$H = \int dx \Psi^\dagger(x) h(x, \partial_x) \Psi(x) + \frac{1}{2} \int dx \int dx' \Psi^\dagger(x) \Psi^\dagger(x') W(x, x') \Psi(x) \Psi(x') \quad (\text{A.26})$$

En développant les opérateurs champs sur la base des états propres de l'Hamiltonien individuel h , le terme d'interaction entre particules conduit à un couplage entre les différents oscillateurs harmoniques de la forme :

$$H = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha', \beta', \alpha, \beta} W_{\alpha', \beta', \alpha, \beta} b_{\alpha'}^{\dagger} b_{\beta'}^{\dagger} b_{\alpha} b_{\beta} \quad (\text{A.27})$$

avec

$$W_{\alpha', \beta', \alpha, \beta} = \int dx \int dx' \phi_{\alpha'}^*(x) \phi_{\beta'}^*(x') W(x, x') \phi_{\alpha}(x) \phi_{\beta}(x') \quad (\text{A.28})$$

En d'autres termes, les interactions entre particules entraînent des transitions entre états individuels. Par exemple, si l'on considère deux particules initialement dans les états $\phi_a(x_1)$ et $\phi_b(x_2)$, leur couplage conduit à des transitions vers les états $\phi_{a'}(x_1)$ et $\phi_{b'}(x_2)$. Dans le langage de la seconde quantification, le couplage détruit deux bosons dans les états individuels a et b et il crée deux bosons dans les états individuels a' et b' .

Annexe B

Phénomène de localisation

En physique du solide, pour déterminer les états quantiques d'une particule (électron, phonon, exciton ...), on s'appuie sur la propriété fondamentale d'invariance par translation. Par conséquent, le théorème de Bloch s'applique si bien que les états propres de la particule sont des ondes planes complètement délocalisées. Les énergies correspondantes sont alors regroupées en bandes, appelées "bandes permises".

Cependant, lorsque le réseau présente un défaut, celui-ci brise l'invariance translationnelle. Il entraîne l'apparition d'états quantiques spécifiques situés en dehors des bandes permises. Un tel phénomène n'est possible que si le vecteur d'onde des ondes planes devient complexe traduisant ainsi l'apparition d'ondes évanescentes. En pratique, ces ondes présentent un caractère fortement localisé au voisinage de la région occupée par le défaut : on appelle de tels états des "états localisés".

Pour illustrer ce phénomène de localisation, nous allons considérer le modèle simple d'une particule en mouvement sur un réseau 1D et dont la dynamique est décrite par un modèle de liaisons fortes. Lorsque la particule occupe le site n , elle se trouve dans une orbitale atomique $|n\rangle$ d'énergie ω_0 . Elle saute alors de site en site sous l'action d'une constante de saut Φ . Cependant, le site $n = 0$ est occupé par un défaut qui traduit le fait que l'énergie de l'orbitale correspondante est déplacée vers le rouge d'une quantité Δ . L'Hamiltonien de la particule est alors défini par :

$$H = \sum_n (\omega_0 - \Delta\delta_{n0})|n\rangle\langle n| + \Phi(|n+1\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n+1|) \quad (\text{B.1})$$

Lorsque $\Delta = 0$, les fonctions d'ondes de la particule sont des ondes planes de vecteur d'onde $k \in [-\pi, \pi]$:

$$\Psi_n \propto e^{i(kn - \omega_k t)} \quad (\text{B.2})$$

Les énergies correspondantes $\omega_k = \omega_0 + 2\Phi \cos(k)$ forment une bande permise centrée sur ω_0 et de largeur 4Φ , comme illustré sur la figure [B.1](#).

Dans ce contexte, la présence du défaut lorsque $\Delta > 0$ entraîne l'apparition d'un état particulier dans la bande interdite basse fréquence située sous la bande permise. Un tel état

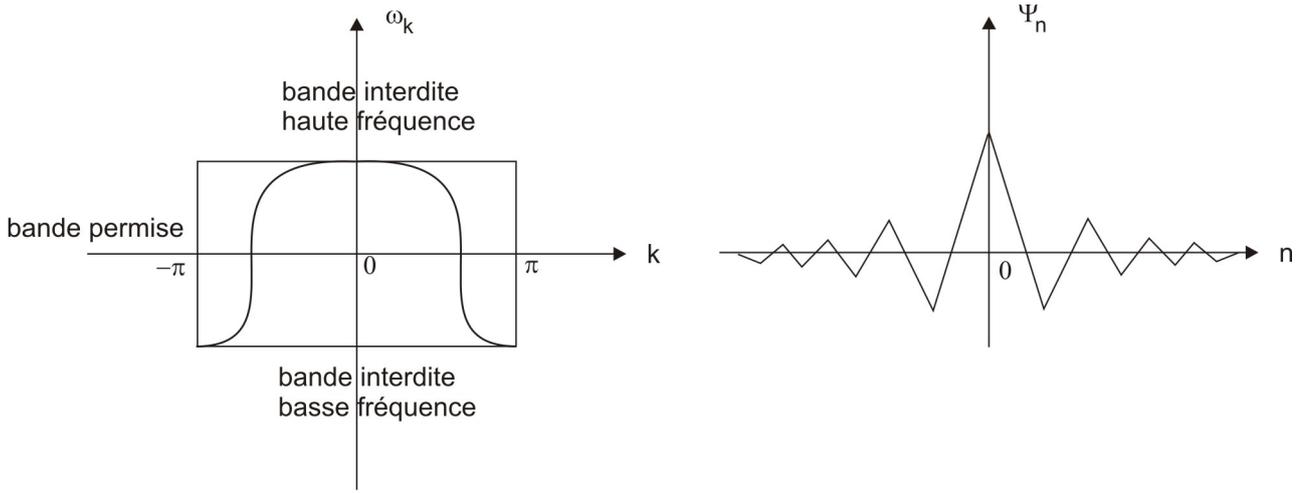


FIGURE B.1 – Diagramme de dispersion et onde localisée

est caractérisé par un vecteur d'onde complexe $k = \pi + i\kappa$. Quel que soit $\kappa > 0$, l'énergie ω_{loc} d'un tel état apparaît bien sous la bande permise puisque l'on a :

$$\omega_{loc} = \omega_0 + 2\Phi \cos(\pi + i\kappa) = \omega_0 - 2\Phi \cosh(\kappa) \quad (\text{B.3})$$

La fonction d'onde associée décrit une amplitude de probabilité localisée au voisinage du site $n = 0$:

$$\Psi_n = (-1)^n \alpha e^{-\kappa|n|} \quad (\text{B.4})$$

On note $\xi = 1/\kappa$ la longueur de localisation de l'état qui mesure son extension spatiale autour du défaut. A ce stade, pour trouver α et κ il convient d'étudier l'équation de Schrodinger au niveau du site $n = 0$ et de tenir compte de la normalisation de la fonction d'onde. On en déduit :

$$\begin{aligned} \sinh(\kappa) &= \frac{\Delta}{2\Phi} \\ \alpha^2 &= \tanh(\kappa) = \frac{\Delta^2}{\sqrt{4\Phi^2 + \Delta^2}} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Annexe C

Etats cohérents de bosons

Pour introduire simplement la notion d'état cohérent de bosons, nous allons considérer le cas d'un unique oscillateur harmonique. Cet oscillateur, de pulsation ω_0 , est décrit par les opérateurs bosons b et b^\dagger . Dès lors, la base naturelle utilisée pour représenter les états de l'oscillateur est formée par les états nombres $|v\rangle$. Cependant, nous allons voir qu'il existe une autre base intéressante analogue à la représentation coordonnée : la base des états cohérents quasi-classiques¹.

C.1 Définition

Par définition, un état cohérent $|\psi\rangle$ est un vecteur propre de l'opérateur d'annihilation b associé à la valeur propre ψ :

$$b|\psi\rangle = \psi|\psi\rangle \quad (\text{C.1})$$

Pour les bosons², les valeurs propres ψ sont des c-nombres complexes qui commutent.

C.2 Génération d'un état cohérent

Soit $\{|v\rangle\}$ la base des états nombre de bosons de l'oscillateur. Dans cette base, la décomposition de l'état cohérent $|\psi\rangle$ s'écrit :

$$|\psi\rangle = \sum_{v=0}^{\infty} f_v |v\rangle \quad (\text{C.2})$$

1. Voir J.W. Negele and H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Perseus Book, 1998)

2. On notera que ce n'est pas le cas pour les fermions pour lesquels les valeurs propres des états cohérents sont des variables de Grassmann.

Par définition, on en déduit :

$$b|\psi\rangle = \sum_{v=0}^{\infty} f_v \sqrt{v} |v-1\rangle = \psi \sum_{v=0}^{\infty} f_v |v\rangle \implies f_{v+1} \sqrt{v+1} = \psi f_v \quad (\text{C.3})$$

Par récurrence, on obtient :

$$f_v = \frac{\psi^v}{\sqrt{v!}} \quad (\text{C.4})$$

La décomposition de l'état cohérent s'écrit finalement :

$$|\psi\rangle = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{\psi^v}{\sqrt{v!}} |v\rangle = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(\psi b^\dagger)^v}{v!} |\emptyset\rangle \quad (\text{C.5})$$

On en déduit :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= e^{\psi b^\dagger} |\emptyset\rangle \\ \langle\psi| &= \langle\emptyset| e^{\psi^* b} \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

C.3 Action de b et b^\dagger

L'état cohérent $|\psi\rangle$ étant ket propre de b , on peut se demander quelle est l'influence de b^\dagger . Dès lors, compte tenu de la définition précédente, on a :

$$b^\dagger |\psi\rangle = b^\dagger e^{\psi b^\dagger} |\emptyset\rangle = \frac{\partial}{\partial \psi} e^{\psi b^\dagger} |\emptyset\rangle = \frac{\partial}{\partial \psi} |\psi\rangle \quad (\text{C.7})$$

Par analogie, on en déduit les quatre relations fondamentales suivantes :

$$\begin{aligned} b|\psi\rangle &= \psi |\psi\rangle \quad \text{et} \quad b^\dagger |\psi\rangle = \frac{\partial}{\partial \psi} |\psi\rangle \\ \langle\psi| b &= \frac{\partial}{\partial \psi^*} \langle\psi| \quad \text{et} \quad \langle\psi| b^\dagger = \psi^* \langle\psi| \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Compte tenu de ces définitions, on notera l'analogie entre les états cohérents $|\psi\rangle$ et la représentation coordonnée $|x\rangle$. Ainsi l'opérateur position X correspond à b , l'opérateur impulsion P correspond à b^\dagger et la valeur propre ψ correspond à la position x .

C.4 Produit scalaire et relation de fermeture

La base des états cohérents n'est pas orthonormée. On a en effet :

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = e^{\psi_1^* \psi_2} \quad (\text{C.9})$$

Par contre, la base des états cohérents est complète. La relation de fermeture s'écrit :

$$\int \frac{d\psi^* d\psi}{2i\pi} e^{-|\psi|^2} |\psi\rangle \langle\psi| = 1 \quad (\text{C.10})$$

avec $d\psi^* d\psi = 2i d\text{Re}(\psi) d\text{Im}(\psi)$

C.5 Représentation d'un opérateur

L'introduction des états cohérents est judicieuse pour représenter les opérateurs exprimés en fonction des opérateurs bosons b et b^\dagger . Ainsi, quel que soit $A(b^\dagger, b)$ un opérateur ordonné normalement, c'est-à-dire tel que les opérateurs création se trouvent toujours à gauche des opérateurs annihilation. On a alors :

$$\langle \psi_1 | A(b^\dagger, b) | \psi_2 \rangle = A(\psi_1^*, \psi_2) e^{\psi_1^* \psi_2} \quad (\text{C.11})$$

Annexe D

Intégrale de Chemin

La théorie des intégrales de chemins est une autre formulation de la mécanique quantique développée par Richard Feynman. Moins familière que le formalisme de l'état quantique, elle permet d'introduire de nouvelles approximations et de réaliser un pont entre les phénomènes quantiques et les phénomènes classiques.

L'idée principale est la suivante. Considérons le mouvement d'un électron de masse m dans un potentiel $V(x)$. Si on suppose que l'électron se trouve à la position x_i à l'instant t_i , la mécanique quantique permet de décrire son évolution et en particulier de déterminer la probabilité d'observer l'électron à la position x_f à l'instant t_f . Le postulat de base de la théorie quantique exprime que cette probabilité est donnée par le module carré de l'amplitude de probabilité associée à la transition entre les deux points de l'espace-temps. Pour effectuer la transition, l'électron peut suivre différentes trajectoires, ou différents chemins, chaque chemin noté $[c]$ ayant une certaine amplitude de probabilité de réalisation $a[c]$. Dès lors, l'amplitude de probabilité de la transition sera la somme sur tous les chemins possibles des amplitudes $a[c]$:

$$a = \sum_c a[c] \quad (\text{D.1})$$

La théorie de Feynman permet alors de montrer que l'amplitude de réalisation d'un chemin s'exprime en fonction de l'action classique $S[c]$ de l'électron le long du chemin $[c]$:

$$a[c] \approx e^{\frac{i}{\hbar}S[c]} \implies a = \sum_c e^{\frac{i}{\hbar}S[c]} \quad (\text{D.2})$$

En d'autres termes, puisque l'amplitude a n'est autre qu'un élément de l'opérateur d'évolution entre deux points de l'espace-temps, la théorie de Feynman permet de réaliser une représentation de cet opérateur au moyen d'intégrales de chemins. La conséquence première est que dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, seul le chemin qui minimise l'action classique contribuera de manière significative à la transition. On retrouve ainsi l'origine du principe de moindre action qui conduit aux équations dynamiques classiques de Lagrange

Si les intégrales de chemins peuvent être développées en représentation coordonnée, elles peuvent aussi être introduites via le concept d'état cohérent. Une telle formulation est alors

relativement bien adaptée à la description de la dynamique d'un ensemble de Bosons, comme nous allons le voir dans le paragraphe suivant ¹.

D.1 Intégrale de chemin et états cohérents

Soit un oscillateur harmonique caractérisé par les opérateurs bosons b et b^\dagger . Soit $H(b^\dagger, b)$ son Hamiltonien supposé ordonné normalement. On se propose de calculer l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution $U(t) = \exp(-i\hbar^{-1}Ht)$ entre les états cohérents $|\psi_i\rangle$ et $|\psi_f\rangle$:

$$U_{fi}(t) = \langle \psi_f | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(b^\dagger, b)t\right) | \psi_i \rangle \quad (\text{D.3})$$

Pour calculer $U_{fi}(t)$, on découpe le temps t en M intervalles élémentaires $\epsilon = t/M$. On peut alors écrire l'opérateur d'évolution sous la forme :

$$U_{fi}(t) = \langle \psi_f | e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H(b^\dagger, b)} e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H(b^\dagger, b)} \dots e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H(b^\dagger, b)} | \psi_i \rangle \quad (\text{D.4})$$

En introduisant $M-1$ fois la relation de fermeture dans la base des états cohérents on obtient :

$$U_{fi}(t) = \int \prod_{k=1}^{M-1} \frac{d\psi_k^* d\psi_k}{2i\pi} e^{-|\psi_k|^2} \times \langle \psi_f | e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H} | \psi_{M-1} \rangle \langle \psi_{M-1} | e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H} | \psi_{M-2} \rangle \dots \langle \psi_1 | e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H} | \psi_i \rangle$$

Posons

$$\begin{aligned} \psi_0 &= \psi_i \\ \psi_M &= \psi_f \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

On en déduit :

$$U_{fi}(t) = \int \prod_{k=1}^{M-1} \frac{d\psi_k^* d\psi_k}{2i\pi} e^{-|\psi_k|^2} \times \prod_{k=1}^M \langle \psi_k | e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H(b^\dagger, b)} | \psi_{k-1} \rangle \quad (\text{D.6})$$

Lorsque $M \rightarrow \infty$, ϵ tend vers zéro. Dès lors, les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution élémentaire s'écrivent :

$$\langle \psi_k | e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H(b^\dagger, b)} | \psi_{k-1} \rangle \approx e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}H(\psi_k^*, \psi_{k-1})} \langle \psi_k | \psi_{k-1} \rangle \quad (\text{D.7})$$

où $H(\psi_k^*, \psi_{k-1})$ s'obtient en remplaçant b^\dagger par ψ_k^* et b par ψ_{k-1} . On en déduit :

$$\begin{aligned} U_{fi}(t) &= \int \prod_{k=1}^{M-1} \frac{d\psi_k^* d\psi_k}{2i\pi} e^{+|\psi_k|^2} \times e^{\sum_{k=1}^M \psi_k^* \psi_{k-1} - \psi_k^* \psi_k - i\frac{\epsilon}{\hbar}H(\psi_k^*, \psi_{k-1})} \\ &= \int \prod_{k=1}^{M-1} \frac{d\psi_k^* d\psi_k}{2i\pi} e^{+|\psi_k|^2} \times e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^M \epsilon [i\hbar \psi_k^* (\psi_k - \psi_{k-1}) / \epsilon - H(\psi_k^*, \psi_{k-1})]} \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

1. Voir J.W. Negele and H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Perseus Book, 1998)

A ce stade, pour définir l'opérateur d'évolution sous la forme d'une intégrale de chemin, nous allons introduire la notion de trajectoire $\psi(t)$. Dans le limite $M \rightarrow \infty$, la trajectoire $\psi(t)$ définit un ensemble de points $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_M$ par lesquels passe la variable complexe ψ au cours du temps. Dans ce contexte, on a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &\approx \frac{\psi_k - \psi_{k-1}}{\epsilon} \\ H(\psi^*(t), \psi(t)) &\approx H(\psi_k^*, \psi_{k-1}) \\ \sum_{k=1}^M \epsilon &\approx \int_0^t dt \end{aligned} \quad (D.9)$$

Avec ces notations, l'opérateur d'évolution s'écrit finalement :

$$U_{fi}(t) = \int \mathcal{D}[\psi^*, \psi] \times e^{\frac{i}{\hbar} S[\psi^*, \psi]} \quad (D.10)$$

avec :

$$S[\psi^*, \psi] = \int_0^t dt \left(i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - H(\psi^*, \psi) \right) \quad (D.11)$$

où $\mathcal{D}[\psi^*, \psi]$ symbolise une intégration sur l'ensemble des chemins.

Par analogie avec le formalisme des intégrales de chemin pour une particule, on peut voir $\psi(t)$ et $\psi^*(t)$ comme des coordonnées classiques dont la dynamique est gouvernée par le Lagrangien L défini par :

$$L(\psi(t), \psi^*(t)) = i\hbar \psi^*(t) \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} - H(\psi^*(t), \psi(t)) \quad (D.12)$$

La grandeur $S[\psi^*, \psi]$ joue alors le rôle d'une action classique associée qui caractérise la trajectoire $\psi(t)$. Cependant, une différence notable apparaît puisque selon nos définitions, le lagrangien est une fonction de \hbar . Dans ce cas, on ne peut pas explicitement faire tendre \hbar vers zéro pour générer une limite classique. En fait, on montre que le principe de moindre action conduit à une limite dite quasi-classique qui tend vers la limite classique lorsque les énergies mises en jeu deviennent importantes.

D.2 Principe de moindre action et limite quasi-classique

Le principe de moindre action dit que l'action est minimisée le long de la trajectoire effectivement suivie. Dès lors, considérons une trajectoire $\psi(t)$ et une trajectoire proche $\psi(t) + \delta\psi(t)$ identiques à $t = t_i$ et $t = t_f$. La variation de l'action s'écrit :

$$\begin{aligned} S' &= \int dt \left[i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi + \delta\psi}{\partial t} - H(\psi^*, \psi + \delta\psi) \right] \\ S' &= S + \int dt \left[i\hbar \psi^* \frac{\partial \delta\psi}{\partial t} - \delta\psi \frac{\partial H}{\partial \psi} \right] \\ S' &= S + \psi^* \delta\psi \Big|_{t_i}^{t_f} + \int dt \left[-i\hbar \delta\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} - \delta\psi \frac{\partial H}{\partial \psi} \right] \end{aligned} \quad (D.13)$$

Le principe dit que S doit être extrémal, donc $\delta S = S' - S = 0$ quelle que soit la petite perturbation $\delta\psi$. Ceci implique :

$$i\hbar \frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial\psi} \quad (\text{D.14})$$

De même, considérons une trajectoire $\psi^*(t)$ et une trajectoire proche $\psi^*(t) + \delta\psi^*(t)$ identiques à $t = t_i$ et $t = t_f$. La variation de l'action s'écrit :

$$\begin{aligned} S' &= \int dt [i\hbar(\psi^* + \delta\psi^*) \frac{\partial\psi}{\partial t} - H(\psi^* + \delta\psi^*, \psi)] \\ S' &= S + \int dt [i\hbar\delta\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \delta\psi^* \frac{\partial H}{\partial\psi^*}] \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

La condition $S' = S$ implique :

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = +\frac{\partial H}{\partial\psi^*} \quad (\text{D.16})$$

L'application du principe de moindre action conduit donc à des équations du mouvement pour $\psi(t)$ et $\psi^*(t)$ qui sont complexes conjuguées l'une de l'autre.

Annexe E

Etats à deux bosons : procédure exacte

Pour chaque valeur du vecteur d'onde k associé à la délocalisation du centre de masse des deux bosons, la fonction d'onde $\psi_k(m)$ qui décrit le mouvement de la distance m entre les deux quanta vérifie :

$$\begin{aligned} (2\omega_0 - \omega)\psi_k(m) + \Phi_k[\psi_k(m+1) + \psi_k(m-1)] &= 0 \text{ si } m \geq 2 \\ (2\omega_0 - \omega)\psi_k(1) + \sqrt{2}\Phi_k\psi_k(0) + \Phi_k\psi_k(2) &= 0 \text{ si } m = 1 \\ (2\omega_0 - 2A - \omega)\psi_k(0) + \sqrt{2}\Phi_k\psi_k(1) &= 0 \text{ si } m = 0 \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

où $\Phi_k = 2\Phi \cos(k/2)$. Dans un réseau physique contenant N sites avec conditions aux limites périodiques, il faut ajouter aux Eqs. (E.1) les conditions provenant de l'indiscernabilité des bosons. En effet, si l'on tient compte de la propriété d'invariance $\psi(n_1, n_2) = \psi(n_2 - N, n_1)$, alors en utilisant la quantification du vecteur d'onde k , on remarque que $\psi_k(\frac{N+1}{2})$ et $\psi_k(\frac{N-1}{2})$ sont équivalents à une phase près :

$$\psi_k(\frac{N+1}{2}) = (-1)^p e^{i\frac{k}{2}} \psi_k(\frac{N-1}{2}) \quad (\text{E.2})$$

où $(-1)^p = e^{ik\frac{N}{2}}$. Cette relation impose des conditions aux limites pour $m = (N-1)/2$ qui s'expriment par l'équation :

$$(2\omega_0 - \omega + (-1)^p \Phi_k) \psi_k(\frac{N-1}{2}) + \Phi_k \psi_k(\frac{N-3}{2}) = 0 \quad (\text{E.3})$$

Dans ce contexte, les Eqs. (E.1), (E.3) révèlent que la dynamique de l'interdistance m entre les deux bosons est isomorphe à une modèle des liaisons fortes pour une particule quantique fictive décrite par la fonction d'onde $\psi_k(m)$ et se déplaçant sur le réseau 1D de **taille finie** représenté sur la figure E.1. La restriction $0 \leq m \leq (N-1)/2$ impose que ce réseau présente une taille finie.

Pour résoudre le problème, le réseau de taille finie possédant trois défauts, on introduit une fonction d'onde à trois paramètres :

$$\psi_k(m) = \begin{cases} \gamma & \text{pour } m = 0 \\ \alpha e^{iqm} + \beta e^{-iqm} & \text{pour } m \geq 1 \end{cases} \quad (\text{E.4})$$

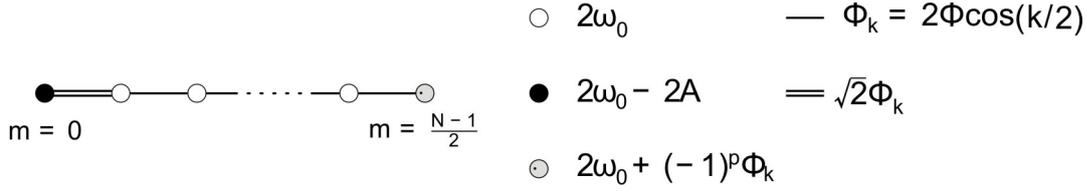


FIGURE E.1 – L'équation de Schrödinger pour l'interdistance entre les deux bosons en interaction sur un réseau 1D est isomorphe à l'équation de Schrödinger pour une particule fictive en mouvement sur un réseau 1D.

où le paramètre q joue le rôle de vecteur d'onde de la particule fictive. En étudiant l'équation de Schrödinger dans le cœur du réseau équivalent, c'est-à-dire en substituant l'Eq. (E.4) dans l'Eq. (E.1), nous obtenons la relation de dispersion des états à deux bosons :

$$\omega_2(k, q) = 2\omega_0 + 2\Phi_k \cos q \quad (\text{E.5})$$

Les valeurs possibles du paramètre q s'obtiennent à partir de l'analyse de l'équation de Schrödinger au niveau des défauts du réseau équivalent. Tout d'abord, l'utilisation de la relation de dispersion et la substitution de l'Eq. (E.4) dans l'Eq. (E.3) conduit à la relation suivante entre α , β et γ :

$$\sqrt{2}\gamma = \alpha + \beta \quad (\text{E.6})$$

Ensuite, en utilisant cette dernière relation ainsi que les Eqs. (E.4) et (E.5), l'équation de Schrödinger pour les deux extrémités du réseau équivalent conduit au système suivant :

$$(A - i\Phi_k \sin q)\alpha + (A + i\Phi_k \sin q)\beta = 0 \quad (\text{E.7})$$

$$e^{iqN/2}\alpha + (-1)^{p-1}e^{-iqN/2}\beta = 0 \quad (\text{E.8})$$

Ce système possède des solutions non triviales si et seulement si :

$$\frac{\Phi_k \sin q + iA}{\Phi_k \sin q - iA} = (-1)^p e^{iqN} \quad (\text{E.9})$$

La solution de cette équation définit l'ensemble des valeurs de q et détermine donc l'ensemble des vecteurs propres et des valeurs propres du système.

Lorsque $A \neq 0$ alors il existe deux types de solutions, selon que q soit réel ou complexe. Pour q réel, on peut tout d'abord remarquer que pour toute solution q de l'Eq. (E.9) il existe une solution $-q$. De plus, l'Eq. (E.7) qui détermine la relation entre α et β , c'est-à-dire les vecteurs propres, est invariante sous le changement de variable $q \rightarrow -q$. Ainsi pour toute solution q de l'Eq. (E.9), la solution $-q$ correspond au même vecteur propre. Ceci permet de restreindre les solutions q à l'intervalle $0 \leq q \leq \pi$. En remarquant que le membre de gauche de l'Eq. (E.9) est un nombre complexe de norme unité, q est alors déterminé par l'équation :

$$2 \arctan\left(\frac{\Phi_k \sin q}{A}\right) = qN + [p - 1 - 2s]\pi \quad (\text{E.10})$$

où s est un entier. Lorsque la taille du réseau devient très importante, $N \rightarrow \infty$, alors l'ensemble des valeurs de q forme un continuum dans l'intervalle $0 \leq q \leq \pi$. Par conséquent les énergies associées sont celles décrivant deux bosons libres (Eqs. (E.5) et (4.28)).

Lorsque q est complexe, on cherche des solutions de la forme $q = Q + i\kappa$. Si l'on choisit $\kappa > 0$ alors seules les solutions telles que $\beta = 0$ présentent une réalité physique puisque non divergentes. Ce choix, reporté dans l'expression de la fonction d'onde (E.4) conduit à :

$$\psi_k(m) = \alpha e^{-m\kappa} e^{iQm} \left[1 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - 1 \right) \delta_{m,0} \right] \quad (\text{E.11})$$

où :

$$Q = s\pi \quad (\text{E.12})$$

$$\sinh \kappa = (-1)^{s-1} \frac{A}{\Phi_k} \quad (\text{E.13})$$

$$\alpha^2 = \frac{2A}{\sqrt{A^2 + 4\Phi^2 \cos^2(k/2)}} \quad (\text{E.14})$$

et s est un entier déterminé par le signe de Φ . Puisque l'on impose $\kappa > 0$, alors s est impair lorsque Φ est positif et pair lorsque Φ est négatif.