



UNIVERSITÉ DE FRANCHE-COMTÉ
ÉCOLE DOCTORALE LOUIS PASTEUR



THÈSE DE DOCTORAT
Spécialité Physique

présentée par

David Viennot

GÉOMÉTRIE ET ADIABATICITÉ DES SYSTÈMES PHOTODYNAMIQUES QUANTIQUES

soutenue le 22 novembre 2005 à l'Observatoire de Besançon

composition du jury :

Directeur de thèse : Georges Jolicard (Professeur, Université de Franche-Comté)
Présidente : Evelyne Roueff (Astronome, Observatoire de Paris Meudon)
Rapporteurs : Osman Atabek (Directeur de recherche CNRS, Université Paris 11)
Hans-Rudolf Jauslin (Professeur, Université de Bourgogne)
Examineurs : Jacky Cresson (Maître de conférences, Université de Franche-Comté)
John P. Killingbeck (Reader emeritus, University of Hull, U.K.)

Table des matières

| | |
|--|-----------|
| Introduction | 11 |
| I Théories de jauge des systèmes photodynamiques quantiques | 23 |
| 1 Les théorèmes adiabatiques | 27 |
| 2 Transport adiabatique et phases géométriques | 31 |
| 2.1 La phase de Berry abélienne | 32 |
| 2.2 La phase de Berry non-abélienne | 33 |
| 2.3 Les phases de Aharonov-Anandan | 35 |
| 2.4 Transport adiabatique généralisé | 35 |
| 2.5 Cas des systèmes quantiques dissipatifs | 37 |
| 2.5.1 Continua et résonances | 37 |
| 2.5.2 Formule de transport adiabatique : cas abélien | 39 |
| 2.5.3 Formule de transport adiabatique : cas non-abélien | 40 |
| 2.6 Premières propriétés | 41 |
| 3 Mathématiques des phases géométriques | 43 |
| 3.1 Interprétation géométrique de la phase de Berry-Simon | 44 |
| 3.1.1 Le transport adiabatique comme un relèvement horizontal | 44 |
| 3.1.2 Retour sur la connexion adiabatique | 47 |
| 3.1.3 Retour sur le fibré adiabatique | 50 |
| 3.1.4 Holonomie | 51 |
| 3.2 La structure projective | 52 |
| 3.2.1 Le fibré de la mécanique quantique | 52 |
| 3.2.2 Interprétation géométrique de la phase de Aharonov-Anandan | 54 |
| 3.2.3 Classification universelle | 55 |
| 3.3 La structure Kählerienne | 55 |
| 3.3.1 Éléments de géométrie Kählerienne | 55 |
| 3.3.2 La métrique quantique | 56 |
| 3.3.3 Cas des systèmes à deux niveaux | 59 |
| 3.4 Géométrie des espaces actifs | 60 |
| 3.4.1 Phases de Aharonov-Anandan non-abéliennes | 60 |
| 3.4.2 Le fibré des espaces actifs | 60 |
| 3.4.3 Structure Kählerienne des espaces actifs | 62 |
| 3.4.4 Distances quantiques | 64 |
| 3.4.5 Dynamique géodésique | 67 |
| 3.4.6 Classification universelle | 68 |
| 3.5 Géométrie des dynamiques dissipatives | 70 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 3.5.1 | Le modèle universel dissipatif | 70 |
| 3.5.2 | Groupe compact vs groupe non-compact | 71 |
| 3.5.3 | Classification universelle | 73 |
| 3.6 | Comparaison systèmes dynamiques quantiques / classiques | 74 |
| 3.6.1 | Rappels sur les systèmes dynamiques classiques | 74 |
| 3.6.2 | Analogie entre systèmes dynamiques classiques et quantiques | 75 |
| 3.7 | Interprétation topologique de la phase de Berry abélienne | 79 |
| 3.7.1 | La première classe de Chern | 79 |
| 3.7.2 | Classes de Chern et courbure adiabatique | 82 |
| 3.7.3 | Première classe de Chern et phase de Berry non-abélienne | 83 |
| 3.8 | Lignes de changement de carte | 84 |
| 4 | Théorie des monopôles magnétiques adiabatiques | 89 |
| 4.1 | Image électromagnétique des phases de Berry | 89 |
| 4.1.1 | Analogie jauge électromagnétique / jauge adiabatique | 90 |
| 4.1.2 | La courbure adiabatique comme solution des équations de Maxwell | 91 |
| 4.1.3 | Le modèle électromagnétique | 91 |
| 4.2 | Monopôles magnétiques | 93 |
| 4.2.1 | Monopôles magnétiques de Dirac | 93 |
| 4.2.2 | Transport adiabatique dans un système à deux niveaux | 96 |
| 4.2.3 | Monopôles magnétiques adiabatiques standards | 97 |
| 4.3 | Passages adiabatiques, trous de ver et espaces parallèles | 102 |
| 4.3.1 | Régimes adiabatiques purs / transitions soudaines | 102 |
| 4.3.2 | Régimes avec couplages adiabatiques off-diagonaux | 103 |
| 4.4 | Notion de sous-espaces actifs - champs matriciels | 104 |
| 4.5 | Surface de contrôle et monopôles adiabatiques | 107 |
| 4.5.1 | Immersion de la variété de contrôle, croisements et croisements évités | 107 |
| 4.5.2 | Structure Riemannienne de la variété de contrôle | 108 |
| 4.5.3 | Champ magnétique de la variété de contrôle | 108 |
| 4.6 | Charge apparente des monopôles magnétiques | 110 |
| 4.6.1 | Géométrie d'un croisement de niveaux | 110 |
| 4.6.2 | Analyse perturbative | 112 |
| 4.6.3 | Analyse topologique | 114 |
| 4.6.4 | Boucles sur la variétés de contrôle | 115 |
| 4.6.5 | Densité de charge magnétique pour une levée de dégénérescence | 115 |
| 4.7 | Monopôles non-abéliens et multi-croisements | 116 |
| 4.7.1 | Immersion de la variété de contrôle | 116 |
| 4.7.2 | Analogie avec la théorie des champs | 117 |
| 4.7.3 | Charge des monopôles | 118 |
| 4.8 | Monopôles magnétiques des systèmes dissipatifs | 119 |
| 5 | Applications : Atomes en champ laser | 125 |
| 5.1 | Atome à 2 niveaux | 125 |
| 5.2 | Un modèle simpliste d'ionisation | 129 |
| 5.3 | Atome à 3 niveaux | 132 |
| 6 | Le modèle géométrique spatio-temporel | 139 |
| 6.1 | Théorie des fibrés composites principaux | 140 |
| 6.1.1 | Définition d'un fibré composite principal | 141 |
| 6.1.2 | Connexions dans un fibré composite principal | 142 |

| | | |
|-----------|---|------------|
| 6.1.3 | Relèvement horizontal dans un fibré composite principal | 142 |
| 6.2 | Le fibré adiabatique spatio-temporel | 143 |
| 6.2.1 | Le fibré de la dynamique | 143 |
| 6.2.2 | Le fibré de la géodynamique et sa connexion | 145 |
| 6.3 | Théorie de jauge dans le fibré spatio-temporel | 147 |
| 6.3.1 | Pseudostructure de Stiefel | 147 |
| 6.3.2 | Analogie avec la théorie des champs | 148 |
| 6.4 | Un modèle de dynamique quantique contrôlée par un système classique | 148 |
| 6.4.1 | Le modèle | 149 |
| 6.4.2 | Observables généralisées | 150 |
| 6.5 | Application | 150 |
| 6.5.1 | Discussion préliminaire | 151 |
| 6.5.2 | Un exemple concret | 152 |
| 6.5.3 | Le fibré composite modélisant le système dynamique quantique | 153 |
| 6.5.4 | Différents aspects du système dynamique dans le formalisme fibré | 155 |
| 7 | Théorie de jauge adiabatique sur réseaux | 159 |
| 7.1 | La formule de transport adiabatique discrétisée | 161 |
| 7.1.1 | Transport parallèle discret | 161 |
| 7.1.2 | Invariance par rapport aux permutations d'états | 163 |
| 7.2 | Géométrie discrète du transport adiabatique | 164 |
| 7.2.1 | Théorie de jauge sur réseaux : discrétisation de \mathcal{M} | 164 |
| 7.2.2 | Discrétisation et transport adiabatique | 167 |
| 7.3 | Réseaux non-uniformes | 168 |
| 7.3.1 | Procédure numérique pour calculer un réseau 2D | 168 |
| 7.3.2 | Signification de la non-uniformité | 169 |
| 7.3.3 | Lebesgue vs Riemann | 172 |
| 7.4 | Simulation numérique de la topologie du fibré adiabatique | 172 |
| 7.4.1 | Cohomologies et topologie du fibré monopolaire | 173 |
| 7.4.2 | Une cohomologie de Čech non-antisymétrique | 174 |
| 8 | Théorie de Floquet pour l'interaction matière-rayonnement | 181 |
| 8.1 | Théorie de Floquet à champ constant | 181 |
| 8.2 | Théorie de Floquet (t, θ) | 182 |
| 8.3 | Théorie de Floquet et phases géométriques | 184 |
| 8.3.1 | La phase de Aharonov-Anandan de Floquet à champ constant | 184 |
| 8.3.2 | Phases géométriques dans la théorie de Floquet (t, θ) | 185 |
| II | Théories adiabatique et géométrique des opérateurs d'onde | 191 |
| 9 | Théorie des opérateurs d'onde | 195 |
| 9.1 | L'opérateur d'onde de Bloch | 196 |
| 9.2 | L'opérateur d'onde temporel | 197 |
| 9.3 | Intégration de l'équation de Bloch | 197 |
| 9.4 | Sélection de l'espace actif | 203 |
| 9.5 | Opérateur d'onde et théorie de Floquet (t, θ) | 203 |

| | | |
|------------|---|------------|
| 10 | Théorème adiabatique de l'opérateur d'onde | 205 |
| 10.1 | Théorème adiabatique de l'opérateur d'onde temporel | 205 |
| 10.2 | Opérateurs d'onde et phases géométriques non-adiabatiques | 208 |
| 10.2.1 | Cas unidimensionnel | 209 |
| 10.2.2 | Cas multidimensionnel | 210 |
| 10.3 | Transport adiabatique avec l'opérateur d'onde | 212 |
| 10.3.1 | Cas unidimensionnel | 212 |
| 10.3.2 | Cas multidimensionnel | 213 |
| 10.3.3 | Phases standards vs phases effectives | 214 |
| 11 | Transport parallèle et opérateurs d'onde | 217 |
| 11.1 | Transport parallèle discret par succession d'opérateurs d'onde | 218 |
| 11.1.1 | Transport parallèle discret | 218 |
| 11.1.2 | Opérateurs d'onde et transport adiabatique discret | 220 |
| 11.2 | Formulation géométrique des opérateurs d'onde temporels | 221 |
| 11.2.1 | Généralisation maximale de la théorie des phases géométriques en mécanique quantique | 221 |
| 11.2.2 | Expression géométrique des opérateurs d'onde | 223 |
| 11.2.3 | L'opérateur d'onde temporel en tant que relèvement horizontal dans le fibré des espaces actifs | 224 |
| 12 | CATM | 229 |
| 12.1 | Le concept de potentiel optique temporel | 230 |
| 12.2 | Analyse asymptotique | 230 |
| III | Application générale : l'ion moléculaire H_2^+ | 235 |
| 13 | Adiabaticité et phases géométriques de H_2^+ | 243 |
| 13.1 | Adiabaticité et phase de Aharonov-Anandan de H_2^+ | 244 |
| 13.1.1 | Mesure de l'adiabaticité de H_2^+ | 244 |
| 13.1.2 | La phase de Aharonov-Anandan de H_2^+ | 246 |
| 13.2 | Adiabaticité et phase géométrique de la molécule toy-model | 248 |
| 13.2.1 | Mesure de l'adiabaticité de la molécule "toy-model" | 248 |
| 13.2.2 | Phase de Aharonov-Anandan non-abélienne de la molécule "toy-model" . . . | 251 |
| 13.3 | Adiabaticité contrainte de H_2^+ | 253 |
| 14 | Piégeage électromagnétique de H_2^+ | 255 |
| 14.1 | Position du problème | 255 |
| 14.2 | Difficultés du problème | 257 |
| 14.2.1 | Calcul des vecteurs propres | 257 |
| 14.2.2 | Changements de jauge intempestifs | 258 |
| 14.2.3 | Les continua et l'hypothèse adiabatique | 259 |
| 14.3 | Couplages non-adiabatiques, piégeage et contrôle | 261 |
| 14.4 | Autre fenêtre de fréquences | 264 |
| | Conclusion et perspectives | 269 |
| A | Quelques mots sur les opérateurs d'ordre | 273 |

| | | |
|----------|--|------------|
| B | Fibrés principaux et connexions | 281 |
| B.1 | Notions sur les fibrés | 281 |
| B.2 | Connexion | 282 |
| B.3 | Notion de fibré associé | 288 |
| B.4 | Théorème de classification universelle | 289 |
| C | Cohomologies | 291 |
| C.1 | Cohomologies de de Rham et de Čech | 291 |
| C.2 | Théorie de Mayer-Vietoris | 294 |
| C.3 | Polynômes invariants | 297 |
| C.4 | Principe de de Rham | 298 |
| C.5 | Cohomologie de Čech non-abélienne | 298 |
| C.6 | Cohomologie simplicielle | 299 |
| | Bibliographie | 301 |

Remerciements

Je tiens à remercier tout particulièrement mon directeur de thèse Georges Jolicard ainsi que John Killingbeck, pour leur aide et leur écoute lors de ces trois ans de collaboration.

Je remercie également les différentes personnes avec qui j'ai eu le plaisir de discuter de mon travail, et dont les commentaires m'ont beaucoup aidé : Osman Atabek, Tucker Carrington, Stéphane Chelkowski, Jacky Cresson, Alain Grosjean, Stéphane Guérin, Hans-Rudolf Jauslin, Arne Keller, Azzedine Lakhlifi, Christoph Meier, Juan-Pablo Ortega et Dominique Sugny.

Je remercie tous les membres de l'Observatoire de Besançon, pour leur chaleureux accueil, et en particulier le directeur François Vernotte, les secrétaires du laboratoire (Elisabeth, Martine et Fabienne), et les membres du service informatique (Bernard, Edith, Françoise et Kevin), sans qui rien n'aurait été possible. Je remercie également pour leur accueil le personnel de la bibliothèque du laboratoire de mathématiques.

Je salue mes collègues thésards (ou ex-thésards) : Doug, Félicidade, Frédéric, Jean, Michael, Olivier, Sébastien D., Sébastien P., Sébastien R., Sylvain, et Virginie.

Enfin, je tiens à remercier tout spécialement François Puel qui m'a légué ses ouvrages de géométrie différentielle et de topologie lors de son départ en retraite, ils m'ont été d'une aide plus que précieuse.

Introduction

L'interaction matière-rayonnement est un champ d'étude important de la physique quantique. De récentes avancées dans la conception de lasers intenses femto-secondes ont relancé l'intérêt des études théoriques et expérimentales d'atomes ou de molécules en interaction avec des lasers. Comme les champs intenses interdisent l'usage des méthodes perturbatives usuelles, il est nécessaire de développer de nouveaux outils tant théoriques que numériques pour traiter ces problèmes. En général, les lasers considérés présentent des paramètres modulables, comme par exemple l'enveloppe (laser pulsé), la fréquence, ou la polarisation, chacun induisant un problème spécifique de dynamique quantique.

L'étude des interactions de molécules avec des champs lasers intenses femto-secondes a de nombreuses applications, en particulier dans le domaine du contrôle quantique. Le contrôle est un terme qui regroupe des situations très diverses. Les objectifs du contrôle peuvent eux aussi être très variés, citons par exemple le contrôle de transfert de population, le contrôle de l'orientation d'une molécule, ou de la photodissociation et de la photoionisation. Une possible application à des problèmes de contrôle est l'un des objectifs de ce travail. On peut classer les problèmes de contrôle quantique suivant certaines grandes catégories. Bien que ce classement soit quelque peu arbitraire, nous l'indiquons ici afin de mieux positionner notre travail.

- Une première classification différencie le *contrôle dynamique* du *contrôle statique*. Le contrôle statique consiste à ajuster un jeu de paramètres fixant l'environnement de la molécule (le laser), afin que celle-ci évolue vers l'état souhaité. Dans le cas "dynamique" on ne cherche pas à ajuster les paramètres à une valeur optimale, mais à trouver une variation au cours du temps de ces paramètres, qui fasse évoluer le système moléculaire vers l'état voulu. En schématisant, si $H(\vec{R})$ est l'Hamiltonien moléculaire dépendant des variables environnementales \vec{R} , alors le contrôle statique consiste à trouver un vecteur optimal \vec{R}_0 tel que l'opérateur d'évolution $e^{-i\hbar^{-1}H(\vec{R}_0)t}$ amène le système sur l'état voulu, alors que le contrôle dynamique consiste à trouver une fonction $t \mapsto \vec{R}(t)$ telle que l'opérateur d'évolution $\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t H(\vec{R}(t'))dt'}$ amène le système sur cet état. C'est le contrôle dynamique qui nous intéresse ici.
- On distingue également le *contrôle quantique cohérent* qui ne fait intervenir que des états purs, du *contrôle quantique incohérent* qui fait intervenir une distribution de probabilités sur les états quantiques initialement peuplés, cela par l'intermédiaire d'une matrice densité généralement dépendante de la thermodynamique du problème. C'est principalement du contrôle cohérent que traite cette thèse.
- Enfin une distinction très importante existe entre le *contrôle actif* et le *contrôle passif*. Le contrôle actif consiste à tester une ou plusieurs configurations ou variations des paramètres environnementaux sur la molécule (de manière expérimentale ou simulée), puis, en fonction des résultats, modifier ces configurations ou variations, et les tester à nouveau jusqu'à obtenir des résultats optimaux. L'une des méthodes de contrôle actif les plus efficaces est fondée sur l'utilisation d'algorithmes génétiques. On commence avec une population de configurations ou d'évolutions. Chaque individu de la population est testé sur la molécule, afin de lui attribuer un indice de satisfaction. Les individus les moins satisfaisants sont éliminés (repro-

duisant ainsi la sélection naturelle) tandis que l'on recrée une population en mélangeant les caractères des individus rescapés (brassage génétique) tout en introduisant de petites modifications aléatoires sur ces caractères (mutations). La nouvelle génération est à son tour testée et on relance le processus de sélection / reproduction jusqu'à obtenir une population adaptée (avec des caractères optimums). À l'inverse, le contrôle passif consiste à comprendre d'abord la physique du système, pour prédire ensuite (théoriquement ou numériquement), en une seule opération, la configuration ou la variation qui va résoudre le problème. Les méthodes de contrôle actif sélectionnent avec efficacité les configurations optimales, mais ne permettent pas de comprendre pourquoi ces configurations s'avèrent meilleurs que d'autres. En d'autres termes, le contrôle actif ne permet pas de comprendre les rouages contrôlés du mécanisme. Ceci rend la méthode peu transposable. Il est en particulier impossible de déduire d'une première solution une seconde attachée au même système légèrement modifié; d'autant plus que rien n'assure de la robustesse des solutions sélectionnées. À chaque changement de système, il faut reconstruire complètement l'algorithme génétique. Au contraire la méthode passive, basée sur la compréhension des mécanismes physiques, est plus "tractable", mais bien entendu plus difficile à mettre en œuvre. Elle est également plus enrichissante du point de vue de la connaissance scientifique, puisque elle accède aux processus physiques sous-tendu par le contrôle. C'est donc uniquement de contrôle passif dont il sera question dans ce travail.

Pour résumer, l'un des objectifs de ce travail est le développement de méthodologies nouvelles en vue d'une éventuelle application à des problèmes de *contrôle dynamique quantique cohérent passif*. La maîtrise du contrôle quantique pourrait se révéler être capitale dans le développement de nouvelles technologies. Le contrôle de molécules et de nanostructures (telles les fullérènes et les nanotubes de carbone) est une voie vers la nanoélectronique, c'est à dire la conception de composants électroniques moléculaires, permettant une augmentation de la puissance des ordinateurs par une réduction de la taille de leurs composants. Le contrôle par lasers de réactions chimiques, de la géométrie et de la formation de grandes molécules, pourrait à l'avenir permettre de grandes avancées dans la synthèse de nouvelles molécules pour l'industrie chimique et pharmaceutique. Le contrôle de certains systèmes quantiques pourrait être de plus assimilé au pilotage de portes logiques (unités élémentaires d'un ordinateur), ouvrant une possible voie vers la conception d'un ordinateur quantique, dont on sait que les capacités seraient infiniment plus grandes que celles de tout ordinateur classique. Enfin on peut imaginer des machines moléculaires pilotées par lasers, effectuant des tâches à l'échelle nanoscopique. Le potentiel de technologies qui seraient issues d'un contrôle quantique bien maîtrisé et bien compris est considérable. À l'heure actuelle des horloges ultra-précises et ultra-stables, basées sur des "fontaines à atomes froids", sont à l'étude dans de nombreux laboratoires, cette technologie de pointe est issue du contrôle translationnel des atomes par des lasers.

Une autre application importante de ce travail concerne l'interface physique moléculaire - astrophysique, dans le domaine de l'interaction de molécules du milieu interstellaire avec des champs astronomiques. Ce domaine est en plein essor. Nombre de questions concernant le milieu interstellaire, relèvent encore en partie de la compréhension fine des processus d'interaction matière-rayonnement. La spectroscopie dans le domaine de l'ultraviolet lointain des molécules (éventuellement en interaction avec des grains de poussières ou des cristaux de glace) fait l'objet de nombreuses études. La modélisation de différents mécanismes (photoionisation, photodissociation, recombinaison et association radiative, ou autres phénomènes non-linéaires) est d'une importance capitale dans la compréhension de la physico-chimie du milieu interstellaire, où peuvent régner des champs électromagnétiques très intenses. Remarquons enfin que dans ce milieu, des constituants très simples comme l'hydrogène atomique et moléculaire sont majoritairement présents et jouent un rôle essentiel, justifiant par la même les études sur la photoionisation de H et de H_2 , et la photodissociation de H_2^+ .

Pour toutes ces applications, il est nécessaire de pouvoir comprendre et simuler l'interaction matière-rayonnement. Malheureusement les études numériques de l'interaction d'une molécule avec un champ laser intense nécessitent en général de très longs temps de calcul et une capacité de mémoire informatique importante. Cette difficulté est en partie due à la représentation numérique des systèmes quantiques, car il est nécessaire de prendre en compte les états liés reliés par les champs, mais aussi tous les continua interagissant. La discrétisation de ces derniers conduit à une représentation de l'espace de Hilbert de dimension infinie, sous forme d'un espace vectoriel de travail de très grande dimension, induisant ainsi une représentation des opérateurs par des matrices extrêmement grandes. Pour simplifier les calculs, une première idée est d'utiliser des méthodes de projection et de ne considérer que des sous-espaces vectoriels de petites dimensions, appelés *espaces actifs*, convenablement choisis pour représenter (ou approcher) la dynamique du système. Bien entendu, il n'est pas question d'extraire "brutalement" la sous-matrice de l'Hamiltonien correspondant à cet espace actif, la représentation serait alors totalement fautive, mais il faut trouver un *Hamiltonien effectif*, qui permette de simuler la dynamique réelle du système à partir de la dynamique effective dans l'espace actif. Dans notre approche, nous nous intéressons à une méthode dite des *opérateurs d'onde temporels*, qui fournit une théorie de base bien éprouvée d'espaces actifs. La géométrie des espaces actifs est l'un des points d'étude de ce travail.

Le concept d'espace actif s'avère toutefois délicat dans le cas d'interactions de longue durée. Une alternative aux méthodes d'Hamiltoniens effectifs est de considérer un espace actif se déformant en fonction du temps. À chaque instant l'espace actif $S(t)$ peut être de dimension très faible mais la somme directe sur tout le temps, $\int^{\oplus} S(t)dt$, peut représenter une grande partie, voire la totalité de l'espace de Hilbert. La recherche d'un modèle de mécanique quantique, avec espaces actifs déformables, est le point central de ce travail. Ce modèle doit répondre aux contraintes suivantes. Il doit être mathématiquement équivalent au modèle standard de la mécanique quantique (mêmes prédictions), et plus efficace pour traiter les problèmes qui nous intéressent. D'autre part, il doit être adapté aux problèmes de contrôle (en vue d'une éventuelle application en ce sens), en particulier il doit intégrer dans sa description les paramètres de contrôle de l'expérimentateur (les variables du laser). Dans le modèle développé ici, le rayonnement est modélisé à l'aide de la *théorie de Floquet*, que l'on peut voir comme une description intermédiaire entre les descriptions classique et quantique de la lumière. Remarquant que l'évolution des paramètres de contrôle est lente devant les temps propres quantiques (ces paramètres sont classiques), c'est vers des modèles *adiabatiques* que nous nous sommes tournés pour la description des atomes et des molécules, et en particulier pour la définition des espaces actifs. Inévitablement, l'utilisation de méthodes adiabatiques dans notre modèle, nous a poussé à chercher des méthodes de mesure de l'adiabaticité des systèmes quantiques étudiés ; c'est là aussi un point développé dans ce travail.

Les modèles adiabatiques présentent irrémédiablement un phénomène de phases de Berry (ou plus généralement de phases géométriques). Ce phénomène est fondamental pour la description physique, et d'un certain point de vue, le modèle développé ici est entièrement basé sur ce concept. L'étude de ces phases géométriques nécessite l'utilisation de concepts issus de la géométrie. En particulier, la théorie des fibrés principaux est le formalisme le mieux adapté pour décrire ces phases, de sorte que le modèle de mécanique quantique que l'on propose ici, est exprimé dans cette théorie. La géométrie (différentielle, algébrique ou topologique) apparaît comme un outil de plus en plus incontournable en physique théorique. Elle est pas exemple fortement présente dans la théorie des systèmes dynamiques, et est le socle fondamental de la théorie (classique ou quantique) des champs et de la relativité générale. Des descriptions géométriques de la mécanique quantique sont aujourd'hui proposées dans la littérature, et dans ce travail, l'usage de la géométrie apparaît comme primordial. On verra d'ailleurs que l'usage du formalisme géométrique permet des analogies

fructueuses avec d'autres théories physiques, en particulier avec la théorie des champs par l'intermédiaire du concept de *monopôle magnétique adiabatique*.

Le concept de phases géométriques et le concept mathématique d'*holonomie* qui s'y rapporte apparaissent comme des points centraux dans les théories fondamentales de la physique et dans leurs applications. Dans beaucoup d'applications en effet, le concept d'holonomie s'est avéré fructueux, comme par exemple avec la théorie HQC (*Holonomic Quantum Computation*) en informatique quantique, ou la théorie LGQC (*Loop Geometric Quantum Control*) pour le contrôle quantique ; ce travail se rattache plus ou moins directement à ces théories. Mais l'holonomie apparaît aussi dans des concepts plus fondamentaux, comme dans la théorie LQG (*Loop Quantum Gravity*) qui est l'une des voies vers une théorie quantique de la gravitation. Les phases géométriques elles aussi apparaissent dans de nombreux domaines de la physique, en physique quantique comme nous l'avons déjà noté (sous le nom "phases de Berry"), mais aussi en mécanique classique (sous le nom "angles de Hannay"), en optique (sous le nom "phases de Pancharatnam"), en physique des particules (sous le nom "termes de Wess-Zumino"), en physique de la matière condensée (dans l'effet Aharonov-Bohm et dans l'effet Hall quantique), et dans la théorie des supercordes (dans le modèle matriciel). La diversité des théories où les phases géométriques prennent place, laisse à penser qu'il s'agit là d'un des concepts centraux de toute la physique.

La première partie de ce manuscrit est consacrée à l'exposition du modèle géométrique que l'on a développé, et à l'analyse des phases géométriques qui s'y rattachent. Ce modèle est l'un des résultats fondamentaux de cette thèse. On trouvera également dans cette partie une étude systématique des monopôles magnétiques adiabatiques, plus poussée que ce que l'on trouve généralement dans la littérature. Afin de rendre compréhensible l'ensemble de la thèse, on y trouve également un grand nombre de rappels de théories connues, cela d'une part, afin de fixer les notations, et d'autre part, afin d'avoir un exposé cohérent et complet. L'intérêt de ce modèle et des notions géométriques introduites dans la première partie est clairement explicité à la fin de cette partie où l'on montre que la discrétisation du modèle à partir de concepts de géométrie numérique (*computational geometry*), permet de traduire celui-ci en une méthode numérique. Cette méthode se caractérise par l'utilisation d'un réseau non-uniforme discrétisant les paramètres de contrôle, auxquels on associe un espace actif se "déformant" en fonction de ce réseau ; ce qui est l'un des points originaux de ce travail. La seconde partie revient sur la mesure de l'adiabaticité des systèmes dynamiques et sur le rôle des espaces actifs. Elle introduit deux résultats nouveaux, une théorie adiabatique rigoureuse des opérateurs d'onde temporels et une méthode permettant de forcer formellement l'adiabaticité de certains systèmes, méthode appelée CATM (*Constrained Adiabatic Trajectory Method*). Différents systèmes quantiques sont étudiés au cours de ces développements : Spin contrôlé par un champ magnétique, atomes à deux niveaux, STIRAP d'un atome à 3 niveaux, photodissociation de H_2^+ . Enfin en dernière partie, une application plus "lourde", utilisant simultanément toutes les notions et méthodes introduites dans les parties précédentes, est présentée : le piégeage électromagnétique de H_2^+ .

Remarque sur la terminologie : On emploie dans ce texte le terme "adiabaticité" de manière "très libre", s'éloignant ainsi parfois des concepts orthodoxes. *Stricto sensu*, un système est adiabatique si l'on peut décrire sa dynamique à l'aide d'un seul état propre instantané non-dégénéré ou à l'aide d'un ensemble d'états propres instantanés associés à une unique valeur propre dégénérée. Cette description étant obtenue à l'aide d'un "théorème adiabatique" satisfait par des systèmes dont la dépendance temporelle est lente devant le temps propre quantique. Dans un premier temps on étend le terme adiabatique à des systèmes pouvant être décrit à l'aide d'un petit groupe d'états propres instantanés (associés à plusieurs valeurs propres). Ces cas, qui dérivent d'un théorème adiabatique, seront dits adiabatiques au sens fort. Mais dans de nombreux cas, on s'intéressera aussi à des systèmes qui ne vérifient pas un théorème adiabatique, mais pour lesquels il existe un espace actif (se déformant ou pas) engendré par un nombre fini d'états (pas forcément des états propres) dans lequel la dynamique se projette parfaitement. Ces systèmes seront dits adiabatiques au sens

faible. Dans le même ordre d'idée, les termes "phase de Berry adiabatique", "limite adiabatique" et "transport adiabatique" se réfèrent à des systèmes adiabatique au sens fort du terme, alors que le terme "phase de Berry non-adiabatique" se réfère à des systèmes adiabatiques au sens faible. Notons enfin, que le terme "phase de Berry" qui se réfère, stricto sensu, à la phase géométrique d'un système quantique adiabatique au sens fort, est utilisé dans la littérature comme un terme générique pour qualifier les phases géométrique en mécanique quantique. Afin de limiter les ambiguïtés, les phases géométriques d'un système adiabatique au sens fort seront appelées "phases de Berry adiabatiques" ou "phases de Berry-Simon", les phases géométriques des systèmes adiabatiques au sens faible seront appelées "phases de Berry non-adiabatiques" ou "phases de Aharonov-Anandan".

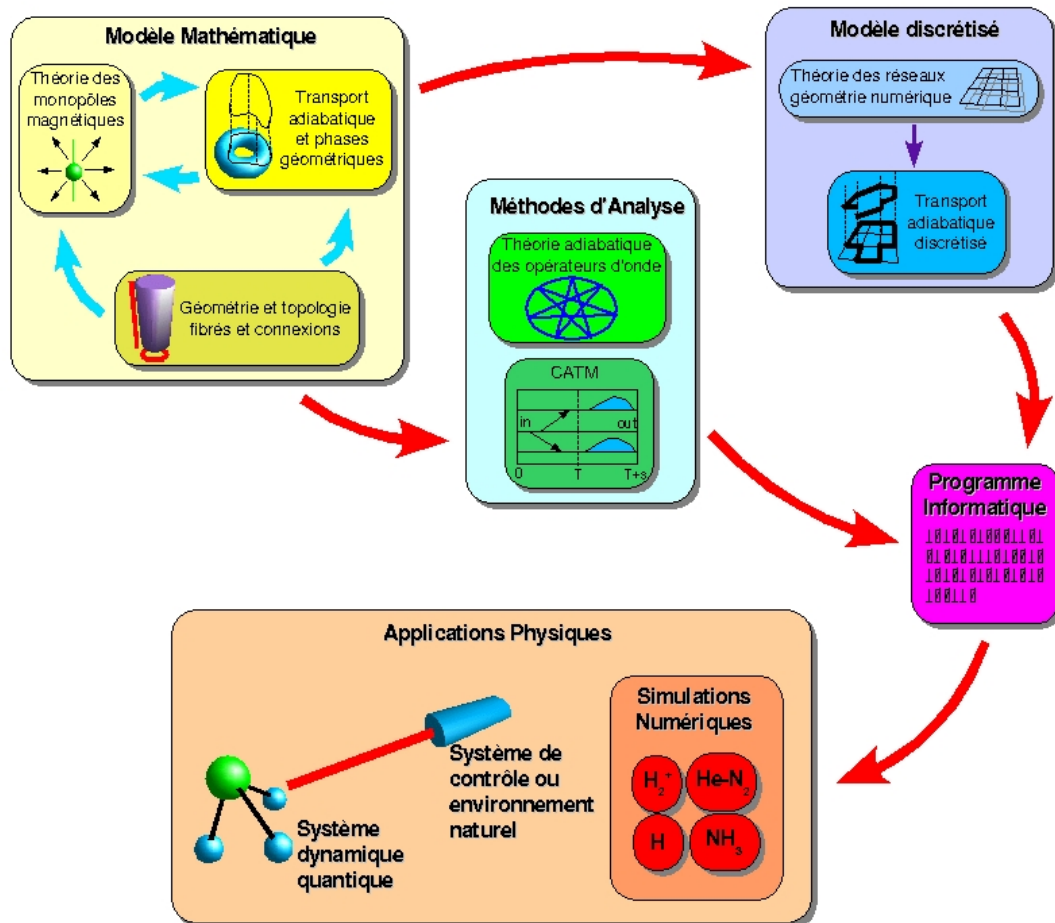


FIG. 1 – Schéma du plan de la thèse.

Publications

Ce travail de thèse a donné lieu aux publications suivantes :

- (1.) Georges Jolicard, David Viennot, John P. Killingbeck et Jean-Marc Zucconi, *Iterative eigenvalue method using the Bloch wave operator formalism with Padé approximants and absorbing boundaries*, Physical Review E **70**, 046703 (2004).
associée au chapitre 9
- (2.) Georges Jolicard, David Viennot et John P. Killingbeck, *Constrained adiabatic trajectory method*, Journal of Physical Chemistry A **108**, 8580 (2004).
associée aux chapitres 12 et 13
- (3.) David Viennot, *Transport adiabatique et phases de Berry : application au contrôle quantique cohérent passif*, Journal de Physique IV France **119**, 289 (2004).
associée au chapitre 7
- (4.) David Viennot, Georges Jolicard, John P. Killingbeck et Marie-Yvonne Perrin, *Adiabatic theorem for the time-dependent wave operator*, Physical Review A **71**, 052706 (2005).
associée aux chapitres 9, 10 et 13
- (5.) David Viennot, *Principal bundle structure of quantum adiabatic dynamics with a Berry phase which does not commute with the dynamical phase*, Journal of Mathematical Physics **46**, 072102 (2005).
associée au chapitre 6
- (6.) David Viennot, Georges Jolicard et John P. Killingbeck, *Berry phase and time-dependent wave operators*, Journal of Physics A (soumis).
associée aux chapitres 10 et 13

Notations

| | | |
|--|--|--|
| | \sim | équivalent à |
| | \simeq (entre fonctions) | approximativement égale |
| | \simeq (entre espaces vectoriels ou groupes) | isomorphe |
| | \simeq (entre espaces topologiques) | homéomorphe |
| | \simeq (entre variétés) | difféomorphe |
| | $\ \cdot\ $ | norme (sous-entendue L^2) |
| | $\ \cdot\ _p$ | norme L^p |
| | $/$ (entre groupes) | groupe quotient |
| | $/$ (entre espaces vectoriels) | espace vectoriel quotient |
| | X/\sim | ensemble des classes d'équivalence pour la relation \sim |
| | \setminus (entre ensembles) | privé de |
| | \wedge | produit extérieur |
| | \cap | intersection |
| | \cup (entre ensembles) | union |
| | \cup (entre cochaînes) | cup-produit |
| | \times | produit cartésien ou produit direct de groupes |
| | \times_H | produit cartésien quotienté par H |
| | \otimes | produit tensoriel |
| | \oplus | somme directe |
| | \circ | composition d'applications |
| | f_* | application tangente (push-forward) de l'application f |
| | f^* | application cotangente (pull-back) de l'application f |
| | a^* | complexe conjugué du nombre a |
| | \mathbb{K}^* | corps $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ ou \mathbb{C} privé de 0 |
| | H^\dagger | transconjugué de l'opérateur ou de la matrice H |
| | M^t | transposée de la matrice M |
| | \bar{a} | complexe conjugué du nombre a |
| | \overline{X} | fermeture topologique de l'ensemble X |
| | $f _X$ | f restreinte à l'ensemble X |
| | $\langle \cdot, \cdot \rangle$ | produit scalaire d'un espace de Hilbert |
| | $\langle \cdot, \cdot \rangle$ | crochet de dualité |
| | $[\cdot, \cdot]$ | crochet de Lie (commutateur) |
| | $*_g$ | star-opérateur de Hodge pour la métrique g |
| | $(-1)^\sigma$ | signature de la permutation σ |
| | \perp | orthogonal à |
| | V^\perp | supplémentaire orthogonal du sous-espace vectoriel V |
| | \emptyset | ensemble vide |
| | \hookrightarrow | inclusion ou immersion |
| | F^E | ensemble des applications de E dans F |

| | |
|---|---|
| ad | représentation adjointe d'une algèbre de Lie |
| Ad | représentation adjointe d'un groupe de Lie |
| $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ | ensemble des opérateurs bornés de l'espace de Hilbert \mathcal{H} |
| $\mathcal{B}^n(M, W)$ | ensemble des n -formes différentielles exactes de la variété M à valeurs dans W |
| $\mathcal{C}^k(A, B)$ | ensemble des fonctions k -fois différentiables de A à valeurs dans B |
| $C^n(X, W)$ | ensemble des n -cochaînes de X à valeurs dans W |
| \mathbb{C} | corps des nombres complexes |
| c_1 | première classe de Chern (comme classe de de Rham) |
| \check{c}_1 | première classe de Chern (comme classe de Čech) |
| card | cardinal (nombre d'éléments d'un ensemble) |
| $\mathbb{C}P^n$ | espace projectif complexe d'ordre n |
| d_M | différentielle extérieure de la variété M |
| D | différentielle covariante |
| ∂ (devant une variété) | bord de |
| ∂ (devant une fonction) | différentielle de Dolbeault |
| $\bar{\partial}$ | différentielle de Dolbeault conjuguée |
| ∂_t | notation compacte pour $\frac{d}{dt}$ |
| ∂_μ | notation compacte pour $\frac{\partial}{\partial R^\mu}$ |
| \det | déterminant d'une matrice |
| \dim | dimension |
| dist | distance |
| dist_{FS} | distance de Fubini-Study |
| dist_{ch} | distance cordale |
| $\text{Dom } H$ | domaine de l'opérateur H |
| $G_p(\mathbb{C}^n)$ | Grassmannienne complexe de \mathbb{C}^n d'ordre p |
| $GL(n, \mathbb{K})$ | groupe de Lie des matrices inversibles d'ordre n sur le corps \mathbb{K} |
| $\mathfrak{gl}(n, \mathbb{K})$ | algèbre de Lie des matrices carrées d'ordre n sur le corps \mathbb{K} |
| $H_x P$ | espace tangent horizontal à la variété P (espace total d'un fibré) au point x |
| $H^n M$ | n -ième groupe de cohomologie de de Rham de la variété M |
| $\check{H}^n(\mathcal{A}, \mathcal{F})$ | n -ième de groupe de cohomologie de Čech des gerbes \mathcal{F} sur l'atlas \mathcal{A} |
| i | nombre imaginaire pur $i^2 = -1$ |
| i_X | produit intérieur par rapport X |
| \Im | partie imaginaire |
| $\text{Im} H$ | image de l'opérateur H |
| $\inf_f f(t)$ | borne inférieure de la fonction f |
| $i\mathbb{R}$ | ensemble des nombres imaginaires purs |
| $\ker H$ | noyau de l'opérateur H |
| L_X | dérivée de Lie par rapport à X |
| $L^2(X, dx)$ | ensemble des fonctions de carré sommable de X pour la mesure de Lebesgue dx |
| $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ | ensemble des opérateurs de l'espace de Hilbert \mathcal{H} |
| $\mathcal{L}(E, F)$ | ensemble des applications linéaires de E dans F |
| $\lim_{n \rightarrow \infty} A_n$ | limite en norme de la suite d'opérateurs ou de fonctions (A_n) |
| $\lim_{n \downarrow} E_n$ | limite inductive des ensembles E_n |
| \ln | logarithme naturel |
| Ln | valeur principale du logarithme naturel sur un nombre complexe |
| $\mathcal{M}_{n \times p}(\mathbb{K})$ | ensemble des matrices à n lignes et p colonnes sur le corps \mathbb{K} |
| $\max X$ | maximum de X |
| $\min X$ | minimum de X |
| \mathbb{N} | nombres entiers naturels |
| $\mathcal{O}(x^n)$ | reste d'ordre x^n pour x au voisinage de 0 |
| $O(n)$ | groupe de Lie des matrices réelles orthogonales d'ordre n |

| | |
|---|--|
| $\mathfrak{o}(n)$ | algèbre de Lie des matrices réelles antisymétriques d'ordre n |
| $\mathbb{P}, \mathbb{P}e$ | opérateur d'ordre sur un chemin |
| Pr_i | projection canonique de $X_1 \times \dots \times X_n$ sur X_i |
| \Re | partie réelle |
| \mathbb{R} | corps des nombres réels |
| $\mathbb{R}P^n$ | espace projectif réel d'ordre n |
| $\text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} A_n$ | limite forte de la suite d'opérateurs (A_n) |
| S^n | n -sphère |
| S_n | groupe des permutations de $(1, \dots, n)$ |
| $SL(\mathbb{K}, n)$ | groupe de Lie des matrices inversibles d'ordre n et de déterminant 1 sur le corps \mathbb{K} |
| $\mathfrak{sl}(\mathbb{K}, n)$ | algèbre de Lie des matrices de trace nulle sur le corps \mathbb{K} |
| $SO(n)$ | groupe de Lie des matrices réelles orthogonales d'ordre n et de déterminant 1 |
| $\text{Sp}(H)$ | spectre de l'opérateur H |
| $\text{Sp}_{\text{cont}}(H)$ | spectre continu de l'opérateur H |
| $\text{Sp}_d(H)$ | spectre discret de l'opérateur H |
| $\text{Sp}_{\text{ess}}(H)$ | spectre essentiel de l'opérateur H |
| $\text{Sp}_{\text{pp}}(H)$ | spectre purement ponctuel de l'opérateur H |
| $SU(n)$ | groupe de Lie des matrices complexes unitaires d'ordre n et de déterminant 1 |
| $\mathfrak{su}(n)$ | algèbre de Lie des matrices complexes anti-autoadjointes d'ordre n et de trace nulle |
| $\sup_t f(t)$ | borne supérieure de la fonction f |
| $\text{supp} f$ | support de f |
| $\mathbb{T}, \mathbb{T}e$ | opérateur d'ordre chronologique |
| $T_x M$ | espace tangent à la variété M au point x |
| T^n | n -tore |
| tr | trace d'une matrice |
| $U(t, 0)$ | opérateur d'évolution |
| $U(n)$ | groupe de Lie des matrices complexes unitaires d'ordre n |
| $\mathfrak{u}(n)$ | algèbre de Lie des matrices complexes anti-autoadjointes d'ordre n |
| $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ | ensemble des opérateurs unitaires de l'espace de Hilbert \mathcal{H} |
| $\mathcal{V}(x)$ | voisinage de x |
| $V_x P$ | espace tangent vertical à la variété P (espace total d'un fibré) au point x |
| $V_p(\mathbb{C}^n)$ | variété de Stiefel complexe de \mathbb{C}^n d'ordre p |
| $V_p^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n)$ | variété de Stiefel complexe non-compacte de \mathbb{C}^n d'ordre p |
| $\text{w-lim}_{n \rightarrow \infty} A_n$ | limite faible de la suite d'opérateurs ou de fonctions (A_n) |
| \mathbb{Z} | nombres entiers relatifs |
| $\mathcal{Z}^n(M, W)$ | ensemble des n -formes différentielles fermées de la variété M à valeurs dans W |
| $\Gamma(M, P)$ | ensemble des sections de M dans P |
| δ | opérateur de cobord de Čech |
| δ_G | opérateur de cobord de Čech non-abélien |
| $\delta(x)$ | distribution de Dirac |
| δ_{ij} | symbole de Krönecker |
| $\Delta_n X$ | ensemble des n -simplexes du complexe X |
| ϵ_{ijk} | symbole de Levi-Civita |
| λ_i | i -ème matrice de Gell-Mann |
| $\pi_1(M)$ | groupe d'homotopie de la variété M |
| $\pi(M, N)$ | classes d'homotopie des applications de M vers N |
| σ_i | i -ème matrice de Pauli |
| $\Omega^n(M, W)$ | ensemble des n -formes différentielles de la variété M à valeurs dans W |
| $\Omega^{n,p} K$ | ensemble des formes différentielles de type (n, p) de la variété complexe K |
| $\Omega_I^n(M, W)$ | ensemble des n -formes différentielles équivariantes de la variété M à valeurs dans W |
| $\Omega_{i=0}^n(M, W)$ | ensemble des n -formes différentielles horizontales de la variété M à valeurs dans W |
| $\Omega_B^n(M, W)$ | ensemble des n -formes différentielles basiques de la variété M à valeurs dans W |

Première partie

**Théories de jauge des systèmes
photodynamiques quantiques**

Introduction

Dans ce travail, nous nous intéressons à des systèmes photodynamiques quantiques, c'est-à-dire des atomes ou des molécules en interaction avec un champ électromagnétique variant avec le temps. Ce sont des systèmes que l'on rencontre lorsque l'on traite des problèmes d'interaction dans le milieu interstellaire, ou dans des problèmes de contrôle de molécules par laser. Pour simplifier la discussion, considérons un système atomique ou moléculaire décrit par un Hamiltonien H_0 sur un espace de Hilbert \mathcal{H} , sur lequel on fait agir des champs lasers $\vec{E}_i(t)$. L'Hamiltonien du système photodynamique est alors

$$H(t) = H_0 + \sum_i \mu f_i(t) \cos(\theta_i(t)) \sin(\omega_i(t)t + \phi_i(t)) \quad (1)$$

où μ est le moment dipolaire électrique de la molécule, et $(f_i, \theta_i, \omega_i, \phi_i)$ sont respectivement l'intensité, la direction de polarisation, la fréquence et la phase du champ laser i . Ces paramètres sont les variables que l'expérimentateur peut faire évoluer avec le temps dans un problème de contrôle. Un $4N$ -uplet $\vec{R} \equiv (f_i, \theta_i, \omega_i, \phi_i)_{i=1, \dots, N}$ caractérisant un environnement déterminé de la molécule (le champ constituant cet environnement), on doit trouver quelle évolution de l'environnement $t \mapsto \vec{R}(t)$, va produire une évolution de la molécule vers l'état souhaité pour le contrôle. On voit ainsi que le chemin \mathcal{C} paramétré par $t \mapsto \vec{R}(t)$ dans \mathcal{M} (espace de toutes les configurations possibles des variables environnementales) est l'objet qui caractérise la solution du contrôle. L'espace \mathcal{M} n'apparaît malheureusement pas dans le modèle standard de la mécanique quantique. En effet, l'espace des états du système est généralement de la forme $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n, dx^1 \dots dx^n)$ où n est le nombre de degrés de liberté. Par exemple, pour un atome à n électrons, l'espace de configuration est \mathbb{R}^{3n} , l'espace de toutes les positions possibles des électrons. On aurait pourtant besoin d'avoir une description où \mathcal{M} apparaît comme espace de configuration, de manière à lier directement les conditions environnementales avec les états du système.

$(f_i, \theta_i, \omega_i, \phi_i)_i$ étant des paramètres qui sont modifiés par l'expérimentateur, ce sont des paramètres classiques, c'est-à-dire dont l'évolution est lente devant le temps propre quantique (durée caractéristique de transition d'un état propre vers un autre). On peut donc penser que $t \mapsto H(t)$ satisfait à un théorème adiabatique. Or si c'est le cas, la fonction d'onde du système présente une forme particulière, dite de "transport parallèle", où apparaît un objet appelé "phase géométrique". Cette phase a une description géométrique basée sur l'espace \mathcal{M} que l'on suppose être une variété infiniment différentiable. C'est de cette description que l'on tirera un modèle de photodynamique quantique adapté aux problèmes de contrôle.

Cette partie est organisée comme suit. Dans un premier temps on rappelle un certain nombre de résultats concernant les théorèmes adiabatiques. Puis on étudie les objets fondamentaux de notre description, le transport parallèle et les phases géométriques. Au cours de ces développements, on introduit une formule dite de transport adiabatique généralisée, qui à notre connaissance, n'est pas considérée dans la littérature. Dans un troisième chapitre, on présente les propriétés mathématiques des phases géométriques. Ensuite on introduit la notion de monopôle magnétique adiabatique qui va s'avérer être un point fondamental de notre étude. Cette présentation est plus détaillée que ce que l'on trouve généralement dans la littérature. Après avoir considéré des exemples issus la physique atomique, le sixième chapitre présente en substance le modèle sur lequel est fondé notre étude, en particulier il introduit la structure mathématique qui permet de décrire le "transport adiabatique généralisé". C'est là un point tout à fait original de ce travail de thèse. Le septième chapitre présente la discrétisation du modèle en vue d'applications numériques de celui-ci. Enfin cette première partie se termine par une digression, on revient au problème de photodynamique, en présentant la théorie de Floquet, qui dans la suite, va nous permettre de décrire le champ électromagnétique dans notre modèle.

Cette partie comporte de nombreux développements mathématiques, en particulier concernant la

théorie des fibrés principaux et de leurs connexions. Les définitions et propriétés utiles pour la compréhension des ces points sont rappelées annexe B. D'autres notions issues de la géométrie différentielle sont nécessaires pour la compréhension des ces développements. Le lecteur peut se reporter aux ouvrages [113, 89, 43, 36, 19, 64] pour avoir une présentation des principaux outils de la géométrie différentielle.

Chapitre 1

Les théorèmes adiabatiques

Adiabatique : du grec adiabatos (“αδιαβατος”) infranchissable, impénétrable.

Comme nous l’avons dit dans l’introduction, on suppose que l’Hamiltonien du système photodynamique satisfait à un théorème adiabatique. Ce chapitre présente les théorèmes adiabatiques que l’on utilisera dans la suite. De manière générale un théorème adiabatique énonce que, si à l’instant $t = 0$ le système se trouve dans un certain sous-espace spectral instantané, alors, sous certaines conditions, il restera à tout instant dans ce sous-espace spectral. En d’autres termes, si $P(t)$ est le projecteur spectral associé et $U(t, 0)$ l’opérateur d’évolution, un théorème adiabatique s’énonce :

$$U(t, 0)P(0) = P(t)U(t, 0) \quad (1.1)$$

C’est à cette propriété que l’on se référera dans la suite en évoquant “un théorème adiabatique”. Une des conditions pour avoir un tel théorème est que le sous-spectre en question reste isolé tout au long du temps du reste du spectre de l’Hamiltonien, c’est-à-dire qu’il existe un gap minimum entre ce sous-spectre et son complémentaire. D’où le terme adiabatique : le système ne peut franchir ce gap. Le sous-espace $S(t) = \text{Im}P(t)$ va à chaque instant décrire complètement le système. C’est un exemple d’espace actif se déformant, que l’on appellera espace actif adiabatique.

Nous considérerons un espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(X, dx)$, où X est un espace topologique équipé de la mesure de Lebesgue dx , et ainsi que l’espace de Banach de ses opérateurs bornés $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ muni de la topologie de la norme. Dans tout ce chapitre, les notions topologiques sont sous-entendues comme appartenant à cette topologie. Ainsi, sauf mention contraire explicite, on dira que $A : \begin{matrix} \mathbb{R} & \rightarrow & \mathcal{B}(\mathcal{H}) \\ s & \mapsto & A(s) \end{matrix}$ est continu par rapport à s pour dire continu en norme, i.e. $\forall s_0 \in \mathbb{R}$

$$\lim_{s \rightarrow s_0} \|A(s) - A(s_0)\| = 0 \quad (1.2)$$

de même on dira dérivable pour dérivable en norme : $\exists A'(s) \in \mathcal{B}(\mathcal{H}), \forall s \in \mathbb{R}$

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left\| \frac{A(s+h) - A(s)}{h} - A'(s) \right\| = 0 \quad (1.3)$$

On écrira $\lim_{s \rightarrow +\infty} A(s) = B$ pour

$$\lim_{s \rightarrow +\infty} \|A(s) - B\| = 0 \quad (1.4)$$

et enfin que $A(s) = \mathcal{O}(s^n)$ si $s \in \mathcal{V}(0)$ pour

$$\frac{A(s)}{s^n} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \quad (1.5)$$

On rappelle que la norme d'un opérateur est définie par

$$\|A\| = \sup_{\substack{\psi \in \mathcal{H} \\ \psi \neq 0}} \frac{\|A\psi\|}{\|\psi\|} \quad (1.6)$$

avec

$$\|\psi\| = \sqrt{\int_X |\psi(x)|^2 dx}$$

Dans la suite, nous supposerons que l'équation de Schrödinger, $i\hbar\partial_t U(t, 0) = H(t)U(t, 0)$, admet une solution $t \mapsto U(t, 0)$ fortement continue. Cette condition est satisfaite sous les conditions du théorème EP, voir par exemple [123] (Th. X.70).

Nous citons à présent le plus utilisé des théorèmes adiabatiques, dont on trouvera un exposé plus détaillé dans [101].

Théorème 1 (Théorème Adiabatique Standard). *Soit $s \mapsto H(s)$ une famille d'hamiltoniens auto-adjoints. On note $s = t/T$ le temps réduit sur l'intervalle $[0, T]$. On suppose que $\{H(s)\}_{s \in [0, 1]}$ ont un domaine commun dense dans \mathcal{H} , et que l'équation :*

$$i\hbar \frac{d}{ds} U_T(s) = TH(s)U_T(s) \quad (1.7)$$

admet une solution $s \mapsto U_T(s) \in \mathcal{U}(\mathcal{H})$ fortement continue. On suppose de plus que le spectre de $H(s)$ est purement discret (i.e. $\sigma(H(s)) = \sigma_d(H(s)) = \{\epsilon_j(s)\}_{j=1, \dots, N}$) (le cas $N = +\infty$ n'est pas exclu).

On suppose que :

- Les valeurs propres instantanées de $H(s)$ sont des fonctions continues de s , et restent distinctes (isolées) les unes des autres pendant la période d'évolution $0 \leq s \leq 1$.
- $P_j(s) \in \mathcal{C}^2([0, 1]; \mathcal{B}(\mathcal{H}))$

Alors $\forall j$:

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s)P_j(0) = P_j(s) \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s) \quad (1.8)$$

Preuve : cf. [101] ■

Ce théorème a un inconvénient majeur, l'espace actif n'y est associé qu'à une seule valeur propre. Or dans les problèmes de photodynamique, en général plusieurs valeurs propres sont mises en jeu. De plus le théorème standard interdit les croisements de valeurs propres, or ce phénomène est d'une importance capitale dans les problèmes que l'on veut traiter. On aura donc besoin d'un théorème adiabatique considérant un groupe de valeurs propres et autorisant les croisements à l'intérieur de ce groupe. Un tel théorème nous est donné par Nenciu [118].

Théorème 2 (Théorème Adiabatique de Nenciu). *Soit $s \mapsto H(s)$ une famille d'hamiltoniens auto-adjoints. On note $s = t/T$ le temps réduit sur l'intervalle $[0, T]$. On suppose que $\{H(s)\}_{s \in [0, 1]}$ ont un domaine commun dense dans \mathcal{H} , et que l'équation :*

$$i\hbar \frac{d}{ds} U_T(s) = TH(s)U_T(s) \quad (1.9)$$

admet une solution $s \mapsto U_T(s) \in \mathcal{U}(\mathcal{H})$ fortement continue.

On suppose que :

– il existe des fonctions réelles sur $[0, 1]$, notées $a_j(s), b_j(s)$ $j = 1, \dots, N - 1 < +\infty$, telles que :

$$a_j(s) < b_j(s) \leq a_{j+1}(s), \forall j, \forall s$$

$$\min_j \inf_s (b_j(s) - a_j(s)) \geq d > 0$$

et

$$\sigma(H(s)) = \bigcup_{j=1}^N \sigma_j(s)$$

$$\sigma_1(s) \subset] -\infty, a_1(s)]$$

$$\sigma_j(s) \subset [b_{j-1}(s), a_j(s)], \forall j = 2, \dots, N - 1$$

$$\sigma_N(s) \subset [b_{N-1}(s), +\infty[$$

– $P_j(s) \in \mathcal{C}^2([0, 1]; \mathcal{B}(\mathcal{H}))$

– $R(s, z) = (H(s) - z)^{-1}$ est différentiable par rapport à s et $\forall \delta > 0, \exists K_\delta \in \mathbb{R}^+$ tel que :

$$\left\| \frac{dR}{ds} \right\| \leq \frac{K_\delta}{\text{dist}(z, \sigma(H(s)))}$$

$$\forall z | \text{dist}(z, \sigma(H(s))) > \delta.$$

Alors $\forall j = 2, \dots, N - 1$:

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s) P_j(0) = P_j(s) \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s) \quad (1.10)$$

Preuve : cf. [118] ■

Ce théorème permet les croisements de valeurs propres à l'intérieur des sous-spectres isolés, de plus il n'exclut pas le cas où une partie du spectre serait continue. Dans les cas courants le spectre continu se trouve dans l'intervalle $[b_{N-1}, +\infty[$. L'hypothèse sur la norme de la dérivée de la résolvante signifie que les variations temporelles de la résolvantes sont lentes loin du spectre et sont d'autant plus lentes que l'on s'éloigne de celui-ci.

Il existe d'autres théorèmes adiabatiques, en particulier le théorème de Nenciu-Rasche [119] qui s'applique à des matrices non-auto-adjointes. Malheureusement les conditions d'application de ce théorème ne seront pas remplies par les Hamiltoniens non-auto-adjointes que nous rencontrerons. Nous serons donc obligés de postuler la propriété d'adiabaticité faute de théorème applicable. Citons d'autre part l'existence d'un théorème adiabatique s'appliquant aux cas présentant des croisements [23], d'un théorème adiabatique s'appliquant localement sur le spectre et démontré à partir de la géométrie différentielle [83], d'un théorème adiabatique sans gap [17, 141, 16], d'un théorème adiabatique pour la mécanique quantique statistique [116] et d'un théorème adiabatique pour des systèmes présentant un nombre infini de croisements [81].

En pratique le temps d'interaction n'est pas infini et il est difficile de poser $\frac{d}{dt} = \frac{1}{T} \frac{d}{ds}$ avec $\frac{1}{T} \in \mathcal{V}(0)$. Mais dans les problèmes qui nous intéressent, l'Hamiltonien dépend du temps à travers des paramètres $\vec{R}(t)$, on peut donc poser $\frac{d}{dt} = \frac{\partial R^\mu}{\partial t} \frac{\partial}{\partial R^\mu}$. Or ces paramètres étant classiques, leurs vitesses d'évolution $\frac{\partial R^\mu}{\partial t}$ sont lentes, on peut donc supposer que $\frac{\partial R^\mu}{\partial t} \in \mathcal{V}(0)$, et appliquer les théorèmes adiabatiques approximativement. En d'autres termes, l'hypothèse adiabatique consiste à supposer que les paramètres environnementaux évoluent infiniment plus lentement que la molécule. Ainsi celle-ci a le temps de s'adapter à chaque configuration environnementale avant que celle-ci ne change significativement. Tout se passe alors, comme si le système passait par une succession de positions d'équilibre, chacune associée à un environnement constant. Ne subissant aucun "choc violent" le

système ne change pas d'état et reste donc sur le même état propre instantané, le passage d'un état vers un autre ne se faisant qu'au moment des croisements de valeurs propres, c'est-à-dire aux points de dégénérescence. On voit donc que le sous-espace spectral sélectionné par le théorème de Nenciu et qui va constituer notre espace actif, est formé des valeurs propres reliées par croisements les unes aux autres et dans lequel se projette la fonction d'onde initiale. Dans la suite, nous nous intéresserons aussi à des régimes intermédiaires, où l'évolution des paramètres de contrôle est suffisamment lente pour que le système ne sorte pas de l'espace actif, mais dans lequel des transitions non-adiabatiques apparaissent entre les états internes à l'espace actif. Ces transitions se manifestent au voisinage des croisements mais pas aux croisements eux-mêmes (transitions depuis un anti-croisement). On continuera de qualifier ces systèmes d'adiabatiques (c'est l'adiabaticité par rapport à l'espace actif qui nous intéresse ici), et même d'adiabatiques au sens fort, puisque satisfaisant au théorème de Nenciu. D'autre part, ces transitions entre états de l'espace actif, qualifiées de non-adiabatiques dans la littérature, seront appelées ici, pour une raison qui deviendra claire dans la suite, transitions adiabatiques off-diagonales.

Chapitre 2

Transport adiabatique et phases géométriques

Nul n'entre ici s'il n'est géomètre.

Platon (inscription sur le fronton de l'Académie d'Athènes)

Comme nous l'avons explicité dans le chapitre précédent, nous supposons que le système photodynamique satisfait à un théorème adiabatique. Nous écrivons l'Hamiltonien $t \mapsto H(\vec{R}(t))$, où $t \mapsto \vec{R}(t)$ est un chemin \mathcal{C} dans l'espace des paramètres de contrôle \mathcal{M} . Par extension, nous considérerons l'expression générale de l'Hamiltonien dépendant directement des paramètres environnementaux :

$$H : \begin{array}{ll} \mathcal{M} & \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) \\ \vec{R} & \mapsto H(\vec{R}) \end{array}$$

L'hypothèse adiabatique consiste donc à supposer l'existence d'un projecteur spectral de $H(\vec{R})$, $P(\vec{R})$, tel que pour tout chemin $t \mapsto \vec{R}(t)$ on ait

$$U(t, 0)P(\vec{R}(0)) = P(\vec{R}(t))U(t, 0) \quad (2.1)$$

Il s'agit maintenant de savoir quelle est la forme de la fonction d'onde lorsque le système satisfait à l'hypothèse adiabatique 2.1. Nous verrons dans ce chapitre que la forme en question fait intervenir une quantité appelée phase de Berry-Simon, dont la généralisation va être un élément fondamental de notre modèle mathématique. La phase de Berry-Simon est un exemple de phase géométrique. Il existe des contextes différents de l'hypothèse adiabatique où apparaissent ces phases. En particulier, si on sait que l'évolution est cyclique (i.e. $\psi(T) = e^{i\varphi}\psi(0)$), il apparaît une phase géométrique dite de Aharonov-Anandan. Cette situation est assez similaire au cas adiabatique puisque l'équation 2.1 est vérifiée, mais pour $P(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$, qui n'a aucune raison d'être un projecteur spectral. En fait, nous verrons au chapitre suivant, que les deux phénomènes de phases géométriques sont intimement liés.

Les premières sections de ce chapitre sont consacrées à des rappels fondamentaux concernant les phases de Berry-Simon et de Aharonov-Anandan. Le lecteur souhaitant approfondir ces sujets peut se reporter à [133] qui regroupe les articles fondateurs concernant les phases géométriques, ainsi qu'à l'ouvrage de Bohm et al [22]. Les dernières sections présentent les formules de transport adiabatique généralisé que nous utiliserons dans la suite.

2.1 La phase de Berry abélienne

Proposition 1. Soit $H(\vec{R})$ un Hamiltonien auto-adjoint. Soit $E_n(\vec{R})$ une valeur propre non-dégénérée de $H(\vec{R})$ et $|n, \vec{R}\rangle$ le vecteur propre associé, tel que pour tout chemin \mathcal{C} dans \mathcal{M} paramétré par une application $t \mapsto \vec{R}(t)$ on a

$$U(t, 0)|n, \vec{R}(0)\rangle \langle n, \vec{R}(0)| = |n, \vec{R}(t)\rangle \langle n, \vec{R}(t)| U(t, 0) \quad (2.2)$$

où $U(t, 0)$ est une solution de l'équation de Schrödinger associée à $t \mapsto H(\vec{R}(t))$. On suppose qu'à $t = 0$ la fonction d'onde du système est telle que $\psi(0) = |n, \vec{R}(0)\rangle$, alors on a pour tout t

$$\psi(t) = e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E_n(\vec{R}(t')) dt'} e^{-\int_0^t \langle n, \vec{R}(t') | \partial_{t'} |n, \vec{R}(t') \rangle dt'} |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (2.3)$$

Le terme $e^{-\int_0^t \langle n, \vec{R}(t') | \partial_{t'} |n, \vec{R}(t') \rangle dt'}$ porte le nom de phase de Berry-Simon abélienne.

Preuve :

L'hypothèse adiabatique nous donne :

$$\psi(t) = U(t, 0)|n, \vec{R}(0)\rangle = \langle n, \vec{R}(t) | U(t, 0) |n, \vec{R}(0)\rangle |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (2.4)$$

Par unitarité de l'opérateur d'évolution on pose $\langle n, \vec{R}(t) | U(t, 0) |n, \vec{R}(0)\rangle = e^{i\phi(t)}$. On injecte cette expression dans l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \partial_t \psi(t) = H(\vec{R}(t)) \psi(t) \quad (2.5)$$

$$-i\hbar \dot{\phi} e^{i\phi} |n, \vec{R}(t)\rangle + i\hbar e^{i\phi} \partial_t |n, \vec{R}(t)\rangle = e^{i\phi} E_n(\vec{R}(t)) |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (2.6)$$

En projetant cette expression sur $|n, \vec{R}(t)\rangle$ on obtient

$$i\dot{\phi} = -i\hbar^{-1} E_n(\vec{R}(t)) - \langle n, \vec{R}(t) | \partial_t |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (2.7)$$

■

On voit donc apparaître dans l'expression de la fonction d'onde, la phase dynamique usuelle et une phase supplémentaire, dite "géométrique", qui est en fait l'élément caractéristique de la fonction d'onde. On interprète la phase dynamique comme étant le "souvenir" du temps écoulé, alors que la phase géométrique s'interprète comme étant le "souvenir" du chemin parcouru, comme le montre la propriété suivante.

Propriété 1. La phase de Berry ne dépend que du chemin \mathcal{C} parcouru dans \mathcal{M} et pas de la durée T de ce parcours.

Preuve :

On voit ceci par un simple changement de variables :

$$\frac{d}{dt} = \frac{dR^\mu}{dt} \frac{\partial}{\partial R^\mu} \quad (2.8)$$

$$d\vec{R} = \frac{d\vec{R}}{dt} dt \quad (2.9)$$

donc

$$\int_0^T \langle n, \vec{R}(t) | \frac{d}{dt} |n, \vec{R}(t)\rangle dt = \int_{\mathcal{C}} \langle n, \vec{R} | \frac{\partial}{\partial R^\mu} |n, \vec{R}\rangle dR^\mu \quad (2.10)$$

■

Ceci justifie l'appellation phase géométrique. On introduit la 1-forme $A = \langle n, \vec{R} | d|n, \vec{R} \rangle \in \Omega^1 \mathcal{M}$ appelée potentiel de Berry (d étant la différentielle extérieure de \mathcal{M}). La phase de Berry-Simon est alors $\int_{\mathcal{C}} A$.

Propriété 2. *La phase de Berry est imaginaire pure.*

$$\int_{\mathcal{C}} A \in i\mathbb{R} \iff A^* = -A \quad (2.11)$$

Preuve :

$$\langle n, \vec{R} | n, \vec{R} \rangle = 1 \quad (2.12)$$

$$\Rightarrow \partial_{\mu} \langle n, \vec{R} | n, \vec{R} \rangle = 0 \quad (2.13)$$

$$\Rightarrow \left(\partial_{\mu} \langle n, \vec{R} | \right) |n, \vec{R} \rangle + \langle n, \vec{R} | \partial_{\mu} |n, \vec{R} \rangle = 0 \quad (2.14)$$

$$\Rightarrow \overline{\langle n, \vec{R} | \partial_{\mu} |n, \vec{R} \rangle} = -\langle n, \vec{R} | \partial_{\mu} |n, \vec{R} \rangle \quad (2.15)$$

$$\Rightarrow A_{\mu}^* = -A_{\mu} \quad (2.16)$$

■

Notons que si $|n, \vec{R} \rangle$ n'a que des composantes réelles, alors la phase de Berry-Simon abélienne est nulle.

Ce phénomène de phase géométrique dans l'approximation adiabatique fut découvert par Berry dans [20]. Cet article est illustré par le problème d'un spin dans un champ magnétique, un problème sur lequel nous reviendrons par la suite.

2.2 La phase de Berry non-abélienne

Nous nous intéressons maintenant au cas qui fut étudié par Wilczek et Zee [145], où nous considérerons une unique valeur propre dégénérée.

Proposition 2. *Soit $H(\vec{R})$ un Hamiltonien auto-adjoint. Soit $E_n(\vec{R})$ une valeur propre dégénérée M fois de $H(\vec{R})$, et $\{|n, \vec{R}, a\rangle\}_{a=1, \dots, M}$ une base de vecteurs propres orthonormés du sous-espace propre associé à E_n , tels que pour tout chemin \mathcal{C} dans \mathcal{M} paramétré par une application $t \mapsto \vec{R}(t)$ on a*

$$U(t, 0) P_n(\vec{R}(0)) = P_n(\vec{R}(t)) U(t, 0) \quad (2.17)$$

$$P_n(\vec{R}(t)) = \sum_{a=1}^M |n, \vec{R}(t), a\rangle \langle n, \vec{R}(t), a|$$

où $U(t, 0)$ est une solution de l'équation de Schrödinger associée à $t \mapsto H(\vec{R}(t))$. On suppose qu'à $t = 0$ la fonction d'onde du système est telle que $\psi(0) = |n, \vec{R}(0), a\rangle$, alors on a pour tout t

$$\psi(t) = e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E_n(\vec{R}(t')) dt'} \sum_{b=1}^M U_{ba}(t) |n, \vec{R}(t), b\rangle \quad (2.18)$$

avec

$$U(t) = \mathbb{T} e^{-\int_0^t A_{\mu}(\vec{R}(t')) \dot{R}^{\mu}(t') dt'} \quad (2.19)$$

$A_{ab}(\vec{R}) = \langle n, \vec{R}, a | d | n, \vec{R}, b \rangle$. Le terme $U(t)$ porte le nom de phase de Berry non-abélienne.

Preuve :

Par hypothèse $U(t, 0)P_n(\vec{R}(0)) = P_n(\vec{R}(t))U(t, 0)$ d'où

$$\psi(t) = P_n(\vec{R}(t))U(t, 0)|n, \vec{R}(0), a\rangle \quad (2.20)$$

$$= \sum_b \langle n, \vec{R}(t), b|U(t, 0)|n, \vec{R}(0), a\rangle |n, \vec{R}(t), b\rangle \quad (2.21)$$

On note $U(t)$ la matrice telle que $U(t)_{ba} = \langle n, \vec{R}(t), b|U(t, 0)|n, \vec{R}(0), a\rangle$. ψ étant solution de l'équation de Schrödinger on a

$$i\hbar \sum_b \dot{U}_{ba}|n, \vec{R}(t), b\rangle + i\hbar \sum_b U_{ba}\partial_t|n, \vec{R}(t), b\rangle = E_n \sum_b U_{ba}|n, \vec{R}(t), b\rangle \quad (2.22)$$

En projetant cette équation sur $|n, \vec{R}(t), c\rangle$ on obtient :

$$\dot{U}_{ca} = -i\hbar^{-1}E_n U_{ca} - \sum_b U_{ba}\langle n, \vec{R}(t), c|\partial_t|n, \vec{R}(t), b\rangle \quad (2.23)$$

On a alors

$$(\dot{U}U^{-1})_{cd} = \sum_a \dot{U}_{ca}U_{ad}^{-1} \quad (2.24)$$

$$= -i\hbar^{-1}E_n \sum_a U_{ca}U_{ad}^{-1} - \sum_{a,b} \langle n, \vec{R}(t), c|\partial_t|n, \vec{R}(t), b\rangle U_{ba}U_{ad}^{-1} \quad (2.25)$$

$$= -i\hbar^{-1}E_n \delta_{cd} - \sum_b \langle n, \vec{R}(t), c|\partial_t|n, \vec{R}(t), b\rangle \delta_{bd} \quad (2.26)$$

$$= -i\hbar^{-1}E_n \delta_{cd} - \langle n, \vec{R}(t), c|\partial_t|n, \vec{R}(t), d\rangle \quad (2.27)$$

On pose $U(t) = e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E_n(\vec{R}(t'))dt'} V(t)$, il vient alors $\dot{U} = -i\hbar^{-1}E_n e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E_n(\vec{R}(t'))dt'} V + e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E_n(\vec{R}(t'))dt'} \dot{V}$. D'où $\dot{U}U^{-1} = -i\hbar^{-1}E_n I_M + \dot{V}V^{-1}$ où I_M est la matrice identité d'ordre M . On en déduit donc que

$$(\dot{V}V^{-1})_{cd} = -\langle n, \vec{R}(t), c|\partial_t|n, \vec{R}(t), d\rangle \quad (2.28)$$

En posant $A(t)_{ca} = \langle n, \vec{R}(t), c|\partial_t|n, \vec{R}(t), a\rangle$ on a

$$\dot{V} = -AV \iff V(t) = \mathbb{T}e^{-\int_0^t A(t')dt'} \quad (2.29)$$

■

De même que dans le cas abélien, la phase de Berry non-abélienne ne dépend que du chemin suivi dans \mathcal{M} et pas de la durée écoulée : $\mathbb{T}e^{\int_0^T A_\mu(\vec{R}(t'))\dot{R}^\mu(t')dt'} = \mathbb{P}e^{\int_C A}$.

Propriété 3. $A^\dagger = -A$

Preuve :

$$\langle n, \vec{R}, a|n, \vec{R}, b\rangle = 1 \quad (2.30)$$

$$\Rightarrow \partial_\mu \langle n, \vec{R}, a|n, \vec{R}, b\rangle = 0 \quad (2.31)$$

$$\Rightarrow \left(\partial_\mu \langle n, \vec{R}, a| \right) |n, \vec{R}, b\rangle + \langle n, \vec{R}, a| \partial_\mu |n, \vec{R}, b\rangle = 0 \quad (2.32)$$

$$\Rightarrow \overline{\langle n, \vec{R}, b|\partial_\mu|n, \vec{R}, a\rangle} = -\langle n, \vec{R}, a|\partial_\mu|n, \vec{R}, b\rangle \quad (2.33)$$

$$\Rightarrow (A_\mu)_{ba}^* = -(A_\mu)_{ab} \quad (2.34)$$

■

2.3 Les phases de Aharonov-Anandan

En 1987, Aharonov et Anandan [4] montrent que le phénomène des phases géométriques n'est pas lié à l'approximation adiabatique mais est bien plus général.

Proposition 3. *Soit $t \mapsto H(t)$ un Hamiltonien auto-adjoint dépendant du temps. Soit $\psi(t)$ une solution normée de l'équation de Schrödinger $i\hbar\partial_t\psi(t) = H(t)\psi(t)$. On suppose que l'évolution est cyclique, c'est-à-dire que*

$$\psi(T) = e^{i\varphi}\psi(0) \quad (2.35)$$

L'évolution revient donc sur le même état physique mais avec une différence de phase. Soit $\tilde{\psi}(t)$ l'état tel que $\forall t \in [0, T] \ |\langle\psi(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle| = 1$ et $\tilde{\psi}(T) = \tilde{\psi}(0)$ (mêmes états physiques que $\psi(t)$ mais tel qu'il n'y aucune différence de phase entre l'état initial et final). Alors on a $\forall t \in [0, T]$

$$\psi(t) = e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \langle\tilde{\psi}(t')|H(t')|\tilde{\psi}(t')\rangle dt' - \int_0^t \langle\tilde{\psi}(t')|\partial_{t'}\tilde{\psi}(t')\rangle dt'} \tilde{\psi}(t) \quad (2.36)$$

Le terme $e^{-\int_0^t \langle\tilde{\psi}(t')|\partial_{t'}\tilde{\psi}(t')\rangle dt'}$ est appelé phase de Aharonov-Anandan (ou phase de Berry non-adiabatique).

Preuve :

Par définition ψ et $\tilde{\psi}$ ne diffèrent que par une phase, on pose donc

$$\psi(t) = e^{if(t)}\tilde{\psi}(t) \quad (2.37)$$

où f est une fonction à valeurs réelles de $[0, T]$. En utilisant cette expression de ψ dans l'équation de Schrödinger on a

$$-\hbar f'(t)e^{if(t)}\tilde{\psi}(t) + i\hbar e^{if(t)}\partial_t\tilde{\psi}(t) = e^{if(t)}H(t)\tilde{\psi}(t) \quad (2.38)$$

En projetant cette équation sur $\tilde{\psi}(t)$ on a

$$f'(t) = -\hbar^{-1}\langle\tilde{\psi}(t)|H(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle + i\langle\tilde{\psi}(t)|\partial_t\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (2.39)$$

■

Dans la pratique, ce résultat est utilisé comme suit. On suppose que le système dynamique quantique peut être décrit à l'aide d'un espace actif unidimensionnel qui se déforme avec le temps (adiabaticité au sens faible). On connaît une base de cette espace : $\tilde{\psi}(t)$. Alors la fonction d'onde du système dynamique pour la condition initiale $\psi(0) = \tilde{\psi}(0)$ est $\psi(t) = e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \langle\tilde{\psi}(t')|H(t')|\tilde{\psi}(t')\rangle dt' - \int_0^t \langle\tilde{\psi}(t')|\partial_{t'}\tilde{\psi}(t')\rangle dt'} \tilde{\psi}(t)$. On retrouvera ce phénomène de phase géométrique associée à un espace actif se déformant dans la section consacrée à la théorie de Floquet et dans la partie consacrée à la théorie des opérateurs d'onde temporels.

2.4 Transport adiabatique généralisé

Les formules de transport adiabatique et les phases de Berry étudiées dans les sections précédentes sont toujours associées à une unique valeur propre. Dans la littérature, le terme phase de Berry se réfère toujours à cette situation. Mais dans les problèmes de photodynamique qui nous intéressent, plusieurs valeurs propres distinctes interviennent presque toujours dans la dynamique. Nous nous intéressons donc maintenant au cas le plus général où l'espace actif adiabatique est associé à plusieurs valeurs propres. La condition adiabatique sera alors vérifiée pour un Hamiltonien satisfaisant par exemple au théorème de Nenciu.

Proposition 4. Soit $U(t, 0)$ l'opérateur d'évolution d'un système dynamique quantique gouverné par un Hamiltonien auto-adjoint $H(\vec{R}(t))$. Soit $\{E_a(\vec{R}(t))\}_a$ et $\{|a, \vec{R}(t)\rangle\}_a$ les valeurs propres instantanées et les vecteurs propres instantanés de H (le cas des valeurs propres dégénérées n'est pas exclu, dans ce cas on répète la valeur propre et on associe à chacune de ces répétitions un des vecteurs d'une base orthonormée du sous-espace propre). On suppose qu'il existe un ensemble d'indices I tel que le projecteur $P_m(t) = \sum_{a \in I} |a, \vec{R}(t)\rangle \langle a, \vec{R}(t)|$ satisfait pour toute évolution $t \mapsto \vec{R}(t)$, à la condition adiabatique

$$U(t, 0)P_m(\vec{R}(0)) = P_m(\vec{R}(t))U(t, 0) \quad (2.40)$$

Si à $t = 0$ la fonction d'onde est $\psi(0) = |a, \vec{R}(0)\rangle$ ($a \in I$), alors au temps t on a

$$\psi(t) = \sum_{b \in I} U_{ba}(t) |b, \vec{R}(t)\rangle \quad (2.41)$$

avec

$$U(t) = \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(\vec{R}(t')) dt' - \int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'} \quad (2.42)$$

où $A_\mu(\vec{R})_{ab} = \langle a, \vec{R} | d | b, \vec{R} \rangle$ (d étant toujours la différentielle extérieure de \mathcal{M}) et $E(\vec{R})_{ab} = E_a(\vec{R}) \delta_{ab}$.

Preuve :

En utilisant l'hypothèse adiabatique, on trouve que $\psi(t) = \sum_{b \in I} U_{ba}(t) |b, \vec{R}(t)\rangle$, en utilisant cette expression dans l'équation de Schrödinger, et en projetant sur $|c, \vec{R}(t)\rangle$ on trouve

$$\dot{U}_{ca} = -i\hbar^{-1} E_c U_{ca} - \sum_{b \in I} U_{ba} \langle c, \vec{R}(t) | \partial_t | b, \vec{R}(t) \rangle \quad (2.43)$$

d'où

$$(\dot{U}U^{-1})_{cd} = \sum_a \dot{U}_{ca} U_{ad}^{-1} \quad (2.44)$$

$$= -i\hbar^{-1} \sum_a E_c U_{ca} U_{ad}^{-1} - \sum_{a,b} \langle c, \vec{R}(t) | \partial_t | b, \vec{R}(t) \rangle U_{ba} U_{ad}^{-1} \quad (2.45)$$

$$= -i\hbar^{-1} E_c \delta_{cd} - \langle c, \vec{R}(t) | \partial_t | d, \vec{R}(t) \rangle \quad (2.46)$$

■

A génère donc une phase de Berry-Simon non-abélienne généralisée. Si $\dim \mathcal{H} = n$ et $\text{card} I = M$, on a $A = T^\dagger dT$ où $T \in \mathcal{M}_{n \times M}(\mathbb{C})$ est la matrice des vecteurs propres de l'espace actif, de même $E = T^\dagger H T$. On peut de plus écrire que

$$U(T) = \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^T E(\vec{R}(t')) dt' - \int_{\mathcal{C}} A} \quad (2.47)$$

ici \mathbb{T} est à la fois l'opérateur d'ordre chronologique et l'opérateur d'ordre sur le chemin \mathcal{C} pour la paramétrisation particulière $t \mapsto \vec{R}(t)$ de ce chemin. Lorsque la condition initiale n'est pas un état propre, $\psi(0) = \sum_a c_a |n, \vec{R}(0)\rangle$, on a

$$\psi(t) = \sum_{a,b} c_a \left[\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(\vec{R}(t')) dt' - \int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'} \right]_{ba} |b, \vec{R}(t)\rangle \quad (2.48)$$

On note $\psi_a(t)$ la solution de l'équation de Schrödinger pour la condition initiale pure $\psi_a(0) = |a, \vec{R}(0)\rangle$. Soit $\Psi(t) \in \mathcal{M}_{n \times M}(\mathbb{C})$ la matrice des fonctions d'onde pour toutes les conditions initiales pures : $\Psi = (\psi_1, \dots, \psi_M)$. On a alors

$$\Psi(t) = T(\vec{R}(t)) \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(\vec{R}(t')) dt' - \int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'} \quad (2.49)$$

Ψ a une grande importance puisque c'est la solution du problème de dynamique pour tout l'espace actif et pas seulement pour une fonction d'onde avec une condition initiale particulière.

Notons qu'en utilisant le théorème de la représentation intermédiaire (cf. annexe A), la phase non-abélienne peut être réécrite sous la forme suivante :

$$U(T) = \mathbb{P}e^{-\int_C A} \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^T \mathbb{T}e^{\int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'} E(\vec{R}(t)) \mathbb{T}e^{-\int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'} dt} \quad (2.50)$$

Le terme $\mathbb{P}e^{-\int_C A}$ montre bien que A engendre un terme de phase purement géométrique, le second terme dans l'expression précédente est à la fois une contribution dynamique et géométrique. Par une autre représentation, on pourrait isoler une phase purement dynamique engendrée par E . Lorsque A et E ne commutent pas, il est impossible d'isoler simultanément les contributions dynamiques et géométriques. D'autre part le chapitre 6 montrera plus clairement l'origine purement géométrique de A et l'origine purement dynamique de E lorsque ces termes ne commutent pas.

2.5 Cas des systèmes quantiques dissipatifs

2.5.1 Continua et résonances

Les continua ont souvent un rôle important dans les processus atomiques et moléculaires, il est donc nécessaire dans un modèle quantique de ne pas considérer seulement les valeurs propres du spectre ponctuel mais aussi les valeurs spectrales du spectre essentiel. Le théorème adiabatique de Nenciu n'exclut pas la présence de continua dans l'espace actif, mais pour généraliser la méthode de transport adiabatique, un certain nombre de problèmes surviennent.

1. Les continua de l'espace actif doivent être isolés du reste du spectre. On rappelle que l'une des hypothèses du théorème de Nenciu est l'existence de fonctions telles que $a_j(t) < b_j(t) < a_{j+1}(t)$ avec $\min_j \inf_t (b_j(t) - a_j(t)) \leq d$, et tels que les différents sous-spectres satisfont à $\sigma_j(t) \subset [b_{j-1}(t), a_j(t)]$. L'application du théorème nécessite donc que le continuum ait une structure en bandes, on peut alors sélectionner dans l'espace actif une bande de continuum interne à $[b_{j-1}, a_j]$ et pas une autre bande dans $[b_j, a_{j+1}]$, les bandes étant isolées l'une de l'autre par une distance au moins égale à d . Un tel spectre est courant en physique du solide, mais dans les milieux dilués (ce qui nous intéresse), ce n'est pas le cas. Le ou les continua se présentent comme un ensemble connexe généralement du type $[0, +\infty[$. On pourrait bien sûr utiliser tout le continuum $[0, +\infty[$ dans l'espace actif, mais, d'une part le continuum n'est en général pas isolé du spectre ponctuel, il n'y a pas de gap d . C'est le cas par exemple de l'atome d'hydrogène, $\text{Sp}_{pp}(H) = \{-\frac{1}{n^2}\}_{n \in \mathbb{N}}$ et $\text{Sp}_{ess}(H) = [0, +\infty[$ ($\lim_{n \rightarrow +\infty} -\frac{1}{n^2} = 0$). D'autre part, prendre tout le continuum, alors qu'en général seule une partie de celui-ci contribue à la dynamique, limite l'intérêt de la méthode adiabatique.
2. Dans le transport adiabatique on utilise explicitement les vecteurs propres associés aux valeurs propres du spectre discret. C'est même la base de représentation. Or les valeurs spectrales du continuum n'ont pas de vecteurs propres. Soit $\lambda \in \text{Sp}_{cont}(H)$ et $\epsilon > 0$ tel que $]\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon[\subset \text{Sp}_{cont}(H)$. Le vecteur ψ est un état du sous-continuum $]\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon[$ si

$$\|(H - \lambda)\psi\| \leq \epsilon \|\psi\| \quad (2.51)$$

Cette inégalité remplace l'équation aux valeurs propres $H\psi = \lambda\psi$. Mais il est difficile d'utiliser ces états du continuum pour le transport adiabatique, en particulier deux états de deux sous-continua distincts, mais d'intersection non-vide, ne sont pas orthogonaux.

3. L'intérêt des formules de transport adiabatique est sa représentation matricielle, or l'espace des états associé à un sous-continuum $]\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon[$ est de dimension infinie. De plus les continua font intervenir dans la représentation spectrale des opérateurs, des intégrales sur une mesure

spectrale. Rappelons que pour un Hamiltonien auto-adjoint H on a (au sens de la topologie faible)

$$H = \sum_{\lambda \in \text{Sp}_{pp}(H)} \lambda P_\lambda + \int_{\text{Sp}_{cont}(H)} \lambda dP_\lambda \quad (2.52)$$

où P_λ est le projecteur propre associé à la valeur propre λ alors que dP_λ est la mesure spectrale sur le spectre continu.

Pour résoudre le point 2, il est possible d'utiliser des états non-normalisables. Soit \mathcal{H} l'espace de Hilbert décrivant le problème, pour simplifier la discussion nous admettrons que $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}, dx)$. Soit H l'Hamiltonien du système supposé auto-adjoint. Afin toujours de simplifier notre raisonnement, nous supposons que $\text{Sp}_{pp}(H) \subset [E_0, 0]$ ($E_0 < 0$) et $\text{Sp}_{cont}(H) = [0, +\infty[$ (ce qui est toujours le cas des systèmes atomiques, cf. théorème HVZ [124]). Soit \mathcal{S} l'espace de Schwartz, i.e. l'ensemble des fonctions de $L^2(\mathbb{R}, dx)$ à décroissance rapide. Soit $]\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon[\subset \text{Sp}_{cont}(H)$. Soit $\psi_{\lambda, \epsilon}$ un état de ce continuum. Nous supposons que $\psi_{\lambda, \epsilon} \in \mathcal{S} \forall \epsilon$, que $\epsilon \mapsto \psi_{\lambda, \epsilon}$ est continue en norme et enfin que $\|\psi_{\lambda, \epsilon}\|$ diverge moins vite que $\frac{1}{\epsilon}$. Sous ces conditions on a pour tout $\phi \in \mathcal{H}$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} |\langle (H - \lambda) \psi_{\lambda, \epsilon} | \phi \rangle| = 0 \quad (2.53)$$

et donc

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle H \psi_{\lambda, \epsilon} | \phi \rangle = \lambda \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \psi_{\lambda, \epsilon} | \phi \rangle \quad (2.54)$$

On voit donc que $\text{w-lim}_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \psi_{\lambda, \epsilon} | = \langle \lambda |$ se comporte comme un vecteur propre, au sens faible on a

$$\langle \lambda | H^\dagger = \langle \lambda | \lambda \quad (2.55)$$

Le problème est que $\langle \lambda |$ n'est pas un état de \mathcal{H} , en fait $\langle \lambda | \in \mathcal{S}'$ où \mathcal{S}' est le dual topologique de \mathcal{S} , l'ensemble des distributions tempérées (on dit que $\mathcal{S} \subset \mathcal{H} \subset \mathcal{S}'$ constitue un triplet de Gelfand). Une analyse de type WKB montrerait de plus, que $|\lambda\rangle$ est de type "fonction onde plane" et que par conséquent son extension sur l'espace de configuration \mathbb{R} est infinie; pour un état discret le quasi-support de la fonction (i.e. le domaine de \mathbb{R} pour lequel le module de la fonction n'est pas négligeable) est compact, pour une onde plane, le module ne devient jamais négligeable. Ainsi se profile un nouveau problème. Numériquement il est impossible de représenter l'espace de configuration \mathbb{R} , on utilise quand il n'y a que des états discrets une boîte $[a, b]$, telle que toute fonction de l'espace actif ait son quasi-support dans $[a, b]$. Si l'on met des conditions aux limites usuelles sur la boîte de quantification (qu'elles soient périodiques ou strictes) des réflexions sur les murs de la boîte vont changer la nature des états du continuum et la description sera très mauvaise. On doit donc considérer un problème avec deux espaces de configuration $V_1 = [a, b]$ et $V_2 = \mathbb{R} \setminus [a, b]$, tel que le système quantique se trouve dans V_1 mais avec une perte possible du flux quantique de V_1 vers V_2 . Le système avec continuum se présente alors comme un système ouvert dissipatif.

Par cette méthode on a aussi réglé les problèmes 1 et 3, en effet la mise dans la boîte de quantification V_1 du système, discrétise le continuum. On introduit à sa place un quasi-continuum, c'est à dire un ensemble de valeurs propres discrètes uniformément réparties sur l'ancien continuum de H (plus la boîte V_1 est grande, plus la densité de valeurs propres du quasi-continuum est grande). Au cours du temps, seules certaines des ces valeurs propres du quasi-continuum interviennent dans la dynamique, ce qui se traduit par le fait qu'elles restent plus ou moins isolées de celles qui ne participent pas. Une représentation matricielle est alors possible.

Afin de représenter la perte de flux quantique de V_1 vers V_2 on introduit des frontières absorbantes, c'est à dire des potentiels optiques, on a alors $\tilde{\mathcal{H}} = L^2(V_1, dx)$ avec

$$\tilde{H} = H - \imath V_{opt} \quad (2.56)$$

où $\text{supp}V_{opt} = [a, a_0] \cup [b_0, b]$ tels que les quasi-supports des états liés soient dans $[a_0, b_0]$ et avec $\lim_{x \rightarrow a, b} V_{opt}(x) = +\infty$. \tilde{H} est alors un opérateur non-autoadjoint (ce qui traduit le fait qu'il représente un système dissipatif).

Il est important de noter que cette représentation à l'aide des potentiels optiques n'est pas qu'un artifice numérique. Supposons que l'on considère une particule libre se déplaçant sur \mathbb{R} . L'opérateur position X s'interprète traditionnellement comme la modélisation d'un appareil *idéal* mesurant la position de la particule. L'appareil est idéal car son champ de mesure est \mathbb{R} , et est donc de dimension infinie. Donc, l'appareil idéal est soit de taille infinie, soit de sensibilité infinie afin de pouvoir détecter de la même façon des particules se trouvant proche de lui et des particules se trouvant à une distance infinie. En réalité, un appareil mesurant la position, est caractérisé par une fonction réponse, qui par exemple vaut 1 sur $[a_0, b_0]$ (si un flux de particules est émis de cet intervalle, 100% du flux est détecté), elle décroît de 1 vers 0 de a_0 vers $a < a_0$ et de b_0 vers $b > b_0$ (si un flux est émis depuis ces intervalles moins de 100% est détecté), enfin elle est nulle sur $\mathbb{R} \setminus [a, b]$ (pas de détection). Pour modéliser cet appareil réel, l'opérateur position sera de la forme $\tilde{X} = X - iV_{opt}$, afin de faire progressivement disparaître les flux quantiques en partance pour $\mathbb{R} \setminus [a, b]$. Il en est de même pour \tilde{H} , où le potentiel optique caractérise la région de l'espace où l'appareil expérimental peut effectivement mesurer l'énergie d'un système quantique.

Une fois \tilde{H} défini, on peut alors appliquer un théorème adiabatique pour opérateurs non-autoadjoints (ou postuler qu'il en existe un).

Ce formalisme nous permet aussi de traiter le transport adiabatique avec des résonances. Les résonances apparaissent formellement par une dilatation complexe du spectre, $H(\theta) = U(\theta)HU(\theta)^\dagger$ avec $U(\theta) = e^{3\theta/2}e^{\theta x \frac{\partial}{\partial x}}$, $\theta \in \mathbb{C}$. Le théorème d'Aguilar-Balslev-Combes-Simon (théorème 16.4 [69] et théorème XIII.36 [124]) nous apprend¹ alors, que sous l'effet de la dilatation complexe, le spectre discret de H est inchangé, que le spectre essentiel tourne dans le plan complexe inférieur d'un angle de $2\Im\theta$, et qu'entre le spectre continu tourné et la droite réelle, apparaissent de nouvelles valeurs propres, les résonances. Il est important de noter que l'usage de potentiels optiques a des effets similaires à une dilatation complexe² : rotation du spectre essentiel dans le plan complexe inférieur et apparition de résonances.

À partir de ce point, nous considérerons un Hamiltonien H non-auto-adjoint ne présentant qu'un spectre discret. Cet Hamiltonien modélisant, soit un système ouvert intrinsèquement dissipatif, soit le système dissipatif équivalent à un problème où les continua interviennent, soit un système dissipatif équivalent à un problème de résonance.

2.5.2 Formule de transport adiabatique : cas abélien

Soit $H(t)$ un Hamiltonien non-auto-adjoint, avec $E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}$ une de ses valeurs propres instantanées non-dégénérées et $|n, t\rangle$ et $|n^*, t\rangle$ respectivement son vecteur propre associé et son dual biorthogonal, i.e.

$$H(t)|n, \vec{R}\rangle = (E_n(t) - i\frac{\Gamma_n(t)}{2})|n, t\rangle \quad (2.57)$$

$$H(t)^\dagger|n^*, t\rangle = (E_n(t) + i\frac{\Gamma_n(t)}{2})|n^*, t\rangle \quad (2.58)$$

$$\langle n^*, t|n, t\rangle = 1 \quad (2.59)$$

Nous supposons que H satisfait à un théorème adiabatique pour $E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}$, à savoir

$$U(t, 0)|n, 0\rangle\langle n^*, 0| = |n, t\rangle\langle n^*, t|U(t, 0) \quad (2.60)$$

¹Remarque : rigoureusement le comportement du spectre essentiel qui tourne d'un angle de $2\Im\theta$, n'est démontré que pour une classe de potentiels très restreinte, dite à dilatation analytique (cf. [124]), mais en pratique ce comportement a toujours été observé, même dans les autres cas.

²cf. travaux de Moiseyev [102] montrant qu'une dilatation complexe est équivalente à un potentiel absorbant

Supposons de plus que le système se trouve initialement dans l'état $|n, 0\rangle$, alors à l'instant t on a

$$\psi(t) = U(t, 0)|n, 0\rangle = \underbrace{\langle n^*, t|U(t, 0)|n, 0\rangle}_{\in \mathbb{C}^*} |n, t\rangle \quad (2.61)$$

On écrit donc :

$$\psi(t) = e^{\varphi_n(t)} |n, t\rangle \quad (2.62)$$

avec $\varphi_n(t) \in \mathbb{C}$. En insérant cette expression dans l'équation de Schrödinger et en projetant sur $\langle n^*, t|$ on trouve :

$$\dot{\varphi}_n = -i\hbar^{-1}(E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}) - \langle n^*, t|\partial_t|n, t\rangle \quad (2.63)$$

2.5.3 Formule de transport adiabatique : cas non-abélien

Soit $\{E_\alpha(t) - i\frac{\Gamma_\alpha(t)}{2}\}_\alpha$ un ensemble de valeurs propres de $H(t)$ isolées du reste du spectre. Soient les vecteurs propres et leurs duaux :

$$H(t)|\alpha, i, t\rangle = (E_\alpha(t) - i\frac{\Gamma_\alpha(t)}{2})|\alpha, i, t\rangle \quad (2.64)$$

$$H(t)^\dagger|\alpha, i^*, t\rangle = (E_\alpha(t) + i\frac{\Gamma_\alpha(t)}{2})|\alpha, i^*, t\rangle \quad (2.65)$$

Le nombre de vecteurs propres pouvant être inférieur au degré de dégénérescence de la valeur propre, nous introduisons de plus les vecteurs propres généralisés

$$(H(t) - E_\alpha(t) + i\frac{\Gamma_\alpha(t)}{2})^n|\alpha, i, t\rangle = 0 \quad (2.66)$$

$$(H(t)^\dagger - E_\alpha(t) - i\frac{\Gamma_\alpha(t)}{2})^n|\alpha, i^*, t\rangle = 0 \quad (2.67)$$

où $n \in \mathbb{N}$. Soit I un ensemble d'indices (α, i) , pour lesquels :

$$\forall a, b \in I \quad \langle a^*, t|b, t\rangle = \delta_{ab} \quad (2.68)$$

Soit $T(t)$ la matrice des vecteurs propres généralisés et $T^*(t)$ la matrice des duaux biorthogonaux, $T^*(t)^\dagger H(t) T(t)$ est une matrice triangulaire. Nous supposons que :

$$U(t, 0) \sum_{a \in I} |a, 0\rangle \langle a^*, 0| = \sum_{a \in I} |a, t\rangle \langle a^*, t| U(t, 0) \quad (2.69)$$

Si de plus $\psi(0) = |a, 0\rangle$, alors :

$$\psi(t) = \sum_{b \in I} U_{ba}(t) |b, t\rangle \quad (2.70)$$

avec

$$(\dot{U}U^{-1})_{ba} = \langle a^*, t|H(t)|b, t\rangle - \langle a^*, t|\partial_t|b, t\rangle \quad (2.71)$$

De manière équivalente au cas auto-adjoint, nous introduisons une variété \mathcal{M} des paramètres adiabatiques et obtenons :

$$\psi(T) = \sum_{b \in I} \left[\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^T E(\vec{R}(t)) dt - \int_C A(\vec{R})} \right]_{ba} |b, \vec{R}(t)\rangle \quad (2.72)$$

avec

$$E(\vec{R})_{ab} = \langle a^*, \vec{R}|H(\vec{R})|b, \vec{R}\rangle \quad (2.73)$$

$$A(\vec{R})_{ab} = \langle a^*, \vec{R}|d|b, \vec{R}\rangle \quad (2.74)$$

E est une matrice triangulaire supérieure, diagonale par blocs. Cette matrice est quelque fois appelée forme de Jordan de H .

Afin de simplifier et d'unifier l'écriture, nous poserons la définition suivante :

Définition 1. Soit $T \in \mathcal{M}_{n \times M}(\mathbb{C})$ une matrice. Nous désignerons par T^{-1} la matrice de $\mathcal{M}_{M \times n}(\mathbb{C})$ telle que

$$T^{-1}T = I_M \quad (2.75)$$

I_M étant la matrice identité d'ordre M .

Ainsi la notation T^{-1} pourra dans la suite désigner T^\dagger lorsque nous considérerons un système conservatif, ou $T^{*\dagger}$ pour un système dissipatif.

Toujours afin de simplifier les notations, nous supposerons à partir de ce point que $I = \{1, \dots, M\}$ quitte à redéfinir les labels des vecteurs propres.

Définition 2. Soit H un hamiltonien non-auto-adjoint avec pour valeurs propres $\lambda_i \in \mathbb{C}$, vecteurs propres généralisés $|i\rangle$ et vecteurs propres généralisés duaux $|i^*\rangle$. On appelle conjugaison de dualité, l'opérateur antilinéaire C tel que

$$C|i\rangle = |i^*\rangle \quad C|i^*\rangle = |i\rangle \quad (2.76)$$

On notera que C est une involution : $C^2 = 1$ et $C^\dagger C = 1$. Il est de facile de montrer que $CH = H^\dagger C$.

2.6 Premières propriétés des phases de Berry non-abéliennes généralisées

Les propriétés énoncées ici sont valables pour les phases de Berry-Simon abéliennes, non-abéliennes et non-abéliennes généralisées. Elles sont énoncées pour le cas plus général des phases non-abéliennes généralisées.

Propriété 4. Le choix des vecteurs propres instantanés (choix de la convention de phase pour un vecteur propre non-dégénéré, choix de la base orthonormale (ou biorthogonale) pour un espace propre dégénéré), n'a pas d'influence sur le transport adiabatique.

Preuve :

Soit $\Psi(t) \in \mathcal{M}_{n \times M}(\mathbb{C})$ la matrice des fonctions d'onde pour toutes les conditions initiales pures. Soient T et \tilde{T} les matrices des vecteurs propres pour deux choix de bases différents. Il existe $G \in GL(M, \mathbb{C})$ tel que $T = \tilde{T}G$. Donc on a

$$A = T^{-1}dT = G^{-1}\tilde{A}G + G^{-1}dG \quad (2.77)$$

$$\tilde{\Psi}(t) = \tilde{T}(t)\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \tilde{E}dt' - \int \tilde{A}dt'} \quad (2.78)$$

D'après la propriété 19 de l'annexe A, on a

$$\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E dt' - \int A dt'} = G(t)^{-1}\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \tilde{E} dt' - \int \tilde{A} dt'} G(0) \quad (2.79)$$

d'où

$$\Psi(t) = T(t)\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E dt' - \int A dt'} \quad (2.80)$$

$$= T(t)G(t)^{-1}\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \tilde{E} dt' - \int \tilde{A} dt'} G(0) \quad (2.81)$$

$$= \tilde{T}(t)\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \tilde{E} dt' - \int \tilde{A} dt'} G(0) \quad (2.82)$$

$$= \tilde{\Psi}(t)G(0) \quad (2.83)$$

■

Nous supposons que \mathcal{H} est de dimension finie n . Alors pour \vec{R} fixé $H(\vec{R})$ peut s'écrire comme un élément d'une algèbre de Lie \mathfrak{g} . Si H est réel symétrique alors $\mathfrak{g} = \mathfrak{o}(n)$. Si H est complexe auto-adjoint $\mathfrak{g} = \mathfrak{u}(n)$ et enfin si H est complexe non-auto-adjoint $\mathfrak{g} = \mathfrak{gl}(n, \mathbb{C}) = \mathcal{M}_{n \times n}(\mathbb{C})$. Des sous-algèbres de ces trois cas peuvent survenir dans des cas particuliers de systèmes symétriques. Notons que $\mathfrak{o}(n)$ ou $\mathfrak{u}(n)$ sont ici des algèbres de Lie réelles alors que $\mathfrak{gl}(n, \mathbb{C})$ est une algèbre de Lie complexe. Nous notons \mathfrak{h} la sous-algèbre de Cartan de \mathfrak{g} (cf. [18, 146]). Si $(H_i, E_\alpha)_{i,\alpha}$ est la base de Cartan de \mathfrak{g} , \mathfrak{h} est l'algèbre de Lie engendrée par $(H_i)_i$. Nous notons de plus \mathfrak{n}_+ et \mathfrak{n}_- les algèbres engendrées respectivement par les racines positives $(E_\alpha)_{\alpha>0}$ et par les racines négatives $(E_\alpha)_{\alpha<0}$. On a donc

$$\mathfrak{g} = \mathfrak{h} \oplus \mathfrak{n}_+ \oplus \mathfrak{n}_-$$

De plus si \mathfrak{g} est une algèbre de Lie complexe, nous introduisons la sous-algèbre de Borel $\mathfrak{b} = \mathfrak{h} \oplus \mathfrak{n}_-$ (cf. [146] pour les propriétés de cette sous-algèbre). Dans les cas qui nous intéressent \mathfrak{h} est une algèbre de matrices diagonales, \mathfrak{n}_- est une algèbre de matrices triangulaires supérieures à diagonale nulle, et \mathfrak{n}_+ est une algèbre de matrices triangulaires inférieures à diagonale nulle.

Propriété 5. *Si \mathfrak{g} est une algèbre de Lie réelle, il existe une base de vecteurs propres instantanés telle que*

$$E \in \mathfrak{h} \quad A \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{g}/\mathfrak{h})$$

Si \mathfrak{g} est une algèbre de Lie complexe, il existe une base de vecteurs propres instantanés telle que

$$E \in \mathfrak{b} \quad A \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{g}/\mathfrak{b})$$

Preuve :

On suppose \mathfrak{g} réelle. H est donc une matrice auto-adjointe et donc diagonalisable. D'où $E = b^i H_i$. \mathfrak{h} étant abélienne, nous pouvons écrire

$$H(\vec{R}) = e^{i \sum_{\alpha>0} z^\alpha(\vec{R}) E_\alpha + \bar{z}^\alpha(\vec{R}) E_{-\alpha}} E(\vec{R}) e^{-i \sum_{\alpha>0} z^\alpha(\vec{R}) E_\alpha + \bar{z}^\alpha(\vec{R}) E_{-\alpha}} \quad (2.84)$$

on pose

$$T(\vec{R}) = e^{i \sum_{\alpha>0} z^\alpha(\vec{R}) E_\alpha + \bar{z}^\alpha(\vec{R}) E_{-\alpha}} \quad (2.85)$$

et donc

$$A_\mu = T^{-1} \partial_\mu T \in \mathfrak{n}_- \oplus \mathfrak{n}_+ = \mathfrak{g}/\mathfrak{h} \quad (2.86)$$

Si \mathfrak{g} est complexe, H est seulement triangularisable donc $E = b^i H_i + \sum_{\alpha<0} b^\alpha E_\alpha \in \mathfrak{h} \oplus \mathfrak{n}_- = \mathfrak{b}$. Soit T une matrice de triangularisation de H que l'on décompose comme suit

$$T(\vec{R}) = \underbrace{e^{i \sum_{\alpha>0} \chi^\alpha(\vec{R}) E_\alpha}}_{T^+} \underbrace{e^{i \sum_{\alpha>0} \bar{\chi}^\alpha(\vec{R}) E_{-\alpha}}}_{T^-} \underbrace{e^{i \sum_i \chi^i(\vec{R}) H_i}}_{T_0} \quad (2.87)$$

On a alors

$$H = T^{+\dagger} \underbrace{T^{-\dagger} T_0^\dagger E T_0 T^-}_{E' \in \mathfrak{b}} T^+ \quad (2.88)$$

E' est une matrice triangulaire supérieure qui représente H , E' est donc obtenue à partir de E par un changement de bases de vecteurs propres généralisés. T^+ est alors la matrice de ces vecteurs propres et

$$A_\mu = T^{+\dagger} \partial_\mu T^+ \in \mathfrak{n}_+ = \mathfrak{g}/\mathfrak{b} \quad (2.89)$$

■

Dans le cas général où on sélectionne M vecteurs propres, si H est un opérateur auto-adjoint $A^\dagger = -A$, donc $A \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{u}(M))$ sinon $A \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C}))$.

Chapitre 3

Mathématiques des phases géométriques

*Si vous vous plaignez d'avoir des problèmes en maths que diriez-vous si vous aviez les miens.
Albert Einstein*

Nous avons vu au chapitre précédent, que la fonction d'onde dans l'approximation adiabatique était décrite par un terme de phase (matriciel en général). Ce terme est composé de deux éléments, une phase dynamique et une phase géométrique. Lorsque la phase dynamique et la phase géométrique commutent, $\forall \vec{R} \in \mathcal{M}$, $[E(\vec{R}), A_\mu(\vec{R})] = 0$, on peut écrire

$$\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^T E(\vec{R}(t))dt - \int_0^T A_\mu(\vec{R}(t))\dot{R}^\mu(t)dt} = \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^T E(\vec{R}(t))dt} \mathbb{T}e^{-\int_0^T A_\mu(\vec{R}(t))\dot{R}^\mu(t)dt} \quad (3.1)$$

Ayant ainsi séparé les contributions dynamique et géométrique, on peut étudier plus particulièrement le terme $\mathbb{T}e^{-\int_0^T A_\mu(\vec{R}(t))\dot{R}^\mu(t)dt} = \mathbb{P}e^{-\int_C A}$, dont la nature géométrique est très importante comme ce chapitre le montrera. On peut de plus totalement éliminer la phase dynamique le long du parcours \mathcal{C} en redéfinissant la base de vecteurs propres. En effet, si $|a, \vec{R}(t)\rangle$ est associée à une valeur propre non-dégénérée ou à une valeur propre pour laquelle H est diagonalisable dans le sous-espace propre, on pose

$$|a_\sharp, \vec{R}(t)\rangle = e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E_a(\vec{R}(t'))dt'} |a, \vec{R}(t)\rangle \quad (3.2)$$

Les vecteurs propres étant défini à un facteur près $|a_\sharp, \vec{R}(t)\rangle$ peut être choisi comme nouveau vecteur pour la représentation de ψ . Si $\{|a, \vec{R}(t)\rangle\}_{a=a_1, \dots, a_p}$ est une base de vecteurs propres généralisés associés au bloc $E_{a_1 \rightarrow a_p}$ de la triangularisation de H , on pose

$$|a_i \sharp, \vec{R}(t)\rangle = \sum_{b=a_1}^{a_p} \left[\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E_{a_1 \rightarrow a_p}(\vec{R}(t'))dt'} \right]_{ba_i} |b, \vec{R}(t)\rangle \quad (3.3)$$

Les nouveaux vecteurs forment une autre base de triangularisation de H associée au même sous-espace. Ainsi on a

$$\psi(t) = \sum_{b \in I} \left[\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^T E(\vec{R}(t))dt - \int_0^T A_\mu(\vec{R}(t))\dot{R}^\mu(t)dt} \right]_{ba} |b, \vec{R}(t)\rangle \quad (3.4)$$

$$= \sum_{b, c \in I} \left[\mathbb{T}e^{-\int_0^T A_\mu(\vec{R}(t))\dot{R}^\mu(t)dt} \right]_{ca} \left[\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^T E(\vec{R}(t))dt} \right]_{bc} |b, \vec{R}(t)\rangle \quad (3.5)$$

$$= \sum_{c \in I} \left[\mathbb{T}e^{-\int_0^T A_\mu(\vec{R}(t))\dot{R}^\mu(t)dt} \right]_{ca} |c_\sharp, \vec{R}(t)\rangle \quad (3.6)$$

On pose C^\sharp l'opérateur défini par

$$C^\sharp |a, \vec{R}(t)\rangle = |a^\sharp, \vec{R}(t)\rangle \quad (3.7)$$

on a alors

$$\psi^\sharp = C^\sharp \psi = \sum_c \left[\mathbb{T}e^{-\int_0^T A_\mu(\vec{R}(t)) \dot{R}^\mu(t) dt} \right]_{ca} |c, \vec{R}(t)\rangle \quad (3.8)$$

On voit donc que les propriétés de la fonction d'onde vont être très étroitement liées à la phase géométrique seule. L'étude de la structure mathématique décrivant cette phase est l'objet de ce chapitre. Une première section est consacrée à l'interprétation géométrique de la phase de Berry-Simon. Puis dans les sections suivantes c'est la structure mathématique de la phase de Aharonov-Anandan qui est étudiée. On étudie en particulier le lien étroit entre ces deux phases. Cette étude conduit de plus, à reformuler la mécanique quantique dans un langage purement géométrique. Enfin la fin de ce chapitre est consacrée aux propriétés topologiques des phases de Berry.

Lorsque la phase géométrique ne commute pas avec la phase dynamique, la structure présentée dans ce chapitre, qui décrit le terme $\mathbb{T}e^{-\int_0^T A_\mu(\vec{R}(t)) \dot{R}^\mu(t) dt}$ seul, ne peut être utilisée comme le fondement d'un modèle de photodynamique. Néanmoins, les informations concernant A seront même dans ces cas, très utiles comme on le verra au chapitre suivant. L'élaboration d'une structure décrivant le terme de phase matriciel quand phases géométrique et dynamique ne commutent pas, fera l'objet d'un chapitre ultérieur.

Dans tout ce chapitre où on ne considérera pas la phase dynamique, on notera sans ambiguïté ψ à la place de ψ^\sharp .

3.1 Interprétation géométrique de la phase de Berry-Simon

L'interprétation géométrique de la phase de Berry abélienne fut découverte par Simon [135]. On en donne ici un exposé détaillé appliqué au cas général des phases de Berry non-abéliennes.

3.1.1 Le transport adiabatique comme un relèvement horizontal

Nous avons vu au chapitre précédent que la phase de Berry-Simon était définie par le potentiel adiabatique $A = T^{-1}dT \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{g})$, T étant la matrice des vecteurs propres (généralisés ou non). \mathfrak{g} est en général $\mathfrak{u}(M)$ pour les systèmes conservatifs ou $\mathfrak{gl}(M, \mathbb{C})$ pour les systèmes dissipatifs. Supposons que l'on change la base de l'espace actif adiabatique, on a alors une nouvelle matrice \tilde{T} représentant cette base avec la relation

$$\tilde{T}(\vec{R}) = T(\vec{R})g(\vec{R}) \quad (3.9)$$

où $g(\vec{R})$ est la matrice de passage entre les deux bases. Dans le cas des systèmes conservatifs, on souhaite conserver une base orthonormée, donc $g(\vec{R}) \in U(M)$ ($U(1)$ dans le cas abélien); et pour les systèmes dissipatifs $g(\vec{R}) \in GL(M, \mathbb{C})$ (\mathbb{C}^* dans le cas abélien). Le potentiel adiabatique pour la nouvelle base de l'espace actif doit donc être

$$\tilde{A}(\vec{R}) = \tilde{T}(\vec{R})^{-1}d\tilde{T}(\vec{R}) \quad (3.10)$$

$$= g(\vec{R})^{-1}T^{-1}(\vec{R})dT(\vec{R})g(\vec{R}) + g(\vec{R})dg(\vec{R}) \quad (3.11)$$

$$= g^{-1}(\vec{R})A(\vec{R})g(\vec{R}) + g^{-1}(\vec{R})dg(\vec{R}) \quad (3.12)$$

Ainsi, sous le changement de base de l'espace actif, le potentiel adiabatique se comporte comme un potentiel de jauge sous changement de jauge : $\tilde{A} = g^{-1}Ag + g^{-1}dg$.

D'autre part, comme nous l'avons déjà remarqué, la fonction d'onde du système dynamique est totalement définie par la donnée de la phase matricielle (restreinte dans ce chapitre à la phase

géométrique non-abélienne), c'est à dire un élément de G (G désignant $U(M)$ ou $GL(M, \mathbb{C})$ suivant les cas). Plus précisément, c'est la donnée en chaque point de \mathcal{C} (la trajectoire des paramètres de contrôle) d'un élément de G . Afin de tenir compte de toutes les fonctions d'onde possibles, il est clair que l'espace décrivant cet ensemble de fonctions d'onde, est construit en greffant sur chaque point de \mathcal{C} une copie de G . Et en tenant compte, non pas d'une seule trajectoire de contrôle \mathcal{C} , mais de toutes les trajectoires possibles, l'espace qui va décrire la phase géométrique est clairement obtenu en greffant G sur chaque point de \mathcal{M} . Cet espace est donc un fibré principal à droite $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, G, \pi_P)$ (on reviendra dans la suite sur la topologie de P , pour l'instant on suppose que l'on connaît cette variété). A peut alors être considéré comme le potentiel de jauge de ce fibré (on reviendra dans la suite sur la connexion qui définit ce potentiel). De plus les changements de jauge $g : \mathcal{M} \rightarrow G$ (changement de sections) apparaissent comme correspondant au changement de base de l'espace actif adiabatique.

Soit $\mathcal{E} = (E, \mathcal{M}, \mathbb{C}^M, \pi_E)$ le fibré vectoriel associé à \mathcal{P} pour la représentation fidèle ρ de G sur \mathbb{C}^M (en considérant G comme un groupe de matrices, ρ est définie par le produit des matrices carrées de G par les matrices colonnes de \mathbb{C}^M dans la base canonique). Un état (interne à l'espace actif) du système dynamique quantique, apparaît comme un point de E , en effet si ϕ est un état de l'espace actif se déformant pour les paramètres $\vec{R} \in \mathcal{M}$ on a

$$\phi = \sum_{a=1}^M c_a |a, \vec{R}\rangle \quad (3.13)$$

Le difféomorphisme de fibre $\chi_{\vec{R}}^E : \pi_E^{-1}(\vec{R}) \rightarrow \mathbb{C}^M$ est donné par

$$\chi_{\vec{R}}^E \left(\sum_{a=1}^M c_a |a, \vec{R}\rangle \right) = (c_1, \dots, c_M) \quad (3.14)$$

($|1, \vec{R}\rangle, \dots, |M, \vec{R}\rangle$) pouvant par définition être considérée comme la base canonique de l'espace actif pour les paramètres de contrôle \vec{R} (ainsi cet espace actif est donc $\pi_E^{-1}(\vec{R})$). De plus, comme pour tout fibré associé, un élément $p \in \pi_P^{-1}(\vec{R})$ apparaît comme un repère de $\pi_E^{-1}(\vec{R})$, c'est à dire dans le cas d'un fibré vectoriel, une base. En effet, p définit parfaitement une base de l'espace actif $\pi_E^{-1}(\vec{R})$. Soit $\chi_{\vec{R}}^P : P \rightarrow G$ le difféomorphisme de fibre de P au dessus de \vec{R} , si $\chi_{\vec{R}}^P(p) = e$ (e identité de G) alors on pose que p est associé à la base canonique ($|1, \vec{R}\rangle, \dots, |M, \vec{R}\rangle$). Si $\chi_{\vec{R}}^P(p) = g \in G$ alors on pose que p est associé à la base ($\sum_{a=1}^M g_{a1} |a, \vec{R}\rangle, \dots, \sum_{a=1}^M g_{aM} |a, \vec{R}\rangle$) où g_{ab} est l'élément de matrice (ab) dans la représentation matricielle ρ ($\rho(g)$ est la matrice de changement de base de la base canonique vers celle définie par p). Ainsi la relation d'équivalence définissant le fibré associé $\forall p \in P, \forall u \in \mathbb{C}^M, (p, u) \sim (pg, \rho(g^{-1})u)$, n'est rien d'autre que la relation d'équivalence entre les coordonnées dans la base p et dans la base pg , qui assure que les vecteurs de $\pi^{-1}(\vec{R})$ sont indépendants du choix de la base sur laquelle on les représente.

Soit \mathcal{C} un chemin dans \mathcal{M} , nous supposons $\mathcal{C} \subset U$ où U est un ouvert de \mathcal{M} . Soit $\sigma \in \Gamma(U, P)$ la section locale trivialisante de \mathcal{P} , c'est à dire la section telle que

$$\forall \vec{R} \in U \quad \sigma(\vec{R}) = \chi_{\vec{R}}^{P^{-1}}(e) \quad (3.15)$$

plus simplement, σ est la section qui à chaque point \vec{R} de U , associe le point de $\pi_P^{-1}(\vec{R})$ associé à la base canonique de l'espace actif adiabatique au dessus de \vec{R} ($\pi_E^{-1}(\vec{R})$). $A \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{g})$ défini par

$$A_{ab} = \langle a, \vec{R} | d | b, \vec{R} \rangle \quad (3.16)$$

est le potentiel de jauge associé à cette section. On suppose \mathcal{C} paramétré par $[0, T] \ni t \mapsto \vec{R}(t) \in \mathcal{M}$. Le relèvement horizontal de \mathcal{C} dans \mathcal{P} passant par $\sigma(\vec{R}(0))$ est (voir annexe B) :

$$\gamma(t) = \sigma(\vec{R}(t)) \mathbb{T}e^{-\int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'} \quad (3.17)$$

Soit $\psi_0 \in \mathbb{C}^M$ l'état du système dynamique à $t = 0$. En identifiant provisoirement \mathbb{C}^M avec $\pi_E^{-1}(\vec{R}(0))$ par le difféomorphisme $\chi_{\vec{R}(0)}^E$, on peut écrire dans la base canonique de l'espace actif

$$\psi_0 = \sum_{a=1}^M c_a |a, \vec{R}(0)\rangle \quad (3.18)$$

Le relèvement horizontal de \mathcal{C} dans \mathcal{E} passant par ψ_0 (le transport parallèle de ψ_0 au dessus de \mathcal{C}) est donné par

$$\psi(t) = p_E(\gamma(t), \psi_0) = \sum_{a,b=1}^M c_a \left[\mathbb{T}e^{-\int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'} \right]_{ba} |b, \vec{R}(t)\rangle \quad (3.19)$$

où p_E est la projection $P \times E \rightarrow P \times_G E$ induite par \sim . Il apparaît alors clairement, que l'expression dérivée de l'hypothèse adiabatique de la fonction d'onde du système, n'est rien d'autre que le transport parallèle de l'état initial, pour la connexion adiabatique définie par A , d'où son nom de transport adiabatique.

Dans la théorie usuelle des fibrés, aucune section n'est privilégiée pour l'expression de A , toute transformation de jauge $A' = g^{-1}Ag + g^{-1}dg$ est permise. Ce qui se traduit par le fait qu'aucune base n'est privilégiée pour l'espace actif. Physiquement c'est bien le cas, mais dans la pratique, on pourrait souhaiter n'utiliser que des bases de vecteurs propres. Si en \vec{R} , il y a p valeurs propres de dégénérescences d_i $i = 1, \dots, p$ ($\sum_{i=1}^p d_i = M$), alors les transformations de jauge permises pour conserver une base de vecteurs propres sont telles que

$$g(\vec{R}) \in U(d_1) \times U(d_2) \times \dots \times U(d_p) \subset U(M)$$

où les produits directs de groupes se traduisent par une forme diagonale par blocs pour $g(\vec{R})$. Dans le cas d'un système dissipatif, $GL(d, \mathbb{C})$ remplace $U(d)$. Notons qu'en changeant de point sur \vec{R} , du fait de la possibilité de croisement de valeurs propres ou de levée de dégénérescence, le sous-groupe en question peut changer.

Le système dynamique étant maintenant représenté par un fibré principal \mathcal{P} équipé d'une connexion, on peut en utilisant l'équation de structure de Cartan, définir la courbure adiabatique (courbure de \mathcal{P}) :

$$F = dA + A \wedge A = dA + \frac{1}{2}[A, A] \in \Omega^2(\mathcal{M}, \mathfrak{g}) \quad (3.20)$$

courbure qui vérifie l'identité de Bianchi

$$dF + [A, F] = 0 \quad (3.21)$$

Dans le cas abélien conservatif $G = U(1)$ on a $F = dA$

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial}{\partial R^\mu} A_\nu - \frac{\partial}{\partial R^\nu} A_\mu \quad (3.22)$$

$$= \frac{\partial}{\partial R^\mu} \langle n, \vec{R} | \frac{\partial}{\partial R^\nu} | n, \vec{R} \rangle - \frac{\partial}{\partial R^\nu} \langle n, \vec{R} | \frac{\partial}{\partial R^\mu} | n, \vec{R} \rangle \quad (3.23)$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial R^\mu} \langle n, \vec{R} | \right) \left(\frac{\partial}{\partial R^\nu} | n, \vec{R} \rangle \right) + \langle n, \vec{R} | \frac{\partial^2}{\partial R^\mu \partial R^\nu} | n, \vec{R} \rangle \\ - \left(\frac{\partial}{\partial R^\nu} \langle n, \vec{R} | \right) \left(\frac{\partial}{\partial R^\mu} | n, \vec{R} \rangle \right) - \langle n, \vec{R} | \frac{\partial^2}{\partial R^\nu \partial R^\mu} | n, \vec{R} \rangle \quad (3.24)$$

$$= 2i\mathfrak{S} \left(\langle n, \vec{R} |_{\mu} \times | n, \vec{R} \rangle_{\nu} \right) \quad (3.25)$$

La courbure de Berry est donc la 2-forme :

$$F = i\mathfrak{S} \left(\langle n, \vec{R} |_{\mu} \times | n, \vec{R} \rangle_{\nu} \right) dR^\mu \wedge dR^\nu \quad (3.26)$$

On reviendra à de nombreuses reprises dans la suite sur le sens physique et l'intérêt de F pour l'étude des systèmes photodynamiques.

3.1.2 Retour sur la connexion adiabatique

$A \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{g})$ est considéré comme le potentiel de jauge du fibré \mathcal{P} . On s'intéresse ici à la connexion qui définit ce potentiel. Dans un premier temps on considère le cas où l'espace actif est unidimensionnel.

Cas abélien

Propriété 6. $t \mapsto \psi(t)$ est une fonction d'onde obtenue par transport adiabatique dans l'espace actif engendré par $|n, \vec{R}\rangle$ si et seulement si

$$\langle \psi(t) | \partial_t | \psi(t) \rangle = 0 \quad (3.27)$$

si le système est conservatif ou

$$\langle C\psi(t) | \partial_t | \psi(t) \rangle = 0 \quad (3.28)$$

si le système est dissipatif.

Preuve :

Considérons le cas conservatif. On suppose que $\psi(t) = e^{-\int_0^t \langle n, \vec{R}(t') | \partial_{t'} | n, \vec{R}(t') \rangle dt'} |n, \vec{R}(t)\rangle$, alors

$$\partial_t \psi(t) = -\langle n, \vec{R}(t) | \partial_t | n, \vec{R}(t) \rangle e^{-\int_0^t \langle n, \vec{R}(t') | \partial_{t'} | n, \vec{R}(t') \rangle dt'} |n, \vec{R}(t)\rangle + e^{-\int_0^t \langle n, \vec{R}(t') | \partial_{t'} | n, \vec{R}(t') \rangle dt'} \partial_t |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (3.29)$$

$$\Rightarrow \langle \psi(t) | \partial_t | \psi(t) \rangle = -\langle n, \vec{R}(t) | \partial_t | n, \vec{R}(t) \rangle + \langle n, \vec{R}(t) | \partial_t | n, \vec{R}(t) \rangle = 0 \quad (3.30)$$

On suppose que $\langle \psi | \partial_t | \psi \rangle = 0$, $\psi(t) \in \langle |n, \vec{R}(t)\rangle \rangle$ donc $\exists c(t) \in \mathbb{C}^*$ tel que $\psi(t) = c(t) |n, \vec{R}(t)\rangle$.

$$\langle \psi | \partial_t | \psi \rangle = c(t)^* \dot{c}(t) + |c(t)|^2 \langle n, \vec{R}(t) | \partial_t | n, \vec{R}(t) \rangle = 0 \quad (3.31)$$

$$\dot{c}(t) = -c(t) \langle n, \vec{R}(t) | \partial_t | n, \vec{R}(t) \rangle \quad (3.32)$$

$$\Rightarrow c(t) = e^{-\int_0^t \langle n, \vec{R}(t') | \partial_{t'} | n, \vec{R}(t') \rangle dt'} \quad (3.33)$$

Dans le cas dissipatif la démonstration est tout à fait analogue en projetant $\partial_t \psi$ sur $C\psi = e^{-\int_0^t \langle n^*, \vec{R}(t') | \partial_{t'} | n, \vec{R}(t') \rangle dt'} |n^*, \vec{R}(t')\rangle$ à la place de ψ . ■

On s'intéresse maintenant à la 1-forme de connexion de \mathcal{P} . Dans un premier temps on considère le cas conservatif $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, U(1), \pi_P)$.

Considérons un point $u \in P$, comme on l'a déjà noté, u s'identifie à une base (un repère) de $\pi_E^{-1}(\pi_P(u))$. Soit $f \in \mathcal{H}$ tel que $\langle f|f \rangle = 1$ ce vecteur de base, on notera $u = (f)$. L'action à droite de $U(1)$ est alors

$$R(e^{-i\varphi})u = (e^{i\varphi}f) \quad (3.34)$$

L'algèbre de Lie de $U(1)$ est \mathbb{R} , soit $\alpha \in \mathbb{R}$, alors le champ de vecteurs fondamental associé à $\alpha \in \mathbb{R}$ est

$$\forall u \in P, \quad \hat{\alpha}(u) = \left[\frac{d}{dt} R(e^{-i\alpha t})u \right]_{t=0} = (i\alpha f) \quad (3.35)$$

Ainsi l'espace tangent vertical à u (l'espace tangent à la fibre à laquelle appartient u) est

$$V_u P \simeq i\langle f \rangle_{\mathbb{R}} \simeq i\mathbb{R} \simeq \mathbb{R} \quad (3.36)$$

$\langle f \rangle_{\mathbb{R}}$ étant l'enveloppe linéaire réelle de f . \mathcal{P} s'identifiant à l'espace des bases des espaces actifs, il est clair que $T_u P$ s'identifie à un sous-espace vectoriel de \mathcal{H} . On introduit alors ω définie par

$$\forall u = (f) \in P, \forall \phi \in T_u P \quad \omega(\phi) = \langle f|\phi \rangle \quad (3.37)$$

Soit $i\alpha f \in V_u P$ on a

$$\omega(i\alpha f) = i\alpha \langle f|f \rangle = i\alpha \quad (3.38)$$

De plus on sait que l'espace tangent en u s'identifie à l'ensemble des $\left[\frac{df}{dt} \right]_{t=0}$ où (f) est une application de $[-1, 1]$ dans P telle que $(f(0)) = u$. Ainsi $\left[\frac{df}{dt} \right]_{t=0} \in T_{(f)} P$ et on a

$$\omega \left(\left[\frac{df}{dt} \right]_{t=0} \right) = \langle f|\partial_t|f \rangle_{t=0} \quad (3.39)$$

et comme $\langle f|f \rangle = 1$ on a $\langle f|\partial_t|f \rangle_{t=0} \in i\mathbb{R}$. Ainsi $\omega : TP \rightarrow \mathbb{R}$ est telle que $\omega(\hat{\alpha}) = \alpha$ (avec $\hat{\alpha} \in VP$). ω peut donc être considérée comme une 1-forme de connexion de P . Soit $t \mapsto (\psi(t))$ le chemin dans P associé à la solution de l'équation de Schrödinger ($(\psi(t))$ étant considérée comme la base de l'espace actif au dessus de $\vec{R}(t)$). $t \mapsto (\psi(t))$ est horizontale pour la connexion définie par ω si $\partial_t \psi(t) \in T_{(\psi(t))} P$ appartient à $\ker \omega$:

$$\omega(\partial_t \psi(t)) = 0 \iff \langle \psi|\partial_t|\psi \rangle = 0 \quad (3.40)$$

On retrouve la propriété précédente. En résumé la condition $\langle \psi|\partial_t|\psi \rangle = 0$, est la condition d'horizontalité, et par conséquent définit la connexion adiabatique de P . Par ailleurs $\omega \in \Omega^1 P$ est la 1-forme de la connexion adiabatique. Enfin en considérant la section $\sigma \in \Gamma(\mathcal{M}, P)$ telle que $\sigma(\vec{R}) = (|n, \vec{R}\rangle)$ on a pour un chemin $t \mapsto \vec{R}(t)$, $\sigma_*(\vec{R}(t)) = \partial_t |n, \vec{R}(t)\rangle dt$ et $\omega \circ \sigma_*(\vec{R}(t)) = \langle n, \vec{R}(t)|\partial_t|n, \vec{R}(t)\rangle dt$ et donc

$$A = \omega \circ \sigma_* = \langle n, \vec{R}|\partial_\mu|n, \vec{R}\rangle dR^\mu \quad (3.41)$$

on retrouve bien le potentiel de jauge adiabatique associé à la section de la base propre.

Dans le cas dissipatif, le raisonnement est tout à fait similaire, l'espace tangent vertical type étant \mathbb{C} (et non plus \mathbb{R}) et ω est définie par $\omega([\partial_t f]_{t=0}) = \langle Cf|\partial_t|f \rangle_{t=0}$.

Cas non-abélien

On considère maintenant un espace actif multidimensionnel engendré par $\{|a, \vec{R}\}_a$.

Propriété 7. $\{t \mapsto \psi_a(t)\}$ est l'ensemble des fonctions d'onde obtenues par transport adiabatique dans l'espace actif multidimensionnel pour les conditions initiales $\psi_a(0) = |a, \vec{R}(0)\rangle$ si et seulement si

$$\langle \psi_a(t) | \partial_t | \psi_b(t) \rangle = 0 \quad \forall a, b \quad (3.42)$$

si le système est conservatif ou

$$\langle C\psi_a(t) | \partial_t | \psi_b(t) \rangle = 0 \quad \forall a, b \quad (3.43)$$

si le système est dissipatif.

Preuve :

On ne considère que le cas conservatif, la preuve pouvant être aisément adaptée au cas dissipatif.

On suppose que ψ_a est obtenue par transport adiabatique, i.e.

$$\psi_a(t) = \sum_b U_{ba}(t) |b, \vec{R}(t)\rangle \quad \text{avec } U(t) = \mathbb{T} e^{-\int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'} \quad (3.44)$$

alors

$$\partial_t \psi_a = \sum_b \left[-A_\mu \dot{R}^\mu U(t) \right]_{ba} |b, \vec{R}(t)\rangle + \sum_b U_{ba}(t) \partial_t |b, \vec{R}(t)\rangle \quad (3.45)$$

$$= -\sum_{b,c} A_{\mu,bc} U_{ca}(t) \dot{R}^\mu |b, \vec{R}(t)\rangle + \sum_b U_{ba} \partial_t |b, \vec{R}(t)\rangle \quad (3.46)$$

On projette sur $\langle \psi_e(t) | = \sum_d U_{ed}^{-1} \langle d, \vec{R} |$

$$\langle \psi_e | \partial_t | \psi_a \rangle = -\sum_{b,c,d} A_{\mu,bc} U_{ca} U_{ed}^{-1} \dot{R}^\mu \langle d, \vec{R}(t) | b, \vec{R}(t) \rangle + \sum_{b,d} U_{ba} U_{ed}^{-1} \langle d, \vec{R}(t) | \partial_t | b, \vec{R}(t) \rangle \quad (3.47)$$

$$= -[U^{-1} A_\mu U]_{ea} \dot{R}^\mu + [U^{-1} A_\mu U]_{ea} \dot{R}^\mu \quad (3.48)$$

$$= 0 \quad (3.49)$$

On suppose que $\langle \psi_c | \partial_t | \psi_a \rangle = 0$. ψ_a étant un vecteur de l'espace actif il existe des coefficients $U_{ba}(t)$ tels que $\psi_a(t) = \sum_b U_{ba}(t) |b, \vec{R}(t)\rangle$. Ces coefficients sont regroupés dans une matrice U .

$$\langle \psi_c | \partial_t | \psi_a \rangle = 0 \iff \sum_{d,b} U_{dc}^* \dot{U}_{ba} \langle d, \vec{R}(t) | b, \vec{R}(t) \rangle + \sum_{d,b} U_{dc}^* U_{ba} \langle d, \vec{R}(t) | \partial_t | b, \vec{R}(t) \rangle \quad (3.50)$$

$$\iff [U^\dagger \dot{U}]_{ca} = -[U^\dagger A_\mu U]_{ca} \dot{R}^\mu \quad (3.51)$$

donc $U^\dagger \dot{U} = -U^\dagger A_\mu U \dot{R}^\mu$ et donc $\dot{U} = -A_\mu \dot{R}^\mu U$. ■

Par analogie avec le cas abélien, on voit que $\langle \psi_a | \partial_t | \psi_b \rangle = 0 \forall a, b$ définit la connexion adiabatique de $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, U(M), \pi_P)$. Plus précisément, un point $u \in P$ s'identifie à une base orthonormale de l'espace actif $\pi_E^{-1}(\pi_P(u))$, on note alors $u = (f_1, \dots, f_M)$ avec $\langle f_a | f_b \rangle = \delta_{ab}$. Avec $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, on pose $F \in \mathcal{M}_{M \times n}(\mathbb{C})$ la matrice définissant cette même base, on note $u = (F)$ avec $F^\dagger F = I_M$. Les champs de vecteurs fondamentaux sont alors $\forall X \in \mathfrak{u}(M)$

$$\hat{X}(u) = \left[\frac{d}{dt} R(e^{-tX}) u \right]_{t=0} = \left[\frac{d}{dt} F e^{tX} \right]_{t=0} = (FX) \quad (3.52)$$

$T_u P$ s'identifie à un M -uplet de vecteurs de \mathbb{C}^n et donc à une matrice de $\mathcal{M}_{M \times n}(\mathbb{C})$ et la 1-forme de connexion adiabatique est définie par

$$\forall (F) \in P, \forall \Phi \in T_{(F)} P \quad \omega(\Phi) = F^\dagger \Phi \quad (3.53)$$

on a alors $\omega(FX) = X \in \mathfrak{u}(M)$ et pour une application $t \mapsto (F(t))$ de $[-1, 1]$ dans P , $\omega([\frac{dF}{dt}]_{t=0}) = [F^\dagger \frac{d}{dt} F]_{t=0} \in \mathfrak{u}(M)$, car $F^\dagger F = I_M \Rightarrow F^\dagger \frac{d}{dt} F = - (F \frac{d}{dt} F)^\dagger$. Soit $\Psi(t)$ la matrice des fonctions d'onde pour toutes les conditions initiales pures, la condition d'horizontalité est donc bien

$$\omega(\partial_t \Psi(t)) = 0 \iff \Psi^\dagger \partial_t \Psi = 0 \quad (3.54)$$

Enfin soit $T(\vec{R})$ la matrice des vecteurs propres (section σ de P), on a bien

$$A = \omega \circ \sigma_* = T^\dagger dT \quad (3.55)$$

La généralisation au cas dissipatif est immédiate.

Dans la suite on verra que l'identification d'un point de P à une matrice F est en fait une application, très importante pour la physique, liée au théorème de classification universelle des fibrés.

3.1.3 Retour sur le fibré adiabatique

Dans les paragraphes précédents, on a introduit un fibré $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, G, \pi_P)$ qui décrit la phase de Berry-Simon. On a supposé l'existence de la variété P , mais on ne l'a jamais définie.

Pour définir un fibré principal (et donc l'espace total de celui-ci), trois possibilités s'offrent à nous : le définir par ses trivialisations locales, par ses difféomorphismes de fibre ou par ses fonctions de transitions. Le théorème suivant donne les propriétés spécifiques des fonctions de transitions de \mathcal{P} et de fait, définit P .

Théorème 3 (Théorème de structure des fibrés adiabatiques). *Soit $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, G, \pi_P)$ le fibré adiabatique, on supposera que $G = U(M)$ ou $GL(M, \mathbb{C})$. Soient $\{g^{ij}\}_{i,j}$ ses fonctions de transition pour un atlas $\mathcal{A} = \{U^i\}_i$ de \mathcal{M} . On suppose pour des raisons de simplicité, que l'atlas \mathcal{A} est choisi tel qu'il n'existe aucune levée de dégénérescence ni aucun croisement dans les intersections des cartes locales de \mathcal{A} . Soient $\{E_\alpha\}_\alpha$ les valeurs propres de H définissant l'espace actif, classées tel que $\forall \vec{R} \in U^i \cap U^j$*

- E_α sont des valeurs propres non-dégénérées pour $\alpha = 1, \dots, p_1^{ij}$
- E_α sont de dégénérescence 2 pour $\alpha = p_1^{ij} + 1, \dots, p_1^{ij} + p_2^{ij}$
- ...
- E_α sont de dégénérescence q pour $\alpha = p_1^{ij} + \dots + p_{q-1}^{ij} + 1, \dots, p_1^{ij} + \dots + p_q^{ij}$

q étant le degré maximum de dégénérescence dans $U^i \cap U^j$, on a de plus $\sum_k p_k^{ij} = M$. Alors les fonctions de transitions de P dans le cas conservatif sont telles que

$$g^{ij} \in \underbrace{U(1) \times \dots \times U(1)}_{p_1^{ij} \text{ termes}} \times \underbrace{U(2) \times \dots \times U(2)}_{p_2^{ij} \text{ termes}} \times \dots \times \underbrace{U(q) \times \dots \times U(q)}_{p_q^{ij} \text{ termes}} \quad (3.56)$$

$U(1)^{p_1^{ij}} \times U(2)^{p_2^{ij}} \times \dots \times U(q)^{p_q^{ij}} \subset U(M)$. Dans le cas dissipatif, on a

$$g^{ij} \in (\mathbb{C}^*)^{p_1^{ij}} \times GL(2, \mathbb{C})^{p_2^{ij}} \times \dots \times GL(q, \mathbb{C})^{p_q^{ij}} \subset GL(M, \mathbb{C}) \quad (3.57)$$

Démonstration :

Soit $\mathcal{E} = (E, \mathcal{M}, \mathbb{C}^M, \pi_E)$ le fibré vectoriel associé à \mathcal{P} par ρ représentation de G sur \mathbb{C}^M . Par construction les vecteurs propres de H , $\{|a, \vec{R}\rangle\}$, sont des sections de \mathcal{E} jouant le rôle de base canonique de $\Gamma(\mathcal{M}, E)$. L'expression de vecteurs propres va dépendre de la carte locale, ainsi on aura $|a, \vec{R}\rangle^i \in \Gamma(U^i, E)$. $\forall i$, $\{|a, \vec{R}\rangle^i\}$ est une base de vecteurs propres de $\Gamma(U^i, E)$. En fait $|n, \vec{R}\rangle^i$ est la trivialisatation locale de la section $|n, \vec{R}\rangle$ au dessus de U^i . Soient g^{ij} les fonctions de transition de P , par définition on a

$$\forall R \in U^i \cap U^j \quad |a, \vec{R}\rangle^j = \rho(g^{ij}(\vec{R}))|a, \vec{R}\rangle^i \quad (3.58)$$

où $u \in P$ est un point du relèvement horizontal passant par z et $\Omega = d_p\omega + \omega \wedge \omega$ est la courbure globale du fibré.

Preuve : cf. [113] ■

La boucle de Wilson associée au relèvement horizontal d'un chemin fermé \mathcal{C} de \mathcal{M} est appelé holonomie du relèvement. On voit donc que la phase de Berry est cette holonomie. Dans les applications physiques qui nous intéressent, on aura souvent à considérer des chemins fermés. En effet, \mathcal{M} modélisant les paramètres des lasers d'un système photodynamique, en général pour un problème de contrôle, on part des champs éteints pour revenir vers les champs éteints. Si $\vec{R}_0 \in \mathcal{M}$ est le point associé aux champs éteints, les chemins qui vont nous intéresser seront dans $\mathcal{C}_{\vec{R}_0}$. Si l'holonomie se réduit à l'identité, il est clair que l'on revient sur l'état initial et que le contrôle a échoué. En d'autres termes, l'holonomie d'un chemin fermé est le résultat du contrôle. Si ψ_0 est la condition initiale, le groupe d'holonomie H_{ψ_0} est l'ensemble des résultats possibles du contrôle. En d'autres termes, un contrôle dont l'objectif est de modifier l'état initial par un opérateur $U \in G$, n'est possible que si $U \in H_{\psi_0}$. $Hol_{\vec{R}_0}$ est donc le groupe de tous les résultats admissibles du contrôle. Supposons que \mathcal{M} soit simplement connexe. Soit \mathcal{S} une surface de \mathcal{M} de frontière \mathcal{C} ($\partial\mathcal{S} = \mathcal{C}$). Alors dans le cas abélien en appliquant le théorème de Stokes on a

$$\oint_{\mathcal{C}} A = \oint_{\partial\mathcal{S}} A = \int_{\mathcal{S}} dA \quad (3.64)$$

d'où

$$e^{-\oint_{\mathcal{C}} A} = e^{-\int_{\mathcal{S}} F} \quad (3.65)$$

avec $F = dA \in \Omega^2\mathcal{M}$ la courbure locale du fibré. On voit que l'holonomie abélienne est fonction de F , de plus c'est un invariant de jauge. Son indépendance vis-à-vis du choix de jauge (choix de la base unidimensionnelle de l'espace actif) la rend particulièrement utile pour les problèmes de contrôle. Par contre dans les cas non-abélien l'holonomie n'est pas invariante de jauge mais seulement équivariante

$$\mathbb{P}e^{-\oint_{\mathcal{C}} A'} = g(\vec{R}_0)^{-1} \mathbb{P}e^{-\oint_{\mathcal{C}} A} g(\vec{R}_0) \quad (3.66)$$

avec $A' = g^{-1}Ag + g^{-1}dg$. Néanmoins dans la pratique, si \vec{R}_0 correspond aux champs éteints, le choix de jauge en ce point est maîtrisable. Par contre $\text{tr}\mathbb{P}e^{-\oint_{\mathcal{C}} A}$ est un invariant de jauge¹. En utilisant le théorème de Stokes non-abélien (et ses notations, cf. annexe A), on peut aussi exprimer la boucle de Wilson non-abélienne en fonction de la courbure $F = dA + A \wedge A$

$$\mathbb{P}e^{-\oint_{\mathcal{C}} A} = \mathbb{P}_{\tau} e^{-\frac{1}{2} \int_{\mathcal{S}} T^{-1}(\sigma, \tau) F_{01}(\sigma, \tau) T(\sigma, \tau) d\sigma d\tau} \quad (3.67)$$

Une étude plus poussée du lien entre les phases de Berry et la théorie de l'holonomie pourrait être faite, en particulier en introduisant le groupe des boucles de la variété de contrôle, \mathcal{LM} , et la C^* -algèbre d'holonomie \mathcal{HA} [144, 137, 26]. De plus, la classification des lacets par la relation d'équivalence holonomique est très importante pour le contrôle; or on montre que ce n'est pas le groupe d'homotopie $\pi_1(\mathcal{M})$ qui est pertinent pour cette étude (deux boucles homotopiques peuvent ne pas être holonomiques), mais le groupe d'homotopie fine $\pi_1^1(\mathcal{M})$ [97]. Faute de temps, cette étude n'a pu être faite au cours de cette thèse.

3.2 Géométrie de la mécanique quantique I : la structure projective

3.2.1 Le fibré de la mécanique quantique

Avant d'introduire la structure géométrique des phases de Aharonov-Anandan, il est nécessaire de faire une petite digression sur la structure mathématique de la mécanique quantique. Nous savons

¹suivant les auteurs, c'est $\text{tr}\mathbb{P}e^{-\oint_{\mathcal{C}} A}$ qui est appelée boucle de Wilson

que la description traditionnelle de l'espace des états en mécanique quantique se fait à l'aide d'un \mathbb{C} -espace de Hilbert séparable \mathcal{H} . Mais l'interprétation probabiliste de la mécanique quantique, nous apprend qu'un état physique ψ est une amplitude de probabilité, et doit donc vérifier $\|\psi\| = 1$. Donc deux vecteurs proportionnels de \mathcal{H} représentent le même état physique. De plus, nous savons que la phase de ψ n'est pas une information physique, seule la différence de phase entre deux vecteurs a une interprétation (théorie des interférences quantiques). On voit ainsi que l'espace de Hilbert \mathcal{H} contient beaucoup d'informations non-physiques et n'est donc pas la structure la plus optimale pour décrire la mécanique quantique.

Pour trouver la véritable structure de la mécanique quantique, on commence par considérer \mathcal{H} . Nous savons que si $\psi = \alpha\phi$ avec $\alpha \in \mathbb{R}^{+*}$ alors les deux vecteurs représentent le même état physique (ils ne diffèrent que par leurs normes). Ceci définit une relation d'équivalence dans \mathcal{H} que l'on note \sim , ainsi un état physique est une classe d'équivalence pour \sim . L'espace ainsi défini est donc

$$\mathcal{N} = (\mathcal{H} \setminus \{0\}) / \sim \quad (3.68)$$

\mathcal{N} est appelé espace des rayons normés. Supposons maintenant qu'on ne considère pas les questions d'interférences. Ainsi deux rayons normés qui ne diffèrent que par un terme de phase représentent le même état physique. On définit alors l'action du groupe des phases $U(1)$ sur \mathcal{N} par

$$\forall e^{i\varphi} \in U(1), \forall [\psi] \in \mathcal{N}, \quad e^{i\varphi}[\psi] = [e^{i\varphi}\psi] \quad (3.69)$$

où $[\psi]$ désigne la classe d'équivalence de ψ pour \sim . Deux rayons représentent le même état physique s'ils appartiennent à la même orbite de $U(1)$. L'espace des états physiques est donc l'espace homogène pour l'action de groupe précédemment définie :

$$\mathcal{R} = \mathcal{N}/U(1) \quad (3.70)$$

\mathcal{R} est appelé espace projectif. Si \mathcal{H} est de dimension finie ($\dim \mathcal{H} = n$) alors \mathcal{N} et \mathcal{R} sont des variétés \mathcal{C}^∞ -différentiables complexes. L'espace des rayons normés est la $(2n - 1)$ -sphère

$$\mathcal{N} = S^{2n-1} \quad (3.71)$$

et \mathcal{R} est l'espace projectif complexe de dimension $n - 1$:

$$\mathcal{R} = \mathbb{C}P^{n-1} \quad (3.72)$$

Notons qu'en raisonnant avec les opérateurs d'évolutions à la place des états, on aurait retrouvé les relations liant ces variétés aux groupes :

$$S^{2n-1} \simeq U(n)/U(n-1) \quad (3.73)$$

$$\mathbb{C}P^{n-1} \simeq U(n)/(U(n-1) \times U(1)) \quad (3.74)$$

Notons l'existence d'un difféomorphisme exceptionnel :

$$\mathbb{C}P^1 \simeq S^3/S^1 \simeq S^2 \quad (3.75)$$

l'espace des états physiques d'un système à deux niveaux est la sphère.

Le plongement de \mathbb{C}^n dans \mathbb{C}^{n+1} , défini par $(z_1, \dots, z_n) \mapsto (z_1, \dots, z_n, 0)$, induit une inclusion $\mathbb{C}P^{n-1} \subset \mathbb{C}P^n$. La limite inductive de cette inclusion définit l'espace projectif pour un espace de Hilbert \mathcal{H} de dimension infinie :

$$\mathbb{C}P^\infty = \lim_{n \downarrow \infty} \mathbb{C}P^n \quad (3.76)$$

Dans cette description de l'espace des états quantiques par $\mathbb{C}P^{n-1}$, on a perdu toute référence aux phases. Pour réintroduire une notion de phase adaptée aux problèmes d'interférences, on doit trouver une structure construite sur $\mathbb{C}P^{n-1}$ mais pour laquelle la phase relative d'un état particulier est

un choix arbitraire. Il est clair que cette structure est le fibré principal $\mathcal{U} = (S^{2n-1}, \mathbb{C}P^{n-1}, U(1), \pi_U)$. Le choix d'une phase relative est alors le choix de jauge d'une section de \mathcal{U} . En résumé, la structure naturelle de la mécanique quantique est un $U(1)$ -fibré principal sur un espace projectif complexe. Avant de poursuivre, nous ferons une remarque sur l'espace de base. $\mathbb{C}P^{n-1}$ est une variété complexe. Pour une variété complexe \mathcal{X} de dimension complexe n (et donc de dimension réelle $2n$), on associe à un système de coordonnées réelles $(x^1, \dots, x^n, y^1, \dots, y^n)$, un système de coordonnées complexes (z^1, \dots, z^n) et son système conjugué $(\bar{z}_1, \dots, \bar{z}_n)$ avec $z^i = x^i + iy^i$ et $\bar{z}_i = x^i - iy^i$. L'ensemble des formes différentielles de \mathcal{X} est une algèbre bigraduée $\Omega^{*,*} \mathcal{X}$ avec

$$\omega \in \Omega^{r,s} \mathcal{X} \Rightarrow \omega = \omega_{i_1, \dots, i_r}^{j_1, \dots, j_s} dz^{i_1} \wedge \dots \wedge dz^{i_r} \wedge d\bar{z}_{j_1} \wedge \dots \wedge d\bar{z}_{j_s} \quad (3.77)$$

On introduit alors les opérateurs de Dolbeault $\partial : \Omega^{r,s} \mathcal{X} \rightarrow \Omega^{r+1,s} \mathcal{X}$ et $\bar{\partial} : \Omega^{r,s} \mathcal{X} \rightarrow \Omega^{r,s+1} \mathcal{X}$ tels que

$$\forall \omega \in \Omega^{r,s} \mathcal{X} \quad \partial \omega = \frac{\partial \omega_{i_1, \dots, i_r}^{j_1, \dots, j_s}}{\partial z^k} dz^k \wedge dz^{i_1} \wedge \dots \wedge dz^{i_r} \wedge d\bar{z}_{j_1} \wedge \dots \wedge d\bar{z}_{j_s} \quad (3.78)$$

$$\bar{\partial} \omega = \frac{\partial \omega_{i_1, \dots, i_r}^{j_1, \dots, j_s}}{\partial \bar{z}_k} d\bar{z}_k \wedge dz^{i_1} \wedge \dots \wedge dz^{i_r} \wedge d\bar{z}_{j_1} \wedge \dots \wedge d\bar{z}_{j_s} \quad (3.79)$$

La différentielle extérieure de \mathcal{X} est alors $d = \partial + \bar{\partial}$. L'ensemble des p -formes différentielles de \mathcal{X} (équivalent au cas réel) est $\bigoplus_{k=0}^p \Omega^{k,p-k} \mathcal{X}$. Un exposé détaillé de la géométrie des variétés complexes peut être trouvé dans [113, 36].

3.2.2 Interprétation géométrique de la phase de Aharonov-Anandan

Soit $\psi \in \mathbb{C}^n$, on pose $\psi = (\psi^0, \dots, \psi^{n-1})$ les composantes de ψ dans une base de référence (dans les problèmes qui nous intéressent, la base des vecteurs propres de l'Hamiltonien atomique ou moléculaire sans le champ). On pose $w^i = \frac{\psi^i}{\psi^0}$ pour tout $i = 1, \dots, n-1$. L'ensemble de nombres complexes $\{w^i\}_i$ est appelé coordonnées homogènes de ψ dans $\mathbb{C}P^{n-1}$. On définit une 1-forme $A \in \Omega^{1,0} \mathbb{C}P^{n-1} \oplus \Omega^{0,1} \mathbb{C}P^{n-1}$ telle que

$$A = \frac{\psi^\dagger d\psi}{\psi^\dagger \psi} \quad (3.80)$$

$$= \frac{i \psi^\dagger d\psi - \psi d\psi^\dagger}{2 \psi^\dagger \psi} \quad (3.81)$$

$$= \frac{i \bar{\psi}_\alpha d\psi^\alpha - \psi^\alpha d\bar{\psi}_\alpha}{2 \bar{\psi}_\gamma \psi^\gamma} \quad (3.82)$$

$$= \frac{i \bar{w}_i dw^i - w^i d\bar{w}_i}{2 (1 + \bar{w}_j w^j)} \quad (3.83)$$

avec les conventions suivantes : $\psi^\dagger = \langle \psi |$, $\bar{\psi}_\alpha = \overline{\psi^\alpha}$ (complexe conjugué), les indices grecques parcourent $0, \dots, n-1$ et les indices latins parcourent $1, \dots, n-1$. A peut être considéré comme le potentiel de jauge pour une connexion de \mathcal{U} . Considérons $\mathcal{E}_U = (E_U, \mathbb{C}P^{n-1}, \mathbb{C}, \pi_{E_U})$ le fibré vectoriel associé à \mathcal{U} , le relèvement horizontal d'un chemin $t \mapsto \{w^i(t)\}_i \in \mathbb{C}P^{n-1}$ passant par $\psi(0)$ est alors

$$\hat{\psi}(t) = e^{-\int_0^t (A_i(w(t')) \dot{w}^i + A^i(w(t')) \dot{\bar{w}}_i) dt'} \psi(t) = e^{-\int_0^t \langle \psi(t') | \partial_{t'} | \psi(t') \rangle dt'} \psi(t) \quad (3.84)$$

où $\psi^i(t)/\psi^0(t) = w^i(t)$. Cette connexion définit la phase de Aharonov-Anandan.

Le potentiel de jauge permet de définir la courbure du fibré \mathcal{U} :

$$F = dA = i \frac{\bar{w}_i w^j - (1 + \bar{w}_k w^k) \delta_i^j}{(1 + \bar{w}_l w^l)^2} dw^i \wedge d\bar{w}_j \quad (3.85)$$

$$F \in \Omega^{1,1} \mathbb{C}P^{n-1}.$$

3.2.3 Classification universelle

On s'intéresse ici au lien entre la phase de Aharonov-Anandan et la phase de Berry-Simon abélienne dans le cas conservatif. Il s'agit donc de comparer le fibré adiabatique $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, U(1), \pi_P)$ à $\mathcal{U} = (S^{2n-1}, \mathbb{C}P^{n-1}, U(1), \pi_U)$. On rappelle que n est la dimension de l'espace de Hilbert total, que nous supposons fini dans un premier temps. Nous supposons que la variété \mathcal{M} a une structure d'espace cellulaire d'ordre inférieur à $2n - 2$. Or $\mathcal{U} = (S^{2n-1}, \mathbb{C}P^{n-1}, U(1), \pi_U)$ est un fibré $(2n - 2)$ -universel (cf. [138, 128]). \mathcal{U} est donc universel pour \mathcal{P} et $\mathbb{C}P^{n-1}$ est un espace classifiant pour \mathcal{M} . En vertu du théorème de classification universelle (cf. annexe B), on a donc le diagramme commutatif suivant :

$$\begin{array}{ccc} P & \xleftarrow{f^*} & S^{2n-1} \\ \pi_P \downarrow & & \downarrow \pi_U \\ \mathcal{M} & \xrightarrow{f} & \mathbb{C}P^{n-1} \end{array}$$

où f est l'application universelle associée à \mathcal{P} . Or $\mathbb{C}P^{n-1}$ que l'on a défini comme l'espace des rayons normés sans phase de \mathbb{C}^n , peut être interprété comme l'espace des projecteurs sur les droites vectorielles, i.e. $\mathbb{C}P^{n-1} = \{|f\rangle\langle f|, f \in \mathbb{C}^n, \langle f|f\rangle = 1\}$. L'application universelle est alors évidente

$$f: \begin{array}{ccc} \mathcal{M} & \rightarrow & \mathbb{C}P^{n-1} \\ \vec{R} & \mapsto & |n, \vec{R}\rangle\langle n, \vec{R}| \end{array}$$

Au paragraphe précédent on a introduit une connexion sur \mathcal{U} définie par le potentiel de jauge

$$A_{\mathcal{U}}(|\psi\rangle\langle\psi|) = \langle\psi|d_{\mathbb{C}P^{n-1}}|\psi\rangle \quad (3.86)$$

on suppose ici $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Il s'agit de la connexion universelle de \mathcal{U} au sens du théorème de Narasimhan-Ramaman (cf. annexe B), son pull-back est la connexion adiabatique

$$f^*A_{\mathcal{U}} = \langle n, \vec{R}|d_{\mathcal{M}}|n, \vec{R}\rangle = A_{\mathcal{P}} \quad (3.87)$$

On voit ainsi que la phase de Berry-Simon est un cas particulier de phase de Aharonov-Anandan où on restreint l'espace de base à $\text{Im}f \subset \mathbb{C}P^{n-1}$. Dans le cas où \mathcal{H} est de dimension infinie, on a le même résultat avec pour fibré universel $(\mathcal{N}, \mathbb{C}P^\infty, U(1), \pi_U)$. Notons que ce fibré est universel pour toute dimension de \mathcal{H} , puisque par définition $\mathbb{C}P^n \subset \mathbb{C}P^\infty \forall n \in \mathbb{N}$.

Dans la section suivante, nous verrons que la connexion universelle $A_{\mathcal{U}}$ est associée à la structure naturelle de $\mathbb{C}P^{n-1}$.

3.3 Géométrie de la mécanique quantique II : la structure Kählerienne

On s'intéresse toujours au cas de la phase de Aharonov-Anandan abélienne et donc au fibré $\mathcal{U} = (S^{2n-1}, \mathbb{C}P^{n-1}, U(1), \pi_U)$. $\mathbb{C}P^{n-1}$ a une structure naturelle de variété Kählerienne. La géométrie Kählerienne est en quelque sorte l'équivalent complexe de la géométrie Riemannienne, la notion fondamentale est donc celle de métrique. Dans un premier temps, on rappelle quelques notions fondamentales de cette géométrie (un exposé plus détaillé peut être trouvé dans [113, 36]), puis on s'intéresse à l'usage de cette structure en mécanique quantique.

3.3.1 Éléments de géométrie Kählerienne

On considère \mathcal{K} une variété complexe, avec $\dim_{\mathbb{C}} \mathcal{K} = m$. Soit g une métrique Riemannienne de la variété différentielle associée à \mathcal{K} . Rappelons que les coordonnées réelles et complexes de \mathcal{K} sont

reliées par les relations : $z^i = x^i + iy^i$, $\bar{z}_i = x^i - iy^i$, $\frac{\partial}{\partial z^i} = \frac{1}{2}(\frac{\partial}{\partial x^i} - i\frac{\partial}{\partial y^i})$ et $\frac{\partial}{\partial \bar{z}_i} = \frac{1}{2}(\frac{\partial}{\partial x^i} + i\frac{\partial}{\partial y^i})$. Par définition g est un champ de tenseurs de rang 2 agissant sur deux vecteurs. L'extension de g sur la structure complexe de \mathcal{K} est alors définie par

$$g_{\mu\nu} = g\left(\frac{\partial}{\partial z^\mu}, \frac{\partial}{\partial z^\nu}\right) \quad (3.88)$$

$$g_{\mu}{}^\nu = g\left(\frac{\partial}{\partial z^\mu}, \frac{\partial}{\partial \bar{z}_\nu}\right) \quad (3.89)$$

$$g^\mu{}_\nu = g\left(\frac{\partial}{\partial \bar{z}_\mu}, \frac{\partial}{\partial z^\nu}\right) \quad (3.90)$$

$$g^{\mu\nu} = g\left(\frac{\partial}{\partial \bar{z}_\mu}, \frac{\partial}{\partial \bar{z}_\nu}\right) \quad (3.91)$$

en utilisant la linéarité de g et les expressions des vecteurs de la structure complexe en fonction des vecteurs de la structure réelle. On introduit de plus le champ de tenseur J de type $(1, 1)$, appelé quasi-structure complexe, défini par

$$J = idz^\mu \otimes \frac{\partial}{\partial z^\mu} - id\bar{z}_\mu \otimes \frac{\partial}{\partial \bar{z}_\mu} \quad (3.92)$$

On suppose alors que g est hermitienne, i.e. $\forall X, Y \in T\mathcal{K}$, $g(JX, JY) = g(X, Y)$. Dans ce cas $g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = 0$ et donc

$$g = g_{\mu}{}^\nu dz^\mu \otimes d\bar{z}_\nu + g^\mu{}_\nu d\bar{z}_\mu \otimes dz^\nu \quad (3.93)$$

On introduit de plus une 2-forme $F \in \Omega^{1,1}\mathcal{K}$ appelée forme de Kähler, définie par $\forall X, Y \in T\mathcal{K}$, $F(X, Y) = g(JX, Y)$, soit

$$F = ig_{\mu}{}^\nu dz^\mu \wedge d\bar{z}_\nu \quad (3.94)$$

Cette forme de Kähler joue le rôle de la 2-forme de courbure Riemannienne dans le cas complexe. La variété complexe \mathcal{K} est dite Kählerienne si sa forme de Kähler est fermée : $dF = 0$. Enfin si \mathcal{K} est Kählerienne, on montre qu'il existe une fonction locale K de \mathcal{K} dans \mathbb{C} , telle que

$$g^\mu{}_\nu = \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}_\mu \partial z^\nu} K \quad (3.95)$$

$$F = i\partial\bar{\partial}K \quad (3.96)$$

La donnée K définit donc complètement la structure Kählerienne de \mathcal{K} , on appelle K potentiel de Kähler.

3.3.2 La métrique quantique

On peut montrer [113] que $\mathbb{C}P^{n-1}$ est une variété Kählerienne dont la structure est définie par le potentiel de Kähler $K = \frac{1}{2}\text{Ln}(1 + \bar{w}_k w^k)$ dans les coordonnées homogènes. Plutôt que de dériver toute la structure à partir de K , on va obtenir une structure à partir de la physique et montrer qu'elle s'identifie à la structure Kählerienne de $\mathbb{C}P^{n-1}$. La description des phases de Aharonov-Anandan nous amène à équiper $\mathcal{U} = (S^{2n-1}, \mathbb{C}P^{n-1}, U(1), \pi_U)$ d'une connexion ayant pour potentiel de jauge $A = \frac{\langle \psi | d|\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$. Cette connexion induit la dérivée covariante normalisée dans les sections du fibré associé à \mathcal{U}

$$\psi' = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}} \frac{D}{ds} \psi = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}} \left(\frac{d}{ds} \psi - A\psi \right) = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}} \left(\frac{d}{ds} \psi - \frac{\langle \psi | \frac{d}{ds} \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \psi \right) \quad (3.97)$$

où $s \mapsto \pi_{EU}(\psi(s))$ est un chemin dans $\mathbb{C}P^{n-1}$. Cette dérivée covariante induit une métrique dans $\mathbb{C}P^{n-1}$:

$$dl^2 = \langle \psi' | \psi' \rangle ds^2 \quad (3.98)$$

$$= \frac{\langle d\psi | d\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} - \frac{\langle \psi | d\psi \rangle \langle d\psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^2} - \frac{\langle d\psi | \psi \rangle \langle \psi | d\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^2} + \frac{\langle \psi | d\psi \rangle \langle d\psi | \psi \rangle \langle \psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^3} \quad (3.99)$$

$$= \frac{\langle \psi | \psi \rangle \langle d\psi | d\psi \rangle - \langle d\psi | \psi \rangle \langle \psi | d\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^2} \quad (3.100)$$

$$= \frac{\bar{\psi}_\beta \psi^\beta d\bar{\psi}_\alpha d\psi^\alpha - d\bar{\psi}_\alpha \psi^\alpha \bar{\psi}_\beta d\psi^\beta}{(\bar{\psi}_\gamma \psi^\gamma)^2} \quad (3.101)$$

Ce qui nous donne dans les coordonnées homogènes

$$\eta = dl^2 = \frac{(1 + \bar{w}_k w^k) \delta^i_j - \bar{w}_j w^i}{(1 + \bar{w}_k w^k)^2} d\bar{w}_i dw^j \quad (3.102)$$

Cette métrique est connue dans la littérature sous le nom de métrique de Fubini-Study. Une comparaison avec l'expression de la courbure de \mathcal{U} , $F = dA$, donnée plus haut, montre que

$$F = \eta_i^j dw^i \wedge d\bar{w}_j \quad (3.103)$$

Enfin, il est aisé de montrer que $F = i\partial\bar{\partial}K$. On voit donc que la connexion définie sur \mathcal{U} est en fait la (seule) connexion compatible avec la structure Kählerienne de $\mathbb{C}P^{n-1}$ (compatible avec la métrique). Cette connexion est donc intimement liée à la structure même de la mécanique quantique et est donc totalement naturelle pour décrire la dynamique (et de part le théorème de classification universelle, la connexion adiabatique est elle aussi totalement naturelle par rapport à la structure de la mécanique quantique).

Pour donner les interprétations physiques de la métrique de Fubini-Study, commençons par étudier le problème de la probabilité de trouver les mêmes résultats de mesures entre un système dans l'état ψ et un système dans l'état ϕ , c'est à dire la valeur du recouvrement entre ces deux états : $|\langle \psi | \phi \rangle|^2$. On pose θ tel que :

$$\cos^2 \frac{\theta}{2} = |\langle \psi | \phi \rangle|^2 = \bar{\psi}_\alpha \phi^\alpha \bar{\phi}_\beta \psi^\beta \quad (3.104)$$

Supposons que $|\phi\rangle = |\psi\rangle + d|\psi\rangle$, c'est à dire calculons le recouvrement après un déplacement infinitésimal.

$$\phi^\alpha = \psi^\alpha + d\psi^\alpha \quad (3.105)$$

$$\cos^2 \frac{d\theta}{2} = \left(1 - \frac{d\theta^2}{8} + \mathcal{O}(d\theta^4)\right)^2 \quad (3.106)$$

$$= 1 - \frac{d\theta^2}{4} + \mathcal{O}(d\theta^4) \quad (3.107)$$

$$\bar{\psi}_\alpha \phi^\alpha \bar{\phi}_\beta \psi^\beta = \bar{\psi}_\alpha (\psi^\alpha + d\psi^\alpha) (\bar{\psi}_\beta + d\bar{\psi}_\beta) \psi^\beta \quad (3.108)$$

$$= \underbrace{(\bar{\psi}_\alpha \psi^\alpha)}_{=1} + \bar{\psi}_\alpha d\psi^\alpha \underbrace{(\bar{\psi}_\beta \psi^\beta + d\bar{\psi}_\beta \psi^\beta)}_{=1} \quad (3.109)$$

$$= 1 + d\bar{\psi}_\beta \psi^\beta + \bar{\psi}_\alpha d\psi^\alpha + \bar{\psi}_\alpha d\psi^\alpha d\bar{\psi}_\beta \psi^\beta \quad (3.110)$$

or

$$\phi^\alpha \bar{\phi}_\alpha = 1 \Rightarrow (\psi^\alpha + d\psi^\alpha)(\bar{\psi}_\alpha + d\bar{\psi}_\alpha) = 1 \quad (3.111)$$

$$\Rightarrow \underbrace{\psi^\alpha \bar{\psi}_\alpha}_{=1} + \psi^\alpha d\bar{\psi}_\alpha + d\psi^\alpha \bar{\psi}_\alpha + d\psi^\alpha d\bar{\psi}_\alpha = 1 \quad (3.112)$$

$$\Rightarrow \psi^\alpha d\bar{\psi}_\alpha + d\psi^\alpha \bar{\psi}_\alpha = -d\psi^\alpha d\bar{\psi}_\alpha \quad (3.113)$$

D'où

$$d\theta^2 = 4 \underbrace{(d\psi^\alpha d\bar{\psi}_\alpha - \bar{\psi}_\alpha d\psi^\alpha d\bar{\psi}_\beta \psi^\beta)}_{dt^2} \quad (3.114)$$

On retrouve la métrique de Fubini-Study. Celle-ci mesure donc la “distance quantique” entre deux états, dans le sens où, pour deux états égaux (à une phase près) on a $|\langle \psi | \phi \rangle|^2 = 1 \Rightarrow \theta = 0$, la distance entre les états est nulle, et deux états incompatibles (au sens probabiliste) $|\langle \psi | \phi \rangle|^2 = 0 \Rightarrow \theta = \pi$, sont fortement distants l'un de l'autre. La probabilité d'obtenir les mêmes mesures (le recouvrement entre deux états), est donc obtenue avec la distance séparant les deux états le long d'une géodésique.

$$\theta = 2 \int_\phi^\psi dl \quad (3.115)$$

$$= 2 \int_\phi^\psi \sqrt{\eta^\alpha_\beta d\bar{\xi}_\alpha d\xi^\beta} \quad (3.116)$$

$$= 2 \int_0^T \sqrt{\eta^\alpha_\beta \frac{d\bar{\xi}_\alpha}{dt} \frac{d\xi^\beta}{dt}} dt \quad (3.117)$$

avec $\eta^\alpha_\beta = \delta^\alpha_\beta - \xi^\alpha \bar{\xi}_\beta$ (attention la métrique dépend du point considéré), ξ la géodésique entre $\xi(0) = \phi$ et $\xi(T) = \psi$

Remarquons de plus que :

$$|\psi(t+dt)\rangle = |\psi(t)\rangle + dt \partial_t |\psi(t)\rangle + \frac{dt^2}{2} \partial_t^2 |\psi(t)\rangle + \mathcal{O}(dt^3) \quad (3.118)$$

$$\begin{aligned} &= |\psi(t)\rangle - i\hbar^{-1} dt H |\psi(t)\rangle \\ &\quad - i\hbar^{-1} \frac{dt^2}{2} \left(\frac{\partial H}{\partial t} |\psi(t)\rangle - i\hbar^{-1} H^2 |\psi(t)\rangle \right) + \mathcal{O}(dt^3) \end{aligned} \quad (3.119)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \psi(t+dt) \rangle &= 1 - i\hbar^{-1} dt \langle \psi | H | \psi \rangle - i\hbar^{-2} \frac{dt^2}{2} \langle \psi | \frac{\partial H}{\partial t} | \psi \rangle \\ &\quad - \hbar^{-2} \frac{dt^2}{2} \langle \psi | H^2 | \psi \rangle + \mathcal{O}(dt^3) \end{aligned} \quad (3.120)$$

$$|\langle \psi(t) | \psi(t+dt) \rangle|^2 = 1 + \hbar^{-2} dt^2 \langle \psi | H | \psi \rangle^2 - \hbar^{-2} dt^2 \langle \psi | H^2 | \psi \rangle + \mathcal{O}(dt^3) \quad (3.121)$$

$$= 1 - \hbar^{-2} dt^2 \Delta E^2 + \mathcal{O}(dt^3) \quad (3.122)$$

où $\Delta E = \sqrt{\langle \psi | H^2 | \psi \rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle^2}$ est la variance de l'énergie (sens probabiliste), c'est à dire, l'incertitude de mesure sur E (sens physique).

Mais $|\psi(t+dt)\rangle = |\psi\rangle + d|\psi\rangle$, par conséquent :

$$|\langle \psi(t) | \psi(t+dt) \rangle|^2 = (1 + \bar{\psi}_\alpha d\psi^\alpha)(1 + \psi^\beta d\bar{\psi}_\beta) = 1 - dt^2 \quad (3.123)$$

d'où l'on déduit que :

$$dl^2 = \frac{\Delta E^2}{\hbar^2} dt^2 \quad (3.124)$$

$$dl = \frac{\Delta E}{\hbar} dt \quad (3.125)$$

$$\Delta E = \hbar \frac{dl}{dt} \quad (3.126)$$

L'incertitude sur l'énergie est donc la vitesse du système dans l'espace projectif. La moyenne temporelle d'une quantité f étant :

$$\bar{f} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} f(t) dt \quad (3.127)$$

on a

$$\overline{\Delta E} \Delta t = \frac{\hbar}{2} \int_0^{\Delta t} \frac{d\theta}{dt} dt \quad (3.128)$$

Pour que $\psi(0)$ et $\psi(\Delta t)$ soient quantiquement séparés, il faut qu'entre 0 et Δt , $\psi(t)$ ait été orthogonal à $\psi(0)$, c'est à dire qu'il faut que la distance entre les deux états soit supérieure ou égale à π . D'où le principe d'incertitude de Heisenberg

$$\overline{\Delta E} \Delta t \geq \frac{\hbar \pi}{2} \quad (3.129)$$

$$\overline{\Delta E} \Delta t \geq \frac{h}{4} \quad (3.130)$$

On a de plus $\overline{\Delta E} \Delta t = \frac{h}{4}$, si et seulement si $\text{dist}(\psi(t), \psi(t + \Delta t)) = \pi, \forall t$. On a donc une évolution avec un minimum d'incertitude, si et seulement si la trajectoire du système est une géodésique². Ce principe est analogue au minimum d'incertitude position-impulsion d'un paquet d'ondes gaussien. La structure Kählerienne de la mécanique quantique a été étudiée dans de nombreux travaux dont les principaux sont [8, 130, 7, 120, 9].

3.3.3 Cas des systèmes à deux niveaux

On s'intéresse ici au cas particulier des systèmes à deux niveaux, $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, comme par exemple le spin d'un électron. Dans ce cas, comme on l'a déjà fait remarquer, l'espace de base est $\mathbb{C}P^1 \simeq S^2$. Soit $\psi = (\psi^0, \psi^1) \in \mathbb{C}^2$ un état du système et $w^1 = \frac{\psi^1}{\psi^0} \in \mathbb{C}$ sa coordonnée homogène dans $\mathbb{C}P^1$. La métrique de Fubini-Study de $\mathbb{C}P^1$ est alors

$$\eta = \frac{(1 + \bar{w}_1 w^1) - \bar{w}_1 w^1}{(1 + \bar{w}_1 w^1)^2} d\bar{w}_1 dw^1 = \frac{d\bar{w}_1 dw^1}{(1 + \bar{w}_1 w^1)^2} \quad (3.131)$$

Or cette expression est précisément la représentation conforme de la métrique Riemannienne de la sphère (cf. [35]). La structure Kählerienne de $\mathbb{C}P^1$ est donc équivalente à la structure Riemannienne de S^2 , et on peut donc écrire dans les coordonnées standard de S^2 :

$$\eta = \sin^2 \varphi d\theta^2 + d\varphi^2 \quad (3.132)$$

avec $\psi = (\cos \frac{\theta}{2}, e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2})$.

Une étude très détaillée de la géométrie de la mécanique quantique peut être trouvée dans [25].

²Cette relation d'incertitude doit être différenciée de la relation $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ que l'on peut trouver dans la littérature. Les deux relations font référence à deux situations bien distinctes. Dans le premier cas Δt est le temps nécessaire pour quantiquement séparer $\psi(t)$ de $\psi(t + \Delta t)$, Δt est donc fixé par la mécanique quantique. Dans le deuxième cas, Δt est la fenêtre d'intégration sur laquelle on fait les mesures, un appareil expérimental ne faisant en effet pas de mesures instantanées, il intègre sur un petit intervalle de temps. La fenêtre d'intégration Δt est donc fixée par le matériel expérimental (généralement ne dépendant que de la mécanique classique). Ainsi $\overline{\Delta E}$ est la moyenne temporelle sur Δt de la variance quantique instantanée de l'énergie, alors que ΔE dans la seconde expression est la variance quantique de l'intégration sur Δt des mesures de l'énergie. Il existe d'autres définitions de la relation d'incertitude temps-énergie dépendant du sens que l'on donne à Δt , cf. [27]

3.4 Géométrie de la mécanique quantique III : géométrie des espaces actifs

On revient ici au problème fondamental évoqué dans l'introduction, décrire les systèmes dynamiques quantiques à l'aide de petits sous-espaces vectoriels appelés espaces actifs qui se déforment avec le temps. On a vu que le théorème adiabatique donnait une première classe d'espaces actifs se déformant et on en verra une autre dans la partie II. On s'intéresse ici à la géométrie de ces espaces actifs. On va trouver ici une généralisation des sections précédentes où la géométrie de la mécanique quantique qui y est décrite, peut être assimilée à la géométrie des espaces actifs de dimension 1.

3.4.1 Phases de Aharonov-Anandan non-abéliennes

Proposition 5. *Soit $\{\psi_i(0)\}_i$ un ensemble orthonormé de vecteurs. Soient $\psi_i(t) = U(t, 0)\psi_i(0)$ les fonctions d'onde solutions de l'équation de Schrödinger d'un système dynamique d'Hamiltonien auto-adjoint $H(t)$. Soit $P(t) = \sum_i |\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)|$ le projecteur de l'espace actif³ se déformant $S(t)$. On suppose que l'évolution est cyclique par rapport à $S(0)$, i.e. $P(T) = P(0)$ où T est la durée sur laquelle on décrit la dynamique. Bien que $P(T) = P(0)$, $\psi_i(T)$ est en général différent de $\psi_i(0)$. Si $U(t)$ est la transformation de jauge unitaire telle que $\psi_i(t) = \sum_j U_{ji}(t)\tilde{\psi}_j(t) \in S(t)$ avec $\tilde{\psi}_i(0) = \psi_i(0)$ et $\tilde{\psi}_i(T) = \tilde{\psi}_i(0)$, alors*

$$U(t) = \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(t')dt' - \int_0^t A(t')dt'} \quad (3.133)$$

avec $E_{ij}(t) = \langle\tilde{\psi}_i(t)|H(t)|\tilde{\psi}_j(t)\rangle$ et $A_{ij}(t) = \langle\tilde{\psi}_i(t)|\partial_t|\tilde{\psi}_j(t)\rangle$.

Preuve :

On injecte l'expression $\psi_i = \sum_j U_{ji}\tilde{\psi}_i$ dans l'équation de Schrödinger $i\hbar\partial_t\psi_i = H\psi_i$:

$$i\hbar \sum_j \dot{U}_{ji}\tilde{\psi}_j + i\hbar \sum_j U_{ji}\partial_t\tilde{\psi}_j = \sum_j U_{ji}H\tilde{\psi}_j \quad (3.134)$$

d'où en projetant cette expression sur $\tilde{\psi}_k$

$$\dot{U}_{ki} = -i\hbar^{-1} \sum_j U_{ji}\langle\tilde{\psi}_k|H|\tilde{\psi}_j\rangle - \sum_j U_{ji}\langle\tilde{\psi}_k|\partial_t|\tilde{\psi}_j\rangle \quad (3.135)$$

$$\dot{U} = -(i\hbar^{-1}E + A)U \quad (3.136)$$

■

En pratique, on utilise cette proposition à l'envers ; connaissant une base orthonormée cyclique $\{\tilde{\psi}_i(t)\}_i$ de l'espace actif $S(t)$, on obtient alors la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger à partir de U . Cette proposition est une généralisation non-abélienne de la phase de Aharonov-Anandan, de plus on retrouve le transport adiabatique généralisé en posant que $S(t)$ est la somme directe de sous-espaces propres et avec la base cyclique $\{|a, \vec{R}(t)\rangle\}$, pour un chemin fermé \mathcal{C} dans \mathcal{M} .

3.4.2 Le fibré des espaces actifs

On s'intéresse ici à la structure géométrique qui décrit les espaces actifs de la dynamique quantique. On suppose dans un premier temps, l'espace de Hilbert de dimension finie $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, et

³ $S(t)$ est bien un espace actif, pour toute condition initiale prise dans $S(0)$, la fonction d'onde reste dans $S(t)$ au cours du temps

on suppose que la dynamique du système peut être décrite à l'aide d'un espace actif se déformant $[0, T] \ni t \mapsto S(t)$ de dimension M . On suppose de plus le système conservatif. Les opérateurs d'évolution associés aux dynamiques, $U(t, 0)$, peuvent être considérés comme des applications de $[0, T]$ dans $U(n)$ par une représentation matricielle associée à une base de \mathbb{C}^n pour tout t . On choisit à chaque instant t la base suivante, $\mathcal{B}(t) = (\tilde{\psi}_1(t), \dots, \tilde{\psi}_M(t), \phi_1(t), \dots, \phi_{n-M}(t))$ où $\mathcal{B}_0(t) = (\tilde{\psi}_1(t), \dots, \tilde{\psi}_M(t))$ est une base orthonormée de $S(t)$ et où $\mathcal{B}_\perp(t) = (\phi_1(t), \dots, \phi_{n-M}(t))$ est une base orthonormée de $S(t)^\perp$. La représentation $D_{\mathcal{B}(t)}(U(t, 0))$ de $U(t, 0)$ dans la base $\mathcal{B}(t)$ est bien une matrice unitaire d'ordre n . Mais on a supposé que $S(t)$ était un espace actif pour la dynamique du système, donc une transformation en dehors de l'espace actif n'a pas d'influence sur la fonction d'onde. Ce qui se traduit par la relation d'équivalence dans $U(n)$, $U \sim V \iff U = VH$ avec $H \in U(n-M)$ (on peut multiplier $U(t, 0)$ par un opérateur de $\langle \phi_1(t), \dots, \phi_{n-M}(t) \rangle$ sans changer son sens physique). Il est donc clair que les opérateurs d'évolutions associés à la dynamique avec espace actif sont des éléments de $U(n)/U(n-M)$. Cette variété est connue dans la littérature sous le nom de variété de Stiefel complexe $V_M(\mathbb{C}^n) = U(n)/U(n-M)$. La variété décrivant l'évolution sans phase non-abélienne (élément de $U(M)$) est alors $G_M(\mathbb{C}^n) = U(n)/(U(n-M) \times U(M))$ dite Grassmannienne complexe. On montre que [128]

$$V_M(\mathbb{C}^n) \simeq \{Z \in \mathcal{M}_{n \times M}(\mathbb{C}) | Z^\dagger Z = I_M\} \quad (3.137)$$

Une telle matrice $Z \in V_M(\mathbb{C}^n)$ pouvant être alors interprétée comme la matrice des vecteurs d'une base d'un espace actif, exprimés dans une base fixe de \mathbb{C}^n , la variété de Stiefel $V_M(\mathbb{C}^n)$ est l'espace de tous les espaces actifs de dimension M dans \mathbb{C}^n muni d'un choix de base :

$$\forall Z \in V_M(\mathbb{C}^n) \quad Z = \begin{pmatrix} \langle 1 | \psi_1 \rangle & \dots & \langle 1 | \psi_M \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle n | \psi_1 \rangle & \dots & \langle n | \psi_M \rangle \end{pmatrix} \quad (3.138)$$

($|1\rangle, \dots, |n\rangle$) étant une base orthonormale de \mathbb{C}^n . De plus $V_M(\mathbb{C}^n)$ est équipé d'un produit à valeurs dans $\mathcal{M}_{M \times M}(\mathbb{C})$

$$W^\dagger Z = \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \phi_1 | \psi_M \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \phi_M | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \phi_M | \psi_M \rangle \end{pmatrix} \quad (3.139)$$

qui nous donne la matrice des recouvrements des vecteurs de base des deux espaces actifs $\pi_U(Z)$ et $\pi_U(W)$ (ou la matrice de changement de base si $\pi_U(Z) = \pi_U(W)$). La Grassmannienne $G_M(\mathbb{C}^n) = V_M(\mathbb{C}^n)/U(M)$ est alors l'espace de tous les espaces actifs de dimension M sans choix d'une base particulière. On montre de plus que

$$G_M(\mathbb{C}^n) \simeq \{P \in \mathcal{M}_{n \times n}(\mathbb{C}) | P^2 = P, P^\dagger = P, \text{tr} P = M\} \quad (3.140)$$

Il se dégage donc une structure de fibré principal $\mathcal{U} = (V_M(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), U(M), \pi_U)$, avec $\pi_U(Z) = ZZ^\dagger$. Ce fibré \mathcal{U} étant un fibré universel (cf. [128]), il est équipé d'une connexion naturelle, la connexion de Stiefel de potentiel de jauge⁴

$$A = Z^\dagger dZ \in \Omega^1(G_M(\mathbb{C}^n), \mathfrak{u}(M)) \quad (3.141)$$

Soit $\mathcal{E}_U = (E_U, G_M(\mathbb{C}^n), \mathbb{C}^M, \pi_{E_U})$ le fibré vectoriel associé \mathcal{U} , et soit $t \mapsto (\tilde{\psi}_1(t), \dots, \tilde{\psi}_M(t)) = \tilde{Z}(t)$ une section de \mathcal{U} au dessus d'un chemin $t \mapsto \pi_U(Z(t))$ dans $G_M(\mathbb{C}^n)$. Le relèvement horizontal de ce chemin passant par $\tilde{\psi}_i(0) \in E_U$ est

$$\psi_i(t) = \sum_j \left[\mathbb{T} e^{-\int_0^t \tilde{Z}^\dagger(t') \partial_{t'} \tilde{Z}(t') dt'} \right]_{ji} \tilde{\psi}_j(t) \quad (3.142)$$

⁴ $Z^\dagger Z = I_M \Rightarrow dZ^\dagger Z = -Z^\dagger dZ \rightarrow A^\dagger = -A \Rightarrow A \in \mathfrak{u}(M)$

Ainsi la phase de Aharonov-Anandan non-abélienne n'est que la traduction de la structure fibrée. En résumé le cadre naturel pour étudier une théorie d'espaces actifs se déformant est le fibré principal $\mathcal{U} = (V_M(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), U(M), \pi_U)$ équipé de la connexion de Stiefel A . La courbure de \mathcal{U} est alors

$$F = dA + A \wedge A = dZ^\dagger \wedge dZ + (Z^\dagger dZ) \wedge (Z^\dagger dZ) \quad (3.143)$$

elle satisfait à l'identité de Bianchi

$$dF + [A, F] = 0 \quad (3.144)$$

Lorsque l'espace de Hilbert est de dimension infinie, on peut définir $G_M(\mathbb{C}^\infty)$ par la limite inductive $\lim_{n \downarrow \infty} G_M(\mathbb{C}^n)$, on a alors

$$G_M(\mathbb{C}^\infty) = \{P \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \mid P^2 = P, P^\dagger = P, \text{tr} P = M\} \quad (3.145)$$

$\mathcal{B}(\mathcal{H})$ désignant l'espace de Banach des opérateurs bornés de \mathcal{H} .

$$V_M(\mathbb{C}^\infty) = \{(\psi_1, \dots, \psi_M) \in \mathcal{H}^M \mid \forall i, j \quad \langle \psi_i \mid \psi_j \rangle = \delta_{ij}\} \quad (3.146)$$

3.4.3 Structure Kählerienne des espaces actifs

Le fibré des espaces actifs $(V_M(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), U(M), \pi_U)$ est une généralisation du fibré de la mécanique quantique, en effet, $V_1(\mathbb{C}^n) = S^{2n-1}$ et $G_1(\mathbb{C}^n) = \mathbb{C}P^{n-1}$. Comme $\mathbb{C}P^{n-1}$, la Grassmannienne complexe $G_M(\mathbb{C}^n)$ est une variété Kählerienne. Le potentiel de Kähler de cette variété est

$$K = \frac{1}{2} \text{Ln} \det(W^\dagger Z) \quad (3.147)$$

Ln étant la valeur principale du logarithme complexe, $W, Z \in V_M(\mathbb{C}^n)$. On obtient la forme de Kähler \mathcal{F} de $G_M(\mathbb{C}^n)$ par la formule

$$\mathcal{F} = (2i\bar{\partial}\partial K)|_{W=Z} \quad (3.148)$$

Proposition 6. Soit $Z \in V_M(\mathbb{C}^n)$, avec ψ_α la α -ème colonne de Z (le α -ème vecteur de base de l'espace actif). Soit $(|i\rangle)_{i=1, \dots, n}$ une base de référence de \mathbb{C}^n . On introduit la notation suivante : $Z_i^\alpha = \langle i \mid \psi_\alpha \rangle$ et $\bar{Z}_\alpha^i = \langle \psi_\alpha \mid i \rangle$. On considère $\{Z_\alpha^i\}_{i, \alpha}$ comme un système de coordonnées pour $G_M(\mathbb{C}^n)$. Alors on a

$$\mathcal{F} = \text{tr} F = d\bar{Z}_\beta^j \wedge dZ_j^\beta - (Z_k^\gamma d\bar{Z}_\beta^k) \wedge (\bar{Z}_\gamma^j dZ_j^\beta) \quad (3.149)$$

Preuve :

Dans cette preuve, on adopte les conventions d'Einstein pour les indices latins (indices de l'espace total) mais pas pour les indices grecs (indices de l'espace actif). On pose S_M le groupe des

permutations de $(1, \dots, M)$ et on désigne par $(-1)^\sigma$ la signature de la permutation $\sigma \in S_M$.

$$\det W^\dagger Z = \sum_{\sigma \in S_M} (-1)^\sigma \prod_{\alpha=1}^M \overline{W}_{\sigma(\alpha)}^i Z_i^\alpha \quad (3.150)$$

$$\partial \text{Ln det } W^\dagger Z = \frac{1}{\det W^\dagger Z} \sum_{\sigma \in S_M} (-1)^\sigma \sum_{\beta=1}^M \prod_{\alpha \neq \beta} \overline{W}_{\sigma(\alpha)}^i Z_i^\alpha \overline{W}_{\sigma(\beta)}^j dZ_j^\beta \quad (3.151)$$

$$\begin{aligned} \overline{\partial} \partial \text{Ln det } W^\dagger Z &= \frac{1}{\det W^\dagger Z} \sum_{\sigma \in S_M} (-1)^\sigma \sum_{\beta=1}^M \sum_{\gamma \neq \beta} \prod_{\alpha \neq \beta, \gamma} \overline{W}_{\sigma(\alpha)}^i Z_i^\alpha \overline{W}_{\sigma(\beta)}^j Z_k^\gamma d\overline{W}_{\sigma(\gamma)}^k \wedge dZ_j^\beta \\ &+ \frac{1}{\det W^\dagger Z} \sum_{\sigma \in S_M} (-1)^\sigma \sum_{\beta=1}^M \prod_{\alpha \neq \beta} \overline{W}_{\sigma(\alpha)}^i Z_i^\alpha d\overline{W}_{\sigma(\beta)}^j \wedge dZ_j^\beta \\ &- \frac{1}{(\det W^\dagger Z)^2} \left(\sum_{\sigma \in S_M} (-1)^\sigma \sum_{\beta=1}^M \prod_{\alpha \neq \beta} \overline{W}_{\sigma(\alpha)}^i Z_i^\alpha Z_j^\beta d\overline{W}_{\sigma(\beta)}^j \right) \\ &\wedge \left(\sum_{\sigma \in S_M} (-1)^\sigma \sum_{\beta=1}^M \prod_{\alpha \neq \beta} \overline{W}_{\sigma(\alpha)}^i Z_i^\alpha \overline{W}_{\sigma(\beta)}^j dZ_j^\beta \right) \end{aligned} \quad (3.152)$$

$$\begin{aligned} (\overline{\partial} \partial \text{Ln det } W^\dagger Z)_{|W=Z} &= \sum_{\sigma \in S_M} (-1)^\sigma \sum_{\beta=1}^M \sum_{\gamma \neq \beta} \prod_{\alpha \neq \beta, \gamma} (Z^\dagger Z)_{\sigma(\alpha)}^\alpha \overline{Z}_{\sigma(\beta)}^j Z_k^\gamma d\overline{Z}_{\sigma(\gamma)}^k \wedge dZ_j^\beta \\ &+ \sum_{\sigma \in S_M} (-1)^\sigma \sum_{\beta=1}^M \prod_{\alpha \neq \beta} (Z^\dagger Z)_{\sigma(\alpha)}^\alpha d\overline{Z}_{\sigma(\beta)}^j \wedge dZ_j^\beta \\ &- \left(\sum_{\sigma \in S_M} (-1)^\sigma \sum_{\beta=1}^M \prod_{\alpha \neq \beta} (Z^\dagger Z)_{\sigma(\alpha)}^\alpha Z_j^\beta d\overline{Z}_{\sigma(\beta)}^j \right) \\ &\wedge \left(\sum_{\sigma \in S_M} (-1)^\sigma \sum_{\beta=1}^M \prod_{\alpha \neq \beta} (Z^\dagger Z)_{\sigma(\alpha)}^\alpha \overline{Z}_{\sigma(\beta)}^j dZ_j^\beta \right) \end{aligned} \quad (3.153)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\beta=1}^M \sum_{\gamma \neq \beta} \overline{Z}_\beta^j Z_k^\gamma d\overline{Z}_\gamma^k \wedge dZ_j^\beta - \sum_{\beta=1}^M \sum_{\gamma \neq \beta} \overline{Z}_\gamma^j Z_k^\gamma d\overline{Z}_\beta^k \wedge dZ_j^\beta \\ &+ \sum_{\beta=1}^M d\overline{Z}_\beta^j \wedge dZ_j^\beta - \left(\sum_{\beta=1}^M Z_j^\beta d\overline{Z}_\beta^j \right) \wedge \left(\sum_{\beta=1}^M \overline{Z}_\beta^j dZ_j^\beta \right) \end{aligned} \quad (3.154)$$

$$\begin{aligned} &= \left(\sum_{\gamma=1}^M Z_k^\gamma d\overline{Z}_\gamma^k \right) \wedge \left(\sum_{\beta=1}^M \overline{Z}_\beta^j dZ_j^\beta \right) - \sum_{\beta=1}^M Z_k^\beta \overline{Z}_\beta^j d\overline{Z}_\beta^k \wedge dZ_j^\beta \\ &- \sum_{\beta=1}^M \sum_{\gamma=1}^M (Z_k^\gamma d\overline{Z}_\beta^k) \wedge (\overline{Z}_\gamma^j dZ_j^\beta) + \sum_{\beta=1}^M Z_k^\beta \overline{Z}_\beta^j d\overline{Z}_\beta^k \wedge dZ_j^\beta \\ &+ \sum_{\beta=1}^M d\overline{Z}_\beta^j \wedge dZ_j^\beta - \left(\sum_{\beta=1}^M Z_j^\beta d\overline{Z}_\beta^j \right) \wedge \left(\sum_{\beta=1}^M \overline{Z}_\beta^j dZ_j^\beta \right) \end{aligned} \quad (3.155)$$

$$= \sum_{\beta=1}^M d\overline{Z}_\beta^j \wedge dZ_j^\beta - \sum_{\beta, \gamma=1}^M (Z_k^\gamma d\overline{Z}_\beta^k) \wedge (\overline{Z}_\gamma^j dZ_j^\beta) \quad (3.156)$$

■

On a donc comme dans la géométrie de la mécanique quantique, un lien direct entre la courbure du fibré des espaces actifs et la forme de Kähler de la variété des espaces actifs $G_M(\mathbb{C}^n)$ et donc

avec sa métrique Kählerienne

$$dl^2 = \text{tr}(dZ^\dagger dZ) + \text{tr}((Z^\dagger dZ)^2) \quad (3.157)$$

$$= \text{tr}(dZ^\dagger dZ) - \text{tr}(dZ^\dagger Z Z^\dagger dZ) \quad (3.158)$$

$$= d\bar{Z}_\alpha^i dZ_i^\alpha - d\bar{Z}_\alpha^i Z_i^\beta \bar{Z}_\beta^j dZ_j^\alpha \quad (3.159)$$

qui est la généralisation de la métrique de Fubini-Study. La section suivante apporte l'interprétation de cette métrique.

Remarquons que

$$\mathcal{F} = \text{tr}F = d\bar{Z}_\beta^j \wedge dZ_j^\beta \quad (3.160)$$

car $\text{tr}(A \wedge A) = 0$, en effet

$$\text{tr}(A \wedge A) = A^\alpha_\beta \wedge A^\beta_\alpha \quad (3.161)$$

$$= A^\alpha_{\mu\beta} dx^\mu \wedge A^\beta_{\nu\alpha} dx^\nu \quad (3.162)$$

$$= \frac{1}{2}(A^\alpha_{\mu\beta} A^\beta_{\nu\alpha} dx^\mu \wedge dx^\nu - A^\alpha_{\mu\beta} A^\beta_{\nu\alpha} dx^\nu \wedge dx^\mu) \quad (3.163)$$

$$= \frac{1}{2}(A^\alpha_{\mu\beta} A^\beta_{\nu\alpha} dx^\mu \wedge dx^\nu - A^\alpha_{\nu\beta} A^\beta_{\mu\alpha} dx^\mu \wedge dx^\nu) \quad (3.164)$$

$$= \frac{1}{2}(A^\alpha_{\mu\beta} A^\beta_{\nu\alpha} - A^\beta_{\mu\alpha} A^\alpha_{\nu\beta}) dx^\mu \wedge dx^\nu \quad (3.165)$$

$$= 0 \quad (3.166)$$

3.4.4 Distances quantiques

La classe d'équivalence $\pi_U(Z)$ de $Z = (|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_M\rangle)$ représente un espace actif de dimension M . Le choix particulier d'un représentant de cette classe est associé à un choix particulier d'une base $(|\psi_i\rangle)_i$ de l'espace actif. On souhaite introduire une distance dans $G_M(\mathbb{C}^n)$ qui caractérise la distance quantique entre deux espaces actifs. On a deux choix de distances, la première est la distance cordale :

$$\text{dist}_{ch}(W, Z) = \sqrt{2} \sqrt{M - \text{tr}(W^\dagger Z Z^\dagger W)} = \sqrt{2} \sqrt{M - \|W^\dagger Z\|_F^2} \quad (3.167)$$

où $\|\cdot\|_F$ désigne la norme de Frobenius des matrices : $\|A\|_F^2 = \text{tr}(A^\dagger A) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M |A_{ij}|^2$. Le second choix possible est la distance de Fubini-Study :

$$\text{dist}_{FS}(W, Z) = \arccos(\det(W^\dagger Z) \det(Z^\dagger W)) = \arccos |\det W^\dagger Z|^2 \quad (3.168)$$

Ces deux applications sont des distances dans $G_M(\mathbb{C}^n)$ (l'ensemble des classes d'équivalence de $V_M(\mathbb{C}^n)$). On peut remarquer que

$$0 \leq \text{dist}_{ch}(W, Z) \leq \sqrt{2M} \quad (3.169)$$

$$0 \leq \text{dist}_{FS}(W, Z) \leq \frac{\pi}{2} \quad (3.170)$$

Le fait que ces distances soient bornées reflète le fait que $G_M(\mathbb{C}^n)$ est une variété compacte. L'interprétation en tant que distances quantiques de ces applications vient d'une part du fait que si W et Z représentent le même espace actif, i.e. $W = ZU$ avec $U \in U(M)$, alors les distances entre W et Z sont nulles, et d'autre part de la propriété suivante.

Propriété 8. Soit E_1 un espace actif représenté par W et E_2 un espace actif représenté par Z . Alors $\text{dist}_{ch}(W, Z) = \sqrt{2M}$ si et seulement si $E_1 \perp E_2$ et $\text{dist}_{FS}(W, Z) = \frac{\pi}{2}$ si et seulement si $E_1^\perp \cap E_2 \neq \{0\}$ ou $E_2^\perp \cap E_1 \neq \{0\}$.

Preuve :

$$\mathrm{tr}(W^\dagger Z Z^\dagger W) = 0 \iff \sum_{i,j} |\langle \psi_i | \phi_j \rangle|^2 = 0 \iff \forall i, j \quad \langle \psi_i | \phi_j \rangle = 0 \quad (3.171)$$

Ce qui prouve que $\mathrm{dist}_{ch}(W, Z) = 0 \iff E_1 \perp E_2$.

Si $\det W^\dagger Z = 0$ alors les vecteurs colonnes de $W^\dagger Z$ ne sont pas linéairement indépendants, donc $\exists \alpha_i$ tels que $\sum_j \alpha_j \langle \phi_i | \psi_j \rangle = 0, \forall i$. Soit $|\tilde{\psi}\rangle = \sum_j \alpha_j |\psi_j\rangle, \forall \phi \in E_1$ on a $\langle \phi | \tilde{\psi} \rangle = 0$, et donc $\tilde{\psi} \in E_1^\perp$. On en conclut que $\det W^\dagger Z = 0 \Rightarrow E_1^\perp \cap E_2 \neq \{0\}$.

On suppose que $\exists \tilde{\psi} \in E_1^\perp \cap E_2, \tilde{\psi} \neq 0$. Puisque $(\psi_j)_j$ est une base orthonormale de E_2 on a $\tilde{\psi} = \sum_j \alpha_j |\psi_j\rangle$ avec $\alpha_j = \langle \psi_j | \tilde{\psi} \rangle$. Puisque $\tilde{\psi} \in E_1^\perp$ on a $\forall i, \langle \phi_i | \tilde{\psi} \rangle = 0$ et donc $\forall i \sum_j \alpha_j \langle \phi_i | \psi_j \rangle = 0$. Les vecteurs colonnes de $W^\dagger Z$ ne sont donc pas linéairement indépendants, ce qui prouve que $E_1^\perp \cap E_2 \neq \{0\} \Rightarrow \det W^\dagger Z = 0$. ■

Les deux distances sont donc associées aux deux notions d'incompatibilité quantique d'espaces actifs : deux espaces actifs sont incompatibles au sens fort s'ils sont orthogonaux (la probabilité d'obtenir les mêmes mesures expérimentales sur un système dans un état de E_1 et sur un système dans un état de E_2 est nulle), et incompatibles au sens faible si $E_1^\perp \cap E_2 \neq \{0\}$ (il existe un état de E_1 pour lequel la probabilité d'obtenir les mêmes résultats qu'avec un système dans un état de E_2 est nulle). Pour comprendre la différence géométrique entre ces deux distances, on considère le cas $n = 2$ et $M = 1$. On a alors $G_1(\mathbb{C}^2) = \mathbb{C}P^1 \simeq S^2$. L'espace des espaces actifs est la sphère. Dans ce cas les distances sont

$$\mathrm{dist}_{ch}(\phi, \psi) = \sqrt{2} \sqrt{1 - |\langle \psi | \phi \rangle|^2} \quad (3.172)$$

$$\mathrm{dist}_{FS}(\phi, \psi) = \arccos |\langle \psi | \phi \rangle| \quad (3.173)$$

Soit $\psi \in \mathbb{C}P^1$ un vecteur normé sans phase. On peut écrire

$$\psi = \begin{pmatrix} \sin \theta_1 e^{i\varphi_1} \\ \cos \theta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta_1 \cos \varphi_1 + i \sin \theta_1 \sin \varphi_1 \\ \cos \theta_1 \end{pmatrix} \quad (3.174)$$

On peut alors associer à ψ un vecteur \vec{v}_1 de \mathbb{R}^3 :

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} \sin \theta_1 \cos \varphi_1 \\ \sin \theta_1 \sin \varphi_1 \\ \cos \theta_1 \end{pmatrix} \quad (3.175)$$

On voit que le vecteur \vec{v}_1 trace la surface d'une sphère de rayon 1 (on a explicitement le difféomorphisme entre $\mathbb{C}P^1$ et S^2). Avec \vec{v}_2 associé de même avec ϕ , on a

$$\mathrm{dist}_{ch}(\psi, \phi) = \sqrt{2} \sqrt{1 - \vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2} = \|\vec{v}_1 - \vec{v}_2\| \quad (3.176)$$

$$\mathrm{dist}_{FS}(\psi, \phi) = \arccos \vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 \quad (3.177)$$

La distance de Fubini-Study est la distance sur la surface de la sphère alors que la distance cordale est la distance dans \mathbb{R}^3 , voir figure 3.1.

Propriété 9. *Les deux distances quantiques induisent la métrique Kählerienne de $G_M(\mathbb{C}^n)$.*

Preuve :

$$\mathrm{dist}_{ch}(Z, Z + dZ)^2 = 2(M - \mathrm{tr}(Z^\dagger(Z + dZ)(Z^\dagger + dZ^\dagger)Z)) \quad (3.178)$$

$$= 2(M - \mathrm{tr}((1 + Z^\dagger dZ)(1 + dZ^\dagger Z))) \quad (3.179)$$

$$= 2\mathrm{tr}(-Z^\dagger dZ - dZ^\dagger Z) - \mathrm{tr}(Z^\dagger dZ dZ^\dagger Z) \quad (3.180)$$

$$= 2\mathrm{tr}(dZ^\dagger dZ) - 2\mathrm{tr}(Z^\dagger dZ dZ^\dagger Z) \quad (3.181)$$

$$= 2d^2 \quad (3.182)$$

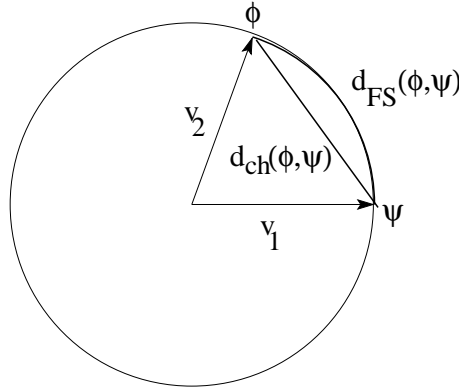


FIG. 3.1 – Comparaison entre la distance cordale et la distance de Fubini-Study sur $\mathbb{C}P^1 \simeq S^2$

on a utilisé la propriété $(Z^\dagger + dZ^\dagger)(Z + dZ) = 1 \iff dZ^\dagger dZ + Z^\dagger dZ + dZ^\dagger Z = 0$.
On rappelle que si $\|A\|$ est au voisinage de zero et si A est diagonalisable alors

$$\det(1 + A) = 1 + \text{tr}A + \frac{1}{2}((\text{tr}A)^2 - \text{tr}(A^2)) + \mathcal{O}(\|A\|^2) \quad (3.183)$$

alors

$$\cos \text{dist}_{FS}(Z, Z + dZ) = \det(1 + Z^\dagger dZ) \det(1 + dZ^\dagger Z) \quad (3.184)$$

$$\begin{aligned} &= (1 + \text{tr}Z^\dagger dZ + \frac{1}{2}(\text{tr}Z^\dagger dZ)^2 - \frac{1}{2}\text{tr}(Z^\dagger dZ)^2 + \mathcal{O}(\|dZ\|^3)) \\ &\quad \times (1 + \text{tr}dZ^\dagger Z + \frac{1}{2}(\text{tr}dZ^\dagger Z)^2 - \frac{1}{2}\text{tr}(dZ^\dagger Z)^2 \\ &\quad + \mathcal{O}(\|dZ\|^3)) \end{aligned} \quad (3.185)$$

$$\begin{aligned} &= 1 + \text{tr}Z^\dagger dZ + \text{tr}dZ^\dagger Z + (\text{tr}Z^\dagger dZ)(\text{tr}dZ^\dagger Z) + \frac{1}{2}(\text{tr}Z^\dagger dZ)^2 \\ &\quad - \frac{1}{2}\text{tr}(Z^\dagger dZ)^2 + \frac{1}{2}(\text{tr}dZ^\dagger Z)^2 - \frac{1}{2}\text{tr}(dZ^\dagger Z)^2 \\ &\quad + \mathcal{O}(\|dZ\|^3) \end{aligned} \quad (3.186)$$

$$= 1 - \text{tr}(dZ^\dagger dZ) - (\text{tr}Z^\dagger dZ)^2 + (\text{tr}dZ^\dagger Z)^2 - \text{tr}(Z^\dagger dZ)^2 + \mathcal{O}(\|dZ\|^3) \quad (3.187)$$

$$= 1 - \text{tr}(dZ^\dagger dZ) - \text{tr}(Z^\dagger dZ)^2 + \mathcal{O}(\|dZ\|^3) \quad (3.188)$$

$$\simeq 1 - dl^2 \quad (3.189)$$

Comme $\cos \text{dist}_{FS}(Z, Z + dZ) \simeq 1 - \frac{\text{dist}_{FS}(Z, Z + dZ)^2}{2}$ on a $\text{dist}_{FS}(Z, Z + dZ)^2 \simeq 2dl^2$. ■

Soit \mathcal{C} une géodésique pour la métrique dl^2 dans $G_M(\mathbb{C}^n)$ reliant Z et W alors

$$\int_{\mathcal{C}} dl = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{dist}_{FS}(Z, W) \quad (3.190)$$

$G_M(\mathbb{C}^n) \subset \mathcal{M}_{n \times n}(\mathbb{C})$. De plus WW^\dagger est auto-adjoint, donc $G_M(\mathbb{C}^n) \subset \mathbb{R}^{n^2}$ (un point \vec{v}_W de \mathbb{R}^{n^2} étant la liste des parties réelles et imaginaires des composantes $(WW^\dagger)_j^i$ pour $j \leq i$), $G_M(\mathbb{C}^n)$ est une sous-variété de cet espace, que l'on appellera espace universel généralisé. On équipe \mathbb{R}^{n^2} de

la métrique Euclidienne. Pour tout $WW^\dagger \in G_M(\mathbb{C}^n)$, comme $W^\dagger W = I_M$, on a

$$(WW^\dagger)_j^i (WW^\dagger)_i^j = W_j^\alpha \overline{W}_\alpha^i W_i^\beta \overline{W}_\beta^j \quad (3.191)$$

$$= \overline{W}_\alpha^i W_i^\beta \overline{W}_\beta^j W_j^\alpha \quad (3.192)$$

$$= \delta_\alpha^\beta \delta_\beta^\alpha \quad (3.193)$$

$$= M \quad (3.194)$$

d'où

$$\text{dist}_{ch}(WW^\dagger, ZZ^\dagger) = \sqrt{2} \sqrt{M - (W^\dagger ZZ^\dagger W)_\alpha^\alpha} \quad (3.195)$$

$$= \sqrt{2} \sqrt{M - \overline{W}_\alpha^i Z_i^\beta \overline{Z}_\beta^j W_j^\alpha} \quad (3.196)$$

$$= \sqrt{2M - 2(WW^\dagger)_j^i (ZZ^\dagger)_i^j} \quad (3.197)$$

$$= \sqrt{(WW^\dagger)_j^i (WW^\dagger)_i^j + (ZZ^\dagger)_j^i (ZZ^\dagger)_i^j - 2(WW^\dagger)_j^i (ZZ^\dagger)_i^j} \quad (3.198)$$

$$= \sqrt{(WW^\dagger - ZZ^\dagger)_i^j (WW^\dagger - ZZ^\dagger)_j^i} \quad (3.199)$$

$$= \sqrt{(\vec{v}_W - \vec{v}_Z) \cdot (\vec{v}_W - \vec{v}_Z)} \quad (3.200)$$

$$= \|\vec{v}_W - \vec{v}_Z\| \quad (3.201)$$

La distance cordale est donc la distance à travers l'espace universel généralisé Euclidien, alors que la distance de Fubini-Study est la distance sur la surface de $G_M(\mathbb{C}^n)$. Notons que les symétries de l'Hamiltonien peuvent réduire la taille de l'espace universel généralisé, car on peut ne considérer que les matrices $G_M(\mathbb{C}^n)$ de même symétrie.

3.4.5 Dynamique géodésique

On s'intéresse ici au sens des géodésiques de la métrique Kählerienne de $G_M(\mathbb{C}^n)$. Soit $\Psi(t) \in V_M(\mathbb{C}^n)$ telle que $\Psi(t) = (|\psi_1(t)\rangle, \dots, |\psi_M(t)\rangle)$ où $|\psi_a(t)\rangle$ est la solution de l'équation de Schrödinger pour la condition initiale $\psi_a(0)$ dans l'espace actif au temps $t = 0$. La forme de $\psi_a(t)$ par rapport à une base de l'espace actif se déformant est donnée par la formule de transport parallèle associée à la phase de Aharonov-Anandan non-abélienne. L'Hamiltonien $H(t)$ du système dynamique peut être considéré comme une matrice carrée d'ordre n . On a alors

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi \quad \Psi^\dagger \Psi = I_M \quad (3.202)$$

Généralisant de $\mathbb{C}P^{n-1}$ vers $G_M(\mathbb{C}^n)$, l'idée de Anandan et Aharonov [9] on a

$$\Psi(t + dt) = \Psi(t) + \frac{\partial \Psi}{\partial t} dt + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \frac{dt^2}{2} + \mathcal{O}(dt^3) \quad (3.203)$$

$$= \Psi - i\hbar^{-1} H\Psi dt - i\hbar^{-1} \left(\frac{\partial H}{\partial t} \Psi - i\hbar^{-1} H^2 \Psi \right) \frac{dt^2}{2} + \mathcal{O}(dt^3) \quad (3.204)$$

$$\Psi(t)^\dagger \Psi(t + dt) = 1 - i\hbar^{-1} \Psi^\dagger H\Psi dt - i\hbar^{-1} \Psi^\dagger \frac{\partial H}{\partial t} \Psi \frac{dt^2}{2} - \hbar^{-2} \Psi^\dagger H^2 \Psi \frac{dt^2}{2} + \mathcal{O}(dt^3) \quad (3.205)$$

$$|\det \Psi(t)^\dagger \Psi(t + dt)|^2 = 1 - \hbar^{-2} \text{tr}(\Psi^\dagger H^2 \Psi) dt^2 - \hbar^{-2} (\text{tr} \Psi^\dagger H\Psi)^2 dt^2 + \hbar^{-2} \text{tr}(\Psi^\dagger H\Psi)^2 dt^2 + \hbar^{-2} (\text{tr} \Psi^\dagger H\Psi)^2 dt^2 + \mathcal{O}(dt^3) \quad (3.206)$$

$$= 1 - \hbar^{-2} \text{tr}(\Psi^\dagger H^2 \Psi) dt^2 + \hbar^{-2} \text{tr}(\Psi^\dagger H\Psi)^2 dt^2 + \mathcal{O}(dt^3) \quad (3.207)$$

d'où

$$dl^2 = \frac{\hbar^{-2}}{2} (\text{tr}(\Psi^\dagger H^2 \Psi) - \text{tr}(\Psi^\dagger H \Psi)^2) \quad (3.208)$$

$$= \frac{\hbar^{-2}}{2} \sum_{a=1}^M \left(\langle \psi_a | H^2 | \psi_a \rangle - \sum_{b=1}^M |\langle \psi_a | H | \psi_b \rangle|^2 \right) dt^2 \quad (3.209)$$

$$= \frac{\hbar^{-2}}{2} \left(\sum_{a=1}^M \Delta_a E^2 - 2 \sum_{a=1}^M \sum_{b < a} |\langle \psi_b | H | \psi_a \rangle|^2 \right) dt^2 \quad (3.210)$$

On peut interpréter $\Delta_I E^2 = \sum_a \Delta_a E^2 - 2 \sum_a \sum_{b < a} |\langle \psi_b | H | \psi_a \rangle|^2$ comme l'incertitude globale sur l'énergie dans l'espace actif. Notons que cette formule diffère de la formule usuelle de l'incertitude totale : $\Delta E^2 = \sum_a \Delta_a E^2 - 2 \sum_a \sum_{b < a} \langle \psi_a | H | \psi_a \rangle \langle \psi_b | H | \psi_b \rangle$. Soit $\overline{\Delta_I E} = \frac{1}{\Delta T} \int_0^{\Delta T} \Delta_I E dt$, on a la relation

$$\overline{\Delta_I E} \Delta T = \hbar \int_0^{\Delta T} \sqrt{2} \frac{dl}{dt} dt = \hbar \text{dist}_{FS}(\Psi(0), \Psi(\Delta T)) \quad (3.211)$$

si la dynamique suit une géodésique entre 0 et ΔT . Comme on l'a déjà dit, deux espaces actifs S_1 et S_2 sont quantiquement séparés (au sens faible) si $S_2 \cap S_1^\perp \neq \{0\} \iff \text{dist}_{FS}(S_1, S_2) = \frac{\pi}{2}$. Si ΔT désigne la durée nécessaire pour que l'espace actif se déformant auquel appartient $\Psi(t)$, c'est à dire $S(t)$, change significativement (durée nécessaire pour séparer $S(0)$ de $S(\Delta T)$), alors on a la relation d'incertitude de Heisenberg temps-énergie suivante

$$\overline{\Delta_I E} \Delta T \geq \frac{\pi \hbar}{2} \quad (3.212)$$

Le minimum de cette relation d'incertitude est obtenue pour une dynamique suivant une géodésique dans $G_M(\mathbb{C}^n)$.

3.4.6 Classification universelle

Le fibré des espaces actifs $\mathcal{U} = (V_M(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), U(M), \pi_U)$ est un fibré $2n(n-M)$ -universel. On considère aussi le fibré adiabatique $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, U(M), \pi_P)$ associé au transport adiabatique dégénéré. Si la variété des paramètres adiabatiques \mathcal{M} a une structure d'espace cellulaire d'ordre inférieur à $2n(n-M)$, on a, de par le théorème de classification universelle (cf. annexe B), le diagramme commutatif suivant

$$\begin{array}{ccc} P & \xleftarrow{f^*} & V_M(\mathbb{C}^n) \\ \pi_P \downarrow & & \downarrow \pi_U \\ \mathcal{M} & \xrightarrow{f} & G_M(\mathbb{C}^n) \end{array}$$

En remarquant que $G_M(\mathbb{C}^n)$ peut être assimilé à l'ensemble des projecteurs orthogonaux d'ordre M de \mathbb{C}^n , l'application universelle est

$$f : \begin{array}{l} \mathcal{M} \rightarrow G_M(\mathbb{C}^n) \\ \vec{R} \mapsto P(\vec{R}) = \sum_{a=1}^M |a, \vec{R}\rangle \langle a, \vec{R}| \end{array}$$

ou en introduisant la matrice $T(\vec{R})$ des vecteurs propres de H générant l'espace actif adiabatique, on a l'expression matricielle

$$f : \begin{array}{l} \mathcal{M} \rightarrow G_M(\mathbb{C}^n) \\ \vec{R} \mapsto T(\vec{R}) T^\dagger(\vec{R}) \end{array}$$

Remarque : dans la section consacrée à la structure géométrique du transport adiabatique non-abélien, on a identifié les points de P à des matrices, cette identification n'est autre que l'application f_* .

Il est important de remarquer le cas spécial où l'espace actif adiabatique est un sous-espace propre associé à une unique valeur propre dégénérée. Ce cas a été étudié par Bohm et Mostafazadeh dans [21], où la relation entre phase de Berry non-abélienne standard (associée à une unique valeur propre) et phase de Aharonov-Anandan a été découverte (cette section est une généralisation aux problèmes des espaces actifs de ce travail). Soit $\Psi(t) \in V_M(\mathbb{C}^n)$ la matrice des solutions de l'équation de Schrödinger pour toutes les conditions initiales pures, pour l'instant sans supposer l'adiabaticité. Soit $P_\Psi(t) = \Psi(t)\Psi(t)^\dagger = \pi_U(\Psi(t)) \in G_M(\mathbb{C}^n)$ le projecteur sur l'espace actif engendré par les M fonctions d'onde. On a alors

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi \quad (3.213)$$

$$-i\hbar \frac{d\Psi^\dagger}{dt} = \Psi^\dagger H^\dagger \quad (3.214)$$

d'où

$$i\hbar \frac{dP_\Psi}{dt} = i\hbar \frac{d\Psi}{dt} \Psi^\dagger + i\hbar \Psi \frac{d\Psi^\dagger}{dt} \quad (3.215)$$

$$= H\Psi\Psi^\dagger - \Psi\Psi^\dagger H \quad (3.216)$$

$$= [H, P_\Psi] \quad (3.217)$$

On voit donc que P_Ψ doit satisfaire à l'équation de Schrödinger-von Neumann $i\hbar \frac{dP_\Psi}{dt} = [H(t), P_\Psi(t)]$. Si on suppose l'hypothèse adiabatique, on a alors $P_\Psi(t) = f(\vec{R}(t)) = T(\vec{R}(t))T(\vec{R}(t))^\dagger = P(\vec{R}(t))$. Or $HP = EP$ et $PH = PE$ où E est la matrice diagonale des valeurs propres sélectionnées par le théorème adiabatique. d'où $[H, P] = [E, P]$. Mais si le théorème adiabatique, ne sélectionne qu'une seule valeur propre E_n , on a $[H, E_n] = 0$ et donc P_Ψ est indépendant du temps. Ce problème est interprété par Bohm et Mostafazadeh comme le fait qu'il n'existe pas rigoureusement, à part les systèmes stationnaires, de système adiabatique pur⁵ (par "pur" on entend ne faisant intervenir qu'une unique valeur propre). Pour résoudre ce problème, Bohm et Mostafazadeh introduisent une application différentiable $F : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$, modélisant l'approximation faite par l'hypothèse adiabatique, et posent comme nouvelle application universelle $\tilde{f} = f \circ F$, [21].

Dans les cas qui nous intéressent en photodynamique, l'hypothèse adiabatique porte sur plusieurs valeurs propres distinctes. Cette hypothèse est aussi en général une approximation, mais généralement beaucoup moins grossière que l'approximation adiabatique pure. En particulier elle ne produit pas de problème aussi drastique (en général $[P, E] \neq 0$). Néanmoins, il est possible comme le font Bohm et Mostafazadeh, d'introduire une application F (que nous appellerons application de Bohm-Mostafazadeh) qui modélise l'approximation. Si la dimension de l'espace actif est suffisante, F est presque égale à l'identité. Dans la partie II on introduira une mesure de l'adiabaticité fonction de la dimension de l'espace actif, qui permet de nous assurer que cette dimension est suffisante.

L'application f va nous permettre de munir la variété de contrôle, d'une métrique naturelle. En effet \mathcal{M} n'est pas à l'origine munie d'une telle métrique (c'est une variété "molle"). Considérons, par exemple, que les paramètres de contrôle sont l'amplitude E et la fréquence ω d'un laser. La norme Euclidienne du vecteur $\vec{R} = (E, \omega)$ n'a pas de sens physique, $\|\vec{R}\| = \sqrt{E^2 + \omega^2}$, puisqu'on ajoute des quantités qui sont de natures physiques différentes. Par contre en munissant \mathcal{M} du pull-back

⁵Bohm et Mostafazadeh n'emploient pas l'adjectif "pur", puisqu'ils utilisent le terme adiabatique au sens orthodoxe, ici on ajoute ce qualificatif car on étend l'usage du terme adiabatique aux cas où plusieurs valeurs propres interviennent

de η (la métrique Kählerienne de $G_M(\mathbb{C}^n)$) on muni \mathcal{M} d'une métrique qui mesure la distance quantique parcourue par le système, lorsqu'on fait varier les paramètres de contrôle. On rappelle que

$$\eta = d\bar{Z}_\alpha^i dZ_i^\alpha - d\bar{Z}_\alpha^i Z_i^\beta \bar{Z}_\beta^j dZ_j^\alpha \quad (3.218)$$

d'où la métrique de \mathcal{M}

$$f^*\eta = \frac{\partial \bar{T}_\alpha^i}{\partial R^\mu} \frac{\partial T_i^\alpha}{\partial R^\nu} dR^\mu dR^\nu - T_i^\beta \bar{T}_\beta^j \frac{\partial \bar{T}_\alpha^i}{\partial R^\mu} \frac{\partial T_j^\alpha}{\partial R^\nu} dR^\mu dR^\nu \quad (3.219)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\alpha=1}^M \frac{\partial \langle \alpha, \vec{R} |}{\partial R^\mu} \frac{\partial | \alpha, \vec{R} \rangle}{\partial R^\nu} dR^\mu dR^\nu \\ &\quad - \sum_{\alpha, \beta=1}^M \overline{\langle \beta, \vec{R} | \frac{\partial}{\partial R^\mu} | \alpha, \vec{R} \rangle} \langle \beta, \vec{R} | \frac{\partial}{\partial R^\nu} | \alpha, \vec{R} \rangle dR^\mu dR^\nu \end{aligned} \quad (3.220)$$

Le champ de formes bilinéaires $f^*\eta$ est bien une métrique (définie positive en tout point) si f est une immersion de \mathcal{M} dans $G_M(\mathbb{C}^n)$, si ce n'est pas le cas, on aura des vecteurs tangents isotropes qui indiqueront des directions de variations des paramètres de contrôle n'ayant aucun effet. Un chemin de points distincts dans \mathcal{M} , pourrait alors être de "longueur" nulle, traduisant le fait que tout au long de ce chemin l'espace actif n'a pas changé, et donc que cette variation des paramètres est sans efficacité. $f^*\eta$ apporte donc toujours des informations physiques sur le système photodynamique. Dans la suite, même quand f n'est pas une immersion, on fera l'abus de langage consistant à appeler $f^*\eta$ métrique (abus fort courant en physique, puisqu'en relativité, la métrique de Minkowski et toutes les métriques solutions de l'équation d'Einstein de la relativité générale, ne sont pas définies positives et ne sont donc pas rigoureusement des métriques).

À partir de ce point, on peut donner une théorie générale des espaces actifs se déformant comme étant la donnée d'une application f d'une variété \mathcal{M} vers $G_M(\mathbb{C}^n)$. \mathcal{M} étant la variété des paramètres avec lesquels se déforme l'espace actif, c'est l'interprétation physique du modèle. f est alors la fonction qui associe à un point de \mathcal{M} , l'espace actif correspondant, f relie le système quantique (décrit par $G_M(\mathbb{C}^n)$) au dispositif expérimental (décrit par \mathcal{M}). Le problème est de trouver explicitement l'espace actif (trouver une base) et avoir une interprétation physique de \mathcal{M} . C'est le grand intérêt de l'hypothèse adiabatique qui nous fournit directement le couple (\mathcal{M}, f) . Mais d'autres cas sont envisageables.

3.5 Géométrie de la mécanique quantique IV : cas des systèmes dissipatifs

Dans les sections précédentes, on s'est restreint au cas des systèmes conservatifs. La modification de la structure géométrique des espaces actifs au cas d'un système dissipatif est donnée dans cette section.

3.5.1 Le modèle universel dissipatif

Le fibré universel associé aux fibrés principaux de groupe $GL(M, \mathbb{C})$ est $(V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$ où $G_M(\mathbb{C}^n)$ est toujours la Grassmannienne complexe et $V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n)$ est la variété de Stiefel complexe non-compacte. On notera que

$$V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) \simeq V_M(\mathbb{C}^n) \times T(M, \mathbb{C}) \quad (3.221)$$

où $V_M(\mathbb{C}^n) \simeq U(n)/U(n-M)$ est la variété de Stiefel complexe compacte et $T(M, \mathbb{C})$ est la variété des matrices triangulaires supérieures d'ordre M à éléments diagonaux positifs. On notera que $V_1^{\mathcal{U}}(\mathbb{C}^n) = \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$. Le passage du fibré universel conservatif $(V_M(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), U(M), \pi_U)$ vers le fibré universel dissipatif $(V_M^{\mathcal{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$ se fait par extension⁶ de groupe $U(M) \subset GL(M, \mathbb{C})$. Rappelons le principe de l'extension, soit G un groupe et H un sous-groupe de G . Soit (Q, M, H, π_Q) un fibré principal. L'extension de groupe de ce fibré est (P, M, G, π_P) avec

$$P = Q \times_H G \quad (3.222)$$

où H agit à gauche sur Q par action canonique et à droite sur G par la loi de groupe ($g \mapsto hg$). On a bien en effet $V_M^{\mathcal{U}}(\mathbb{C}^n) = V_M(\mathbb{C}^n) \times_{U(M)} GL(M, \mathbb{C})$ en considérant le théorème suivant.

Théorème 5 (Théorème de décomposition polaire). *Soit \mathcal{H} un espace de Hilbert et V un opérateur borné de \mathcal{H} . Alors il existe une isométrie partielle U ($U \in \mathcal{U}(\ker U^\perp)$) telle que*

$$V = U|V| \quad |V| = \sqrt{V^\dagger V} \quad (3.223)$$

avec $\ker U = \ker V$.

Preuve : cf. [124] ■

Soit $V(t, 0)$ l'opérateur d'évolution du système dissipatif, $V(t, 0) \in GL(M, \mathbb{C}) \Rightarrow V$ est inversible $\Rightarrow \ker V = \{0\} \Rightarrow \ker U = \{0\} \Rightarrow U \in U(M)$. L'évolution dissipative $V(t, 0)$ correspond bien à une évolution conservative $U(t, 0)$ (évolution interne à l'espace de configuration V_1), à laquelle on adjoint un opérateur de propagation de V_1 vers V_2 qui modélise la fuite du flux quantique en dehors de V_1 .

3.5.2 Groupe compact vs groupe non-compact

Considérons le groupe

$$H = \{U(t, 0), t \in \mathbb{R}\} \quad (3.224)$$

H est un sous-groupe de G (avec $G = U(M)$ si le système est conservatif ou $G = GL(M, \mathbb{C})$ si il est dissipatif). On s'intéresse également à l'espace géométrique des états du système, $\mathcal{V} = V_M(\mathbb{C}^n)$ pour un système conservatif ou $\mathcal{V} = V_M^{\mathcal{U}}(\mathbb{C}^n)$ pour un système dissipatif.

On s'intéresse à la notion physique d'états liés et d'états se propageant. Cette notion est bien définie dans le cas d'un Hamiltonian indépendant du temps ; un état est lié si c'est un état propre associé à une valeur propre du spectre discret, c'est un état se propageant si il est associé au spectre essentiel. Pour un système dynamique avec un Hamiltonien dépendant du temps, la notion d'états liés ou d'états se propageant dépend de l'évolution dans le temps de cet état. Ainsi dans le modèle Hilbertien de dimension infinie de la mécanique quantique, un état ψ est lié dans le futur, si pour une suite $(P_n)_{n \in \mathbb{N}}$ d'opérateurs bornés convergeant fortement vers 1, on a

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \sup_{t > 0} \|(1 - P_n)U(t, 0)\psi\| = 0 \quad (3.225)$$

de même un état ψ se propage si

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|P_n U(t, 0)\psi\| dt = 0 \quad (3.226)$$

En général le caractère lié ou se propageant d'un vecteur dépend de la suite $(P_n)_n$ choisie⁷. Dans notre modèle adiabatique, pour des raisons évidentes de cohérence, on souhaite une définition qui soit géométrique et non plus analytique. On adopte alors la définition suivante

⁶certains auteurs disent élargissement

⁷cette suite peut être vue comme une suite de projecteurs associés aux mesures expérimentales faites sur le système afin de déterminer à chaque instant l'état de celui-ci

Définition 5 (Définition géométrique des états liés). Soit \mathcal{V} la variété décrivant l'espace des états du système. Un état $\psi_0 \in \mathcal{V}$ est dynamiquement lié si la sous-variété de \mathcal{V}

$$\overline{\{U(t, 0)\psi_0, t \in \mathbb{R}\}} = \overline{H\psi_0} \quad (3.227)$$

est compacte⁸. Le surlignage signifiant la fermeture topologique dans la topologie de \mathcal{V} . ψ_0 est dit se propageant si $\overline{H\psi_0}$ est non-compact.

Si l'orbite dynamique de ψ_0 est compacte, c'est en quelque sorte comme si $\psi(t)$ ne s'éloignait "pas trop" de ψ_0 , ce que l'on peut bien considérer comme un état lié. Cette définition est en accord avec le cas stationnaire. Soit $E \in \mathbb{R}$ une valeur propre indépendante du temps à laquelle est associée ψ_0 comme vecteur propre. $H\psi_0 = \{e^{-i\hbar^{-1}Et}\psi_0\}_{t \in \mathbb{R}} = \{e^{-i\hbar^{-1}Et}\psi_0\}_{t \in [0, \hbar/E]} \subset S^{2N-1}$ est compacte car on peut la recouvrir par le système de deux cartes $[-\epsilon, \frac{\hbar}{2E} + \epsilon[$, $]\frac{\hbar}{2E} - \epsilon, \frac{\hbar}{E} + \epsilon]$. A l'inverse, si $E - i\frac{\Gamma}{2}$ est une valeur propre (continuum après application des potentiels optiques), $\overline{H\psi_0} = \{e^{-\frac{\hbar^{-1}}{2}\Gamma t} e^{-i\hbar^{-1}Et}\psi_0\}_{t \in \mathbb{R}} \subset \mathbb{C}^N \setminus \{0\}$ n'est pas compacte.

Rappelons la propriété suivante des systèmes dynamiques quantiques :

Propriété 10. Soient

$$\mathcal{M}_{\pm}^{bd}(P_n) = \{\psi \in \mathcal{H}, \lim_{n \rightarrow +\infty} \sup_{t \geq 0} \|(1 - P_n)U(t, 0)\psi\| = 0\} \quad (3.228)$$

$$\mathcal{H}_{\pm}^p = \{\psi \in \mathcal{H}, \overline{\{U(t, 0)\psi, t \geq 0\}} \text{ est compact}\} \quad (3.229)$$

dans cette dernière expression la fermeture topologique est prise dans la topologie forte de \mathcal{H} . Si $(P_n)_n$ est une suite d'opérateurs relativement compacte⁹ par rapport à $U(t, 0)$, alors

$$\mathcal{H}_{\pm}^p = \mathcal{M}_{\pm}^{bd}(P_n) \quad (3.230)$$

Dans le cas qui nous intéresse, où on se restreint à l'espace actif de dimension M , il est judicieux de choisir (P_n) comme une suite d'opérateurs de l'espace actif. (P_n) étant alors une suite d'opérateurs de rang fini (et donc compact), elle est donc automatiquement relativement compacte à $U(t, 0)$. Ainsi les états, tels que $\overline{\{U(t, 0)\psi, t \in \mathbb{R}\}}$ soit compact, sont des états liés. De plus, la topologie de \mathcal{V} étant induite par la topologie forte de \mathcal{H} par passage au quotient, la définition géométrique des états liés coïncide avec la définition analytique. On peut de plus montrer que l'ensemble des états satisfaisant à la définition analytique des états se propageant $\mathcal{M}_{\pm}^f(P_n)$ est le supplémentaire orthogonal de $\mathcal{M}_{\pm}^{bd}(P_n)$, ce qui montre que les définitions analytique et géométrique des états se propageant coïncident.

Dans le cas d'un système conservatif, \overline{H} est un sous-groupe fermé de G , G est compact donc \overline{H} l'est aussi (tout sous-espace fermé d'un compact est compact). On a alors $\overline{H}\psi_0 \simeq \overline{H}/J$ qui est toujours compact¹⁰, J étant le sous-groupe d'isotropie de ψ_0 . Ainsi tous les états sont liés. Ce qui n'est pas le cas pour G non-compact. Notons que pour un système dissipatif, on a possiblement $\lim_{t \rightarrow +\infty} \psi(t) = 0$, or l'état nul 0 ne fait pas partie de la variété de Stiefel, ψ converge alors en dehors de $V_M^{\cup}(\mathbb{C}^n)$, d'où la non-compactité de $\overline{H}\psi_0$.

⁸de manière équivalente, ψ_0 est un état lié si il existe K un compact de \mathcal{V} tel que $H\psi_0 \subset K$

⁹ (P_n) est relativement compacte à $U(t, 0)$ si $\forall t, \forall \psi \in \mathcal{H}, \forall n \in \mathbb{N}, \overline{\{P_n U(t, 0)\psi, t \in \mathbb{R}\}}$ est compact. La fermeture topologique étant dans la topologie forte de \mathcal{H} .

¹⁰ $f : E \rightarrow F$ continue alors si E est compact $f(E)$ est compact, la projection canonique $\overline{H} \rightarrow \overline{H}/J$ est une application continue

3.5.3 Classification universelle

Le fibré $\mathcal{U}^{\mathbb{U}} = (V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$ étant universel, il existe f liant le fibré des espaces actifs d'une dynamique dissipative, au fibré adiabatique dissipatif $\mathcal{P}^{\mathbb{U}} = (P^{\mathbb{U}}, \mathcal{M}, GL(M, \mathbb{C}^n), \pi_P)$:

$$\begin{array}{ccc} P^{\mathbb{U}} & \xleftarrow{f^*} & V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) \\ \pi_P \downarrow & & \downarrow \pi_U \\ \mathcal{M} & \xrightarrow{f} & G_M(\mathbb{C}^n) \end{array}$$

avec

$$f : \begin{array}{l} \mathcal{M} \rightarrow G_M(\mathbb{C}^n) \\ \vec{R} \mapsto \sum_{a=1}^M |a, \vec{R}\rangle \langle a^*, \vec{R}| \end{array}$$

ou avec les notations matricielles

$$f : \begin{array}{l} \mathcal{M} \rightarrow G_M(\mathbb{C}^n) \\ \vec{R} \mapsto T(\vec{R})T^{-1}(\vec{R}) \end{array}$$

On équipe le fibré $\mathcal{U}^{\mathbb{U}} = (V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$ de la connexion définie par le potentiel de jauge $A_{\mathcal{U}}(ZZ^{-1}) = Z^{-1}dZ \in \Omega^1(G_M(\mathbb{C}^n), \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C}))$ avec $Z \in V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n)$ considéré comme un ensemble de matrices. On a bien $A_{\mathcal{P}}(\vec{R}) = T^{-1}(\vec{R})d_{\mathcal{M}}T(\vec{R}) = f^*A_{\mathcal{U}}$. Le choix de $A_{\mathcal{U}}$ est, comme le montre le résultat suivant, tout à fait naturel.

Théorème 6. *La connexion de $(V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$ définie par le potentiel de jauge $A = Z^{-1}dZ$ est une connexion universelle pour les fibrés à groupe structural $GL(M, \mathbb{C})$.*

Preuve :

Pour démontrer ce fait, on a besoin d'un résultat issu de la démonstration du théorème 1 réf. [115].

Théorème 7 (Théorème de Narasimhan-Ramanan pour les fibrés principaux à groupe non-compact). *Soit G un groupe de Lie connexe. Soit \mathcal{F} un G -fibré principal k -universel d'espace total F équipé d'une connexion de 1-forme $\gamma_1 \in \Omega^1(F, \mathfrak{g})$. Soit \mathcal{E} un autre G -fibré principal d'espace total E et $\alpha_0 \in \Omega_{\mathbb{B}}^1(E, \mathfrak{g})$ une forme basique de \mathcal{E} (une forme $Ad(G)$ -équivariante horizontale). Soit $\mathcal{B} = \mathcal{F} \times \mathcal{E}$ le fibré principal produit direct ($B = E \times F$ avec l'action de groupe $(e, f)g = (eg, fg)$). Soient $\text{Pr}_1 : E \times F \rightarrow E$ et $\text{Pr}_2 : E \times F \rightarrow F$ les projections canoniques. Alors $\gamma^0 = \text{Pr}_1^*\gamma_1 + \text{Pr}_2^*\alpha_0$ est une connexion universelle.*

On rappelle que $V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) = V_M(\mathbb{C}^n) \times_{U(M)} GL(M, \mathbb{C})$. Soit q la projection $V_M(\mathbb{C}^n) \times GL(M, \mathbb{C}) \rightarrow V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n)$. On a alors

$$q_* : T_{(x,g)}(V_M(\mathbb{C}^n) \times GL(M, \mathbb{C})) \simeq T_x V_M(\mathbb{C}^n) \oplus T_g GL(M, \mathbb{C}) \rightarrow T_{q(x,g)} V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) \quad (3.231)$$

Or

$$T_x V_M(\mathbb{C}^n) = H_x V_M(\mathbb{C}^n) \oplus V_x V_M(\mathbb{C}^n) \simeq H_x V_M(\mathbb{C}^n) \oplus \mathfrak{u}(M) \quad (3.232)$$

ici $H_x V_M(\mathbb{C}^n)$ est l'espace tangent horizontal de la connexion universelle de $(V_M(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), U(M), \pi_U)$. De même $T_g GL(M, \mathbb{C}) \simeq \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C})$. $\text{Im} q_* = T_{q(x,g)} V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n)$ car q définit $V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n)$. q est la projection associée à la relation d'équivalence dans $V_M(\mathbb{C}^n) \times GL(M, \mathbb{C})$, $(x, g) \sim (xh, h^{-1}g)$ avec $h, g \in GL(M, \mathbb{C}^n)$ et $x \in V_M(\mathbb{C}^n)$. La relation d'équivalence induite dans $TV_M(\mathbb{C}^n) \oplus TGL(M, \mathbb{C})$ est $(u, X) \sim (u+Y, X-Y)$ avec $u \in TV_M(\mathbb{C}^n)$ et $X, Y \in \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C})$. D'où si $X \in \mathfrak{u}(M) \simeq VV_M(\mathbb{C}^n)$ et $Y \in \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C})$, $(X, Y) \sim (X-Y, 0)$. En introduisant j l'injection canonique de $\mathfrak{u}(M)$ dans $\mathfrak{gl}(M, \mathbb{C})$, on a

$$q_* : \begin{array}{l} \mathfrak{u}(M) \oplus \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C}) \rightarrow \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C}) \\ X \oplus Y \mapsto j(X) + Y \end{array}$$

$q_*(\mathfrak{u}(M) \oplus \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C})) = \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C})$. On a donc $T_{q(x,g)} V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) \simeq q_* H_x V_M(\mathbb{C}^n) + \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C})$. $\ker q_* = \{X \oplus j(-X), X \in \mathfrak{u}(M)\} \subset \mathfrak{u}(M) \oplus \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C})$. On introduit alors le résultat suivant.

Soient $f : E \rightarrow F$ une application linéaire entre deux espaces vectoriels telle que $f(E) = F$, $E = V_1 \oplus V_2$ et $\ker f \subset V_2$. On a $F = f(V_1) + f(V_2)$. Soit $x \in f(V_1) \cap f(V_2)$. $\exists y_1 \in V_1$ tel que $f(y_1) = x$ et $\exists y_2 \in V_2$ tel que $f(y_2) = x$. D'où $f(y_1) - f(y_2) = 0 \Rightarrow f(y_1 - y_2) = 0 \Rightarrow y_1 - y_2 \in \ker f \Rightarrow y_1 \in \ker f + V_2 = V_2$ car $\ker f \subset V_2$. D'où $y_1 \in V_1 \cap V_2 = \{0\}$, $y_1 = 0$ donc $x = f(y_1) = 0$. On en déduit que $f(V_1) \cap f(V_2) = \{0\}$ et donc $F = f(V_1) \oplus f(V_2)$.

En utilisant ce résultat, on a $T_{q(x,y)}V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) \simeq q_*H_xV_M(\mathbb{C}^n) \oplus \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C})$. On peut donc poser $H_{q(x,g)}V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) = q_*H_xV_M(\mathbb{C}^n)$.

Soit $\omega = \pi_U^*A \in \Omega^1(V_M(\mathbb{C}^n), \mathfrak{u}(M))$ où A est le potentiel de jauge de la connexion universelle de $(V_M(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), U(M), \pi_U)$. ω est une forme horizontale (puisque si (P, M, G, π) est un fibré principal $\pi^*\Omega^*M \subset \Omega_{i=0}^*P$). Soit $g \in GL(M, \mathbb{C})$ la trivialisatation locale d'une section ϕ de $(V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$. On introduit le résultat suivant [115] :

Corollaire 1. *Soit H un sous-groupe de G . P un H -fibré principal et Q son extension de groupe. Soit la projection de l'extension $q : P \times G \rightarrow P \times_H G = Q$ et $i : P \rightarrow Q$ telle que $i(x) = q(x, e)$ (e identité de G). Soit $\alpha \in \Omega^*(P, \mathfrak{h})$ une forme $Ad(H)$ -équivariante. Alors $\alpha'_{(x,g)} = Ad(g^{-1})(Pr_1^*\alpha)_{x,g} \in \Omega^*(P \times G, \mathfrak{g})$ est une forme $Ad(G)$ -équivariante. Il existe $\tilde{\alpha} \in \Omega^*(Q, \mathfrak{g})$ $Ad(G)$ -équivariante telle que $q^*\tilde{\alpha} = \alpha$ ($\tilde{\alpha}_{q(x,g)}(\{q_*X_i\}) = \alpha_{x,g}(\{X_i\})$ avec $X_i \in T_{(x,g)}(Q \times G)$).*

D'où $g^{-1}\tilde{\omega}g \in \Omega^1(V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C}))$ est $Ad(GL(M, \mathbb{C}))$ -équivariante avec $\tilde{\omega}_{q(x,g)}(q_*X) = \omega_x(X)$ et $X \in T_xV_M(\mathbb{C}^n)$ ($q^*\tilde{\omega} = \omega$). Donc $g^{-1}\tilde{\omega}g$ est basique.

Soit $\alpha_0 = g^{-1}d_Vg$ (où d_V est la différentielle extérieure de $V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n)$). α_0 est par construction $Ad(GL(M, \mathbb{C}))$ -équivariante et verticale, c'est donc une 1-forme de connexion pour $(V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$ (la connexion plate). Or d'après le théorème cité en début de démonstration $Pr_1^*g^{-1}d_Vg + Pr_2^*g^{-1}\tilde{\omega}g$ est une connexion universelle dans $\mathcal{U}^{\mathbb{U}} \times \mathcal{U}^{\mathbb{U}}$. Soit $k : V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) \times V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) \rightarrow V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n)$ la projection de la relation d'équivalence $\forall x, y$ appartenant à la même fibre de $V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n)$, $(x, y) \sim (xg, yg^{-1})$, $g \in GL(M, \mathbb{C})$. La 1-forme de connexion κ telle que $k^*\kappa = Pr_1^*g^{-1}d_Vg + Pr_2^*g^{-1}\tilde{\omega}g$ est une connexion universelle dans $(V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$ avec $\ker \kappa_{q(x,g)} = H_{q(x,g)}V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) = q_*H_xV_M(\mathbb{C}^n)$. Soit σ la section de $(V_M(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), U(M), \pi_U)$ avec laquelle on définit A , soit la section τ de $(V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$ définie par $\forall x \in G_M(\mathbb{C}^n)$, $\tau(x) = \phi(x)\sigma(x)$. Le potentiel de jauge de la connexion universelle κ pour cette section est alors

$$A^{\mathbb{U}} = \kappa \circ \tau_* = g^{-1}Ag + g^{-1}d_Gg = g^{-1}Z^\dagger dZg + g^{-1}d_Gg = (Zg)^{-1}d(Zg) \quad (3.233)$$

où d_G est la différentielle extérieure de $G_M(\mathbb{C}^n)$, $Z \in V_M(\mathbb{C}^n)$ et $Zg \in V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n)$. ■

3.6 Comparaison des systèmes dynamiques quantiques et des systèmes dynamiques classiques

Dans cette partie, on montre que la formulation géométrique des systèmes dynamiques quantiques, introduite dans les sections précédentes, est très analogue à la théorie des systèmes dynamiques classiques.

3.6.1 Rappels sur les systèmes dynamiques classiques

On considère un système dynamique classique, d'espace de configuration \mathcal{R} . L'espace total du fibré tangent à \mathcal{R} , $T\mathcal{R}$, est l'espace des phases \mathcal{S} du système dynamique classique. On munit \mathcal{S} du système de coordonnées $(q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n)$, que l'on notera pour simplifier (q, p) ; p_i étant le moment conjugué de q^i . \mathcal{S} a une structure de variété symplectique, c'est à dire que $\dim \mathcal{S}$ est paire et il existe une 2-forme $\omega \in \Omega^2\mathcal{S}$, fermée et non-dégénérée, i.e. $d\omega = 0$ et $\det(\omega^i_j) \neq 0$ (ω^i_j étant la matrice carrée des composantes de la 2-forme ω). ω porte le nom de forme symplectique de \mathcal{S} . Dans le cas usuel d'un système de n particules matérielles, $\mathcal{S} = \mathbb{R}^{2n}$, et on équipe \mathcal{S} de λ , appelée

1-forme de Poincaré, et définie par

$$\lambda = p_i dq^i \quad (3.234)$$

La 2-forme de Poincaré $\omega = d\lambda$ est la forme symplectique de \mathcal{S} .

$$\omega = dp_i \wedge dq^i \quad (3.235)$$

L'espace des observables du système dynamique classique est $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{S}, \mathbb{C})$, qui est équipé du crochet de Poisson :

$$\forall f, g \in \mathcal{C}^\infty(\mathcal{S}, \mathbb{C}) \quad \{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial q^i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q^i} \quad (3.236)$$

Soit $\mathcal{H}(q, p) \in \mathcal{C}^\infty(\mathcal{S}, \mathbb{C})$, l'Hamiltonien du système dynamique classique, supposé dans un premier temps indépendant du temps. Soit $X(t) = X^i(t) \frac{\partial}{\partial q^i} + X_i(t) \frac{\partial}{\partial p_i} \in T\mathcal{S}$, le champ de vecteurs tangents à une courbe $t \mapsto (q(t), p(t))$ de \mathcal{S} .

$$\frac{dq^i}{dt} = X^i \quad \frac{dp_i}{dt} = X_i \quad (3.237)$$

$t \mapsto (q(t), p(t))$ est solution des équations de Hamilton, i.e.

$$\frac{dq^i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^i} \quad (3.238)$$

si et seulement si X satisfait à l'équation

$$i_X \omega = -d\mathcal{H} \quad (3.239)$$

qui est donc l'équation fondamentale de la dynamique dans le formalisme de la géométrie symplectique, i étant le produit intérieur de \mathcal{S} .

Si $\mathcal{H}(q, p, t)$ est dépendant du temps, alors on introduit de nouvelles formes de Poincaré, $\Lambda \in \Omega^1(\mathcal{S} \times \mathbb{R})$ et $\Omega \in \Omega^2(\mathcal{S} \times \mathbb{R})$.

$$\Lambda = p_i dq^i - \mathcal{H}(q, p, t) dt \quad (3.240)$$

$$\Omega = d\Lambda = dp_i \wedge dq^i - d\mathcal{H} \wedge dt \quad (3.241)$$

$X = X^i \frac{\partial}{\partial q^i} + X_i \frac{\partial}{\partial p_i} + \frac{\partial}{\partial t}$ est un champ de vecteurs tangent à une courbe solution des équations de Hamilton, si et seulement si

$$i_X \Omega = 0 \quad (3.242)$$

3.6.2 Analogie entre systèmes dynamiques classiques et quantiques

Soit \mathcal{K} la variété universelle du système dynamique quantique. \mathcal{K} est comme on l'a vu dans les sections précédentes, une variété Kählerienne. Or une variété Kählerienne \mathcal{K} , est une variété réelle de dimension $\dim_{\mathbb{R}} \mathcal{K} = 2 \dim_{\mathbb{C}} \mathcal{K}$, qui a une structure de variété symplectique avec pour forme symplectique la forme de Kähler de \mathcal{K} .

On considère le cas le plus usuel, d'un système conservatif, où la variété universelle du système dynamique quantique est $\mathcal{K} = \mathbb{C}P^{n-1}$. On considère le fibré linéaire complexe du système dynamique quantique $(\mathbb{C}^n, \mathbb{C}P^{n-1}, \mathbb{C}, \pi_E)$, qui est le fibré vectoriel associé du fibré universel $(S^{2n-1}, \mathbb{C}P^{n-1}, U(1), \pi_U)$. L'espace de Hilbert du système dynamique quantique \mathbb{C}^n est l'analogue quantique de l'espace des phases. On munit \mathbb{C}^n du système de coordonnées $(z^1, \dots, z^n, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_n) = (z, \bar{z})$ (en termes algébriques z^i est la i -ème composante de $\psi \in \mathbb{C}^n$ dans la base canonique). On supposera que $\bar{z}_i z^i = 1$, ce qui nous ramène dans S^{2n-1} . Le potentiel de jauge du fibré universel est alors

$$A = \langle \psi | d\psi \rangle = \bar{z}_i dz^i \quad (3.243)$$

cette dernière expression étant tout à fait similaire à celle de la 1-forme de Poincaré. De même, la courbure du fibré universel, qui est aussi la forme de Kähler, est très similaire à la 2-forme de Poincaré :

$$F = dA = d\bar{z}_i \wedge dz^i \quad (3.244)$$

Notons que $dF = 0$ (identité de Bianchi). L'ensemble des opérateurs de \mathbb{C}^n forme l'espace des observables. Si on ne s'intéresse qu'à la valeur moyenne des résultats expérimentaux, on a $\forall C \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^n)$

$$\langle \psi | C \psi \rangle = C^i_j \bar{z}_i z^j = f(z, \bar{z}) \quad (3.245)$$

La fonction f peut être considérée comme la version faible de l'observable ayant pour version forte C ¹¹. Si f et g sont les versions faibles de deux observables ayant pour version forte C et B , alors le crochet de Poisson est la version faible de l'observable ayant pour version forte le commutateur de C et B :

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial z^i} \frac{\partial g}{\partial \bar{z}_i} - \frac{\partial f}{\partial \bar{z}_i} \frac{\partial g}{\partial z^i} \quad (3.246)$$

$$= C^k_i \bar{z}_k B^i_l z^l - C^i_l z^l B^k_i \bar{z}_k \quad (3.247)$$

$$= \bar{z}_k (C^k_i B^i_l - C^i_l B^k_i) z_k \quad (3.248)$$

$$= \langle \psi | [C, B] \psi \rangle \quad (3.249)$$

On notera $\mathcal{C}_{1,1}^\infty(\mathbb{C}^n, \mathbb{C})$ le sous-ensemble de $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{C}^n, \mathbb{C})$ engendré par les polynômes de la forme $\bar{z}_i z^j$. Notons que si ce sont les résultats possibles d'une expérience qui nous intéressent, il est possible de les obtenir à partir de la version faible des observables. En effet $\lambda \in \mathbb{R}$ (on considère des observables conservatives), est un résultat possible d'une mesure par une observable de version faible f (i.e. une valeur propre de la version forte C de l'observable), si

$$\exists (z, \bar{z}) \in S^{2n-1} \text{ tel que } \partial f(z, \bar{z}) = \lambda A(z, \bar{z}) \text{ et } \bar{\partial} f(z, \bar{z}) = -\lambda A(z, \bar{z}) \quad (3.250)$$

Le point (z, \bar{z}) représentant alors l'état propre associé. En effet $\partial f = \lambda A \iff C^i_j \bar{z}_i dz^j = \lambda \bar{z}_j dz^j$ et $\bar{\partial} f = -\lambda A \iff C^i_j z^j d\bar{z}_i = -\lambda z_i d\bar{z}_i = \lambda z^i d\bar{z}_i$, en considérant la relation $\bar{z}_i z^i = 1 \implies \bar{z}_i dz^i = -z^i d\bar{z}_i$. Soit $\mathcal{H}(z, \bar{z}) = H^i_j \bar{z}_i z^j$ la version faible de l'Hamiltonien H du système dynamique quantique, supposé dans un premier temps, indépendant du temps. $X = X^i \frac{\partial}{\partial z^i} + X_i \frac{\partial}{\partial \bar{z}_i}$ est un champ de vecteurs tangents à une courbe $t \mapsto (z(t), \bar{z}(t))$ solution de l'équation de Schrödinger si et seulement si

$$i\hbar i_X F = -d\mathcal{H} \quad (3.251)$$

En effet, avec $X^i = \frac{dz^i}{dt}$ et $X_i = \frac{d\bar{z}_i}{dt}$, on a

$$i_X F = \frac{d\bar{z}_i}{dt} dz^i - \frac{dz^i}{dt} d\bar{z}_i \quad (3.252)$$

de plus

$$d\mathcal{H} = H^i_j z^j d\bar{z}_i - H^i_j \bar{z}_i dz^j \quad (3.253)$$

d'où

$$\begin{aligned} i\hbar i_X F &= -d\mathcal{H} \\ \iff i\hbar \frac{d\bar{z}_i}{dt} dz^i - i\hbar \frac{dz^i}{dt} d\bar{z}_i &= -H^i_j z^j d\bar{z}_i - H^i_j \bar{z}_i dz^j \end{aligned} \quad (3.254)$$

¹¹les adjectifs "faible" et "fort" se rapportent à la topologie de référence de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$, $(C_n) \in (\mathcal{L}(\mathcal{H}))^{\mathbb{N}}$, converge fortement vers C , si $\forall \psi \in \mathcal{H} \lim_{n \rightarrow +\infty} \|(C_n - C)\psi\| = 0$, et faiblement si $\forall \psi, \phi \in \mathcal{H}, \lim_{n \rightarrow +\infty} |\langle \phi | (C_n - C)\psi \rangle| = 0$ et donc $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle C_n \rangle = \langle C \rangle$.

d'où

$$\left(i\hbar\frac{d\bar{z}_j}{dt} + H^i_j\bar{z}_i\right)dz^j + \left(-i\hbar\frac{dz^i}{dt} + H^i_jz^j\right)d\bar{z}_i = 0 \quad (3.255)$$

Compte-tenu du fait que pour toute fonction $\lambda(t)$, on a $\lambda(t)(\bar{z}_i dz^i + z^i d\bar{z}_i) = 0$, cette dernière équation est équivalente aux deux équations suivantes

$$i\hbar\frac{dz^i}{dt} + \lambda z^i = H^i_j z^j \iff i\hbar\frac{d}{dt}\left(e^{-i\hbar^{-1}\int_0^t \lambda(t')dt'}\psi\right) = H e^{-i\hbar^{-1}\int_0^t \lambda(t')dt'}\psi \quad (3.256)$$

$$-i\hbar\frac{d\bar{z}_j}{dt} + \lambda\bar{z}_j = H^i_j\bar{z}_i \iff \overline{i\hbar\frac{d}{dt}\left(e^{-i\hbar^{-1}\int_0^t \lambda(t')dt'}\psi\right)} = \overline{H e^{-i\hbar^{-1}\int_0^t \lambda(t')dt'}\psi} \quad (3.257)$$

La dépendance de la solution d'un choix de jauge locale $\lambda(t)$, n'a rien de surprenant, c'est l'expression de la fibration de S^{2n-1} sur $\mathbb{C}P^{n-1}$. Lorsque H est dépendant du temps, on introduit le nouveau potentiel

$$A_+ = \langle\psi|d\psi\rangle + i\hbar^{-1}\langle\psi|H\psi\rangle dt \quad (3.258)$$

c'est à dire le générateur de la phase de Aharonov-Anandan et de la phase dynamique. On a alors

$$A_+ = \bar{z}_i dz^i + i\hbar^{-1}H^i_j\bar{z}_i z^j dt \quad (3.259)$$

$$= \bar{z}_i dz^i + i\hbar^{-1}\mathcal{H}(z, \bar{z})dt \quad (3.260)$$

Cette dernière équation est une nouvelle fois très proche de la 1-forme de Poincaré de la dynamique classique (la spécificité de la dynamique quantique étant contenue dans le facteur $i\hbar^{-1}$ à la place de -1). On a alors

$$F_+ = dz_i \wedge dz^i + i\hbar^{-1}d\mathcal{H} \wedge dt \quad (3.261)$$

$$= dz_i \wedge dz^i + i\hbar^{-1}H^i_j z^j d\bar{z}_i \wedge dt + i\hbar^{-1}H^i_j \bar{z}_i dz^j \wedge dt \quad (3.262)$$

Les rôles de A_+ et F_+ dans le formalisme des fibrés principaux seront étudiés au chapitre 6. $X = X^i \frac{\partial}{\partial z^i} + X_i \frac{\partial}{\partial \bar{z}_i} - \frac{\partial}{\partial t}$ est un champ de vecteurs tangents à une courbe solution de l'équation de Schrödinger si et seulement si

$$i\hbar i_X F_+ = 0 \quad (3.263)$$

En effet

$$i\hbar i_X F_+ = 0 \quad (3.264)$$

$$\iff i\hbar\frac{d\bar{z}_i}{dt}dz^i - i\hbar\frac{dz^i}{dt}d\bar{z}_i = H^i_j z^j \frac{d\bar{z}_i}{dt}dt - H^i_j \bar{z}_i \frac{dz^i}{dt}dt \quad (3.265)$$

$$\iff i\hbar\frac{d\bar{z}_i}{dt}dz^i - i\hbar\frac{dz^i}{dt}d\bar{z}_i = H^i_j z^j d\bar{z}_i - H^i_j \bar{z}_i dz^i \quad (3.266)$$

On peut résumer l'analogie entre systèmes dynamiques classiques et quantiques par la table 3.1.

Dans le cas dissipatif, l'unique changement consiste à prendre pour variable conjuguée à z^i , $u_i = \frac{\bar{z}_i}{z_j z^j}$. Dans le cas de la dynamique quantique des espaces actifs, on a des expressions similaires mais qui se compliquent un peu du fait de l'aspect matriciel. L'équivalent de la 1-forme de Poincaré est

$$\mathcal{A} = \text{tr} A = \bar{Z}_i^\alpha dZ_\alpha^i \quad (3.267)$$

celle de la 2-forme de Poincaré est

TAB. 3.1 – Comparaison entre les systèmes dynamiques classiques et quantiques pour les situations les plus simples.

| <i>Systèmes dynamiques classiques</i> | <i>Systèmes dynamiques quantiques</i> |
|--|---|
| Espace de configuration \mathbb{R}^n | Variété universelle $\mathbb{C}P^{n-1}$ |
| Espace des phases \mathbb{R}^{2n} | Espace total du fibré universel S^{2n-1} |
| Fibré tangent | Fibré universel |
| Algèbre des observables $(\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^{2n}, \mathbb{C}), +, \{\cdot, \cdot\})$ | Algèbre des observables faibles $(\mathcal{C}_{1,1}^\infty(S^{2n-1}, \mathbb{C}), +, \{\cdot, \cdot\})$ |
| 1-forme de Poincaré $\lambda = p_i dq^i$ | Potentiel de jauge $A = \bar{z}_i dz^i$ |
| $\Lambda = p_i dq^i - \mathcal{H} dt$ | $A_+ = \bar{z}_i dz^i + i\hbar^{-1} \mathcal{H} dt$ |
| 2-forme de Poincaré $\omega = dp_i \wedge dq^i$ | Courbure (forme de Kähler) $F = d\bar{z}_i \wedge dz^i$ |
| $\Omega = dp_i \wedge dq^i - d\mathcal{H} \wedge dt$ | $F_+ = d\bar{z}_i \wedge dz^i + i\hbar^{-1} d\mathcal{H} \wedge dt$ |
| $i_X \omega = -d\mathcal{H}$ | $i_X F = i\hbar^{-1} d\mathcal{H}$ |
| $i_X \Omega = 0$ | $i_X F_+ = 0$ |

$$\mathcal{F} = \text{tr} F = d\bar{Z}_i^\alpha \wedge dZ_\alpha^i \quad (3.268)$$

Une observable C est représentée par la fonction f telle que

$$f(Z, Z^\dagger) = C^i_j \bar{Z}_i^\alpha Z_\alpha^j = \text{tr}(Z^\dagger C Z) \quad (3.269)$$

et on a bien

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial Z_\alpha^i} \frac{\partial g}{\partial \bar{Z}_i^\alpha} - \frac{\partial f}{\partial \bar{Z}_i^\alpha} \frac{\partial g}{\partial Z_\alpha^i} \quad (3.270)$$

$$= \bar{Z}_k^\alpha (C^k_i B^i_l - B^k_i C^i_l) Z_\alpha^l \quad (3.271)$$

$$= \text{tr}(Z^\dagger [C, B] Z) \quad (3.272)$$

$X = \frac{dZ_\alpha^i}{dt} \frac{\partial}{\partial Z_\alpha^i} + \frac{d\bar{Z}_i^\alpha}{dt} \frac{\partial}{\partial \bar{Z}_i^\alpha}$ est le champ de vecteurs tangents à une courbe $t \mapsto (Z(t), Z^\dagger(t))$ qui satisfait à l'équation de Schrödinger pour une matrice de fonction d'onde de conditions initiales pures, si et seulement si

$$i\hbar i_X \mathcal{F} = -d\mathcal{H} \quad (3.273)$$

En effet, par un calcul similaire au cas abélien, on obtient que cette condition est équivalente à

$$(i\hbar \frac{d\bar{Z}_j^\alpha}{dt} + H^i_j \bar{Z}_i^\alpha) dZ_\alpha^i + (-i\hbar \frac{dZ_\alpha^i}{dt} + H^i_j Z_\alpha^j) d\bar{Z}_i^\alpha = 0 \quad (3.274)$$

Compte-tenu que pour tout ensemble de fonctions $\{\Lambda_\beta^\alpha(t)\}$ on a

$$\Lambda^\beta_\alpha (Z_\beta^i d\bar{Z}_i^\alpha + \bar{Z}_i^\alpha dZ_\beta^i) = 0 \quad (3.275)$$

on a

$$i\hbar \frac{dZ_\alpha^i}{dt} + \Lambda^\beta_\alpha Z_\beta^i = H^i_j Z_\alpha^j \iff i\hbar \frac{d}{dt} \left(\Psi \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \Lambda(t') dt'} \right) = H \Psi \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \Lambda(t') dt'} \quad (3.276)$$

$$-i\hbar \frac{d\bar{Z}_j^\alpha}{dt} + \Lambda^\alpha_\beta \bar{Z}_j^\beta = H^i_j \bar{Z}_i^\alpha \iff \left(i\hbar \frac{d}{dt} \left(\Psi \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \Lambda(t') dt'} \right) \right)^\dagger = \left(H \Psi \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \Lambda(t') dt'} \right)^\dagger \quad (3.277)$$

De même si H est dépendant du temps, on aura

$$A_+ = \text{tr}(A + i\hbar^{-1}Edt) = \overline{Z}_i^\alpha dZ_\alpha^i + i\hbar^{-1}H^i_j \overline{Z}_i^\alpha Z_\alpha^j dt \quad (3.278)$$

de même l'équivalent de la 2-forme de Poincaré sera

$$\mathcal{F}_+ = \text{tr}(dA_+ + A_+ \wedge A_+) = d\overline{Z}_i^\alpha \wedge dZ_\alpha^i + i\hbar^{-1}d\mathcal{H} \wedge dt \quad (3.279)$$

L'équation fondamentale de la dynamique équivalente à l'équation de Schrödinger, est alors

$$i\hbar i_X \mathcal{F}_+ = 0 \quad (3.280)$$

3.7 Interprétation topologique de la phase de Berry abélienne

Nous nous intéressons maintenant, aux propriétés topologiques de la phase de Berry abélienne. Les résultats de cette section sont particulièrement importants pour le chapitre suivant, qui est consacré aux monopôles adiabatiques. Il est fait usage à de nombreuses reprises dans cette section, de la théorie de la cohomologie. Les éléments fondamentaux et les notations de cette théorie sont rappelés annexe C. On considère donc le fibré principal $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, U(1), \pi_P)$ ou de manière équivalente son fibré linéaire associé $\mathcal{L} = (L, \mathcal{M}, \mathbb{C}, \pi_E)$ (L peut aussi être considéré comme le fibré linéaire associé du cas dissipatif). On suppose que \mathcal{M} est couverte par un ensemble localement fini d'ouverts $\mathcal{A} = \{U_\alpha\}_\alpha$ formant un atlas de \mathcal{M} . On suppose de plus que \mathcal{A} est l'atlas du théorème de structure des fibrés adiabatiques.

3.7.1 La première classe de Chern

Le potentiel de jauge A d'un fibré, est défini comme étant une 1-forme de la variété. Mais en général, il ne peut être défini que localement (cf. le théorème de structure des fibrés adiabatiques). A s'écrit donc en fonction d'un indice de carte :

$$A = \prod_\alpha A_\alpha \quad (3.281)$$

où $A_\alpha = T_\alpha^{-1}dT_\alpha$, T_α étant la matrice des vecteurs propres avec la convention associée à la carte locale U_α . A est donc aussi une 0-cochaîne de Čech. Par conséquent, on a :

$$A \in C^0(\mathcal{A}, \Omega^1 \mathcal{M}) \quad (3.282)$$

Par définition, la courbure du fibré est $F = dA$, c'est donc une 2-forme de la variété, et même un 2-cobord de de Rham. De plus $(\delta F)_{\alpha\beta} = dA_\beta - dA_\alpha$. Or sur $U_\alpha \cap U_\beta$, la condition de recollement est $A_\beta = A_\alpha + g_{\alpha\beta}^{-1}dg_{\alpha\beta} = A_\alpha + d \ln g_{\alpha\beta}$, où $g_{\alpha\beta} = T_\alpha^{-1}T_\beta$ sont les fonctions de transition du fibré. En différentiant l'expression précédente, on trouve $dA_\beta = dA_\alpha + d^2 \ln g_{\alpha\beta} = dA_\alpha$. Par conséquent $\delta F = 0$, F est un 0-cocycle de Čech.

$$F \in \mathcal{Z}^0(\mathcal{A}, \mathcal{B}^2 \mathcal{M}) \quad (3.283)$$

Et comme il n'y a pas de cobord de degré -1, par extension on pose :

$$[F] \in \check{H}^0(\mathcal{A}, \mathcal{B}^2 \mathcal{M}) \quad (3.284)$$

À partir de ce point, on suppose que \mathcal{M} est une variété compacte de dimension n . Et on considère la limite inductive des raffinements des atlas de \mathcal{M} . On désigne par \mathcal{O} l'ensemble des fonctions \mathcal{C}^∞ de \mathcal{M} , et par \mathcal{O}^* le groupe multiplicatif des fonctions \mathcal{C}^∞ non-nulles de \mathcal{M} . On remarquera que l'on a la suite exacte suivante :

$$0 \rightarrow \mathbb{Z} \rightarrow \mathcal{O} \xrightarrow{\text{exp}} \mathcal{O}^* \rightarrow 0$$

Propriété 11. Soit L un fibré linéaire complexe construit sur \mathcal{M} (en fait la classe d'équivalence d'isomorphismes d'un fibré linéaire), L est un élément du groupe de cohomologie de Čech $\check{H}^1(\mathcal{M}, \mathcal{O}^*)$.

Preuve :

Soit $(L, \mathcal{M}, \mathbb{C}, \pi)$ le fibré linéaire. Soit $\mathcal{A} = \{U_\alpha\}$ un atlas de \mathcal{M} , et soient les trivialisations locales :

$$\phi_\alpha : \pi^{-1}(U_\alpha) \rightarrow U_\alpha \times \mathbb{C} \quad (3.285)$$

Soient $g_{\alpha\beta}$ les fonctions de transitions associées :

$$g_{\alpha\beta} : U_\alpha \cap U_\beta \rightarrow \mathbb{C}^* \quad (3.286)$$

$$g_{\alpha\beta}(x) = \phi_\alpha \circ \phi_\beta^{-1}|_{\pi^{-1}(x)} \quad (3.287)$$

$$g_{\alpha\beta} \in \mathcal{O}^*(U_\alpha \cap U_\beta) \quad (3.288)$$

Le fibré L est complètement défini par les données $\{U_\alpha \times \mathbb{C}\}_\alpha$ et $\{g_{\alpha\beta}\}_{\alpha,\beta}$. Les fonctions de transition vérifient les conditions de compatibilité suivantes :

$$(a) \begin{cases} g_{\alpha\beta}g_{\beta\alpha} = 1 \\ g_{\alpha\beta}g_{\beta\gamma}g_{\gamma\alpha} = 1 \end{cases}$$

$\forall f_\alpha \in \mathcal{O}^*(U_\alpha)$, $\phi'_\alpha = f_\alpha \phi_\alpha$ est une autre trivialisations locale. On a donc :

$$(b) \quad g'_{\alpha\beta} = \frac{f_\alpha}{f_\beta} g_{\alpha\beta}$$

$\{g_{\alpha\beta}\}$ et $\{g'_{\alpha\beta}\}$ définissent donc le même fibré linéaire, s'il existe $\{f_\alpha \in \mathcal{O}^*(U_\alpha)\}$ satisfaisant (b). Mais :

$$g_{\alpha\beta} \in \mathcal{O}^*(U_\alpha \cap U_\beta) \iff g_{\alpha\beta} \in C^1(\mathcal{A}, \mathcal{O}^*) \quad (3.289)$$

Les fonctions de transition sont des 1-cochaînes. Comme \mathcal{O}^* est un groupe et en utilisant (a) on a :

$$(\delta_G g)_{\alpha\beta\gamma} = g_{\beta\gamma}g_{\alpha\gamma}^{-1}g_{\alpha\beta} = g_{\beta\gamma}g_{\gamma\alpha}g_{\alpha\beta} = 1 \quad (3.290)$$

Les fonctions de transition sont donc des cocycles de Čech. De plus d'après (b), $g_{\alpha\beta}$ et $g'_{\alpha\beta}$ définissent le même fibré si et seulement si :

$$g'_{\alpha\beta}g_{\alpha\beta}^{-1} = \frac{f_\alpha}{f_\beta} \in \mathcal{B}^1(\mathcal{A}, \mathcal{O}^*) \quad (3.291)$$

Donc $g_{\alpha\beta}$ et $g'_{\alpha\beta}$ définissent le même fibré si et seulement si leur "différence" est un cobord de Čech. Le fibré linéaire est caractérisé par une classe de cohomologie de Čech de degré 1. Par conséquent, l'ensemble des fibrés linéaires sur \mathcal{A} est $\check{H}^1(\mathcal{A}, \mathcal{O}^*) \subset \check{H}^1(\mathcal{M}, \mathcal{O}^*)$ ■

D'après la suite exacte donnée en début de paragraphe on a :

$$\check{H}^1(\mathcal{M}, \mathcal{O}^*) \xrightarrow{\delta} \check{H}^2(\mathcal{M}, \mathbb{Z})$$

Définition 6 (Première classe de Chern d'un fibré linéaire). Soit $L \in \check{H}^1(\mathcal{M}, \mathcal{O}^*)$ un fibré linéaire. On appelle première classe de Chern de ce fibré, la classe de cohomologie de Čech :

$$\check{c}_1(L) = \delta L \in \check{H}^2(\mathcal{M}, \mathbb{Z}) = \pi(\mathcal{M}, \mathbb{C}P^\infty) \quad (3.292)$$

Propriété 12. Soit $F \in \check{H}^0(\mathcal{M}, \mathcal{Z}^2\mathcal{M})$ la 2-forme de courbure du fibré L . Alors on a :

$$\check{c}_1(L) = \frac{i}{2\pi} \delta_2 \delta_1 [F] \quad (3.293)$$

Preuve :

Remarquons l'existence des deux suites exactes suivantes :

$$\begin{aligned} 0 \rightarrow \mathbb{R} \xrightarrow{i} \Omega^0 \mathcal{M} \xrightarrow{d} \mathcal{B}^1 \mathcal{M} \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow \mathcal{Z}^1 \mathcal{M} \xrightarrow{i} \Omega^1 \mathcal{M} \xrightarrow{d} \mathcal{B}^2 \mathcal{M} \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Ce qui nous donne les relations entre groupes de cohomologie de Čech suivantes :

$$\check{H}^0(\mathcal{M}, \mathcal{B}^2 \mathcal{M}) \xrightarrow{\delta_1} \check{H}^1(\mathcal{M}, \mathcal{Z}^1 \mathcal{M}) \supset \check{H}^1(\mathcal{M}, \mathcal{B}^1 \mathcal{M}) \xrightarrow{\delta_2} \check{H}^2(\mathcal{M}, \mathbb{R}) \supset \check{H}^2(\mathcal{M}, \mathbb{Z})$$

Soient $\{g_{\alpha\beta} \in \mathcal{O}^*\}$ le groupe des fonctions de transition et $\{h_{\alpha\beta} = \frac{i}{2\pi} \ln g_{\alpha\beta} \in \mathcal{O}\}$ la linéarisation de ce groupe.

$$z_{\alpha\beta\gamma} = (\delta_2 h)_{\alpha\beta\gamma} = h_{\alpha\beta} + h_{\beta\gamma} - h_{\alpha\gamma} = \frac{i}{2\pi} \ln(g_{\alpha\beta} g_{\alpha\gamma}^{-1} g_{\beta\gamma}) + n \quad (3.294)$$

$n \in \mathbb{Z}$, est du à la multivaluation de \ln . $z_{\alpha\beta\gamma}$ est un 2-cocycle de Čech représentant la classe $\check{c}_1(L)$ (en effet L est défini par $\{h_{\alpha\beta}\} \in \check{H}^1(\mathcal{M}, \mathcal{O})$ et $\check{c}_1(L) = \delta_2 L$, il suffit alors de suivre la suite exacte donnée en début de paragraphe). Soit A_α le potentiel de jauge de L sur U_α . La condition de recollement des potentiels est alors :

$$A_\beta = A_\alpha + g_{\alpha\beta}^{-1} dg_{\alpha\beta} \quad (3.295)$$

$$\iff A_\beta - A_\alpha = g_{\alpha\beta}^{-1} dg_{\alpha\beta} = d \ln g_{\alpha\beta} \quad (3.296)$$

$[F] \in \check{H}^0(\mathcal{M}, \mathcal{B}^2 \mathcal{M})$. Soit $F \in [F]$, $F = dA$ et $\delta A = d \ln g$. En suivant la démonstration du théorème sur les suites exactes (annexe C) avec la seconde suite donnée en début de démonstration, on a (avec $\beta = d$ et $\alpha = i$) :

$$\delta_1[F] = [d \ln g] = [\delta A] \in \check{H}^1(\mathcal{M}, \mathcal{Z}^1 \mathcal{M}) \quad (3.297)$$

mais $d \ln g \in \mathcal{B}^1 \mathcal{M} \subset \mathcal{Z}^1 \mathcal{M}$, donc en fait $\delta_1[F] = [d \ln g] \in \check{H}^1(\mathcal{M}, \mathcal{B}^1 \mathcal{M})$. De plus avec la première suite exacte donnée en début de démonstration, on a :

$$\delta_2[d \ln g] = \frac{2\pi}{i} [z] = \frac{2\pi}{i} \check{c}_1(L) \in \check{H}^2(\mathcal{M}, \mathbb{R}) \quad (3.298)$$

car $\delta \ln g = \frac{2\pi}{i} z$. ■

On rappelle que l'on a :

$$F \in \mathcal{Z}^0(\mathcal{M}, \mathcal{B}^2 \mathcal{M}) \quad A \in C^0(\mathcal{M}, \Omega^1 \mathcal{M}) \quad h \in C^1(\mathcal{M}, \mathcal{O}) \quad (3.299)$$

avec $h = \ln g$. On sait que :

$$\check{c}_1(L) = \frac{i}{2\pi} \delta^2[F] = \delta[\delta h] \quad (3.300)$$

$$[F] \in H^2 \mathcal{M} \quad [\delta h] \in \check{H}^2(\mathcal{M}, \mathbb{Z}) \quad (3.301)$$

Car $dF = 0$ d'après l'identité de Bianchi. Mais attention $[F] = [dA] \neq 0$, car en effet

$$F = \prod_{\alpha} dA_{\alpha} \quad (3.302)$$

et $\bar{A}\omega \in \Omega^1 \mathcal{M}$ tel que $F = d\omega$. De même $[\delta h] \neq 0$ car $\bar{A}\phi \in C^1(\mathcal{M}, \mathbb{Z})$ tel que $\delta h = \delta\phi$.

Seul le cas où le fibré est trivial est différent, dans ce cas il existe une section globale, et on peut définir A sur une seule carte couvrant tout \mathcal{M} , ainsi on a $A \in \Omega^1 \mathcal{M}$ et $F = dA$, donc $\check{c}_1(L) = 0$, la classe de Chern mesure donc la non-trivialité du fibré.

3.7.2 Classes de Chern et courbure adiabatique

La courbure adiabatique est liée à la première classe de Chern du fibré adiabatique.

$$\check{c}_1 = \frac{i}{2\pi} \delta^2[F] \quad (3.303)$$

Les classes caractéristiques sont invariants lors du passage d'un fibré à un fibré isomorphe. Dans l'étude des fibrés principaux, les classes de cohomologie pertinentes sont les classes de Chern, définies comme étant des polynômes invariants de la 2-forme F . La classe totale de Chern est :

$$c(F) = \det(1 + iF/2\pi) = 1 + c_1(F) + c_2(F) + \dots \quad (3.304)$$

On remarquera que $c_i(F) \in H^{2i}M$, et que $c(F) \in \bigoplus_{k=1}^{\dim M} H^k M \equiv H^*M$. La première classe de Chern est donc $c_1(F) = \frac{i}{2\pi} \text{tr}(F)$. Une propriété importante des classes de Chern est la suivante :

Propriété 13 (Naturalité de la classe de Chern). *Soit f une application C^∞ de \mathcal{M} vers \mathcal{N} . Soit E un fibré linéaire sur \mathcal{N} . Alors*

$$c(f^*E) = f^*c(E) \quad (3.305)$$

Preuve : cf. [113] ■

Ainsi, soit $f : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{C}P^\infty$ l'application universelle, $\mathcal{L} = (L, \mathcal{M}, \mathbb{C}, \pi_L)$ le fibré linéaire adiabatique et $\mathcal{U} = (L_U, \mathbb{C}P^\infty, \mathbb{C}, \pi_{L_U})$ le fibré linéaire universel. Comme d'après le théorème de classification universelle, $f^*L_U = L$, on a $c_1(L) = f^*c_1(L_U)$. Les invariants topologiques caractérisent les propriétés communes à certaines familles de variétés, en l'occurrence ici, la propriété d'holonomie. Ces invariants sont les quantités topologiques physiques, car elles sont indépendantes du choix de la modélisation (la modélisation étant ici un couple (f, \mathcal{M})).

Notons que la dernière classe de Chern non-nulle est telle que $c_k(F) = (\frac{i}{2\pi})^k \det F$. Or dans le cas du transport adiabatique, $F \in \mathfrak{u}(1)$ et $\text{tr}F = \det F$, donc toutes les autres classes de Chern sont nulles.

Pour terminer, on peut résumer le problème de la première classe de Chern et donc de la courbure adiabatique et de la phase de Berry abélienne, par un diagramme représentant les liens entre les différents ensembles dans lesquels ces quantités sont définies.

$$\begin{array}{ccccc} \check{H}^2(\mathcal{M}, \mathbb{Z}) & \xrightarrow{\simeq} & \check{H}^2(\mathcal{M}, \mathbb{R}) & \xleftarrow[\simeq]{R} & H^2\mathcal{M} \\ & & \uparrow \delta_2 \delta_1 & & \uparrow \chi_E \\ \check{H}^0(\mathcal{M}, \mathcal{B}^2\mathcal{M}) & \xrightarrow{\simeq} & \check{H}^0(\mathcal{M}, \mathcal{Z}^2\mathcal{M}) & \xrightarrow{\simeq} & I^1(U(1)) \end{array}$$

χ_E étant l'homomorphisme de Weil, R l'isomorphisme de de Rham et $I^1(U(1))$ l'ensemble des polynômes de degré 1, $U(1)$ -invariants (cf. annexe C).

$$\begin{array}{ccc} \check{c}_1(L) \in \check{H}^2(\mathcal{M}, \mathbb{Z}) & \xleftarrow{R} & c_1(F) \in H^2\mathcal{M} \\ \uparrow \delta^2 & & \uparrow \chi_E \\ \frac{i}{2\pi}F \in \check{H}^0(\mathcal{M}, \mathcal{B}^2\mathcal{M}) & \xrightarrow{P^1} & P^1(\frac{i}{2\pi}F) \in I^1(U(1)) \end{array}$$

où $P^1(X) = X$, $\check{c}_1 = R(c_1)$.

Définition 7. *On sait que $\check{c}_1(L) \in \check{H}^2(\mathcal{M}, \mathbb{Z})$. En utilisant l'isomorphisme du principe de de Rham, on a*

$$\frac{i}{2\pi} \int_{\langle \alpha\beta\gamma \rangle} F = \check{c}_1(L)_{\alpha\beta\gamma} \in \mathbb{Z} \quad (3.306)$$

où $\langle \alpha\beta\gamma \rangle$ est un 2-simplexe de \mathcal{M} . Si on suppose que \mathcal{M} est compacte, connexe, sans bord et de dimension 2, $\check{H}^2(\mathcal{M}, \mathbb{Z}) \simeq \mathbb{Z}$, alors on a

$$\mathcal{I}_C = \frac{1}{2} \check{c}_1(L) = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathcal{M}} F \in \frac{1}{2} \mathbb{Z} \quad (3.307)$$

Le nombre \mathcal{I}_C est appelé indice de Chern.

Du fait de la naturalité de la classe de Chern, l'indice de Chern est commun à tous les modèles, soit $f : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{C}P^\infty$ l'application universelle

$$\mathcal{I}_C = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{M}} c_1(f^* L_U) = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{M}} f^* c_1(L_U) = \frac{1}{2} \int_{f(\mathcal{M})} c_1(L_U) \quad (3.308)$$

3.7.3 Première classe de Chern et phase de Berry non-abélienne

Considérons le fibré adiabatique $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, G, \pi_P)$ avec $G = U(M)$ ou $G = GL(M, \mathbb{C})$. Le polynôme invariant associé à la première classe de Chern est $P^1(X) = \text{tr} X$. On en déduit que

$$c_1(F) = \frac{i}{2\pi} \text{tr} F \quad (3.309)$$

F est défini par l'équation de structure de Cartan : $F = dA + A \wedge A$. Mais en utilisant la cyclicité de la trace, on a

$$\text{tr}(A \wedge A) = \text{tr}([A_\mu, A_\nu]) dR^\mu \wedge dR^\nu \quad (3.310)$$

$$= \text{tr}(A_\mu A_\nu - A_\nu A_\mu) dR^\mu \wedge dR^\nu \quad (3.311)$$

$$= (\text{tr}(A_\mu A_\nu) - \text{tr}(A_\nu A_\mu)) dR^\mu \wedge dR^\nu \quad (3.312)$$

$$= (\text{tr}(A_\mu A_\nu) - \text{tr}(A_\mu A_\nu)) dR^\mu \wedge dR^\nu \quad (3.313)$$

$$= 0 \quad (3.314)$$

d'où

$$c_1(F) = \frac{i}{2\pi} \text{tr} F \quad (3.315)$$

$$= \frac{i}{2\pi} \text{tr} dA \quad (3.316)$$

$$= \frac{i}{2\pi} \sum_{a=1}^M dA_{aa} \quad (3.317)$$

Soit $(L_a, \mathcal{M}, \mathbb{C}, \pi_a)$ le fibré linéaire correspondant à l'espace unidimensionnel engendré par $|a, \vec{R}\rangle$. Et soit E la somme de Whitney de tous les fibrés linéaires associés aux états de l'espace actif :

$$E = \bigoplus_{a=1}^M L_a \quad (3.318)$$

Il est clair que E est le fibré vectoriel associé à $(P^{ab}, \mathcal{M}, T^M, \pi'_P)$ où $T^M = U(1)^M$ est le M -tore (ou avec C^{*M} dans le cas dissipatif). Le potentiel de jauge de L_a est $\langle a, \vec{R} | d | a, \vec{R} \rangle = A_{aa}$, donc le potentiel de E ou de P^{ab} est $\sum_{a=1}^M A_{aa}$. La classe de Chern vérifiant $c(E_1 \oplus E_2) = c(E_1) + c(E_2)$, on a $c_1(F) = c_1(F^{ab})$ avec $F^{ab} = d \sum_a A_{aa}$ la courbure de P^{ab} .

La première classe de Chern de la phase de Berry non-abélienne est donc la même que celle de l'abélianisation de la phase de Berry (où on ne conserve que les termes diagonaux). Le fibré E ou

le fibré P^{ab} , correspondent au cas où la dynamique est telle que la fonction d'onde ne présente jamais de superposition de vecteurs propres. C'est à dire, le régime "transport adiabatique pure - transition soudaine", où tant que le chemin \mathcal{C} dans \mathcal{M} ne rencontre pas de croisements de valeurs propres de l'espace actif, le système reste sur le même état propre (transport adiabatique pur), et passe brutalement d'un état à un autre en passant par les croisements (transition soudaine). En d'autres termes, il s'agit de régime sans couplages adiabatiques off-diagonaux. On reviendra dans le chapitre suivant sur ce régime particulier.

On voit donc que la première classe de Chern est un invariant topologique qui n'est pertinent que pour les phases de Berry abéliennes (de groupes structuraux T^M ou \mathbb{C}^{*M}) et donc les régimes adiabatiques purs avec ou sans croisement de valeurs propres (respectivement $M = 1$ ou $M > 1$). Dans les régimes où l'évolution des paramètres de contrôle est suffisamment lente pour rester dans un espace actif multidimensionnel, mais où entre les états de l'espace actif, subsistent des couplages off-diagonaux, la première classe de Chern n'apporte pas assez d'informations pour être pertinente.

3.8 Lignes de changement de carte

Considérons deux niveaux d'un système dynamique, ne présentant qu'un croisement. Lorsqu'on ne considère qu'un paramètre adiabatique, on sait que l'on peut suivre par continuité les états avant et après le croisement mais pas à travers celui-ci. Lorsqu'on passe le croisement, on a deux choix possibles de suivi des états :

1. si l'état de plus basse énergie a le label 1 avant le croisement, alors le label 1 est attribué à l'état de plus basse énergie après le croisement,
2. si l'état de plus basse énergie a le label 1 avant le croisement, alors le label 2 est attribué à l'état de plus basse énergie après le croisement,

, cf. fig. 3.2.

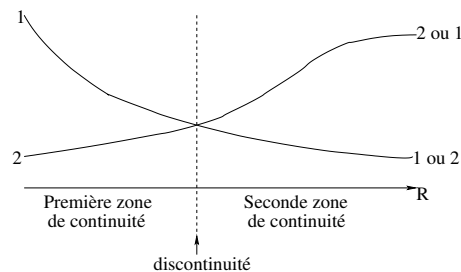


FIG. 3.2 – Schéma d'un croisement de 2 niveaux en fonction d'un unique paramètre adiabatique R . On a indiqué les deux zones où les états peuvent être suivis par continuité.

Lorsqu'on a deux paramètres adiabatiques, le suivi par continuité peut se faire le long de toute courbe ne passant pas par le croisement. On a alors la situation où sur une courbe passant par le croisement, on ne peut pas suivre par continuité les états, mais si on opère une légère déformation de la courbe ce suivi est possible, cf. fig. 3.3.

On sait par ailleurs que dans le voisinage immédiat du croisement, l'amplitude des transitions non-adiabatiques est très forte. Il y a alors mélange des états au passage dans ce voisinage, et le problème du suivi des états se pose à nouveau, fig. 3.4.

Du point de vue de la dynamique quantique, ce phénomène de mélange due aux couplages non-adiabatiques va dépendre de la vitesse de parcours du chemin. Et même avec une vitesse de référence donnée, suivant que le chemin passera plus ou moins loin du croisement, le suivi par continuité sera plus ou moins possible. Si on choisit comme règle de suivi des états, que les labels

les recouvrements des cartes locales. Avec un atlas où des recouvrements englobent un croisement, les changements de jauge sont des matrices de permutations (avec éventuellement des changements de convention de phase).

Au final, si la bande de recouvrement des deux cartes est choisie très fine (de largeur tendant vers 0), la solution adoptée ici, consiste à munir \mathcal{M} d'une ligne passant par le croisement et coupant \mathcal{M} en (au moins) deux parties (cette ligne peut être refermée sur elle-même). De chaque côté de cette ligne de changement de carte, le suivi par continuité des états est possible, par contre le passage de cette ligne permute les états. Notons que la disposition de cette ligne dans \mathcal{M} est totalement arbitraire, cf. fig. 3.5.

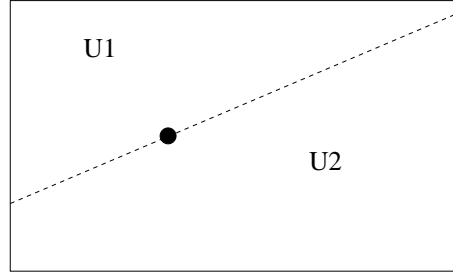


FIG. 3.5 – \mathcal{M} (de dimension 2), coupée par une ligne de changement de carte qui permute les états.

Dans le cas d'une variété de contrôle de dimension 3, c'est à des murs de changement de carte auxquels on a à faire.

En résumé

On a montré dans ce chapitre, que la structure mathématique décrivant la phase de Berry, est un fibré principal $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, G, \pi_P)$ dont la topologie est donnée par les matrices de recouvrement des vecteurs propres (généralisés) pour deux conventions ($T_\alpha^{-1}T_\beta$ où α et β sont deux indices de carte, la convention de la base de vecteurs propres étant différente d'une carte à l'autre). Le transport adiabatique purement géométrique est caractérisé par la condition d'adiabaticité, $\forall a, b, \langle \psi_a^\# | \partial_t | \psi_b^\# \rangle = 0$ (ou $\langle C\psi_a^\# | \partial_t | \psi_b^\# \rangle = 0$ pour les systèmes dissipatifs), $\psi_a^\#$ étant une fonction d'onde obtenue par transport adiabatique pour une condition initiale pure. On a également montré, que la structure décrivant un problème d'espaces actifs se déformant était le fibré $\mathcal{U} = (V_M(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), U(M), \pi_U)$ (ou $(V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$ dans le cas dissipatif), où $G_M(\mathbb{C}^n)$ est la variété de tous les espaces actifs et $V_M(\mathbb{C}^n)$ est la variété de tous les espaces actifs équipés de bases particulières. $G_M(\mathbb{C}^n)$ est équipé d'une métrique et de deux distances qui mesurent la compatibilité quantique (au sens probabiliste) entre espaces actifs. La variété universelle $G_M(\mathbb{C}^n)$ est plongée dans un espace Euclidien appelé espace universel généralisé. La première des distances quantiques, dite de Fubini-Study mesure la distance à la surface de $G_M(\mathbb{C}^n)$, l'autre dite cordale, mesure la distance Euclidienne à travers l'espace universel généralisé. Celui-ci dépend de la symétrie de l'Hamiltonien, les cas les plus courants sont donnés table 3.2.

Le fibré des espaces actifs étant universel pour le fibré adiabatique, à partir de la métrique de $G_M(\mathbb{C}^n)$, on peut équiper \mathcal{M} d'une métrique ayant cette même signification. Enfin, on a vu que si \mathcal{M} est compacte sans bord et de dimension 2, alors $\frac{1}{4\pi} \int_{\mathcal{M}} F_a \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}$ avec $F_a = dA_{aa}, \forall a$. Nous verrons au chapitre suivant, la signification physique de cet invariant topologique.

TAB. 3.2 – Espace universel généralisé suivant la forme de l'Hamiltonien.

| <i>Hamiltonien</i> | <i>Espace universel généralisé</i> |
|---------------------------------------|------------------------------------|
| réel symétrique | $\mathbb{R}^{n(n+1)/2}$ |
| réel non-symétrique | \mathbb{R}^{n^2} |
| complexe hermitien | \mathbb{R}^{n^2} |
| complexe symétrique | $\mathbb{R}^{n(n+1)}$ |
| complexe non-symétrique non-hermitien | \mathbb{R}^{2n^2} |

Chapitre 4

Théorie des monopôles magnétiques adiabatiques

*Il n'est pas certain que personne n'ait jamais vu un monopôle magnétique; ce qui est certain c'est que personne n'en n'a vu deux.
(phrase qui circule dans la communauté des physiciens des particules)*

Au chapitre précédent, nous avons vu que le système photodynamique était modélisé par un fibré principal $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, G, \pi_P)$ muni d'une connexion de potentiel de jauge $A \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{g})$. Nous verrons dans ce chapitre, que cette description apporte une part importante des informations physiques sur le système dynamique. Le modèle usuel de la théorie des champs, consiste en un fibré principal sur l'espace-temps, équipé d'une connexion. Il existe donc une analogie avec la structure mathématique associée au système photodynamique, c'est grâce à cette analogie avec la théorie des champs, que l'on va pouvoir interpréter la description géométrique, introduite au chapitre précédent. Dans un premier temps, nous considérerons la situation la plus simple, d'un système photodynamique conservatif, dans un régime adiabatique pur pour une valeur propre non-dégénérée qui ne croise aucune autre valeur propre. Une fois l'analyse de ce système fait, nous introduirons des croisements dans l'espace des paramètres de contrôle, qui dans un premier temps, seront évités par le système. Ensuite au régime adiabatique pur, nous ajouterons des transitions soudaines dues au passage par les croisements, avant d'étudier le cas des régimes avec des transitions adiabatiques off-diagonales. Enfin, nous nous intéresserons aux régimes dissipatifs.

4.1 Image électromagnétique des phases de Berry

Dans cette section, on considère un système dynamique conservatif décrit par un espace actif unidimensionnel, donc associé au fibré $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, U(1), \pi_P)$. On rappelle que la fonction d'onde du système, pour un chemin \mathcal{C} dans \mathcal{M} paramétré par $t \mapsto \vec{R}(t)$ est

$$\psi^\sharp(t) = e^{-\int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'} |n, \vec{R}(t)\rangle \quad (4.1)$$

Si \mathcal{C} est un chemin fermé, alors

$$\psi^\sharp(T) = e^{-\oint_{\mathcal{C}} A} |n, \vec{R}(0)\rangle \quad (4.2)$$

4.1.1 Analogie jauge électromagnétique / jauge adiabatique

Nous rappelons tout d'abord le formalisme de l'électrodynamique classique en mécanique quantique, en considérant une particule chargée (la charge est posée ici égale à 1), de masse m , décrite par un espace de Hilbert \mathcal{H} , et qui se déplace dans l'espace \mathbb{R}^3 .

Sur les états de \mathcal{H} , on procède à une transformation de jauge (quantique) locale :

$$\psi \longrightarrow \psi e^{i\hbar^{-1}\varphi(x,t)} \quad (4.3)$$

$$d\psi \longrightarrow (d\psi + i\hbar^{-1}\psi d\varphi)e^{i\hbar^{-1}\varphi} \quad (4.4)$$

d étant la différentielle de \mathbb{R}^4 . Afin de préserver l'invariance de jauge de l'équation de Schrödinger, on doit poser :

$$i\hbar\partial_t\psi = \left(\frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla} - \vec{A})^2 + A_0 \right) \psi$$

avec $A \longrightarrow A + d\varphi : \vec{A} \longrightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\varphi$ et $A_0 \longrightarrow A_0 - \partial_t\varphi$. On reconnaît l'équation de Schrödinger en présence d'un champ électromagnétique.

On interprète alors la théorie de l'électromagnétisme, comme étant un fibré principal localement trivial, ayant pour espace de base \mathbb{R}^4 muni de la métrique de Minkowski, et pour fibre type le groupe $U(1)$, qui est représenté sur l'espace de Hilbert \mathcal{H} . Un point du fibré, s'interprète donc comme étant un point de l'espace-temps avec une phase locale. Un choix d'une section locale sur le fibré, avec le choix sur chaque fibre d'un espace horizontal, nous donne la convention de phase, et donc le choix de la jauge initiale. A est alors le potentiel de jauge de la connexion électromagnétique. $A : T\mathbb{R}^4 \simeq \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathfrak{u}(1) \simeq \mathbb{R}$, $A = A_\mu dx^\mu$. Le changement de jauge ($g(x,t) = e^{i\varphi(x,t)}$) s'interprète alors comme un changement de section locale. Le potentiel de connexion se transforme comme suit :

$$\tilde{A} = g^{-1}Ag + g^{-1}dg \quad (4.5)$$

$$= A + e^{i\varphi}de^{i\varphi} \quad (4.6)$$

$$= A + i d\varphi \quad (4.7)$$

On introduit alors la différentielle covariante $D = d - iA$, qui dans le formalisme de l'analyse vectorielle, s'écrit sous la forme : $\vec{\nabla} - i\vec{A}$ et $\partial_t + iA_0$, où \vec{A} est le potentiel vecteur magnétique et A_0 le potentiel scalaire électrique.

La 2-forme F , courbure du fibré, est alors $F_{\mu\nu} = [D_\mu, D_\nu] = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$, elle s'identifie au tenseur électromagnétique de Faraday.

On suppose que l'on translate la particule suivant un vecteur \vec{x} . La fonction d'onde après la translation est

$$\tilde{\psi} = e^{\vec{x}\cdot\vec{P}}\psi(x_0) = e^{-i\hbar\vec{x}\cdot\vec{\nabla}}\psi(x_0) = \psi(x_0 + x) \quad (4.8)$$

Mais s'il règne dans l'espace, un champ magnétique de potentiel vecteur \vec{A} , on a

$$\tilde{\psi}e^{\vec{x}\cdot\vec{P}}\psi(x_0) = e^{-\vec{x}\cdot\vec{A}}e^{-i\hbar\vec{x}\cdot\vec{\nabla}}\psi(x_0) = e^{-\vec{x}\cdot\vec{A}}\psi(x_0 + x) \quad (4.9)$$

On suppose que la particule est astreinte à se déplacer sur un chemin fermé \mathcal{C} dans \mathbb{R}^3 , paramétré par $t \mapsto x(t)$. Alors, après le déplacement de la particule le long de \mathcal{C} , on a

$$\tilde{\psi} = e^{-\oint_{\mathcal{C}} \vec{A}\cdot d\vec{x}}\psi(x_0) \quad (4.10)$$

Le transport adiabatique (éq. 4.2) apparaît alors comme tout à fait similaire au transport d'une particule chargée, le long d'un chemin dans un espace où règne un champ magnétique.

4.1.2 La courbure adiabatique comme solution des équations de Maxwell

La courbure du fibré s'écrit $F = dA + A \wedge A$. Mais pour une jauge abélienne, on a simplement $F = dA$. D'où $dF = 0$. Cette équation constitue la moitié des équations de Maxwell dans le vide. En effet, supposons que $\dim M = 4$. Alors si on pose :

$$F = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ -E_x & 0 & -B_z & B_y \\ -E_y & B_z & 0 & -B_x \\ -E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

ce qui est possible compte-tenu de l'anti-symétrie de $F_{\mu\nu}$, on a :

$$dF = 0 \iff \partial_\rho F_{\mu\nu} + \partial_\mu F_{\nu\rho} + \partial_\nu F_{\rho\mu} = 0 \quad (4.12)$$

et en écrivant cette relation pour tous les triplets $(\rho, \mu, \nu)_{\rho, \mu, \nu=0,1,2,3}$ possibles, on obtient les 4 équations suivantes :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial B_z}{\partial t} + \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial B_y}{\partial t} + \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial B_x}{\partial t} + \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \right\} \iff \vec{\text{rot}} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_y}{\partial y} + \frac{\partial B_z}{\partial z} = 0 \iff \text{div} \vec{B} = 0 \quad (4.14)$$

Dans le cas de la connexion adiabatique, où pour l'instant le fibré n'est pas construit sur le temps, on a à faire à une théorie purement magnétique. Les équations sont alors : $F = dA$ qui en dimension 3 a pour analogue : $\vec{B} = \vec{\text{rot}} \vec{A}$ avec de plus $dF = d^2 A = 0$, analogue à $\text{div} \vec{B} = 0$. Pour terminer, remarquons que puisque la connexion adiabatique vérifie les équations de Maxwell, celle-ci s'identifie à la connexion électromagnétique. Enfin, dans une vision de physique-mathématique, on a :

Définition 8. *La théorie de l'interaction électromagnétique est (mathématiquement) définie par la théorie de jauge $U(1)$ avec la connexion électromagnétique.*

On dira alors, que la phase de Berry est un effet électromagnétique, par définition de l'électromagnétisme !

4.1.3 Le modèle électromagnétique

En résumé, le système photodynamique est équivalent à une particule virtuelle chargée électriquement, astreinte à se déplacer sur un chemin \mathcal{C} dans l'espace virtuel des paramètres de contrôle \mathcal{M} , dans lequel règne un champ magnétique F . La phase de Berry apparaît alors, comme le flux du champ magnétique F à travers la surface \mathcal{S} de frontière \mathcal{C} ($\partial \mathcal{S} = \mathcal{C}$)

$$\psi^\#(T) = e^{-\oint_{\mathcal{C}} A} |n, \vec{R}(0)\rangle = e^{-\int_{\mathcal{S}} F} |n, \vec{R}(0)\rangle \quad (4.15)$$

On a donc ramené, un problème de dynamique quantique à un problème d'électrodynamique classique. On n'a pour l'instant considéré qu'un seul état propre non-dégénéré de l'espace actif, et supposé que la dynamique était dans un régime adiabatique pur sans croisement. Dans la suite, on verra que l'image électrodynamique classique, se complique singulièrement lorsque ces hypothèses ne sont pas vérifiées.

Commençons par supposer, qu'il existe $\vec{Q} \in \mathcal{M}$ tel que $E_n(\vec{Q}) = E_p(\vec{Q})$ où E_p est une autre valeur propre non-dégénérée. Pour simplifier, on suppose qu'il s'agit du seul croisement impliquant E_n .

On suppose toujours au demeurant que l'on se trouve dans un régime adiabatique pur, et dans un premier temps que le chemin suivi par la particule virtuelle du système photodynamique (le chemin dans les paramètres de contrôle), ne passe pas par \vec{Q} . En utilisant la relation de fermeture sur tous les vecteurs propres¹

$$F(\vec{R}) = i\mathfrak{S} \left(\langle n, \vec{R} |_{\mu} | n, \vec{R} \rangle_{\nu} \right) dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.16)$$

$$= i\mathfrak{S} \sum_m \langle n, \vec{R} |_{\mu} | m, \vec{R} \rangle \langle m, \vec{R} |_{\nu} | n, \vec{R} \rangle dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.17)$$

$$= i\mathfrak{S} \sum_{m \neq n} \langle n, \vec{R} |_{\mu} | m, \vec{R} \rangle \langle m, \vec{R} |_{\nu} | n, \vec{R} \rangle dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.18)$$

$$= i\mathfrak{S} \sum_{m \neq n} \overline{\langle m, \vec{R} | \frac{\partial}{\partial R^{\mu}} | n, \vec{R} \rangle} \langle m, \vec{R} | \frac{\partial}{\partial R^{\nu}} | n, \vec{R} \rangle dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.19)$$

mais

$$H(\vec{R}) | m, \vec{R} \rangle = E_m(\vec{R}) | m, \vec{R} \rangle \quad (4.20)$$

En dérivant cette équation

$$(\partial_{\mu} H(\vec{R})) | m, \vec{R} \rangle + H(\vec{R}) \partial_{\mu} | m, \vec{R} \rangle = (\partial_{\mu} E_m(\vec{R})) | m, \vec{R} \rangle + E_m(\vec{R}) \partial_{\mu} | m, \vec{R} \rangle \quad (4.21)$$

et en projetant cette dernière équation sur $| n, \vec{R} \rangle$

$$\langle n, \vec{R} | \frac{\partial H}{\partial R^{\mu}} | m, \vec{R} \rangle + \underbrace{\langle n, \vec{R} | H(\vec{R}) \partial_{\mu} | m, \vec{R} \rangle}_{\langle n, \vec{R} | E_n(\vec{R})} = E_m(\vec{R}) \langle n, \vec{R} | \partial_{\mu} | m, \vec{R} \rangle \quad (4.22)$$

$$\iff \langle n, \vec{R} | \frac{\partial H}{\partial R^{\mu}} | m, \vec{R} \rangle = (E_m(\vec{R}) - E_n(\vec{R})) \langle n, \vec{R} | \partial_{\mu} | m, \vec{R} \rangle \quad (4.23)$$

d'où, si $E_m(\vec{R}) \neq E_n(\vec{R})$, alors

$$\langle n, \vec{R} | \partial_{\mu} | m, \vec{R} \rangle = \frac{\langle n, \vec{R} | \frac{\partial H}{\partial R^{\mu}} | m, \vec{R} \rangle}{E_m(\vec{R}) - E_n(\vec{R})} \quad (4.24)$$

On a alors

$$F(\vec{R}) = i\mathfrak{S} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n, \vec{R} | \frac{\partial H}{\partial R^{\mu}} | m, \vec{R} \rangle \langle m, \vec{R} | \frac{\partial H}{\partial R^{\nu}} | n, \vec{R} \rangle}{(E_m(\vec{R}) - E_n(\vec{R}))^2} dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.25)$$

$$\forall \vec{R} \neq \vec{Q}, F(\vec{R}) = i\mathfrak{S} \left(\frac{\langle n, \vec{R} | \frac{\partial H}{\partial R^{\mu}} | p, \vec{R} \rangle \langle p, \vec{R} | \frac{\partial H}{\partial R^{\nu}} | n, \vec{R} \rangle}{(E_p(\vec{R}) - E_n(\vec{R}))^2} + \sum_{m \neq n, p} \frac{\langle n, \vec{R} | \frac{\partial H}{\partial R^{\mu}} | m, \vec{R} \rangle \langle m, \vec{R} | \frac{\partial H}{\partial R^{\nu}} | n, \vec{R} \rangle}{(E_m(\vec{R}) - E_n(\vec{R}))^2} \right) dR^{\mu} \wedge dR^{\nu},$$

or $\lim_{\vec{R} \rightarrow \vec{Q}} (E_p(\vec{R}) - E_n(\vec{R})) = 0$, donc

$$\lim_{\vec{R} \rightarrow \vec{Q}} F(\vec{R}) = +\infty \quad (4.26)$$

Le champ magnétique de \mathcal{M} , présente une divergence ponctuelle au point \vec{Q} (point du croisement). Un champ magnétique usuel ne peut présenter de divergence ponctuelle, puisque $F = dA$ est une forme exacte (en termes vectoriels, $\vec{B} = \text{rot} \vec{A}$ étant un rotationnel, le champ ne peut donc avoir de divergence ponctuelle). La seule explication est que dans l'image électromagnétique, le croisement apparaît comme un monopôle magnétique. On va voir au chapitre suivant, que F satisfait bien aux équations des monopôles magnétiques.

¹supposés former une base de \mathcal{H} , si ce n'est pas le cas (présence de continuum par exemple) rien n'empêche de compléter la base

4.2 Monopôles magnétiques

Avant d'étudier plus en détails le champ magnétique adiabatique, il est nécessaire de faire quelques rappels, sur la théorie des monopôles magnétiques.

4.2.1 Monopôles magnétiques de Dirac

Les équations de Maxwell usuelles, présentent une dissymétrie. La première partie de ces équations, usuellement qualifiée d'homogène, $dF = 0$, ne présentent pas de terme de sources. À l'inverse, la seconde partie, qualifiée d'inhomogène, $d*F = *J$, présentent un terme de source, J , induit par les charges et les courants électriques, et qui au niveau microscopique, est issu de l'existence des monopôles électriques (électrons, protons, quarks, bosons W^\pm , muons, tauon,...). $*$ est le star-opérateur de Hodge associé à la métrique de Minkowski. Ici, on préfère qualifier l'équation $dF = 0$, d'équations de Maxwell topologiques (car issue de la topologie du fibré électromagnétique, c'est l'identité de Bianchi), et $d*F = *J$, d'équations de Maxwell métriques (car dépendantes de $*$). Cette dissymétrie est due au fait, qu'il n'a jamais été observé dans la nature, de pôles magnétiques isolés (pôle nord sans pôle sud). On n'observe en effet que des multipôles, et principalement des dipôles (comme un aimant, qui a deux pôles, Nord et Sud). Au niveau microscopique, ces dipôles magnétiques, sont toujours produits par des particules chargées électriquement, soit par déplacement de charges électriques (diamagnétisme, induction magnétique), soit par le spin de ces particules (paramagnétisme, ferromagnétisme).

Les physiciens ayant un penchant pour la recherche de symétries dans la nature, certains ont proposé d'ajouter un terme de sources magnétiques aux équations de Maxwell topologiques, $dF = J_m$, qui au niveau microscopique, serait induit par des particules chargées magnétiquement, des monopôles magnétiques. Mais, l'élaboration d'une théorie de monopôles magnétiques, se heurte à de grands problèmes, dus au fait que le champ magnétique est une 2-forme exacte (un rotationnel dans le langage vectoriel). C'est Dirac qui le premier a résolu ce problème. On présente ici, la théorie de Dirac des monopôles magnétiques.

On considère un monopôle magnétique statique dans \mathbb{R}^3 , se trouvant à l'origine, et de charge magnétique g . Le premier aspect de la théorie de Dirac, est que l'on ne considère pas \mathbb{R}^3 comme la variété fondamentale, mais comme un feuilletage par des sphères concentriques, (S^2, \mathbb{R}^+) , S^2 étant une sphère centrée sur le monopôle et \mathbb{R}^+ l'espace du paramètre de feuilletage (rayon de la sphère). Dans un premier temps, on ne considère qu'un unique feuillet S^2 . Le fibré électromagnétique, est alors $(S^3, S^2, S^1, \pi_{EM})$ (où $S^1 = U(1)$), qui est connu dans la littérature, sous le nom de fibration de Hopf (cf. [43]). Soit B la 2-forme champ magnétique produit par le monopôle. On voudrait que le flux du champ magnétique à travers S^2 vérifie

$$\Phi = \oint_{S^2} B = 4\pi g \quad (4.27)$$

c'est à dire, dans les notations vectorielles, $\vec{B} = g \frac{\vec{r}}{r^3}$, ce qui impossible puisque $\vec{B} = \overrightarrow{\text{rot}} \vec{A}$.

On sait que la sphère S^2 ne peut être couverte par une seule carte, un atlas de S^2 sera donc au minimum, composé de deux cartes. On fait le choix suivant

$$U^N = \{(\theta, \varphi), \theta \in [0, \pi/2 + \epsilon], \varphi \in [0, 2\pi]\} \quad (4.28)$$

$$U^S = \{(\theta, \varphi), \theta \in [\pi/2 - \epsilon, \pi], \varphi \in [0, 2\pi]\} \quad (4.29)$$

où ϵ est un petit paramètre permettant le recouvrement des cartes au niveau de l'équateur, les cartes correspondant respectivement aux hémisphères nord et sud. Wu et Yang, qui ont amélioré la théorie de Dirac, introduisent alors, deux potentiels de jauge locaux, un sur chaque hémisphère

$$A^N = \iota g(1 - \cos \theta) d\varphi \quad (4.30)$$

$$A^S = -\imath g(1 + \cos \theta)d\varphi \quad (4.31)$$

On a alors

$$\Phi = \oint_{S^2} B \quad (4.32)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\int_{U^N} dA^N + \int_{U^S} dA^S \right) \quad (4.33)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\int_{\partial U^N} A^N + \int_{\partial U^S} A^S \right) \quad (4.34)$$

$$= \oint_{S^1} A^N + \oint_{-S^1} A^S \quad (4.35)$$

$$= \oint_{S^1} A^N - A^S \quad (4.36)$$

$$= \oint_{S^1} 2gd\varphi \quad (4.37)$$

$$= \int_0^{2\pi} 2gd\varphi \quad (4.38)$$

$$= 4\pi g \quad (4.39)$$

S^1 étant l'équateur de S^2 . Le recollement des potentiels est donné par la formule suivante, qui est valable sur $U^N \cap U^S$

$$A^N = A^S + 2gd\varphi = A^S + g^{NS-1}dg^{NS} \quad (4.40)$$

où la fonction de transition du fibré électromagnétique est

$$g^{NS} = e^{2\imath g\varphi} \quad (4.41)$$

Pour que le recollement soit unique, il faut que $g^{NS}(\varphi = 0) = g^{NS}(\varphi = 2\pi)$, et donc que $2g \in \mathbb{Z}$. Cette dernière condition porte le nom de condition de quantification de Dirac.

Très clairement, la théorie de Dirac-Wu-Yang des monopôles magnétiques, consiste à travailler dans le double complexe de Mayer-Vietoris $C^*(\mathcal{A}, \Omega^*S^2)$ (cf. annexe C) où $\mathcal{A} = \{U^N, U^S\}$. $A \in C^0(\mathcal{A}, \Omega^1 S^2)$ et $B \in \mathcal{Z}^0(\mathcal{A}, \mathcal{B}^2 S^2)$. B n'est donc pas d -exacte car A n'est pas une forme globale, ce qui lève le problème de construction du champ monopolaire. Par contre, le champ magnétique est bien défini comme une 2-forme globale car

$$(\delta B)^{NS} = B^S - B^N = 0 \quad (4.42)$$

En effet

$$B = dA^N = dA^S = \imath g \sin \theta d\theta \wedge d\varphi \quad (4.43)$$

Cette structure mathématique de la magnétostatique, utilisant la double complexe de Mayer-Vietoris, est très différente de la structure usuelle de l'électromagnétisme qui est décrite par le simple complexe de de Rham.

D'autre part, on a

$$\frac{\imath}{2\pi} \int_{S^2} B = \check{c}_1 \quad (4.44)$$

La charge magnétique du monopôle n'est autre que l'indice de Chern, moitié de la première classe de Chern $\check{c}_1 \in \check{H}^2(S^2, \mathbb{Z}) = \mathbb{Z}$, la condition de quantification de Dirac découle donc des propriétés topologiques du fibré électromagnétique.

En utilisant le feuilletage, on peut étendre le résultat sur \mathbb{R}^3 . Avec le formalisme vectoriel, en utilisant la correspondance $\vec{e}_\varphi \leftrightarrow r \sin \theta d\varphi$, on a

$$\vec{A}^N = \frac{g(1 - \cos \theta)}{r \sin \theta} \vec{e}_\varphi \quad (4.45)$$

$$\vec{A}^S = -\frac{g(1 + \cos \theta)}{r \sin \theta} \vec{e}_\varphi \quad (4.46)$$

$$\vec{B} = g \frac{\vec{r}}{r^3} \quad (4.47)$$

ou dans le formalisme des formes différentielles pour le double-complexe $C^*(\mathcal{A}, \Omega^*\mathbb{R}^3)$ $\mathcal{A} = \{R^2 \times R^+, R^2 \times R^-\}$:

$$A^N = -ig \frac{ydx - xdy}{r(r+z)} \quad (4.48)$$

$$A^S = ig \frac{ydx - xdy}{r(r-z)} \quad (4.49)$$

$$B = ig \frac{xdy \wedge dz + ydz \wedge dx + zdx \wedge dy}{r^3} \quad (4.50)$$

où $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

Dans le plan $z = 0$, les potentiels se réduisent à

$$A = ig \frac{ydx - xdy}{x^2 + y^2} \in \Omega^1(\mathbb{R} \setminus \{(0,0)\}) \quad (4.51)$$

Soit \mathcal{C} une courbe fermée dans $\mathbb{R}^2 \setminus \{(0,0)\}$, on a

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{ydx - xdy}{x^2 + y^2} = n \in \mathbb{Z} \quad (4.52)$$

n est le nombre de tours orientés que fait \mathcal{C} autour de $(0,0)$. Ce nombre est un invariant topologique de \mathcal{C} (on peut déformer continûment \mathcal{C} dans $\mathbb{R}^2 \setminus \{(0,0)\}$ sans changer ce nombre). Il est appelé nombre d'enroulements de \mathcal{C} , cf. [93] p152. On a alors $\frac{-i}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}} A = ng$. La charge magnétique du monopôle, la première classe de Chern des fibrés de Hopf et le nombre d'enroulements des chemins fermés dans le plan, sont des quantités qui caractérisent la même propriété topologique de l'électromagnétisme avec monopôles magnétiques.

La théorie des monopôles magnétiques est une théorie locale, ce qui n'est pas usuel en électromagnétisme. Il est possible d'obtenir une théorie globale, mais en considérant non pas les fonctions \mathcal{C}^∞ sur \mathbb{R}^3 mais les distributions. On étend un potentiel (A^N par exemple), sur tout \mathbb{R}^3 . Le problème est que A^N présente une singularité sur l'axe z pour $z \leq 0$. De même, A^S présente une singularité sur l'axe z pour $z \geq 0$. Ces singularités portent le nom de cordes de Dirac. Ces cordes de Dirac ont l'inconvénient de ne pas être des invariants de jauge, et donc de ne pas être physique. En effet, les changements de jauge font tourner les cordes dans l'espace. Par exemple un changement du système des cartes locales des sphères feuillettes, qui changerait l'équateur et donc les pôles des sphères, fait tourner les cordes. On peut aussi imaginer que les cartes sur les différents feuillettes S^2 sont tels que les pôles ne soient pas alignés, (il faut quand même que les différents pôles se trouvent sur des courbes différentiables pour que l'atlas du feuilletage soit bien défini), alors les cordes de Dirac sont des courbes dans \mathbb{R}^3 . Ces cordes de Dirac, sont le prix à payer pour avoir une théorie globale.

On a alors au sens des distributions

$$dA^N = B + 2\pi g \int_0^{+\infty} \delta(z+u) du \quad dx \wedge dy \quad (4.53)$$

En toute rigueur, on devrait plutôt écrire $\delta_{s^S}(\vec{r})$, la distribution de Dirac associée à la corde s^S , semi-droite $[0, -\infty[$. La distribution apparaissant en plus du champ B , est la singularité de la corde de Dirac. On a de même

$$dB = 4\pi g \delta(\vec{r}) dx \wedge dy \wedge dz \quad (4.54)$$

On trouve ici, la charge ponctuelle du monopôle magnétique. Historiquement, la théorie globale avec les cordes de Dirac, est la théorie initiale que proposa Dirac. Plus tard, Wu et Yang ont proposé la théorie locale (avec le double complexe de Mayer-Vietoris), pour se débarrasser des cordes non-invariantes de jauge.

4.2.2 Transport adiabatique dans un système à deux niveaux

On considère un système à deux niveaux d'hamiltonien

$$H(\vec{x}) = x^i \sigma_i = \begin{pmatrix} x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & -x^3 \end{pmatrix} \quad (4.55)$$

avec des paramètres de contrôles $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$, $\{\sigma_i\}$ étant les matrices Pauli. Cet Hamiltonien correspond par exemple, au problème d'un spin $\frac{1}{2}$ en interaction avec un champ magnétique \vec{x} (l'espace des paramètres de contrôle étant l'espace des composantes du champ magnétique). Les valeurs propres de $H(\vec{x})$ sont

$$E_{\pm}(\vec{x}) = \pm \sqrt{(x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2} \quad (4.56)$$

On a un croisement de niveau pour $\vec{x} = \vec{0}$. On suppose que la condition initiale de la dynamique se trouve sur l'état $+$, et que le régime est adiabatique pur (pas de transition vers l'état $-$). De plus, on évite le croisement, i.e., au cours des dynamiques $t \mapsto \vec{x}(t)$ que l'on va considérer, $\forall t$, $\vec{x}(t) \neq \vec{0}$. Le vecteur propre associé à E_+ est

$$|+, \vec{x}\rangle^N = \frac{1}{\sqrt{2r(r+x^3)}} \begin{pmatrix} r+x^3 \\ x^1+ix^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (4.57)$$

où $\theta = \arctan \frac{\sqrt{(x^1)^2+(x^2)^2}}{x^3}$, $\varphi = \arctan \frac{x^2}{x^1}$, et $r = \sqrt{(x^1)^2+(x^2)^2+(x^3)^2}$. (r, θ, φ) sont les coordonnées sphériques de \mathbb{R}^3 . Cette définition du vecteur propre est singulière pour $x^3 = -r$ ($\iff x^1 = 0, x^2 = 0, x^3 < 0$), on choisit donc de ne l'appliquer que pour $\vec{x} \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+$, c'est à dire sur U^N , la carte de l'hémisphère nord de la sphère engendrée par (θ, φ) (carte ayant la même définition que dans le paragraphe précédent). Sur U^S , on choisit une autre convention

$$|+, \vec{x}\rangle^S = \frac{1}{\sqrt{2r(r-x^3)}} \begin{pmatrix} x^1-ix^2 \\ r-x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (4.58)$$

Définition qui est singulière pour $x^3 = r$ ($\iff x^1 = 0, x^2 = 0, x^3 > 0$). En utilisant les coordonnées (θ, φ) pour les vecteurs propres, il est clair que le fibré adiabatique est $\mathcal{P} = (P, S^2, S^1, \pi_P)$ où P est défini par la fonction de transition

$$g^{NS}(\theta, \varphi) = {}^N \langle +, \theta, \varphi | +, \theta, \varphi \rangle^S = e^{-i\varphi} \quad (4.59)$$

On reconnaît ici la fonction de transition de la fibration de Hopf, donc $P = S^3$. Le potentiel de jauge adiabatique est donc

$$A^N = {}^N \langle +, \vec{x} | d | +, \vec{x} \rangle^N = -\frac{i}{2} \frac{x^2 dx^1 - x^1 dx^2}{r(r+x^3)} = \frac{i}{2} (1 - \cos \theta) d\varphi \quad (4.60)$$

$$A^S = {}^S\langle +, \vec{x} | d | +, \vec{x} \rangle^S = \frac{i}{2} \frac{x^2 dx^1 - x^1 dx^2}{r(r - x^3)} = -\frac{i}{2}(1 + \cos \theta) d\varphi \quad (4.61)$$

On reconnaît ici, les potentiels de jauge magnétiques associés à un monopôle magnétique de charge $\frac{1}{2}$ en $\vec{x} = \vec{0}$. On voit bien qu'un croisement de niveaux satisfait aux équations des monopôles magnétiques de Dirac. À r constant, la variété décrivant le système est la sphère $S^2 \simeq \mathbb{C}P^1$. On voit que cette représentation (θ, φ) est en fait le modèle universel de la mécanique quantique. S^2 étant la variété universelle (classifiante) pour les systèmes à deux niveaux. D'autre part, en considérant le feuilletage par des sphères S^2 concentriques, \mathbb{R}^3 apparaît comme un espace universel généralisé. On a déjà vu que la métrique quantique était la métrique usuelle de la sphère, celle-ci est engendrée par plongement, par la métrique euclidienne δ que l'on va considérer comme la métrique quantique de \mathbb{R}^3 .

Remarque : en considérant l'état $-$, on aurait trouvé

$$A_-^N = -\frac{i}{2}(1 - \cos \theta) d\varphi \quad (4.62)$$

$$A_-^S = \frac{i}{2}(1 + \cos \theta) d\varphi \quad (4.63)$$

c'est à dire un monopôle de charge $-\frac{1}{2}$.

Dans le cadre de la théorie des champs, Ezawa et Tze [42] notent qu'un unique champ de matière $\phi(x)$ ne peut être utilisé dans tout l'espace-temps en présence d'un monopôle magnétique. Ils utilisent, un formalisme dépendant d'un chemin : $\phi(x, \mathcal{P}) = e^{\int_{\infty}^x A} \phi(x)$ où \mathcal{P} est un chemin de l'infini vers x . Ce nouveau champ de matière est invariant de jauge. Dans le même esprit, soit \mathcal{C} un chemin d'un point arbitraire $\vec{x}_0 \in U^S$ vers \vec{x} . La fonction d'onde après un transport adiabatique de \vec{x}_0 vers \vec{x} est

$$\psi^\sharp(\vec{x}, \mathcal{C}) = \begin{cases} e^{-\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} A_+^S} |+, \vec{x}\rangle^S & \text{si } \vec{x} \in U^S \\ e^{-\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}_1} A_+^S} e^{-\int_{\vec{x}_1}^{\vec{x}} A_+^N} |+, \vec{x}\rangle^N & \text{si } \vec{x} \in U^N, \text{ avec } \vec{x}_1 \in U_N \cap U_S \cap \mathcal{C} \end{cases} \quad (4.64)$$

On voit que le formalisme utilisé par Ezawa et Tze pour définir un champ de matière en présence d'un monopôle magnétique est similaire à la formule de transport adiabatique. On voit encore, que le système dynamique quantique contrôlé par \mathcal{C} dans \mathcal{M} est similaire à une particule matérielle chargée astreinte à se déplacer le long de \mathcal{C} en présence du monopôle magnétique.

Pour plus détails sur la théorie des monopôles de Dirac, le lecteur peut se reporter à [129, 87, 74, 28, 96].

4.2.3 Monopôles magnétiques adiabatiques standards

Dans cette partie, nous étudierons un certain nombre de cas standards de monopôles adiabatiques, n'impliquant que des croisements simples.

Monopôles de Dirac

On a vu que F associé à une unique valeur propre non-dégénérée divergeait aux points où celle-ci croise une autre valeur propre non-dégénérée. Le croisement apparaît donc comme un monopôle magnétique. Si on considère un espace actif multi-dimensionnel avec pour potentiel de jauge $A \in C^0(\mathcal{A}, \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{u}(M)))$, si la valeur propre E_a croise la valeur propres E_b en \vec{Q} , les champs

magnétiques (les champs adiabatiques diagonaux), $F_a = dA_{aa}$ et $F_b = dA_{bb}$ divergent en \vec{Q} , on a alors des monopôles magnétiques associés à chacun de ces états (les monopôles sont de charge inverse). On dira que le monopôle associé à F_a est un monopôle $U(1)$, de même pour celui associé à F_b . Lorsqu'on considère le couple d'états, on dira que le double monopôle est un monopôle $SU(2)$. Le champ $F_{\{a,b\}} = dA_{\{a,b\}} + A_{\{a,b\}} \wedge A_{\{a,b\}}$ (où $A_{\{a,b\}}$ est la matrice extraite $\begin{pmatrix} A_{aa} & A_{ab} \\ A_{ba} & A_{bb} \end{pmatrix}$), du monopôle $SU(2)$ va être étudié dans la suite, mais il est clair que l'information apportée par les deux monopôles $U(1)$ est redondante avec l'information apportée par le monopôle $SU(2)$. Dans la littérature de la théorie des champs, il existe une description alternative au modèle de Dirac des monopôles magnétiques. Cette description porte le nom de monopôles magnétiques de 't Hooft-Polyakov. On retrouve cette double description ici. Les monopôles $U(1)$ sont des monopôles de Dirac.

Monopôles de 't Hooft-Polyakov

La théorie de Dirac des monopôles magnétiques pose en physique des particules certains problèmes (même avec l'élimination des cordes par la méthode de Wu-Yang). Le principal d'entre eux étant que l'énergie du monopôle est divergente. D'autre part, pour être tout à fait satisfaisante, une théorie de monopôles magnétiques devrait tenir compte des interactions nucléaires faibles. C'est pour résoudre ces problèmes que 't Hooft et Polyakov ont proposés un autre modèle de monopôles magnétiques, fondé sur l'interaction électrofaible (cf. [45, 1]). Cette théorie est la suivante. On considère le groupe de jauge $SU(2)$. L'algèbre de Lie de $SU(2)$, $\mathfrak{su}(2)$, est engendrée par les matrices de Pauli :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.65)$$

Ces matrices satisfont à la règle de commutation suivante

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ij}^k \sigma_k \quad (4.66)$$

ϵ étant le symbole de Levi-Civita. Les constantes de structure de cette algèbre avec les matrices de Pauli pour générateurs sont donc $C_{ij}^k = 2i\epsilon_{ij}^k$. On peut munir $\mathfrak{su}(2)$, comme toute algèbre de Lie, d'une forme bilinéaire naturelle, la forme de Killing [18]. Celle-ci est définie par :

$$K_{ij} = C_{ik}^l C_{jl}^k = -4\epsilon_{ik}^l \epsilon_{il}^k = 4\epsilon_{ik}^l \epsilon_i^l{}_k = 8\delta_{ij} \quad (4.67)$$

On note $\langle \cdot, \cdot \rangle_K$ cette forme de Killing, i.e. si $A = A^i \sigma_i \in \mathfrak{su}(2)$ et $B = B^i \sigma_i \in \mathfrak{su}(2)$, alors $\langle A, B \rangle_K = K_{ij} A^i B^j$. On remarque enfin que l'algèbre $(\mathfrak{su}(2), +, [, \cdot], \langle \cdot, \cdot \rangle_K)$ est isomorphe à l'algèbre $(\mathbb{R}^3, +, \wedge, \cdot)$ (où ici \wedge désigne le produit vectoriel et pas le produit extérieur, \cdot désigne le produit scalaire), par les relations suivantes

$$A = A^i \sigma_i \leftrightarrow \vec{A} = (A^1, A^2, A^3) \quad (4.68)$$

$$[A, B] = A^i B^j [\sigma_i, \sigma_j] = 2i A^i B^j \epsilon_{ij}^k \sigma_k = 2i (\vec{A} \wedge \vec{B})^k \sigma_k \quad (4.69)$$

$$\langle A, B \rangle_K = 8 \vec{A} \cdot \vec{B} \quad (4.70)$$

Ces propriétés de $\mathfrak{su}(2)$ étant rappelées, on revient au modèle de 't Hooft-Polyakov des monopôles magnétiques. On considère $\phi \in \Omega^0(\mathbb{R}^3, \mathfrak{su}(2))$ un champ de Higgs, sur lequel agit $SU(2)$ par la représentation adjointe, i.e. $\text{Ad}(g)\phi = g\phi g^{-1}$, $\forall g \in SU(2)$. Ici \mathbb{R}^3 est la variété de base du fibré électrofaible $(F_{EW}, \mathbb{R}^3, SU(2), \pi_{EW})$, donc l'espace physique ordinaire. $\phi = \phi^i \sigma_i$, on associe au champ de Higgs un champ de vecteurs $\vec{\phi} = (\phi^1, \phi^2, \phi^3)$. On note traditionnellement par $W \in \Omega^1(\mathbb{R}^3, \mathfrak{su}(2))$ le potentiel de jauge électrofaible et par $G = dW \in \Omega^2(\mathbb{R}^3, \mathfrak{su}(2))$ le champ électrofaible. La dérivée

covariante sur le champ de Higgs est alors $D_\mu\phi = \partial_\mu\phi - [W_\mu, \phi]$ ou encore $D_\mu\vec{\phi} = \partial_\mu\vec{\phi} - 2\vec{W}_\mu \wedge \vec{\phi}$. Dans le modèle de 't Hooft-Polyakov, on pose que le potentiel a la forme particulière suivante

$$W_\mu = \frac{1}{2}[\phi, \partial_\mu\phi] = \phi\partial_\mu\phi \quad \vec{W}_\mu = \vec{\phi} \wedge \partial_\mu\vec{\phi} \quad (4.71)$$

le champ de Higgs étant normalisé, i.e. $\phi\phi = I_2$, on remarquera que $\phi\partial_\mu\phi = -\partial_\mu\phi\phi$ et donc $[\phi, \partial_\mu\phi] = 2\phi\partial_\mu\phi$. On a alors

$$G_{\mu\nu} = [\partial_\mu\phi, \partial_\nu\phi] \quad \vec{G}_{\mu\nu} = 2\partial_\mu\vec{\phi} \wedge \partial_\nu\vec{\phi} \quad (4.72)$$

On ne considère pas le champ $F = dW + W \wedge W$ qui est nul (ce qui assure la non-divergence de l'énergie). Pour correspondre à la réalité physique, on demande aux champs d'être à symétrie sphérique et de correspondre à une particule de masse finie, les solutions doivent alors être prises sous la forme suivante [1]

$$W^\pm = W^1 \pm W^2 = gf(r)e^{\pm i\varphi}(\sin\theta d\varphi \pm \iota d\theta) \quad (4.73)$$

$$W^3 = g(1 - \cos\theta)d\varphi \quad (4.74)$$

où (r, θ, φ) sont les coordonnées polaires de \mathbb{R}^3 , g est une constante que l'on va interpréter comme la charge du monopôle et f est une fonction qui tend vers 1 quand r tend vers 0, et qui tend vers 0 quand r tend vers l'infini. On retrouve le potentiel de jauge du monopôle de Dirac dans W^3 , ce qui montre bien qu'il s'agit d'une généralisation de la théorie de Dirac. En théorie des champs, on interprète W^3 comme un champ de photons et W^\pm comme les champs des bosons médiateurs de l'interaction nucléaire faible. Le champ magnétique du monopôle de 't Hooft-Polyakov est alors défini par

$$B_{\mu\nu} = \frac{1}{16}\langle\phi, G\rangle_K \quad B_{\mu\nu} = \frac{1}{2}\vec{\phi} \cdot \vec{G}_{\mu\nu} = \vec{\phi} \cdot (\partial_\mu\vec{\phi} \wedge \partial_\nu\vec{\phi}) \quad (4.75)$$

Soit \mathcal{M} une surface fermée dans l'espace physique ordinaire, englobant zéro (position du monopôle magnétique). Il est clair que le flux du champ magnétique est

$$\int_{\mathcal{M}} B = \int_{\mathcal{M}} \vec{\phi} \cdot (\partial_\mu\vec{\phi} \wedge \partial_\nu\vec{\phi}) dR^\mu \wedge dR^\nu = 4\pi g \quad (4.76)$$

$\{R^\mu\}$ étant un système de coordonnées pour \mathcal{M} .

Proposition 7. Soit $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, U(1), \pi_P)$ un fibré principal, tel que \mathcal{M} soit compacte de dimension 2. Le fibré universel associé à \mathcal{P} est la fibration de Hopf $\mathcal{U} = (S^3, S^2, S^1, \pi_U)$. Soit $h : \mathcal{M} \rightarrow S^2$ l'application universelle. En considérant S^2 plongée dans \mathbb{R}^3 , on peut écrire $\vec{h} : \mathcal{M} \rightarrow S^2$ où $\vec{h}(\vec{R})$ ($\forall \vec{R} \in \mathcal{M}$) est un vecteur unitaire de \mathbb{R}^3 . On appelle, indice de Pontrjagin la quantité

$$\mathcal{I}_P = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{M}} \vec{h} \cdot (\partial_\mu\vec{h} \wedge \partial_\nu\vec{h}) dR^\mu \wedge dR^\nu \quad (4.77)$$

$\mathcal{I}_P \in \mathbb{Z}$.

Preuve :

Soit F la courbure de \mathcal{U} . On sait que F est de la forme

$$F = g \frac{\epsilon_{ijk} x^i dx^j \wedge dx^k}{r^3} \quad (4.78)$$

puisque la courbure du fibré de Hopf a été explicité à la section concernant les monopôles de Dirac.

$$h^*F = g\epsilon_{ijk} h^i \partial_\mu h^j \partial_\nu h^k dR^\mu \wedge dR^\nu \quad (4.79)$$

car $\vec{h} \cdot \vec{h} = 1$. Soit \check{c}_1 la première classe de Chern pour le fibré de Hopf.

$$\check{c}_1 = \frac{1}{2\pi} \int_{S^2} F = 2g \in \mathbb{Z} \quad (4.80)$$

mais

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{M}} h^* F = \frac{1}{2\pi} \int_{h(\mathcal{M})} F = \frac{1}{2\pi} \int_{S^2} F \quad (4.81)$$

Donc

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{M}} h^* F \in \mathbb{Z} \quad (4.82)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{M}} \vec{h} \cdot (\partial_\mu \vec{h} \wedge \partial_\nu \vec{h}) dR^\mu \wedge dR^\nu \in \mathbb{Z} \quad (4.83)$$

■

$\vec{\phi}_{1,\mathcal{M}}$ est une application de \mathcal{M} vers S^2 . La charge du monopôle magnétique de 't Hooft-Polyakov est donc l'indice de Pontrjagin (la première classe de Chern du fibré universel), la condition de quantification de Dirac $g \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}$, est donc là encore liée à la topologie du fibré de Hopf. On remarquera, qu'à $r \in \mathcal{V}(+\infty)$ ($f(r) \sim 0$), $G \sim F_D \sigma_3$ où F_D est le champ magnétique d'un monopôle de Dirac. Ainsi à partir de la distance où les interactions faibles sont nulles, on retrouve la théorie de Dirac des monopôles magnétiques.

On revient maintenant au problème du transport adiabatique. On considère donc un système à deux niveaux d'Hamiltonien

$$H(\vec{r}) = \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix} \quad (4.84)$$

Les deux valeurs propres sont $\pm r = \pm \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, et on choisit les vecteurs propres suivants

$$|+, \vec{r}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2r(r+z)}} \begin{pmatrix} r+z \\ x+iy \end{pmatrix} \quad |-, \vec{r}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2r(r+z)}} \begin{pmatrix} x-iy \\ -z-r \end{pmatrix} \quad (4.85)$$

On regroupe ces vecteurs au sein d'une matrice $T(\vec{r}) \in \mathcal{M}_{2 \times 2}(\mathbb{C})$. On a alors le potentiel adiabatique $A = T^\dagger dT \in \Omega^1(\mathbb{R}^3, \mathfrak{su}(2))$. L'espace actif de dimension 2 étant parfaitement isolé (puisque ici c'est l'espace de Hilbert total), $F = dA + A \wedge A = 0$.

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{i}{2} \frac{ydx - xdy}{r(r+z)} & \frac{(r^2 - x^2 + zr + ixy)dx - i(r^2 - y^2 + zr - ixy)dy}{2r^2(r+z)} - \frac{(x-iy)dz}{2r^2} \\ -\frac{(r^2 - x^2 + zr - ixy)dx + i(r^2 - y^2 + zr + ixy)dy}{2r^2(r+z)} + \frac{(x+iy)dz}{2r^2} & \frac{i}{2} \frac{ydx - xdy}{r(r+z)} \end{pmatrix} \quad (4.86)$$

On introduit les coordonnées polaires $\theta = \arctan \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}$ et $\varphi = \arctan \frac{y}{x}$. On a alors

$$T(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} & -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \sin \varphi \sin \frac{\theta}{2} \sigma_1 + \cos \varphi \sin \frac{\theta}{2} \sigma_2 + \cos \frac{\theta}{2} \sigma_3 \quad (4.87)$$

et en définitive :

$$A = i \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) d\varphi & \frac{e^{-i\varphi}}{2} (-\sin \theta d\varphi - i d\theta) \\ \frac{e^{i\varphi}}{2} (-\sin \theta d\varphi + i d\theta) & -\frac{1}{2}(1 - \cos \theta) d\varphi \end{pmatrix} \quad (4.88)$$

On reconnaît l'expression du potentiel d'un monopôle de 't-Hooft-Polyakov de charge $\frac{1}{2}$ pour $f(r) = 1$. La matrice des vecteurs propres T , s'interprète alors comme un champ de Higgs que l'on peut écrire

$$\vec{\phi} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \sin \varphi \\ \sin \frac{\theta}{2} \sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix} \quad (4.89)$$

qui est l'application vers le modèle universel de la fibration de Hopf (S^3, S^2, S^1, π_U) . Le champ électrofaible du monopôle adiabatique est alors

$$G = dA = \iota \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \sin \theta & \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)e^{i\varphi} & -\frac{1}{2} \sin \theta \end{pmatrix} d\varphi \wedge d\theta \quad (4.90)$$

Enfin le champ magnétique du monopôle est

$$B = \frac{1}{2} \vec{\phi} \cdot \vec{G} = \frac{\iota}{4} ((1 - \cos \theta) \sin \frac{\theta}{2} + \sin \theta \cos \frac{\theta}{2}) d\varphi \wedge d\theta \quad (4.91)$$

$$= \frac{\iota}{2} \sin \frac{\theta}{2} d\varphi \wedge d\theta \quad (4.92)$$

$$\frac{-\iota}{4\pi} \int_{S^2} B = \frac{1}{2} \quad (4.93)$$

En résumé, la description du transport adiabatique en présence d'un croisement simple décrit par le groupe de jauge $SU(2)$ est la suivante. Le système dynamique est équivalent à une particule chargée, astreinte à se déplacer le long d'un chemin \mathcal{C} dans \mathcal{M} où règne un champ électrofaible G produit par un monopôle magnétique de 't Hooft-Polyakov (le croisement) et un champ Higgs T (la section du fibré adiabatique). On notera une différence importante avec la physique des particules, dans l'analogie entre transport adiabatique et interaction électrofaible, le champ de force faible ne devient pas nul avec la distance au monopôle ($f(r) = 1$). L'*interaction faible adiabatique* et l'*interaction électromagnétique adiabatique* ont la même portée.

On remarquera que dans cette description, l'espace universel généralisé \mathbb{R}^3 , peut être considéré comme l'algèbre de Lie $\mathfrak{su}(2)$, la forme de Killing mesurant alors les distances quantiques.

Vortexes magnétiques

On considère un Hamiltonien dépendant de deux paramètres $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, tel que

$$H(x, y) = \begin{pmatrix} y & x \\ x & -y \end{pmatrix} \quad (4.94)$$

Les valeurs propres de H sont les suivantes :

$$E_{\pm}(x, y) = \pm \sqrt{x^2 + y^2} = \pm r \quad (4.95)$$

On pose $\theta = \arctan \frac{x}{y}$, $U^N = \{\theta \in [-\pi/2 - \epsilon, \pi/2 + \epsilon]\}$ et $U^S = \{\theta \in [\pi/2 - \epsilon, 3\pi/2 + \epsilon]\}$ où ϵ est un petit paramètre. Dans les coordonnées de \mathbb{R}^2 , on a $U^N = \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$ et $U^S = \mathbb{R} \times \mathbb{R}^-$. Les vecteurs propres de H sont alors

$$|+, x, y\rangle^N = \frac{1}{\sqrt{2r(r+y)}} \begin{pmatrix} y+r \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (4.96)$$

$$|-, x, y\rangle^S = \frac{1}{\sqrt{2r(r-y)}} \begin{pmatrix} y-r \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (4.97)$$

$$|+, x, y\rangle^S = \frac{1}{\sqrt{2r(r-y)}} \begin{pmatrix} x \\ r-y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (4.98)$$

$$|-, x, y\rangle^N = \frac{1}{\sqrt{2r(r+y)}} \begin{pmatrix} x \\ y+r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (4.99)$$

La fonction de transition est donc

$$g^{NS}(\vec{R}) = \begin{pmatrix} N\langle +|+\rangle^S & N\langle +|-\rangle^S \\ N\langle -|+\rangle^S & N\langle -|-\rangle^S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.100)$$

définissant un fibré principal $(P, S^1, O(2), \pi_P)$. Le potentiel de jauge est alors

$$A^N(x, y) = \frac{1}{2} \frac{ydx - xdy}{x^2 + y^2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{so}(2)) \quad (4.101)$$

On retrouve le potentiel d'un monopôle magnétique de Dirac de charge $\frac{1}{2}$, ce qui est tout à fait normal puisque $SO(2) \simeq U(1)$. Considérons maintenant l'Hamiltonien

$$H(x, y, z) = \begin{pmatrix} x & y & 0 \\ y & -x & 0 \\ 0 & 0 & z \end{pmatrix} \quad (4.102)$$

Les valeurs propres de cet Hamiltonien sont $\pm\sqrt{x^2 + y^2}$ et z , et il n'est pas difficile de voir que tous les plans $z = Cste$ correspondent à la situation décrite plus haut d'un monopôle $SO(2)$. En clair, tout se passe comme si l'axe z était un monopôle magnétique qui n'est pas ponctuel mais linéaire. Un tel objet porte dans la littérature le nom de vortexe magnétique (cf. [2, 1, 66]). On parle aussi de cordes magnétiques, de cordes électrofaibles ou encore de cordes cosmiques. Ces cordes sont très différentes des cordes de Dirac, elles sont invariantes de jauge et émettent un champ magnétique (le champ diverge au niveau des cordes de Dirac, mais est immédiatement nul en dehors de la corde). Les cordes magnétiques satisfont à une condition de quantification de Dirac, la circulation du potentiel vecteur sur un chemin fermé entourant la corde est toujours $2\pi n$ avec $n \in \mathbb{Z}$. n est invariant par déformation du chemin. On ne parle pas de charge dans ce cas, puisque on ne peut pas englober la singularité par une sphère, n est appelé le nombre d'enroulements de la corde. Dans le cas d'un monopôle, ce nombre n'a de sens que pour un espace à deux dimensions, alors que pour une corde, il existe dans un espace à 3 dimensions.

4.3 Passages adiabatiques, trous de ver et espaces parallèles

4.3.1 Régimes adiabatiques purs / transitions soudaines

On s'intéresse aux régimes dynamiques où l'évolution des paramètres de contrôle est suffisamment lente pour que le système reste sur son état propre instantané d'origine. On supposera que tous les états sont globalement non-dégénéré et qu'il n'y a pas de croisement faisant intervenir plus de deux états. Lorsque les paramètres de contrôle amènent le système sur un croisement, alors le système passe subitement de l'état propre d'origine vers l'état qui vient d'être croisé. C'est ce que l'on appelle un passage adiabatique. La topologie de ces passages a été étudiée de manière très approfondie par Guérin, Jauslin et Yatsenko [148, 60, 56, 59, 61, 58].

Supposons que le chemin \mathcal{C} ne rencontre qu'un croisement entre les valeurs propres non-dégénérées E_a et E_b à l'instant t_q à la position $\vec{R}(t_q)$. Alors la fonction d'onde aura la forme suivante

$$\psi^\sharp(t) = \begin{cases} e^{-\int_0^t \langle a, \vec{R}(t') | \partial_{t'} | a, \vec{R}(t') \rangle dt'} |a, \vec{R}(t)\rangle & \text{si } t < t_q \\ e^{-\int_0^{t_q} \langle a, \vec{R}(t') | \partial_{t'} | a, \vec{R}(t') \rangle dt'} e^{-\int_{t_q}^t \langle b, \vec{R}(t') | \partial_{t'} | b, \vec{R}(t') \rangle dt'} |b, \vec{R}(t)\rangle & \text{si } t > t_q \end{cases} \quad (4.103)$$

Ainsi dans ce régime $\mathbb{P}e^{-\int A}$ est le produit de matrices diagonales tant que le chemin évite les croisements, par des matrices de permutations au niveau des croisements. Comment interpréter le rôle des monopoles magnétiques dans ces régimes où on n'évite plus les croisements? On sait que le

fibré qui va décrire cette dynamique est $(P, \mathcal{M}, T^M, \pi_P)$ somme de Whitney des fibrés adiabatiques pour un seul état. À chacun des états de l'espace actif $\{|a, \vec{R}\}_{a=1, \dots, M}$, on associe une copie de la variété de base $\{\mathcal{M}_a\}_a$. On "fibre" \mathcal{M}_a par le fibré linéaire correspondant $(L_a, \mathcal{M}_a, \mathbb{C}, \pi_a)$. Ce qui définit un potentiel de jauge $A_a = \langle a, \vec{R} | d_{\mathcal{M}_a} | a, \vec{R} \rangle$ et une courbure $F_a = d_{\mathcal{M}_a} A_a, \forall a = 1, \dots, M$. Ainsi, si la valeur propre E_a croise E_b au point $Q \in \mathcal{M}$ (variété modèle), alors F_a présente une divergence (un monopole magnétique) au point \vec{Q} dans \mathcal{M}_a et F_b diverge au point \vec{Q} dans \mathcal{M}_b . Le régime adiabatique pur / transitions soudaines, apparaît alors dans notre analogie comme suivant. La particule chargée virtuelle représentante du système, se déplace le long du chemin $[0, t_q[\ni t \mapsto \vec{R}(t) \in \mathcal{M}_a$ dans l'espace \mathcal{M}_a . Si $\vec{R}(t_q) = \vec{Q}$, alors à $t = t_q$, quand la particule rencontre le monopôle, celle-ci passe sur l'espace \mathcal{M}_b , puis continue son chemin dans \mathcal{M}_b suivant la paramétrisation $]t_q, T] \ni t \mapsto \vec{R}(t) \in \mathcal{M}_b$. Le monopôle semble alors relier les espaces parallèles \mathcal{M}_a et \mathcal{M}_b . Cette situation est tout à fait analogue à la théorie des "trous de ver" en relativité générale. Deux univers parallèles qui présentent chacun un trou noir dont les "fonds" ont fusionnés, sont reliés par le passage que constitue ces deux trous noirs. Le système constitué des deux trous noirs est appelé un trou de ver. Dans notre modèle, en interprétant F_a , la courbure du fibré \mathcal{M}_a , comme la courbure de la variété \mathcal{M}_a , alors le croisement apparaît comme un point de courbure infinie, c'est à dire un trou noir. On peut interpréter F_a comme la courbure de \mathcal{M}_a car celle-ci est à l'origine "molle", elle n'a pas de métrique naturelle, sauf la métrique de Fubini-Study, qui justement est la métrique compatible avec la jauge adiabatique de courbure F_a . Enfin si \mathcal{M}_a est une surface (dimension 2), l'analogie est parfaite en identifiant \mathbb{C} à \mathbb{R}^2 , on peut considérer $(L_a, \mathcal{M}_a, \mathbb{R}^2, \pi_a)$ comme le fibré tangent à \mathcal{M}_a , de sorte que F_a est bien la courbure (au sens usuel du terme) de \mathcal{M}_a équipé du pull-back de la métrique de Fubini-Study. La connexion adiabatique apparaît alors comme l'analogue de la connexion de la relativité générale.

L'image "gravitation relativiste" du système dynamique est donc la suivante : le système est modélisé par une particule se déplaçant dans un des espaces parallèles \mathcal{M}_a , de courbure F_a , où existent des trous de ver reliant cet espace aux autres espaces parallèles. Les deux images du système dynamique, électromagnétique et gravitation relativiste, sont tout à fait compatibles. En effet, on montre qu'en relativité générale, du point de vu de ses propriétés magnétiques, rien ne distingue un trou de ver d'un monopôle magnétique de Dirac, cf. [43]. De plus, la relativité générale peut être réécrite comme une théorie de jauge $SU(2)$ (formulation relationiste de la relativité générale). Dans ce cas, le potentiel de jauge porte le nom de spin-connexion. C'est donc une image gravimagnétique qui modélise la système dynamique, dans laquelle les croisements apparaissent comme des monopôles-trous de ver.

4.3.2 Régimes avec couplages adiabatiques off-diagonaux

On se place maintenant dans le cadre des régimes où la dynamique est suffisamment lente pour que l'espace actif soit isolé, mais où il reste des couplages non-adiabatiques entre les états internes à l'espace actif. Dans ce cas, des transferts partiels de population peuvent survenir entre les états. La probabilité d'occupation d'un état propre instantané n'est en général pas 1, et le système se trouve dans une superposition quantique d'états propres. Dans l'analogie gravimagnétique cette situation se traduit par le modèle suivant. Il existe toujours M espaces parallèles \mathcal{M}_a , avec pour courbure-champ magnétique dA_{aa} . Les croisements de valeurs propres apparaissent toujours comme des monopôles magnétiques-trous de ver entre les espaces parallèles. Mais pour reproduire la superposition d'états propres, on doit considérer que la particule virtuelle modélisant le système, se trouve sur plusieurs espaces parallèles à la fois. En d'autres termes, elle se trouve sur une superposition quantique d'espaces parallèles. Les interférences entre les transports adiabatiques purs dues aux transitions non-adiabatiques, s'interprètent alors comme des interférences entre espaces parallèles.

Il est très remarquable de retrouver ici une des écoles d'interprétation de la mécanique quantique,

l'interprétation d'Everett et Hartle. Cette interprétation a été proposée dans le but d'étudier la cosmologie quantique, c'est à dire la fonction d'onde de l'Univers dans son entier. En cosmologie quantique, il est impossible d'utiliser l'interprétation de l'école de Copenhague, puisque celle-ci fait intervenir un expérimentateur extérieur au système. Rappelons que la parabole du chat de Schrödinger dans cette interprétation se traduit en ces termes : tant que la boîte est fermée le chat est à la fois vivant et mort. L'information sur la vie du chat n'existe pas dans la boîte en accord avec la violation des inégalités de Bell. L'expérimentateur quand il ouvre la boîte, perturbe l'état du chat et le projette soit dans la vie soit dans la mort. Mais lorsque le système est l'Univers tout entier, il n'y a pas d'expérimentateur extérieur. Pour résoudre ce problème, Everett et Hartle proposent l'interprétation suivante. Il existe deux Univers parallèles (dans le langage de Everett-Hartle, on dit plutôt deux branches d'univers), l'un dans lequel le chat est vivant, l'autre dans lequel il est mort. Lorsqu'on ouvre la boîte, on se contente de découvrir dans lequel de ces Univers nous vivons. Ainsi, il y a bien une information cachée, pas sur l'état de vie du chat, mais sur l'Univers dans lequel on vit. Cette interprétation est toujours en accord avec la violation des inégalités de Bell. En effet, les expériences sur les inégalités de Bell, montrent qu'il n'a pas de variables cachées dans la boîte. Dans l'interprétation de Everett-Hartle, il n'y a pas de variables cachées dans la boîte, la variable cachée se trouve dans l'Univers dans son entier. Pour montrer l'existence de cette variable, il faudrait faire des mesures de Bell, sur l'Univers entier en sortant de celui-ci, ce qui est impossible. En d'autres termes, les expériences de Bell montrent qu'il n'y a pas de variables cachées locales (dans la boîte), mais n'excluent pas l'existence de variables cachées globales, ce qu'exploite l'interprétation de Everett-Hartle. Le problème avec cette interprétation, est le statut des interférences. Dans une expérience de type trous d'Young, pour expliquer la figure d'interférences qui apparaît, même avec une source n'envoyant qu'une particule à la fois, l'école de Copenhague affirme que la particule passe simultanément par les deux trous. Dans l'interprétation d'Everett-Hartle, la particule ne passe que par un seul trou, le trou 1 sur une branche d'Univers et le trou 2 sur une autre branche. Pour expliquer la figure d'interférence, la solution est de supposer que les deux branches d'Univers interfèrent l'une avec l'autre. On retrouve tous les ingrédients de l'interprétation d'Everett-Hartle dans notre analogie, l'Univers étant remplacé par la variété de contrôle du système. Notons que l'analogie avec la cosmologie quantique est bien plus forte encore. En effet, certaines théories qui considèrent le passage du mur de Planck comme une transition de phase (différenciation de la gravitation des autres forces), affirment que cette transition de phase n'a pas été parfaite et a produit des défauts topologiques (comme la transition de phase liquide-solide qui peut produire des défauts dans le cristal solide, comme des clivages par exemple). Les défauts de dimension 2, sont appelés murs domaniaux, ceux de dimension 1 sont appelés des cordes cosmiques et s'avèrent être des vortexes magnétiques. Enfin les défauts ponctuels de l'Univers satisfont à toutes les propriétés des monopôles magnétiques. Dans notre modélisation des systèmes dynamiques quantiques, on retrouve ces entités de la cosmologie quantique, monopôles et vortexes magnétiques.

4.4 Notion de sous-espaces actifs - champs matriciels

Définition 9 (Sous-espace actif). *Soit $(P, \mathcal{M}, U(M), \pi_P)$ le fibré adiabatique et $(E, \mathcal{M}, \mathbb{C}^M, \pi_E)$ son fibré vectoriel associé. On rappelle que l'espace actif (se déformant) est $S(\vec{R}) = \pi_E^{-1}(\vec{R})$. On dit que $V(\vec{R}) \subset S(\vec{R})$ est un sous-espace actif de $S(\vec{R})$ de dimension $N < M$, si*

- $\exists I \subset \{1, \dots, M\}$, $\text{card} I = N$ tel que $V(\vec{R})$ soit engendré par $\{|a, \vec{R}\}_{a \in I}$.
- $\exists \mathcal{V}$ une sous-variété de \mathcal{M} , tel que pour tout chemin \mathcal{C} paramétré par $t \mapsto \vec{R}(t) \in \mathcal{V}$, et pour toute condition initiale $\psi_0 \in V(\vec{R}(0)) \subset S(\vec{R}(0))$, le transport parallèle de ψ_0 au dessus de \mathcal{C} reste dans $V(\vec{R}(t))$.
- $\forall \vec{R} \in \mathcal{V}$, $\forall a \in I$, $\forall b \in \{1, \dots, M\} \setminus I$, $E_a(\vec{R}) \neq E_b(\vec{R})$.

$(\pi_V^{-1}(\mathcal{V}), \mathcal{V}, U(N), \pi_V)$ et $(\pi_{E_V}^{-1}(\mathcal{V}), \mathcal{V}, \mathbb{C}^N, \pi_{E_V})$ sont des sous-fibrés des fibrés adiabatiques. Un sous-espace actif est donc un espace qui est localement isolé (un espace actif étant isolé sur toute la variété \mathcal{M}). $V(\vec{R})$ peut croiser des valeurs propres qui lui sont extérieures, pour $\vec{R} \in \mathcal{M} \setminus \mathcal{V}$. On notera $S_I(\vec{R})$ le sous-espace actif associé aux labels I .

Théorème 8. Soit $(P, \mathcal{M}, U(M), \pi_P)$ et $(E, \mathcal{M}, \mathbb{C}^M, \pi_E)$ les fibrés adiabatiques. On note $S(\vec{R}) = \pi_E^{-1}(\vec{R})$ l'espace actif. Soit $I \subset \{1, \dots, M\}$ un ensemble d'indices. On note $S_I(\vec{R})$ le sous-espace actif associé à cet ensemble. Soit $A = \begin{pmatrix} \langle 1, \vec{R} | d | 1, \vec{R} \rangle & \dots & \langle 1, \vec{R} | d | M, \vec{R} \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle M, \vec{R} | d | 1, \vec{R} \rangle & \dots & \langle M, \vec{R} | d | M, \vec{R} \rangle \end{pmatrix} \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{u}(M))$ le potentiel de jauge adiabatique. On note A_I la matrice extraite de A pour les positions de I , i.e. si $I = \{i_1, \dots, i_N\}$ avec $i_j < i_{j+1}$, on a

$$A_I = \begin{pmatrix} \langle i_1, \vec{R} | d | i_1, \vec{R} \rangle & \dots & \langle i_1, \vec{R} | d | i_N, \vec{R} \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle i_N, \vec{R} | d | i_1, \vec{R} \rangle & \dots & \langle i_N, \vec{R} | d | i_N, \vec{R} \rangle \end{pmatrix} \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{u}(N)) \quad (4.104)$$

Soit $F_I = dA_I + A_I \wedge A_I$ le champ adiabatique dérivant de A_I .

- si $\exists \vec{Q} \in \mathcal{M}$ tel que $E_a(\vec{Q}) = E_b(\vec{Q})$ avec $a, b \in I$, alors $\lim_{\vec{R} \rightarrow \vec{Q}} \|F_I(\vec{R})\|_\infty < +\infty$, le champ n'est pas divergeant pour un croisement interne au sous-espace actif S_I .
- si $\exists \vec{Q} \in \mathcal{M}$ tel que $E_a(\vec{Q}) = E_b(\vec{Q})$ avec $a \in I$ et $b \notin I$, alors $\lim_{\vec{R} \rightarrow \vec{Q}} \|F_I(\vec{R})\|_\infty = +\infty$, le champ est divergeant si le sous-espace actif S_I croise un autre sous-espace actif.

La norme matricielle étant : $\forall B \in \mathcal{M}_{N \times N}(\mathbb{C}), \|B\|_\infty = \max_{a,b=1,\dots,N} |B_{ab}|$.

Démonstration :

Soit $Y \in \mathcal{M}_{n \times N}(\mathbb{C})$ ($n = \dim \mathcal{H}$) la matrice des vecteurs propres de I , i.e. $Y(\vec{R}) = (|i_1, \vec{R}\rangle, \dots, |i_N, \vec{R}\rangle)$.
 $A_I = Y^\dagger dY$. Donc

$$F_I = dA_I + A_I \wedge A_I = (\partial_\mu Y^\dagger \partial_\nu Y + Y^\dagger \partial_\mu Y Y^\dagger \partial_\nu Y) dR^\mu \wedge dR^\nu \quad (4.105)$$

On note S_I^\perp le complémentaire orthogonal de S_I dans S , et $I^\perp = \{1, \dots, M\} \setminus I$. Soient

$a, b \in I$, en utilisant la relation de fermeture, on a

$$[F_I]_{ab} = \left(\langle a, \vec{R} |_{\mu} | b, \vec{R} \rangle_{\nu} + \sum_{c \in I} \langle a, \vec{R} | \partial_{\mu} | c, \vec{R} \rangle \langle c, \vec{R} | \partial_{\nu} | b, \vec{R} \rangle \right) dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.106)$$

$$= \left(\sum_{d=1}^M \overline{\langle d, \vec{R} | \partial_{\mu} | a, \vec{R} \rangle} \langle d, \vec{R} | \partial_{\nu} | b, \vec{R} \rangle + \sum_{c \in I} \langle a, \vec{R} | \partial_{\mu} | c, \vec{R} \rangle \langle c, \vec{R} | \partial_{\nu} | b, \vec{R} \rangle \right) dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.107)$$

$$= \left(\sum_{d \in I^{\perp}} \overline{\langle d, \vec{R} | \partial_{\mu} | a, \vec{R} \rangle} \langle d, \vec{R} | \partial_{\nu} | b, \vec{R} \rangle + \sum_{c \in I} \left(\overline{\langle c, \vec{R} | \partial_{\mu} | a, \vec{R} \rangle} + \langle a, \vec{R} | \partial_{\mu} | c, \vec{R} \rangle \right) \langle c, \vec{R} | \partial_{\nu} | b, \vec{R} \rangle \right) dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.108)$$

$$= \left(\sum_{d \in I^{\perp}} \overline{\langle d, \vec{R} | \partial_{\mu} | a, \vec{R} \rangle} \langle d, \vec{R} | \partial_{\nu} | b, \vec{R} \rangle + \sum_{c \in I} \left(\partial_{\mu} \langle a, \vec{R} | c, \vec{R} \rangle \right) \langle c, \vec{R} | \partial_{\nu} | b, \vec{R} \rangle \right) dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.109)$$

$$= \left(\sum_{d \in I^{\perp}} \overline{\langle d, \vec{R} | \partial_{\mu} | a, \vec{R} \rangle} \langle d, \vec{R} | \partial_{\nu} | b, \vec{R} \rangle + \sum_{c \in I} (\partial_{\mu} \delta_{ab}) \langle c, \vec{R} | \partial_{\nu} | b, \vec{R} \rangle \right) dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.110)$$

$$= \sum_{d \in I^{\perp}} \overline{\langle d, \vec{R} | \partial_{\mu} | a, \vec{R} \rangle} \langle d, \vec{R} | \partial_{\nu} | b, \vec{R} \rangle dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.111)$$

$$= \sum_{d \in I^{\perp}} \frac{\langle a, \vec{R} | \partial_{\mu} H | d, \vec{R} \rangle \langle d, \vec{R} | \partial_{\nu} H | b, \vec{R} \rangle}{(E_a(\vec{R}) - E_d(\vec{R}))(E_b(\vec{R}) - E_d(\vec{R}))} dR^{\mu} \wedge dR^{\nu} \quad (4.112)$$

Si \vec{Q} est un point tel que deux valeurs propres $i \in I$ et $j \in I$ de S_I se croisent, comme dans la dernière expression $d \in I^{\perp}$, il n'y pas de diviseur $(E_i - E_j)$ dans l'expression $[F_I]_{ab} \forall a, b \in I$, donc $\|F_I(\vec{Q})\| < +\infty$. Par contre, si la valeur propre $i \in I$ croise la valeur propre $j \in I^{\perp}$ en \vec{Q} , alors des diviseurs $(E_i - E_j)$ apparaissent et $\lim_{\vec{R} \rightarrow \vec{Q}} [F_I]_{ia} = \lim_{\vec{R} \rightarrow \vec{Q}} [F_I]_{ai} = +\infty, \forall a \in I$.

Remarque : en toute rigueur, il apparaît aussi dans la relation de fermeture des termes $|k, \vec{R}\rangle \langle k, \vec{R}|$ où $|k, \vec{R}\rangle \notin S(\vec{R})$ ($k > M$) est un vecteur en dehors de l'espace actif. Ces vecteurs ne jouant aucun rôle, on les a omis ici. De plus, si $S(\vec{R})$ est un espace actif "parfait", il n'y a ni couplages non-adiabatiques, ni-croisements entre les états de S et ceux de S^{\perp} , ainsi $\langle a, \vec{R} | d | k, \vec{R} \rangle = 0, \forall a = 1, \dots, M$, et les termes issus du projecteur sur S^{\perp} sont nuls.

■

Il apparaît donc très clairement, que le champ adiabatique non-abélien F_I diverge si et seulement si S_I croise un autre sous-espace actif. Notons le cas très particulier $S(\vec{R}) = \mathcal{H}$, où l'espace actif est pris comme l'espace de Hilbert total. On a alors $A = T^{-1}dT$, ici T^{-1} est l'inversion d'une matrice carrée. A est ce que l'on appelle la connexion plate. En effet $F = dA + A \wedge A = dT^{-1} \wedge dT + T^{-1}dT \wedge T^{-1}dT = -T^{-2}dT \wedge dT + T^{-1}dT \wedge T^{-1}dT = -T^{-1}dT \wedge T^{-1}dT + T^{-1}dT \wedge T^{-1}dT = 0$. Lorsque l'espace actif est l'espace de Hilbert total, il est toujours parfaitement isolé (puisque c'est l'espace tout entier).

4.5 Surface de contrôle et monopôles adiabatiques

Dans la section précédente, nous avons vu avec des Hamiltoniens modèles, que les croisements de valeurs propres se comportaient comme des monopôles ou des vortexes magnétiques. Dans cette section, nous considérons le cas général, et montrerons qu'il se ramène au cas des Hamiltoniens modèles de la section précédente. Afin de simplifier la discussion, nous ne considérerons dans cette section que l'aspect monopôle de Dirac, sachant que si les termes scalaires (diagonaux) des champs, satisfont aux équations des monopôles de Dirac, les champs matriciels 2×2 satisfont aux équations des monopôles de 't Hooft-Polyakov. Dans cette section les indices grecques se rapportent à la variété de contrôle \mathcal{M} et les indices latin à l'espace universel généralisé \mathbb{R}^3 .

4.5.1 Immersion de la variété de contrôle, croisements et croisements évités

On considère un système dynamique quantique adiabatique décrit par un Hamiltonien auto-adjoint $H(\vec{R})$, avec $\vec{R} \in \mathcal{M}$. La variété de contrôle \mathcal{M} sera supposée dans toute cette section de dimension 2. On considère un croisement entre deux valeurs propres non-dégénérées de $H(\vec{R})$, E_1 et E_2 . Dans le voisinage \mathcal{U} de ce croisement, on peut éliminer les autres valeurs propres, et considérer l'Hamiltonien effectif associé à ce croisement

$$\forall \vec{R} \in \mathcal{U}, \quad H^{eff}(\vec{R}) = \begin{pmatrix} f^3(\vec{R}) & f^1(\vec{R}) - \imath f^2(\vec{R}) \\ f^1(\vec{R}) + \imath f^2(\vec{R}) & -f^3(\vec{R}) \end{pmatrix} \quad (4.113)$$

On obtient H^{eff} associé au sous-espace lié aux deux valeurs propres, par des techniques de partitionnement [85], qui peuvent éventuellement être combinées à une méthode KAM quantique [56], à une méthode d'élimination adiabatique [56], ou à une méthode d'opérateur d'onde stationnaire [85, 39] (cf. partie II). En comparant cet Hamiltonien avec l'Hamiltonien 4.55 associé au modèle universel généralisé, on a une application f de la variété de contrôle \mathcal{M} vers l'espace universel généralisé \mathbb{R}^3 , avec $f(\vec{R}) = (f^1(\vec{R}), f^2(\vec{R}), f^3(\vec{R})) \in \mathbb{R}^3$. On supposera que f est une application de classe \mathcal{C}^∞ . Soit l'application tangente $f_* : T_{\vec{R}}\mathcal{M} \rightarrow T_{f(\vec{R})}\mathbb{R}^3$. Si on suppose qu'il existe un vecteur tangent X à \mathcal{M} en $\vec{R} \in \mathcal{U}$ tel que $f_*(X) = \vec{0}$, alors dans le modèle universel, $f(\mathcal{U})$ est unidimensionnel en \vec{R} , et par conséquent la direction X dans la variété de contrôle est associée à une modification des paramètres de contrôle d'efficacité nulle. Ce cas "pathologique" est possible, mais afin de simplifier la discussion, nous nous plaçons dans la situation où $\ker f_* = \{0\}$ (f_* injective), et donc où f est une immersion de \mathcal{U} dans \mathbb{R}^3 . On remarquera par contre, que l'on ne suppose pas que f est un plongement, plusieurs points de \mathcal{M} pourront correspondre à un même point dans l'espace universel généralisé.

On a un croisement de niveaux en $\vec{R}_0 \in \mathcal{U}$ si et seulement si $f(\vec{R}_0) = 0$. Bien qu'un seul monopôle magnétique soit présent dans l'espace universel généralisé \mathbb{R}^3 , on n'exclut pas la possibilité qu'il existe plusieurs monopôles (croisements de E_1 avec E_2) dans \mathcal{U} en plusieurs points $\{\vec{R}_i\}_{i=1,\dots,n}$ si $f(\vec{R}_1) = f(\vec{R}_2) = \dots = f(\vec{R}_n) = 0$. La possibilité d'une levée de dégénérescence n'est pas non plus exclue. Supposons qu'il existe une sous-variété $\mathcal{V} \subset \mathcal{U} \subset \mathcal{M}$, qui est contractée en 0 par f ($\forall \vec{R} \in \mathcal{V}, f(\vec{R}) = 0$). Dans ce cas, un chemin qui commence dans \mathcal{V} et qui sort de \mathcal{V} est une levée de dégénérescence. On peut penser que \mathcal{V} apparaît dans l'image électromagnétique comme une zone avec une densité magnétique de charge.

Un croisement évité apparaît dans cette analyse géométrique comme le fait que la variété immergée $f(\mathcal{U})$ n'inclut pas 0 mais passe au voisinage de 0, i.e. $\forall \vec{R} \in \mathcal{U}, f(\vec{R}) \neq 0$, mais $\exists \vec{R}_0$ et $\exists \epsilon$ une petite constante positive tels que $\|f(\vec{R}_0)\| = \sqrt{(f^1(\vec{R}_0))^2 + (f^2(\vec{R}_0))^2 + (f^3(\vec{R}_0))^2} = \epsilon$ et $\forall \vec{R} \in \mathcal{U}, \vec{R} \neq \vec{R}_0, \|f(\vec{R})\| > \epsilon$ (\vec{R}_0 est un minimum local de la norme vectorielle). On remarquera que 2ϵ est le gap énergétique du croisement évité (cf. fig. 4.1).

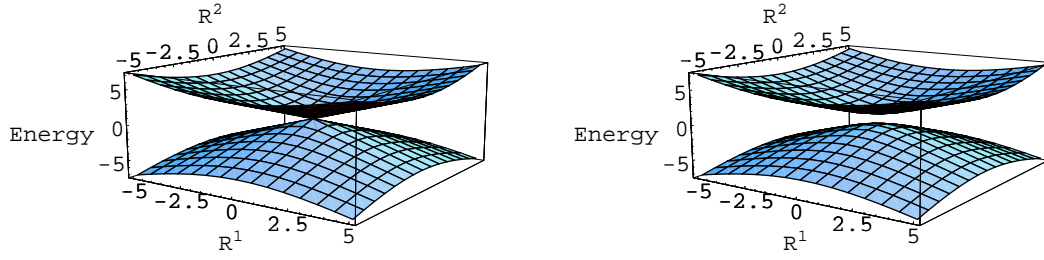


FIG. 4.1 – Graphes de deux surfaces énergétiques en fonction de la surface de contrôle \mathcal{M} pour les immersions suivantes : à gauche : $f^1(\vec{R}) = R^1$, $f^2(\vec{R}) = R^2$, $f^3(\vec{R}) = 0$; à droite : $f^1(\vec{R}) = R^1$, $f^2(\vec{R}) = R^2$ et $f^3(\vec{R}) = 1$. Pour la figure de gauche, le monopôle est dans $f(\mathcal{M})$ et on a un croisement de niveaux en $f(\vec{R}) = 0$. Sur la figure de droite, le monopôle n'est pas dans $f(\mathcal{M})$, mais $f(\mathcal{M})$ passe au voisinage de celui-ci pour $\vec{R} = 0$, à cette position se trouve un croisement évité.

4.5.2 Structure Riemannienne de la variété de contrôle

On a déjà vu dans les chapitres précédents que l'on pouvait équiper la variété de contrôle d'une métrique obtenue comme le pull-back de la métrique quantique du modèle universel. Localement, sur \mathcal{U} , la variété universelle associée à H^{eff} est la sphère $S^2 \simeq \mathbb{C}P^1$ équipée de sa métrique Riemannienne usuelle $\eta = r^2 \sin^2 \varphi d\theta^2 + r^2 d\varphi^2$ (où r est le rayon de la sphère). Mais cette métrique est induite par la métrique Euclidienne de \mathbb{R}^3 sur la sphère plongée centrée sur le monopôle. On rappelle à cette occasion que l'espace universel généralisé \mathbb{R}^3 , est feuilleté par la variété universelle S^2 . On note δ cette métrique ($\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$ ou 1 sinon). La rigidification de \mathcal{U} est obtenue par la métrique induite par l'immersion de \mathcal{U} dans \mathbb{R}^3 équipé de δ . La métrique naturelle dans \mathcal{U} est donc

$$g = g_{\mu\nu} dR^\mu dR^\nu = \delta_{ij} \frac{\partial f^i}{\partial R^\mu} \frac{\partial f^j}{\partial R^\nu} dR^\mu dR^\nu \quad (4.114)$$

Si l'on revient sur l'hypothèse que f est une immersion, on voit que g ne sera pas définie positive et donc ne sera pas rigoureusement une métrique.

4.5.3 Champ magnétique de la variété de contrôle

Dans l'espace universel généralisé \mathbb{R}^3 , on a le potentiel de jauge suivant (on choisit une des deux conventions) :

$$A = \frac{i}{2} \frac{x^2 dx^1 - x^1 dx^2}{r(r - x^3)} \in \Omega^1 \mathbb{R}^3 \quad (4.115)$$

Le champ magnétique produit par le monopôle est

$$B = dA = \frac{i}{2} \frac{x^1 dx^2 \wedge dx^3 + x^2 dx^3 \wedge dx^1 + x^3 dx^1 \wedge dx^2}{r^3} \in \Omega^2 \mathbb{R}^3 \quad (4.116)$$

En utilisant l'identification entre formes différentielles et analyse vectorielle $dx^i \leftrightarrow \begin{pmatrix} \delta_{1i} \\ \delta_{2i} \\ \delta_{3i} \end{pmatrix}$, on peut considérer A comme un champ de vecteurs de \mathbb{R}^3 : \vec{A} .

On rappelle la définition du star-opérateur de Hodge associé à une métrique q dans une variété X de dimension n :

$$\begin{aligned} *q : \Omega^r X &\rightarrow \Omega^{n-r} X \\ *q(dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_r}) &= \frac{\sqrt{|\det q|}}{(n-r)!} q^{i_1 j_1} \dots q^{i_r j_r} \epsilon_{j_1, \dots, j_n} dx^{j_{r+1}} \wedge \dots \wedge dx^{j_n} \end{aligned} \quad (4.117)$$

où ϵ est le symbole de Levi-Civita, $q^{ij} q_{jk} = \delta^i_k$ et $\det q = q_{1i_1} q_{2i_2} \dots q_{ni_n} \epsilon^{i_1, \dots, i_n}$. Dans \mathbb{R}^3 , on a simplement $*_\delta : \Omega^2 \mathbb{R}^3 \rightarrow \Omega^1 \mathbb{R}^3$, avec $*_\delta(dx^1 \wedge dx^2) = dx^3$. Alors $*_\delta B \in \Omega^1 \mathbb{R}^3$ peut être considéré comme un champ de vecteurs \vec{B} dans \mathbb{R}^3 . La relation $B = dA$ prend alors la forme $\vec{B} = \vec{\text{rot}} \vec{A}$.

On considère l'application cotangente $f^* : \Omega^* \mathbb{R}^3 \rightarrow \Omega^* \mathcal{M}$. Le potentiel de jauge de \mathcal{M} localement en \mathcal{U} est

$$f^* A = A_i \frac{\partial f^i}{\partial R^\mu} dR^\mu \quad (4.118)$$

On peut aussi calculer $f^* A$ avec les vecteurs propres de H^{eff}

$$f^* A = \langle 1, \vec{R} | d_{\mathcal{M}} | 1, \vec{R} \rangle = [f^* \langle +, \vec{x} | d_{\mathbb{R}^3} | +, \vec{x} \rangle]_{\vec{x}=f(\vec{R})} \quad (4.119)$$

Comme f^* est une application de chaîne pour la différentielle extérieure, le champ magnétique de \mathcal{M} dans \mathcal{U} est

$$f^* B = f^* d_{\mathbb{R}^3} A = d_{\mathcal{M}} f^* A = B_{ij} \frac{\partial f^i}{\partial R^\mu} \frac{\partial f^j}{\partial R^\nu} dR^\mu \wedge dR^\nu = 2B_{ij} \frac{\partial f^i}{\partial R^1} \frac{\partial f^j}{\partial R^2} dR^1 \wedge dR^2 \quad (4.120)$$

De même que dans \mathbb{R}^3 , le champ associé au formalisme électromagnétique usuel n'est pas $f^* B \in \Omega^2 \mathcal{M}$ mais $*_g f^* B \in \Omega^0 \mathcal{M}$ (en électromagnétisme sur un espace à deux dimensions, le champ magnétique est un champ scalaire).

$$*_g(dR^1 \wedge dR^2) = \sqrt{|\det g|} g^{1\mu} g^{2\nu} \epsilon_{\mu\nu} \quad (4.121)$$

$$= \sqrt{|\det g|} (g^{11} g^{22} - g^{12} g^{21}) \quad (4.122)$$

$$= \sqrt{|\det g|} \det g^{-1} \quad (4.123)$$

$$= \frac{\sqrt{|\det g|}}{\det g} \quad (4.124)$$

$$= \frac{\text{sgn}(\det g)}{\sqrt{|\det g|}} \quad (4.125)$$

Comme g est une métrique Riemannienne (puisque'elle est induite par la métrique Euclidienne), $\det g > 0$, donc

$$*_g f^* B = 2B_{ij} \frac{\partial f^i}{\partial R^1} \frac{\partial f^j}{\partial R^2} \frac{1}{\sqrt{\det g}} \quad (4.126)$$

Soit la 2-coforme

$$N = \frac{\partial f^i}{\partial R^1} \frac{\partial f^j}{\partial R^2} \frac{\partial}{\partial x^i} \wedge \frac{\partial}{\partial x^j} \quad (4.127)$$

$\vec{N} = *_\delta N$ est le vecteur normal à la surface immergée $f(\mathcal{M})$. On calcule la norme de \vec{N}

$$\|\vec{N}\|^2 = \delta_{kl} (*_\delta N)^k (*_\delta N)^l \quad (4.128)$$

$$= \delta_{kl} \frac{\partial f^i}{\partial R^1} \frac{\partial f^j}{\partial R^2} \epsilon_{ij}^k \frac{\partial f^n}{\partial R^1} \frac{\partial f^m}{\partial R^2} \epsilon_{nm}^l \quad (4.129)$$

$$= (\delta_{in} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jn}) \frac{\partial f^i}{\partial R^1} \frac{\partial f^j}{\partial R^2} \frac{\partial f^n}{\partial R^1} \frac{\partial f^m}{\partial R^2} \quad (4.130)$$

On a utilisé la propriété suivante du symbole de Levi-Civita : $\epsilon_{ij}^k \epsilon_{nm}^l \delta_{kl} = \delta_{in} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jn}$. De plus on a

$$\det g = g_{1\mu} g_{2\nu} \epsilon^{\mu\nu} \quad (4.131)$$

$$= \delta_{in} \frac{\partial f^i}{\partial R^1} \frac{\partial f^n}{\partial R^\mu} \delta_{jm} \frac{\partial f^j}{\partial R^2} \frac{\partial f^m}{\partial R^\nu} \epsilon^{\mu\nu} \quad (4.132)$$

$$= \delta_{in} \delta_{jm} \frac{\partial f^i}{\partial R^1} \frac{\partial f^j}{\partial R^2} \left(\frac{\partial f^n}{\partial R^1} \frac{\partial f^m}{\partial R^2} - \frac{\partial f^m}{\partial R^1} \frac{\partial f^n}{\partial R^2} \right) \quad (4.133)$$

$$= (\delta_{in} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jn}) \frac{\partial f^i}{\partial R^1} \frac{\partial f^j}{\partial R^2} \frac{\partial f^n}{\partial R^1} \frac{\partial f^m}{\partial R^2} \quad (4.134)$$

On voit donc que $\|\vec{N}\| = \sqrt{\det g}$. Soit $\vec{u}_n = \frac{1}{\sqrt{\det g}} \vec{N}$ le vecteur normal unitaire à $f(\mathcal{M})$. La densité du flux magnétique à travers $f(\mathcal{M})$ est alors

$$\vec{B} \cdot \vec{u}_N = \frac{1}{\sqrt{\det g}} \langle B, N \rangle = 2B_{ij} \frac{\partial f^i}{\partial R^1} \frac{\partial f^j}{\partial R^2} \frac{1}{\sqrt{\det g}} \quad (4.135)$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit de dualité entre les espaces tangents et cotangents (i.e. $\langle dx^i, \frac{\partial}{\partial x^j} \rangle = \delta_j^i$). En résumé

$$*_g f^* dA = *_g f^* B = *_g d_{\mathcal{M}} f^* A = \vec{B} \cdot \vec{u}_N \quad (4.136)$$

Le champ magnétique scalaire dans \mathcal{M} ($*_g f^* B$) est en fait le densité du flux du champ magnétique vectoriel de \mathbb{R}^3 à travers la surface immergée $f(\mathcal{M})$. Ce résultat est fondamental car il permet de définir le champ magnétique dans la surface de contrôle en toute généralité. La restriction à une surface est un cas important, c'est celui que l'on considérera presque toujours dans les applications. La répartition du champ peut alors prendre des formes très différentes suivant l'immersion. On a représenté figure 4.2 différents champs magnétiques en fonction de la manière dont est immergée \mathcal{M} dans \mathbb{R}^3 .

4.6 Charge apparente des monopôles magnétiques

Dans le modèle universel, le monopôle a une charge égale à $\frac{1}{2}$. Mais expérimentalement, c'est le champ magnétique de \mathcal{M} que l'on voit, et la charge apparente du monopôle dans \mathcal{M} peut être différente de $\frac{1}{2}$. Leboeuf et Mouchet [91] ont proposé une réalisation physique de monopôles magnétiques non-élémentaires dans les systèmes dynamiques adiabatiques par l'introduction de paramètres de contraintes. Ils ont exploré les propriétés de leurs monopôles non-élémentaires par l'analyse des cordes de Dirac. Dans cette section, nous construirons des monopôles non-élémentaires par une méthode différente qui utilise l'immersion de la variété de contrôle dans l'espace universel généralisé. Cette analyse est équivalente à la méthode suivie par Leboeuf et Mouchet mais a l'avantage d'être dans la continuité de ce que nous avons introduit dans les chapitres précédents. On ne reproduira pas ici la discussion sur les cordes de Dirac d'un monopôle non-élémentaire, le lecteur intéressé peut se reporter à [91].

4.6.1 Géométrie d'un croisement de niveaux

Dans le modèle universel, le monopôle a une charge magnétique égale à $\frac{1}{2}$. Cela correspond pour l'Hamiltonien 4.55, à un croisement conique des valeurs propres $\pm \sqrt{(x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2}$, un croisement conique étant un contact d'ordre 0 entre les surfaces énergétiques. On rappelle qu'un contact en \vec{R}_0 entre deux surfaces définies par les équations $z = E_+(R^1, R^2)$ et $z = E_-(R^1, R^2)$ dans l'espace (R^1, R^2, z) , est dit d'ordre r si et seulement si la fonction $E_+(R^1, R^2) - E_-(R^1, R^2)$ et chacune de ses dérivées d'ordre inférieur ou égale à r , ont un zéro en \vec{R}_0 . La notion d'ordre de

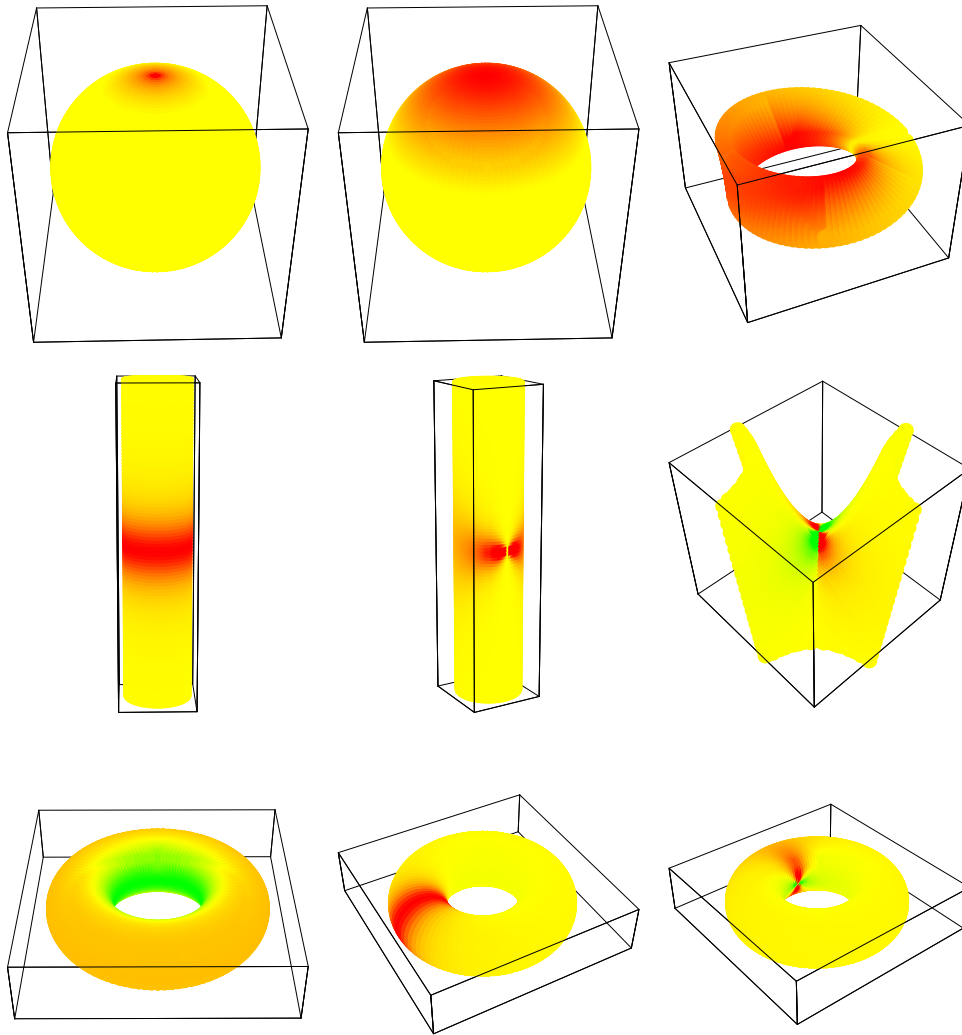


FIG. 4.2 – Quelques exemples de variétés immergées $f(\mathcal{M})$ avec leur densité de champ magnétique monopolaire $*_g f^*B$. De gauche à droite et de haut en bas : une sphère avec un monopôle sur le pôle nord, une sphère englobant un monopôle (mais pas centrée sur celui-ci), un Ruban de Möbius centré sur un monopôle, un cylindre englobant un monopôle, un cylindre avec un monopôle sur sa surface, une parabolôïde hyperbolique avec un monopôle en son centre, un tore centré sur un monopôle, un tore englobant un monopôle et un tore avec un monopôle sur sa surface. Les unités sont arbitraires, le jaune correspondant à un flux nul, le rouge à un flux positif important et le vert à un flux négatif important. Notons que pour le Ruban de Möbius, on a considéré $|*_g f^*B| = |\vec{B} \cdot \vec{u}_N|$ à cause de la non-orientabilité de cette surface.

contact est invariante sous difféomorphisme, donc cette notion est bien définie même sans équiper \mathcal{M} d'une métrique. Un exposé complet de la théorie des contacts de variétés peut être trouvé dans [94].

Pour l'Hamiltonien effectif H^{eff} , l'ordre de contact entre les surfaces énergétiques (l'ordre de l'intersection) dépend de l'immersion f . Soit $E_{\pm} = \pm \sqrt{f^i(\vec{R})f^j(\vec{R})\delta_{ij}}$ les valeurs propres de H^{eff} .

Soit $\epsilon(\vec{R}) = \frac{E_+(\vec{R}) - E_-(\vec{R})}{2}$, par définition si \vec{R}_0 est la position du croisement de niveaux $\epsilon(\vec{R}_0) = 0$ (i.e. $\forall i, f^i(\vec{R}_0) = 0$).

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial R^\mu} = \frac{\frac{\partial f^i}{\partial R^\mu} f^j \delta_{ij}}{\sqrt{f^i f^j \delta_{ij}}} \quad (4.137)$$

$$= \frac{\frac{\partial f^1}{\partial R^\mu} f^1}{\sqrt{(f^1)^2 + (f^2)^2 + (f^3)^2}} + \frac{\frac{\partial f^2}{\partial R^\mu} f^2}{\sqrt{(f^1)^2 + (f^2)^2 + (f^3)^2}} + \frac{\frac{\partial f^3}{\partial R^\mu} f^3}{\sqrt{(f^1)^2 + (f^2)^2 + (f^3)^2}} \quad (4.138)$$

Il est donc clair que

$$\forall i, \left. \frac{\partial f^i}{\partial R^\mu} \right]_{\vec{R}=\vec{R}_0} = 0 \Rightarrow \left. \frac{\partial \epsilon}{\partial R^\mu} \right]_{\vec{R}=\vec{R}_0} = 0 \quad (4.139)$$

L'ordre de contact entre les surfaces énergétiques est supérieur ou égale à 1 si $\forall i, \forall \mu, \left. \frac{\partial f^i}{\partial R^\mu} \right]_{\vec{R}=\vec{R}_0} = 0$. Plus généralement, on peut montrer que

$$\begin{aligned} \frac{\partial^n \epsilon}{\partial R^{\mu_1} \dots \partial R^{\mu_n}} &= \frac{1}{2\epsilon} \sum_{p=0}^{n-1} \sum_{\sigma \in S_n} \frac{1}{(n-p)! p!} \frac{\partial^{n-p} f^i}{\partial R^{\mu_{\sigma(1)}} \dots \partial R^{\mu_{\sigma(n-p)}}} \frac{\partial^p f^j}{\partial R^{\mu_{\sigma(n-p+1)}} \dots \partial R^{\mu_{\sigma(n)}}} \delta_{ij} \\ &\quad - \frac{1}{2\epsilon} \sum_{p=1}^{n-1} \sum_{\sigma \in S_n} \frac{1}{(n-p)! p!} \frac{\partial^{n-p} \epsilon}{\partial R^{\mu_{\sigma(1)}} \dots \partial R^{\mu_{\sigma(n-p)}}} \frac{\partial^p \epsilon}{\partial R^{\mu_{\sigma(n-p+1)}} \dots \partial R^{\mu_{\sigma(n)}}} \end{aligned} \quad (4.140)$$

où S_n est le groupe des permutations de $(1, \dots, n)$.

Donc, l'ordre du croisement est supérieur ou égale à r si $\forall n \leq r, \forall i, \forall \mu_1, \dots, \mu_n \left. \frac{\partial^n f^i}{\partial R^{\mu_1} \dots \partial R^{\mu_n}} \right]_{\vec{R}=\vec{R}_0} = 0$.

4.6.2 Analyse perturbative

Nous allons montrer que la charge apparente du monopôle magnétique dans \mathcal{M} est liée à l'ordre du croisement des valeurs propres, et donc est relié au nombre de dérivées nulles de f en \vec{R}_0 . On considère \mathcal{U} le voisinage de \vec{R}_0 . On suppose que $f(\mathcal{U})$ est tangent au plan $x^3 = 0$ dans \mathbb{R}^3 , i.e. que les cordes de Dirac sont orthogonales à $f(\mathcal{U})$. Si ce n'est pas le cas, on peut toujours faire un changement de jauge tel que les cordes de Dirac tournent jusqu'à être orthogonales à $f(\mathcal{U})$. En d'autres termes, on change le système de coordonnées de \mathbb{R}^3 de sorte que l'axe x^3 coïncide avec les cordes de Dirac. En accord avec cette hypothèse, en supposant \mathcal{U} suffisamment petit, on considère que $\forall \vec{R} \in \mathcal{U}, f^3(\vec{R}) \simeq 0$. Dans le plan $x^3 = 0$, on a le potentiel de jauge spécifique à un monopôle magnétique de charge $\frac{1}{2}$

$$A = \frac{i}{2} \frac{x^2 dx^1 - x^1 dx^2}{(x^1)^2 + (x^2)^2} = \frac{i}{2} \frac{x^i dx^j \epsilon_{ij}}{x^i x^j \delta_{ij}} \quad (4.141)$$

Notons que dans cette expression, le symbole de Kronecker δ_{ij} joue le rôle du tenseur métrique du plan Euclidien, et le symbole de Levi-Civita ϵ_{ij} joue le rôle du produit vectoriel de l'espace Euclidien; ils sont donc dépendant de la métrique (contrairement à ce qui précède, où le symbole de Levi-Civita a été utilisé pour représenter la somme sur les permutations).

Le potentiel de jauge dans \mathcal{M} au voisinage de \vec{R}_0 est

$$f^* A = \frac{i}{2} \frac{f^i(\vec{R}) \frac{\partial f^j}{\partial R^\mu} \epsilon_{ij} dR^\mu}{f^i(\vec{R}) f^j(\vec{R}) \delta_{ij}} \quad (4.142)$$

Mais au voisinage de \vec{R}_0 , on peut écrire le développement limité

$$\begin{aligned} f^i(\vec{R}) &= f^i(\vec{R}_0) + (R^\mu - R_0^\mu) \left. \frac{\partial f^i}{\partial R^\mu} \right]_{\vec{R}=\vec{R}_0} + \frac{(R^\mu - R_0^\mu)(R^\nu - R_0^\nu)}{2} \left. \frac{\partial^2 f^i}{\partial R^\mu \partial R^\nu} \right]_{\vec{R}_0} + \dots \\ &\dots + \frac{(R^{\mu_1} - R_0^{\mu_1}) \dots (R^{\mu_n} - R_0^{\mu_n})}{n!} \left. \frac{\partial^n f^i}{\partial R^{\mu_1} \dots \partial R^{\mu_n}} \right]_{\vec{R}_0} \\ &\quad + \mathcal{O}(((R^\mu - R_0^\mu)(R^\nu - R_0^\nu)\delta_{\mu\nu})^{n/2}) \end{aligned} \quad (4.143)$$

On suppose maintenant, que $\forall r \leq n-1, \forall i, \forall \mu_1, \dots, \mu_r \left. \frac{\partial^r f^i}{\partial R^{\mu_1} \dots \partial R^{\mu_r}} \right]_{\vec{R}=\vec{R}_0} = 0$ et donc que l'ordre de contact du croisement de niveaux est égal à $n-1$. Il est donc clair, que tout développement limité doit être d'ordre égale à n . $\forall \vec{R} \in \mathcal{U}$, on a

$$f^i(\vec{R}) \simeq \frac{(R^{\mu_1} - R_0^{\mu_1}) \dots (R^{\mu_n} - R_0^{\mu_n})}{n!} \left. \frac{\partial^n f^i}{\partial R^{\mu_1} \dots \partial R^{\mu_n}} \right]_{\vec{R}_0} \quad (4.144)$$

$$\frac{\partial f^i}{\partial R^\nu} \simeq \frac{(R^{\mu_1} - R_0^{\mu_1}) \dots (R^{\mu_{n-1}} - R_0^{\mu_{n-1}})}{(n-1)!} \left. \frac{\partial^n f^i}{\partial R^{\mu_1} \dots \partial R^{\mu_{n-1}} \partial R^\nu} \right]_{\vec{R}_0} \quad (4.145)$$

$$g_{\mu\nu}(\vec{R}) = \frac{\partial f^i}{\partial R^\mu} \frac{\partial f^j}{\partial R^\nu} \delta_{ij} \quad (4.146)$$

$$\begin{aligned} &\simeq \frac{(R^{\mu_1} - R_0^{\mu_1}) \dots (R^{\mu_{n-1}} - R_0^{\mu_{n-1}})}{(n-1)!} \left. \frac{\partial^n f^i}{\partial R^{\mu_1} \dots \partial R^{\mu_{n-1}} \partial R^\mu} \right]_{\vec{R}_0} \\ &\quad \times \frac{(R^{\nu_1} - R_0^{\nu_1}) \dots (R^{\nu_{n-1}} - R_0^{\nu_{n-1}})}{(n-1)!} \left. \frac{\partial^n f^j}{\partial R^{\nu_1} \dots \partial R^{\nu_{n-1}} \partial R^\nu} \right]_{\vec{R}_0} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (4.147)$$

$$\begin{aligned} f^i f^j \delta_{ij} &\simeq \frac{(R^{\mu_1} - R_0^{\mu_1}) \dots (R^{\mu_n} - R_0^{\mu_n})(R^{\nu_1} - R_0^{\nu_1}) \dots (R^{\nu_n} - R_0^{\nu_n})}{(n!)^2} \\ &\quad \times \left. \frac{\partial^n f^i}{\partial R^{\mu_1} \dots \partial R^{\mu_n}} \right]_{\vec{R}_0} \left. \frac{\partial^n f^j}{\partial R^{\nu_1} \dots \partial R^{\nu_n}} \right]_{\vec{R}_0} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (4.148)$$

$$\simeq \frac{(R^{\mu_n} - R_0^{\mu_n})(R^{\nu_n} - R_0^{\nu_n})}{n^2} g_{\mu_n \nu_n} \quad (4.149)$$

$$\simeq \frac{\mathcal{N}}{n^2} \quad (4.150)$$

On a donc

$$\begin{aligned} f^* A &\simeq \frac{m^2}{2\mathcal{N}} \left(\frac{(R^{\mu_1} - R_0^{\mu_1}) \dots (R^{\mu_n} - R_0^{\mu_n})}{n!} \left. \frac{\partial^n f^i}{\partial R^{\mu_1} \dots \partial R^{\mu_n}} \right]_{\vec{R}_0} \right. \\ &\quad \left. \times \frac{(R^{\nu_1} - R_0^{\nu_1}) \dots (R^{\nu_{n-1}} - R_0^{\nu_{n-1}})}{(n-1)!} \left. \frac{\partial^n f^j}{\partial R^{\nu_1} \dots \partial R^{\nu_n}} \right]_{\vec{R}_0} \epsilon_{ij} \right) \end{aligned} \quad (4.151)$$

Or le produit vectoriel dans \mathcal{M} induit par le produit vectoriel Euclidien est défini par

$$(R^\mu - R_0^\mu) dR^\nu \epsilon_{\mu\nu}^g = (R^\mu - R_0^\mu) dR^\nu \frac{\partial f^i}{\partial R^\mu} \frac{\partial f^j}{\partial R^\nu} \epsilon_{ij} \quad (4.152)$$

$$\begin{aligned} &\simeq (R^\mu - R_0^\mu) dR^\nu \frac{(R^{\mu_1} - R_0^{\mu_1}) \dots (R^{\mu_{n-1}} - R_0^{\mu_{n-1}})}{(n-1)!} \left. \frac{\partial^n f^i}{\partial R^{\mu_1} \dots \partial R^{\mu_{n-1}} \partial R^\mu} \right]_{\vec{R}_0} \\ &\quad \times \frac{(R^{\nu_1} - R_0^{\nu_1}) \dots (R^{\nu_{n-1}} - R_0^{\nu_{n-1}})}{(n-1)!} \left. \frac{\partial^n f^j}{\partial R^{\nu_1} \dots \partial R^{\nu_{n-1}} \partial R^\nu} \right]_{\vec{R}_0} \epsilon_{ij} \end{aligned} \quad (4.153)$$

en résumé, on a

$$f^*A \simeq \frac{ni}{2} \frac{(R^\mu - R_0^\mu)dR^\nu \epsilon_{\mu\nu}^g}{(R^\lambda - R_0^\lambda)(R^\rho - R_0^\rho)g_{\lambda\rho}} \quad (4.154)$$

en comparant cette expression avec 4.141, on voit que f^*A est le potentiel de jauge d'un monopôle de charge magnétique $\frac{n}{2}$ dans l'espace courbe \mathcal{M} de métrique g . On en conclut que, si la charge apparente du monopôle dans \mathcal{M} est $\frac{n+1}{2}$ alors le contact des surfaces énergétiques est d'ordre n .

4.6.3 Analyse topologique

L'analyse précédente a l'avantage de montrer que le potentiel de jauge dans \mathcal{M} correspond bien à un monopôle magnétique, mais on peut faire une analyse plus courte, basée sur la topologie. Soit S^1 un cercle de centre $(0, 0, 0)$ dans le plan $x^3 = 0$ de l'espace universel généralisé. On a vu que la charge du monopôle magnétique était liée à un invariant topologique des boucles de $\mathbb{R}^2 \setminus \{(0, 0)\}$, le nombre d'enroulements

$$\frac{-i}{2\pi} \oint_{S^1} A = \frac{1}{4\pi} \oint_{S^1} \frac{x^2 dx^1 - x^1 dx^2}{(x^1)^2 + (x^2)^2} = \frac{1}{2} \quad (4.155)$$

Soit S^1 un cercle sur \mathcal{M} de centre \vec{R}_0 contenu dans \mathcal{U} . $f(\mathcal{M})$ n'est pas une variété plate, mais si le rayon du cercle S^1 est suffisamment petit, on peut approcher le disque délimité par S^1 sur \mathcal{M} , par le disque se trouvant dans le plan tangent en \vec{R}_0 . Dans le voisinage de $f(S^1)$, $f(\mathcal{M})$ est approximativement plate. On introduit la coordonnée complexe de \mathcal{M} , $z = R^1 + iR^2$.

$$f(z) = \sqrt{(f^1(z))^2 + (f^2(z))^2} e^{i \arctan \frac{f^2(z)}{f^1(z)}} \quad (4.156)$$

$$= \epsilon(z) e^{i \arctan \frac{f^2(z)}{f^1(z)}} \quad (4.157)$$

Si l'ordre de contact est égale à $n-1$, ϵ a un zéro d'ordre n en $z_0 = R_0^1 + iR_0^2$. f étant holomorphe sur \mathcal{U} , on peut écrire $f(z) = (z - z_0)^n h(z)$, où $h(z)$ est une fonction holomorphe ne s'annulant pas, de plus on pose $(z - z_0)^n = r^n e^{in\theta}$.

$$\arg f(z) = \arg(z - z_0)^n + \arg h(z) = n\theta + \arg h(z) \quad (4.158)$$

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{S^1} d \arg f = \frac{1}{2\pi} \oint_{S^1} n d\theta + \frac{1}{2\pi} \oint_{S^1} d \arg h(z) \quad (4.159)$$

$$= n + \underbrace{\frac{1}{2\pi} \oint_{S^1} \frac{\partial \arg h(z)}{\partial z} dz}_{=0 \text{ par le lemme des résidus}} \quad (4.160)$$

$$= n \quad (4.161)$$

mais on a

$$d \arg f = d \arctan \frac{f^2}{f^1} = \frac{f^1 df^2 - f^2 df^1}{(f^1)^2 + (f^2)^2} = -i 2 f^* A \quad (4.162)$$

On en conclut que

$$\frac{-i}{2\pi} \oint_{S^1} f^* A = \frac{-i}{2\pi} \oint_{f(S^1)} A = \frac{n}{2} \quad (4.163)$$

Le monopôle dans \mathcal{M} a une charge apparente égale à $\frac{n}{2}$. Les différentes situations sont illustrées sur la figure 4.3

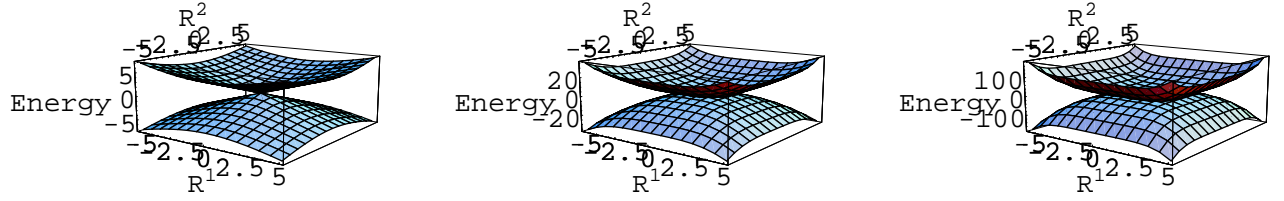


FIG. 4.3 – Différentes surfaces énergétiques en fonction de \mathcal{M} pour (de gauche à droite) : l'immersion $f(\vec{R}) = (R^1, R^2, 0)$ (un monopôle de charge $\frac{1}{2}$), l'immersion $f(\vec{R}) = ((R^1)^2, (R^2)^2, 0)$ (un monopôle de charge 1), et l'immersion $f(\vec{R}) = ((R^1)^3, (R^2)^3, 0)$ (un monopôle de charge $\frac{3}{2}$).

4.6.4 Boucles sur la variétés de contrôle

Pour une boucle quelconque dans \mathcal{U} , l'analyse précédente peut être faussée si le rayon de la boucle est important, $f(\mathcal{U})$ pouvant alors ne pas être considéré comme plat. Soit \mathcal{C} une boucle de \mathcal{M} et $f(\mathcal{C})$ son immersion dans \mathbb{R}^3 . Soit \mathcal{S} une surface de \mathbb{R}^3 telle que $\partial\mathcal{S} = f(\mathcal{C})$. En utilisant le théorème de Stokes, on a

$$\oint_{\mathcal{C}} f^*A = \oint_{f(\mathcal{C})} A = \int_{\mathcal{S}} dA = \int_{\mathcal{S}} B \quad (4.164)$$

La phase de Berry (abélienne) associée à \mathcal{C} est le flux du champ magnétique monopolaire B à travers \mathcal{S} . Mais, ce n'est pas B qui a une signification expérimentale pour la dynamique adiabatique mais f^*B , le champ magnétique monopolaire de \mathcal{M} . On doit alors distinguer différents cas.

1. $\pi_1(\mathcal{M}) = \pi_1(f(\mathcal{M})) \neq \{0\}$. Par exemple, si $\mathcal{M} = C^1$ est un cylindre alors $\pi_1(\mathcal{M}) = \mathbb{Z}$, ou si $\mathcal{M} = T^2$ est un tore alors $\pi_1(\mathcal{M}) = \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}$. Si \mathcal{C} n'est pas homotope à 0, alors la phase de Berry ne peut pas être exprimée en terme de f^*B .
2. Si \mathcal{C} est homotope à 0 (ce qui est vrai pour toute boucle si $\pi_1(\mathcal{M}) = \{0\}$), et si $f(\mathcal{M})$ passe au voisinage de 0 mais pas exactement en 0 (croisement évité), alors on peut choisir la surface \mathcal{S} comme une sous-variété de $f(\mathcal{M})$. Il existe alors Σ une surface de \mathcal{M} telle que $f(\Sigma) = \mathcal{S}$, et donc $\partial_{\mathcal{M}}\Sigma = \mathcal{C}$.

$$\oint_{\mathcal{C}} f^*A = \int_{\mathcal{S}} B = \int_{f(\Sigma)} B = \int_{\Sigma} f^*B \quad (4.165)$$

La phase de Berry est égale au flux du champ magnétique f^*B à travers Σ .

3. Si \mathcal{C} est homotope à 0, et si il existe \vec{R}_0 tel que $f(\vec{R}_0) = 0$ et tel que \mathcal{C} englobe \vec{R}_0 , alors on peut toujours choisir \mathcal{S} comme une sous-variété de $f(\mathcal{M})$, mais dans ce cas, la singularité de B est dans \mathcal{S} , et on ne peut pas rigoureusement appliquer le théorème de Stokes.
4. Si \mathcal{C} est homotope à 0, et si \vec{R}_0 est un croisement vrai qui n'est pas encerclé par \mathcal{C} , on n'a pas de problème et pour Σ telle que $\partial_{\mathcal{M}}\Sigma = \mathcal{C}$, $\oint_{\mathcal{C}} f^*A = \int_{\Sigma} f^*B$.

4.6.5 Densité de charge magnétique pour une levée de dégénérescence

On suppose que l'immersion a la propriété suivante : il existe Σ une sous-variété de \mathcal{M} qui est contractée en 0, i.e. $f(\Sigma) = \{0\}$ et $\forall \vec{R} \in \mathcal{U} \setminus \Sigma$, $f(\vec{R}) \neq 0$. Dans ce cas, on ne peut pas définir f^*B

par $f^*B = d_{\mathcal{M}}f^*A$ car f^*A n'est définie sur Σ . Dans \mathbb{R}^3 , on a au sens des distributions

$$*_\delta d_{\mathbb{R}^3}B = \frac{4\pi}{2}\delta(\vec{x}) \quad (4.166)$$

où δ est la distribution de Dirac. On a alors

$$f^* *_\delta d_{\mathbb{R}^3}B = \frac{4\pi}{2}\delta(f(\vec{R})) \quad (4.167)$$

Cette équation peut être considérée comme l'équation fondamentale du champ magnétique sur \mathcal{M} , $\frac{4\pi}{2}\delta(f(\vec{R}))$ étant une distribution de charge magnétique sur Σ .

4.7 Monopôles non-abéliens et multi-croisements

Dans les sections précédentes, nous avons considéré seulement des croisements de deux valeurs propres non-dégénérées. Nous considérons maintenant des multi-croisements, comme par exemple, le croisement de trois valeurs propres non-dégénérées ou le croisement d'une valeur propre non-dégénérée avec une valeur propre de dégénérescence 2.

4.7.1 Immersion de la variété de contrôle

Dans le voisinage du multi-croisement, on écrit l'Hamiltonien effectif sous la forme

$$H^{eff}(\vec{R}) = f^i(\vec{R})J_i \quad (4.168)$$

où $\{J_i\}_i$ est un ensemble de générateurs d'une algèbre de Lie réelle \mathfrak{g} associée au groupe de Lie G (le groupe de symétrie de H^{eff}). Usuellement, on a $G = U(N)$ où N est le nombre de niveaux impliqués dans le croisement (ou la somme des degrés de dégénérescence des niveaux impliqués). Mais on sait que la physique d'un système à m niveaux peut être décrite simplement par $SU(m)$ (cf. [67, 41]). Soit d le nombre de générateurs de G ($d = \dim \mathfrak{g}$). L'immersion f définit par $f(\vec{R}) = (f^1(\vec{R}), \dots, f^d(\vec{R}))$ est une application de \mathcal{M} vers \mathbb{R}^d . \mathbb{R}^d joue le rôle de l'espace universel généralisé à la place de \mathbb{R}^3 . Soit $\{H_i, E_\alpha\}_{i,\alpha}$ la base de Cartan de \mathfrak{g} . La sous-algèbre de Cartan (l'algèbre générée par $\{H_i\}_i$), \mathfrak{h} , est l'algèbre de Lie du tore maximal T de G . Soit $E(\vec{R}) = b^i(\vec{R})H_i \in \mathfrak{h}$ la matrice diagonale des valeurs propres de H^{eff} . On sait que la matrice de diagonalisation de H^{eff} peut se mettre sous la forme $T(\vec{R}) = e^{i\chi^\alpha(\vec{R})E_\alpha} = e^{i\sum_{\alpha>0}(z^\alpha(\vec{R})E_\alpha + \bar{z}^\alpha(\vec{R})E_{-\alpha})}$. Le potentiel de Berry, $f^*A = T^\dagger dT$, ne dépend donc que de $z^\alpha(\vec{R})$ ou de manière équivalente que de $\chi^\alpha(\vec{R})$, de plus $f^*A \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{g}/\mathfrak{h})$. $\{\chi^\alpha\}_\alpha$ et $\{z^\alpha\}_\alpha$ peuvent être considérés comme respectivement des systèmes de coordonnées réelles et complexes de la variété G/T . Cette variété est appelée variété flag, Mostafazadeh [111] a montré que G/T est bien la variété universelle pour les systèmes avec pour groupe de symétrie G , et $\chi : \mathcal{M} \rightarrow G/T$ défini par $\chi(\vec{R}) = (\chi^\alpha(\vec{R}))_\alpha$ est l'application universelle. La variété flag G/T est une variété complexe qui a une structure Riemannienne induite par l'immersion $G/T \hookrightarrow \mathbb{C}P^{N-1}$ (cf. [111]). La structure Kählerienne de $\mathbb{C}P^{N-1}$ induit une structure Riemannienne sur G/T considérée comme une variété réelle. Soit r le rang de \mathfrak{g} (la dimension de la sous-algèbre de Cartan \mathfrak{h}). \mathbb{R}^d est feuilletée par des feuilletés difféomorphes à G/T avec pour paramètres de feuilletage $\{b^i(\vec{R})\}_{i=1,\dots,r}$, $(G/T, \mathbb{R}^r) \simeq \mathbb{R}^d$. Considérant un feuilleté G/T particulier, on a le diagramme commutatif suivant

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{M} & \xrightarrow{\chi^\alpha} & G/T \\ f^i \downarrow & \Phi^\alpha \swarrow & \downarrow \\ \mathbb{R}^d & \xrightarrow{\hookrightarrow} & \mathbb{C}P^{N-1} \end{array}$$

ou Φ est défini par

$$H^{eff}(\vec{R}) = \text{Ad}(e^{i\chi^\alpha(\vec{R})E_\alpha})b^i(\vec{R})H_i = e^{i\chi^\alpha(\vec{R})\text{ad}(E_\alpha)}b^i(\vec{R})H_i = \Phi^i(\chi(\vec{R}))H_i + \Phi^\beta(\chi(\vec{R}))E_\beta \quad (4.169)$$

On suppose que G est compact et semi-simple, alors la forme de Killing de son algèbre de Lie complexifiée $\mathfrak{g}_\mathbb{C}$, est définie positive. Suivant le précédent diagramme commutatif, la structure Riemannienne de G/T est aussi induite par la forme de Killing K de $\mathfrak{g}_\mathbb{C}$ considérée comme le produit scalaire de \mathbb{R}^d . Si $G = SU(N)$, alors $2NK$ est la métrique euclidienne de \mathbb{R}^d .

On retrouve le cas d'un croisement de deux niveaux, où $G = SU(2)$, $d = 3$ et où le tore maximal est $U(1)$. La variété flag est alors bien la variété universelle $SU(2)/U(1) \simeq S^2$. Dans le cas d'un croisement de trois niveaux, $G = SU(3)$, l'espace universel généralisé est \mathbb{R}^8 , le tore maximal est $T^2 = U(1) \times U(1)$ et la variété flag $SU(3)/(U(1) \times U(1))$.

Dans le cas générique d'un croisement impliquant N niveaux, le groupe de symétrie est $SU(N)$, sa dimension est $d = N^2 - 1$, donc le monopôle standard vit dans l'espace universel généralisé \mathbb{R}^{N^2-1} muni de la métrique Euclidienne. La variété flag (la variété universelle) est $SU(N)/T^N$ où $T^N = U(1) \times \dots \times U(1)$ est le N -tore. La métrique induite sur \mathcal{M} dans le voisinage du multicroisement est

$$g_{\mu\nu} = \delta_{ij} \frac{\partial f^i}{\partial R^\mu} \frac{\partial f^j}{\partial R^\nu} \quad (4.170)$$

avec $i = 1, \dots, N^2 - 1$ et $\mu = 1, 2$.

4.7.2 Analogie avec la théorie des champs

Le potentiel de jauge du monopôle est $A \in \Omega^1(\mathbb{R}^{N^2-1}, \mathfrak{su}(N))$, le champ du monopôle est obtenu par l'équation de structure de Cartan $F = dA + \frac{1}{2}[A, A] \in \Omega^2(\mathbb{R}^{N^2-1}, \mathfrak{su}(N))$, et satisfait à la moitié des équations de Yang-Mills, i.e. l'identité de Bianchi $dF + [A, F] = 0$. Dans \mathcal{M} , $f^*A \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{su}(N))$ et $f^*F \in \Omega^2(\mathcal{M}, \mathfrak{su}(N))$ satisfont à des équations similaires.

Dans le cas d'un croisement simple avec une dynamique dans un régime suffisamment lent pour être adiabatique pur (groupe de jauge $U(1)$), on sait déjà que le croisement se comporte comme un monopôle magnétique de Dirac, F est le champ magnétique produit par ce monopôle, et $\psi^\sharp(t) = e^{-\int_{\mathcal{C}_t} f^*A}|_{+, \vec{R}(t)}\rangle$ est analogue à un champ de matière (une particule chargée) se déplaçant dans \mathcal{M} le long de \mathcal{C} . A est considéré comme le potentiel électromagnétique, i.e. le champ de photons. Dans le cas d'un croisement simple avec transfert de populations entre les deux états, le croisement apparaît comme un monopôle magnétique de Polyakov, et F comme le champ électrofaible produit par celui-ci. $\psi^\sharp(t) = \sum_{b=1}^2 \left[\mathbb{P}e^{-\int_{\mathcal{C}_t} f^*A} \right]_{ba} |b, \vec{R}(t)\rangle$ est toujours similaire à la fonction d'onde d'une particule chargée, et la matrice $T(\vec{R}) = (|1, \vec{R}\rangle, |2, \vec{R}\rangle)$ apparaît comme un champ de Higgs. Les trois composantes indépendantes de la matrice A apparaissent alors comme des champs de photons et de bosons W^\pm .

Considérons maintenant le cas d'un croisement de trois états non-dégénérées. La fonction d'onde est alors

$$\psi^\sharp(t) = \sum_{b=1}^3 \left[\mathbb{P}e^{-\int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(t)} A(\vec{R})} \right]_{ba} |b, \vec{R}(t)\rangle \quad (4.171)$$

et le groupe de jauge est $SU(3)$. $SU(3)$ est représenté sur l'espace engendré par $\{|1, \vec{R}\rangle, |2, \vec{R}\rangle, |3, \vec{R}\rangle\}$ par la représentation irréductible $D^{1,0}$ (cf. [18]). La situation est complètement analogue à un champ de quark ψ en présence d'un monopôle coloré, le monopôle de l'interaction nucléaire forte, cf. [42, 29, 136]. $\{|1, \vec{R}\rangle, |2, \vec{R}\rangle, |3, \vec{R}\rangle\}$ sont alors considérés comme un triplet de couleurs, qui jouent le rôle de trois champs de Higgs comme on peut le voir par comparaison avec la situation décrite

dans [136]. Comme c'est le cas en chromodynamique, "tant que la symétrie $SU(3)$ n'est pas brisée, (...), la spécification de la couleur d'un champ de quark dépend du choix arbitraire d'une base pour l'espace tridimensionnel des couleurs en chaque points de l'espace-temps" (cf. [142]), la base $\{|1, \vec{R}\rangle, |2, \vec{R}\rangle, |3, \vec{R}\rangle\}$ définit les couleurs en chaque point \vec{R} de \mathcal{M} , les opérateurs de couleur étant

$$J_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \sqrt{3}J_8 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \quad (4.172)$$

ces matrices étant écrites dans la base dépendante de \vec{R} $\{|1, \vec{R}\rangle, |2, \vec{R}\rangle, |3, \vec{R}\rangle\}$.

Le point initial de la dynamique $\vec{R}(0)$ peut être considéré comme un point privilégié constituant une brisure de symétrie. Par exemple, dans le cas d'un atome ou d'une molécule contrôlé par un champ laser, ce point initial est la position dans \mathcal{M} pour laquelle le laser est éteint. Dans ce cas, la base $\{|1, \vec{R}(0)\rangle, |2, \vec{R}(0)\rangle, |3, \vec{R}(0)\rangle\}$ est privilégiée comme la base de l'atome nu ou de la molécule non-perturbée par le laser. Les deux choix possibles de description de la couleur, avec la brisure de symétrie ou avec la base dépendante de \vec{R} , sont l'analogue de la description de la molécule au cours du temps, où on peut projeter la fonction d'onde sur les états nus ou sur les états propres instantanés. Enfin, les 8 composantes indépendantes de la matrice A , peuvent dans cette analogie, être considérées comme des champs de gluons.

Pour un croisement d'ordre N supérieur à 3, le problème de dynamique quantique est analogue à une dynamique de Yang-Mills de groupe $SU(N)$, qui n'a pas nécessairement d'analogue en physique des particules.

4.7.3 Charge des monopôles

Dans le cas d'un champ matriciel, comme c'est le cas du champ adiabatique pour un croisement de 3 états, la définition de la charge du monopôle est beaucoup moins claire que dans le cas abélien. Lorsqu'on considère le cas d'un croisement simple, en ne considérant qu'un état, l'espace actif est unidimensionnel, le groupe de jauge est $U(1)$, et la fonction d'onde est décrite par un fibré linéaire L . Alors la charge du monopôle est caractérisée par :

1. Une classe caractéristique de \mathcal{M} , la première classe de Chern $\check{c}_1(L) = \frac{2}{2\pi} \delta^2[F] \in H^2(\mathcal{M}, \mathbb{Z})$.
2. Un invariant topologique pour les surfaces fermées entourant le monopôle dans \mathbb{R}^3 , la première classe de Chern : $\frac{2}{4\pi} \oint_{S^2} F = \frac{1}{2} \check{c}_1(L) \in \frac{1}{2} \mathbb{Z}$.
3. Un invariant topologique pour les boucles entourant le monopôle dans \mathbb{R}^2 , le nombre d'enroulements : $\frac{-2}{2\pi} \oint_{S^1} A \in \frac{1}{2} \mathbb{Z}$.
4. Si G est le groupe de symétrie de l'Hamiltonien et T le tore maximal de G , d'après le théorème de Borel-Weil-Bott, les représentations irréductibles de G sont réalisées dans l'espace des sections holomorphes du fibré linéaire $(L_\Lambda^{BWB}, G/T, \mathbb{C}, \pi)$ où Λ est une représentation irréductible de T . Si on choisit comme vecteur propre, le vecteur de plus grand poids λ de la représentation Λ , alors $\check{c}_1(L_\Lambda^{BWB}) = 2\lambda$, cf. [111].

Dans le cas des monopôles non-abéliens, on ne dispose pas de cette structure permettant de définir la charge. L'analyse faite par Mostafazadeh (ref. [111]), basée sur la théorie de représentation des groupes, pour être appliquée aux monopôles non-abélien, nécessiterait une généralisation aux fibrés vectoriels quelconques du théorème de Borel-Weyl-Bott. Le lien entre la charge topologique d'un monopôle non-abélien et la théorie des groupes n'est pour l'instant qu'une conjecture. Comme on l'a déjà noté, la première classe de Chern n'est pas significative dans le cas non-abélien car elle correspond à une abélianisation. On aurait besoin d'un équivalent matriciel dans une cohomologie de Čech qui satisferait à la règle de changement de jauge : $(\delta_g F)_{\alpha\beta} = F_\beta - g_{\alpha\beta}^{-1} F_\alpha g_{\alpha\beta}$, $g_{\alpha\beta}$ étant les fonctions de transition du fibré principal.

En utilisant la méthode suivie en théorie des champs pour définir la charge des monopôles colorés, on

aboutit au résultat suivant. Considérons une sphère S^2 dans l'espace universel généralisé, d'équateur S^1 . Le transport adiabatique de ψ_0 (exprimé dans la base $(|a, \vec{R}\rangle)_{a=1, \dots, N}$) au dessus de S^1 nous donne en appliquant le théorème de Stokes non-abélien :

$$\mathbb{P}e^{-\oint_{S^1} A} \psi_0 = \mathbb{P}_\varphi e^{-\oint_{UN} T^{-1} F_{\theta\varphi} T} \psi_0 = \mathbb{P}_\varphi e^{-\frac{1}{2} \int_{S^2} T^{-1} F_{\theta\varphi} T} \psi_0 \quad (4.173)$$

où

$$T(\theta, \varphi) = \mathbb{P}e^{-\int_0^\pi A_\theta(\vartheta, \varphi) d\vartheta} \mathbb{P}e^{-\int_0^{2\pi} A_\varphi(\theta, \phi) d\phi} \quad (4.174)$$

$\mathbb{P}e^{-\frac{1}{2} \int_{S^2} T^{-1} F T} \in G$, mais l'orbite de ψ_0 sous G est $G\psi_0 \simeq G/H$ où H est le sous-groupe d'isotropie (projectif) de ψ_0 , $H = \{g \in G, \exists \phi \in [0, 2\pi], g\psi_0 = e^{i\phi}\psi_0\}$. On a alors l'application suivante

$$\begin{aligned} \kappa : \quad S^2 &\rightarrow G/H \\ (\theta, \varphi) &\mapsto \mathbb{P}_\varphi e^{-\frac{1}{2} \int_{S^2} T^{-1} F_{\theta\varphi} T} \psi_0 \end{aligned}$$

La charge topologique du monopôle non-abélien est déterminée par la classe d'homotopie $[\kappa] \in \pi(S^2, G/H) = \pi_2(G/H)$. La charge du monopôle est donc dépendante de l'état initial de la dynamique, ψ_0 , par un mécanisme de brisure spontanée de symétrie. Si G est compact et simplement connexe, et si H est fermé, on a de plus

$$\pi_2(G/H) = \pi_1(H) \quad (4.175)$$

Dans le cas où trois états sont impliqués dans le croisement, $G = SU(3)$, on a trois cas possibles, $H = U(2)$ alors le groupe des charges est $\pi_1(H) = \mathbb{Z}$, $H = U(1) \times U(1)$, alors le groupe des charges est $\pi_1(H) = \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}$, enfin $H = U(1)$ et $\pi_1(H) = \mathbb{Z}$.

Cette définition de la charge n'est peut-être pas la mieux adaptée pour décrire les monopôles adiabatiques non-abéliens. En effet, en théorie des champs, le monopôle "vit" dans l'espace \mathbb{R}^3 , et l'usage de la sphère S^2 est alors naturel. Dans le cas des monopôles adiabatiques, l'espace universel généralisé est \mathbb{R}^d , est c'est G/T qui joue le rôle de variété universelle à la place de S^2 . La possibilité que les monopôles adiabatiques non-abéliens soient classifiés par les classes d'homotopie $\pi(G/T, G/H)$ ne doit pas a priori être exclue.

La question d'une définition topologique de la charge des monopôles adiabatiques non-abéliens, qui soit physiquement significative, n'a pour l'instant pas de réponse définitive.

4.8 Monopôles magnétiques des systèmes dissipatifs

Nous nous intéressons ici au croisement de valeurs propres complexes d'un système dissipatif. Considérons tout d'abord un système à 2 niveaux. L'Hamiltonien générique a l'expression suivante

$$H(\vec{x}, \vec{\Gamma}) = (x^i - i\frac{\Gamma^i}{2})\sigma_i \quad (4.176)$$

$$= \begin{pmatrix} x^3 - i\frac{\Gamma^3}{2} & x^1 - i\frac{\Gamma^1}{2} - ix^2 - \frac{\Gamma^2}{2} \\ x^1 - i\frac{\Gamma^1}{2} + ix^2 + i\frac{\Gamma^2}{2} & -x^3 + i\frac{\Gamma^3}{2} \end{pmatrix} \quad (4.177)$$

Les valeurs propres de H sont alors

$$E_\pm(\vec{x}, \vec{\Gamma}) = \pm \sqrt{(\vec{R} - i\frac{\vec{\Gamma}}{2})^2} \quad (4.178)$$

$$= \pm \sqrt{\vec{R}^2 - \frac{\vec{\Gamma}^2}{4} - i\vec{R} \cdot \vec{\Gamma}} \quad (4.179)$$

$$= \pm \sqrt{R^i R^j \delta_{ij} - \frac{\Gamma^i \Gamma^j}{4} \delta_{ij} - iR^i \Gamma^j \delta_{ij}} \quad (4.180)$$

δ_{ij} étant ici la métrique Euclidienne de \mathbb{R}^3 . D'où les potentiels de jauge

$$A^N = {}^N\langle +, \vec{x}, \vec{\Gamma} | d | +, \vec{x}, \vec{\Gamma} \rangle^N = -\frac{\imath (x^2 - \imath \frac{\Gamma^2}{2})(dx^1 - \frac{\imath}{2}d\Gamma^1) - (x^1 - \imath \frac{\Gamma^1}{2})(dx^2 - \frac{\imath}{2}d\Gamma^2)}{E_+(\vec{x}, \vec{\Gamma})(E_+(\vec{x}, \vec{\Gamma}) + x^3 - \imath \frac{\Gamma^3}{2})} \quad (4.181)$$

$$A^S = {}^S\langle +, \vec{x}, \vec{\Gamma} | d | +, \vec{x}, \vec{\Gamma} \rangle^S = \frac{\imath (x^2 - \imath \frac{\Gamma^2}{2})(dx^1 - \frac{\imath}{2}d\Gamma^1) - (x^1 - \imath \frac{\Gamma^1}{2})(dx^2 - \frac{\imath}{2}d\Gamma^2)}{E_+(\vec{x}, \vec{\Gamma})(E_+(\vec{x}, \vec{\Gamma}) - x^3 + \imath \frac{\Gamma^3}{2})} \quad (4.182)$$

L'espace universel généralisé est donc \mathbb{R}^6 muni d'une structure Euclidienne. Les valeurs propres se croisent, pour $(\vec{R}, \vec{\Gamma}) = \vec{0}$ qui est la position du monopôle magnétique, mais il y a également croisement pour la sous-variété de codimension 2 de \mathbb{R}^6 définie par

$$\begin{cases} \vec{R}^2 - \frac{\Gamma^2}{4} = 0 \\ \vec{R} \cdot \vec{\Gamma} = 0 \\ (\vec{R}, \vec{\Gamma}) \neq 0 \end{cases}$$

Il y a donc une variété \mathfrak{D} de dimension 4 magnétiquement chargée entourant le monopôle que nous désignerons sous le nom de variété diabolique, en accord avec la terminologie introduite dans [103, 104].

Considérons un système dynamique quantique adiabatique avec \mathcal{M} ($\dim \mathcal{M} = 2$) sa variété de contrôle. Au voisinage d'un croisement de deux états non-dégénérés l'Hamiltonien effectif peut être écrit sous la forme

$$H^{eff}(\vec{R}) = \begin{pmatrix} f^3(\vec{R}) - \imath \frac{\gamma^3(\vec{R})}{2} & f^1(\vec{R}) - \imath \frac{\gamma^1(\vec{R})}{2} - \imath f^2(\vec{R}) - \frac{\gamma^2(\vec{R})}{2} \\ -f^1(\vec{R}) + \imath \frac{\gamma^1(\vec{R})}{2} + \imath f^2(\vec{R}) + \imath \frac{\gamma^2(\vec{R})}{2} & -f^3(\vec{R}) + \imath \frac{\gamma^3(\vec{R})}{2} \end{pmatrix} \quad (4.183)$$

L'application $(f, \gamma) : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}^6$ est supposée être une immersion de la variété de contrôle dans l'espace universel généralisé \mathbb{R}^6 . Les croisements apparaissent alors comme un monopole magnétique si $f \times \gamma(\mathcal{M})$ passe par 0, et comme des vortexes magnétiques suivant l'intersection $f \times \gamma(\mathcal{M}) \cap \mathfrak{D}$. Prenons quelques exemples, supposons que $f \times \gamma(\mathcal{M})$ est un plan d'équation

$$\Gamma^1 = a, \Gamma^2 = b, \Gamma^3 = c, ax^1 + bx^2 + cx^3 = 0 \quad (4.184)$$

où a, b, c sont des constantes réelles. $\mathfrak{D} \cap f \times \gamma(\mathcal{M})$ a alors pour équations

$$\begin{cases} \vec{R} \cdot \vec{\Gamma} = 0 \Rightarrow ax^1 + bx^2 + cx^3 = 0 \\ \vec{R}^2 - \frac{\Gamma^2}{4} = 0 \Rightarrow (x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2 = \frac{a^2 + b^2 + c^2}{4} \end{cases} \quad (4.185)$$

On a donc l'intersection d'une sphère et d'un plan, les croisements apparaissent alors dans \mathcal{M} comme un vortexe fermé circulaire, cf. figure 4.4.

Autre exemple, si $f \times \gamma(\mathcal{M})$ est un plan d'équation

$$\Gamma^1 = a, \Gamma^2 = b, x^3 = c, ax^1 + bx^2 + c\Gamma^3 = 0 \quad (4.186)$$

alors on a pour $\mathfrak{D} \cap f \times \gamma(\mathcal{M})$

$$\begin{cases} \vec{R} \cdot \vec{\Gamma} = 0 \Rightarrow ax^1 + bx^2 + c\Gamma^3 = 0 \\ \vec{R}^2 - \frac{\Gamma^2}{4} = 0 \Rightarrow (x^1)^2 + (x^2)^2 - \frac{(\Gamma^3)^2}{2} = \frac{a^2 + b^2}{4} - c^2 \end{cases} \quad (4.187)$$

On a donc l'intersection d'un plan avec une hyperboloïde ce qui nous donne dans \mathcal{M} une hyperbole magnétique, cf. figure 4.5.

Pour un croisement multiple, l'analyse dans le cas dissipatif est le même que pour le cas conservatif, à la différence que le groupe de symétrie est $G = SL(N, \mathbb{C})$ quand N états sont impliqués, et que la variété universelle est G/B et non G/T , B étant le sous-groupe de Borel de G . Dans le cas d'un croisement simple, $G = SL(2, \mathbb{C})$ et la variété universelle est à nouveau la sphère $G/B = S^2$.

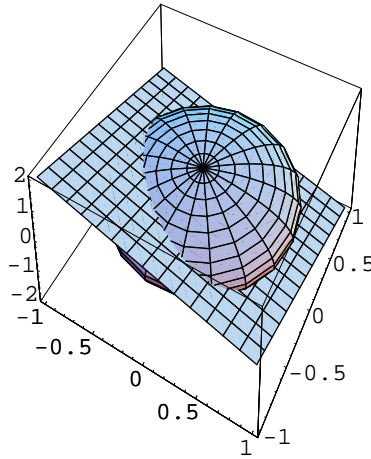


FIG. 4.4 – L'intersection des deux surfaces est un vortexe circulaire.

En résumé

On a vu que le modèle de dynamique quantique adiabatique était équivalent à une particule matérielle de champ la fonction d'onde du système, qui évolue dans une série d'espaces parallèles (tous associés à un des états propres de l'espace actif), reliés par des trous de ver au niveau des croisements. Ces mêmes croisements apparaissent comme des monopôles des interactions électromagnétiques, électrofaibles, chromodynamiques ou autres, suivant le nombre d'états impliqués dans le croisement, cf. table 4.1.

TAB. 4.1 – Table des différentes théories des champs associées aux croisements

| Nombre d'états | Groupe de jauge | Type de monopôle | Théorie associée |
|----------------|-----------------|-------------------------------|-------------------|
| 1 | $U(1)$ | monopôle de Dirac | électromagnétisme |
| 2 | $SU(2)$ | monopôle de 't Hooft-Polyakov | électrofaible |
| 3 | $SU(3)$ | monopôle coloré | chromodynamique |
| $N > 3$ | $SU(N)$ | monopôle adiabatique | |

Les sections globales $\{|a, \vec{R}\}_{a=1, \dots, M}$, base canonique du fibré adiabatique vectoriel, apparaissent dans cette analogie comme les champs de Higgs des différentes interactions. Considérant la variété de contrôle \mathcal{M} supposée être une surface, pour un croisement de groupe de symétrie G , les propriétés du monopôle et de son champ sont régis par le diagramme commutatif suivant

$$\begin{array}{ccc}
 \mathcal{M} & \xrightarrow{x} & G/K \\
 f \downarrow & & \downarrow \hookrightarrow \\
 \mathbb{R}^d & \xrightarrow{\hookrightarrow} & \mathfrak{g}_{\mathbb{C}} \hookrightarrow \mathbb{C}P^{N-1}
 \end{array}$$

L'algèbre de Lie de la symétrie du croisement, $\mathfrak{g}_{\mathbb{C}}$, étant équipée de la forme de Killing, est en isomorphisme avec \mathbb{R}^d . K est le tore maximal T de G si le système est conservatif ou le sous-groupe de Borel B de G s'il est dissipatif. L'immersion f de \mathcal{M} dans l'espace universel généralisé \mathbb{R}^d décrit complètement le monopôle. Dans certains cas, les croisements peuvent apparaître comme des sous-variétés non-ponctuelles, on a alors en plus des monopôles magnétiques, d'autres défauts topologiques : des cordes magnétiques (vortexes), des murs domaniaux, etc... Ces sous-variétés sont

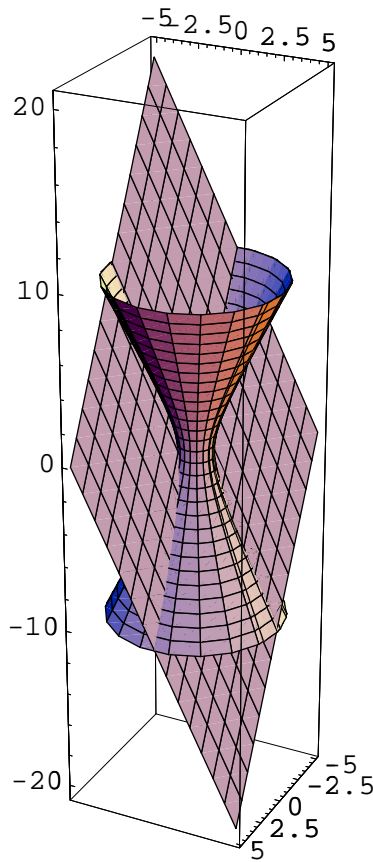


FIG. 4.5 – L 'intersection des deux surfaces est un vortexe hyperbolique.

fonctions du type de dégénérescence, points diaboliques où l'Hamiltonien est diagonalisable, ou points exceptionnels où il ne l'est pas (forme de Jordan), comme le montre la table 4.2.

En utilisant cette table, on a alors le type du défaut topologique standard dans l'espace universel table 4.3.

L'analyse des monopôles qui est faite dans ce chapitre, est une analyse locale (au voisinage des croisements), l'analyse globale ayant été donnée au chapitre 3. Les variétés universelles locales G/K étant des sous-variétés de la variété universelle globale $G_M(\mathbb{C}^n)$. Les champs locaux, calculés à partir de H^{eff} ne doivent pas être confondus avec les champs globaux calculés à partir de H et extraits dans un sous-espace actif, qui mesurent l'isolement de celui-ci.

Pour conclure, on donne table 4.4 la correspondance entre les différentes analogies physiques.

On remarquera que l'on n'a considéré que des théories statiques (l'espace et non l'espace-temps). La généralisation de l'image "théorie des champs" du transport adiabatique à l'espace-temps, fera l'objet d'un chapitre ultérieur, où cette fois, on ne supposera plus la commutation des phases dynamiques et géométriques.

TAB. 4.2 – Codimension des variétés magnétiques associées à un croisement simple, extrait de [132].

| | Type de H^{eff} | cas diabolique | cas exceptionnel |
|------------------|-------------------------|----------------|------------------|
| cas conservatifs | Réel symétrique | 2 | \emptyset |
| | Hermitien | 3 | \emptyset |
| cas dissipatifs | Réel non-symétrique | 3 | 1 |
| | Complexe symétrique | 4 | 2 |
| | Complexe non-symétrique | 6 | 2 |

TAB. 4.3 – Type de défaut topologique standard dans l'espace universel généralisé (EUG) pour un croisement simple, d étant la dimension de ce défaut.

| Type de H^{eff} | EUG | d | type |
|--|----------------|-----|---------------------|
| Réel symétrique | \mathbb{R}^2 | 0 | monopôle magnétique |
| Hermitien | \mathbb{R}^3 | 0 | monopôle magnétique |
| Réel non-symétrique diagonalisable | \mathbb{R}^3 | 0 | monopôle magnétique |
| Réel non-symétrique non-diagonalisable | \mathbb{R}^3 | 2 | mur domanial |
| Complexe symétrique diagonalisable | \mathbb{R}^4 | 0 | monopôle magnétique |
| Complexe symétrique non-diagonalisable | \mathbb{R}^4 | 2 | mur domanial |
| Complexe non-symétrique diagonalisable | \mathbb{R}^6 | 0 | monopôle magnétique |
| Complexe non-symétrique non-diagonalisable | \mathbb{R}^6 | 4 | espace magnétique |

TAB. 4.4 – Correspondances entre les terminologies de la dynamique quantique, de la théorie des champs et de la relativité générale.

| Géométrie | Dynamique quantique | Théorie des champs | Relativité générale |
|---------------------|-------------------------------|---|---------------------|
| Variété de base | Variété de contrôle | Espace | Espace |
| Groupe de jauge | $U(M)$ ou $GL(M, \mathbb{C})$ | $U(1)$, $SU(2)$ et $SU(3)$ | $SU(2)$ |
| Potentiel de jauge | Potentiel adiabatique | Potentiel magnétique, électro-faible, ou chromatique | Spin-connexion |
| Courbure du fibré | Courbure adiabatique | Champ magnétique, électro-faible ou chromatique | Courbure |
| Identité de Bianchi | Identité de Bianchi | Équations de Maxwell, équations de Yang-Mills | Identité de Bianchi |
| Singularité | Croisement | Monopôle magnétique de Dirac, de t' Hooft-Polyakov, ou coloré | Trou noir |

Chapitre 5

Applications : Atomes en champ laser

Un anneau pour les gouverner tous, un anneau pour les trouver, un anneau pour les amener tous, et dans les ténèbres les lier.

J.R.R. Tolkien - Le seigneur des anneaux

Dans le chapitre précédent, nous avons vu qu'un système photodynamique était dans l'approximation adiabatique, équivalent à une particule se déplaçant dans une série d'espaces parallèles reliés par des trous de ver - monopôles magnétiques. L'intensité des couplages non-adiabatiques entre les états du système est proportionnelle à l'intensité du champ magnétique. Les propriétés du champ magnétique adiabatique sont liées à l'immersion de la variété de contrôle dans un espace universel généralisé. Dans ce chapitre, nous illustrons ces différentes notions par quelques exemples très simples, d'atomes à 2 ou 3 niveaux en interaction avec des champs lasers.

5.1 Atome à 2 niveaux

On considère un atome à 2 niveaux, en interaction avec un champ laser. La topologie du passage adiabatique d'un tel système a été étudiée dans les travaux de Yatsenko, Guérin et Jauslin [148, 56]. L'Hamiltonien atomique habillé du champ dans l'approximation *d'onde tournante* (RWA) s'écrit

$$H(\Omega, \Delta, \phi) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega e^{i\phi} \\ \Omega e^{-i\phi} & 2\Delta \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

où $\Omega = |\langle 1 | \vec{\mu} \cdot \vec{E} | 2 \rangle|$, $\vec{\mu}$ étant le moment dipolaire électrique de l'atome, \vec{E} l'intensité du laser et $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ les vecteurs propres de l'atome isolé ; Δ est le detuning du laser, i.e. $\hbar\Delta = E_2 - E_1 - \hbar\omega$, E_1, E_2 étant les niveaux d'énergie de l'atome isolé et ω étant la fréquence du laser ; enfin ϕ est la phase du laser. $\vec{R} = (\Omega, \Delta, \phi)$ est l'ensemble des paramètres de contrôle, la variété de contrôle étant $\mathcal{M} = \mathbb{R}^+ \times [E_1 - E_2, E_2 - E_1] \times S^1$. Les valeurs propres de H sont les suivantes :

$$E_{\pm}(\vec{R}) = \frac{\hbar}{2} (\Delta \pm \sqrt{\Omega^2 + \Delta^2}) \quad (5.2)$$

On pose $r = \sqrt{\Omega^2 + \Delta^2}$ et $\theta = \arctan \frac{\Omega}{\Delta}$. Soient les deux cartes locales $U^N = \{(r, \theta, \phi) | \phi \in [0, 2\pi[, \theta \in [0, \frac{\pi}{2} + \epsilon[, r \in \mathbb{R}^+]\}$ et $U^S = \{(\theta, \phi) | \phi \in [0, 2\pi[, \theta \in]\frac{\pi}{2} - \epsilon, \pi], r \in \mathbb{R}^+]\}$, avec $\epsilon \in \mathcal{V}(0)$, c'est à dire $U^N \simeq \mathbb{R}^+ \times]-\epsilon, E_2 - E_1] \times S^1$ et $U^S \simeq \mathbb{R}^+ \times [E_1 - E_2, \epsilon[\times S^1$. Les vecteurs propres sont alors

$$|+, \vec{R}\rangle^N = \frac{1}{\sqrt{2r(r + \Delta)}} \begin{pmatrix} \Omega e^{i\phi} \\ \Delta + r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

$$|+, \vec{R}\rangle^S = \frac{1}{\sqrt{2r(r-\Delta)}} \begin{pmatrix} -\Delta + r \\ \Omega e^{-i\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

$$|-, \vec{R}\rangle^N = \frac{1}{\sqrt{2r(r+\Delta)}} \begin{pmatrix} -\Delta - r \\ \Omega e^{-i\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

$$|-, \vec{R}\rangle^S = \frac{1}{\sqrt{2r(r-\Delta)}} \begin{pmatrix} \Omega e^{i\phi} \\ \Delta - r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ -\sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

On en déduit que le fibré adiabatique $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, U(2), \pi_P)$ est défini par la fonction de transition

$$\forall \vec{R} \in U^N \cap U^S, \quad g^{NS}(\vec{R}) = e^{-i\phi} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

Notons qu'il existe un croisement de niveaux pour $(\Delta, \Omega) = (0, 0)$. Les conventions que l'on vient de donner sur les vecteurs propres, sont tel que les labels + et - suivent l'ordre énergétique. Lorsque le champ est coupé $\Omega = 0$, on a l'Hamiltonien de l'atome nu $H(0, \Delta, 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hbar\Delta \end{pmatrix}$, avec deux vecteurs propres, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ et $|2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, cette convention ne suit pas l'ordre énergétique des valeurs propres, pour $\Delta < 0$, $|1\rangle$ est associé à la valeur propre de plus basse énergie, mais pour $\Delta > 0$, $|1\rangle$ est associé à la valeur propre de plus haute énergie. Avec ce choix de convention pour le passage à travers le croisement, on doit modifier les conventions pour l'ensemble de la variété \mathcal{M} :

$$|1, \vec{R}\rangle^N = |+, \vec{R}\rangle^N \quad (5.8)$$

$$|1, \vec{R}\rangle^S = |-, \vec{R}\rangle^S \quad (5.9)$$

$$|2, \vec{R}\rangle^N = |-, \vec{R}\rangle^N \quad (5.10)$$

$$|2, \vec{R}\rangle^S = |+, \vec{R}\rangle^S \quad (5.11)$$

avec cette autre convention, le fibré adiabatique $\tilde{\mathcal{P}}$ est défini par la fonction de transition

$$\forall \vec{R} \in U^N \cap U^S, \quad \tilde{g}^{NS}(\vec{R}) = e^{-i\phi} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

bien entendu $\tilde{\mathcal{P}}$ est isomorphe à \mathcal{P} . Avec ϵ tendant vers 0, il est clair que la droite d'équation $\Delta = 0$ dans le plan (Ω, Δ) est la ligne de changement de carte pour notre choix d'atlas (dans \mathcal{M} , $\Delta = 0$ est le mur de changement de carte). Les vecteurs propres exprimés sur la variété universelle S^2 engendrée par (θ, ϕ) , ont déjà été rencontrés au chapitre précédent. Il est clair que le croisement en $(\Delta, \Omega) = 0$ apparaît comme un monopôle magnétique (de Dirac de charge $+\frac{1}{2}$ du point de vue de l'état +, de Dirac de charge $-\frac{1}{2}$ du point de vue de l'état -, de 't Hooft-Polyakov de charge $\frac{1}{2}$ si on considère la matrice des deux états). Les cordes de Dirac du monopôle se trouvent sur l'axe Δ , cf. figure 5.1.

On normalise les paramètres du laser tel que $\Omega \in [0, 2]$ et $\Delta \in [-1, 1]$. La phase du laser est considérée comme constante et est posée égale à $\phi = 0$. On suppose que le champ agissant sur l'atome est composé d'un premier laser impulsif à fréquence constante quasi-résonant avec la transition $1 \rightarrow 2$, appelé laser pompe et d'un laser auxiliaire non-résonant, induisant un effet Stark dynamique [31] qui nous donne la variation temporelle du detuning.

$$\Omega(t) = \Omega_0 e^{-\frac{(t-t_0)^2}{\tau_P^2}} \quad (5.13)$$

$$\Delta(t) = \Delta_0 + S_0 e^{-\frac{t^2}{\tau_S^2}} \quad (5.14)$$

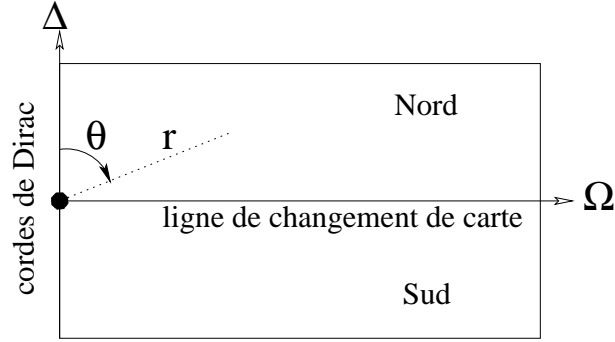


FIG. 5.1 – Plan (Ω, Δ) de la variété de contrôle d'un atome à 2 niveaux en interaction avec un champ laser. Le symbole \bullet représente le monopôle magnétique.

Δ_0 étant le detuning du laser pompe. Dans les unités normalisées utilisées ici, on choisit $\Omega_0 = 1.5$, $S_0 = 2$, $t_0 = 15$, $\tau_p = 10$, $\tau_s = 12$ et $\Delta_0 = -1$. Le chemin \mathcal{C}^{SCRAP} paramétré par $t \mapsto (\Omega(t), \Delta(t))$ est représenté figure 5.2.

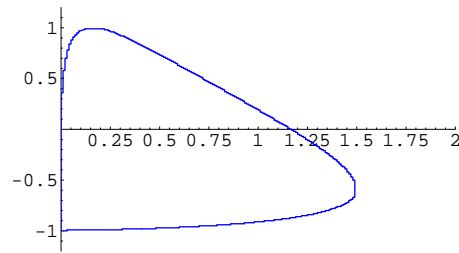


FIG. 5.2 – Le chemin \mathcal{C}^{SCRAP} dans le plan (Ω, Δ) .

Conformément avec l'image trou de ver, le chemin passant par le monopôle, induit une transition de l'état $|+, \vec{R}\rangle$ (supposé être l'état initial) vers l'état $|-, \vec{R}\rangle$, comme le montre la figure 5.3.

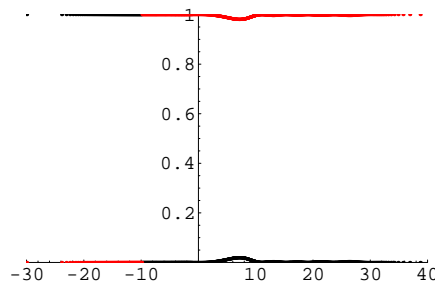


FIG. 5.3 – Probabilité d'occupation des états propres instantanés $|+, \vec{R}(t)\rangle$ (en noir) et $|-, \vec{R}(t)\rangle$ (en rouge) : $P_+(t) = |\langle +, \vec{R}(t) | \psi(t) \rangle|^2$, $P_-(t) = |\langle -, \vec{R}(t) | \psi(t) \rangle|^2$, avec $\psi(t)$ solution de l'équation de Schrödinger.

On observe bien sur la fonction d'onde, une transition soudaine de l'état $+$ vers l'état $-$ à $t = -10$, qui est précisément le moment où la particule virtuelle représentant le système passe par le trou de ver, $\Omega(t = -10) \simeq 0$ et $\Delta(t = -10) \simeq -1 + 1 = 0$ comme on peut le voir figure 5.4.

Ce processus est appelé dans la littérature [148] SCRAP (*Stark Chirped Rapid Adiabatic Pas-*

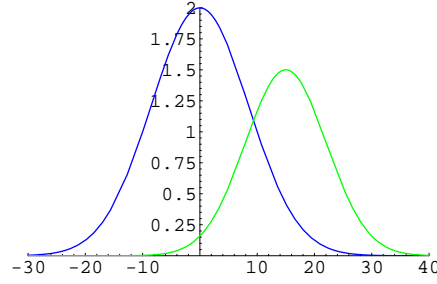


FIG. 5.4 – Forme des pulses du laser pompe (en vert) et du laser Stark (en bleu) paramétrisant le chemin \mathcal{C}^{SCRAP} .

sage).

On s'intéresse maintenant à un autre effet connu sous le nom de *chirping direct* [148]. Cette fois on ne considère que le laser pompe, avec des modulations d'amplitude et de fréquence, telles que

$$\Omega(t) = \Omega_0 \sin(\pi t/10) \quad (5.15)$$

$$\Delta(t) = \Omega_0 \cos(\pi t/10) \quad (5.16)$$

Le chemin \mathcal{C}^{CD} paramétré par ces fonctions est donné figure 5.5.

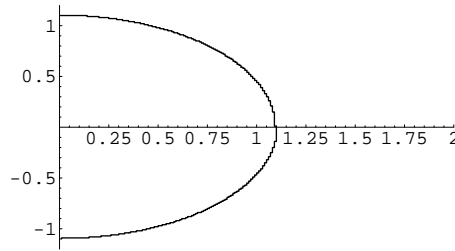


FIG. 5.5 – Le chemin \mathcal{C}^{CD} dans le plan (Ω, Δ) .

La vitesse de parcours de ce chemin étant suffisamment lente par rapport à la distance de ce chemin au croisement, on peut considérer que le système ne subit l'influence d'aucune transition non-adiabatique. Yatsenko, Guérin et Jauslin [148] ont étudié la topologie des surfaces énergétiques pour comprendre cet effet, fig. 5.6.

Le résultat de l'effet de chirping direct correspond au fait que l'on est passé de l'état $|1\rangle$ (état initial) à l'état $|2\rangle$ (état final). En effet, le demi-cercle \mathcal{C}^{CD} (fig. 5.5) peut être reporté sur la surface E_+ (en rouge sur 5.6), on constate alors, que les deux extrémités du chemin, correspondent à deux états nus différents. Le chirping direct est interprété par Yatsenko et al comme un effet de la topologie particulière des surfaces électroniques [148].

Dans notre interprétation en termes de théorie de jauge, du point de vue de la particule virtuelle modélisant le système, il ne s'est absolument rien passé. Elle n'a rencontré aucun trou de ver et n'a été soumise à aucun champ de transition. Tout au long de l'évolution, la particule est restée sur l'espace parallèle associé à E_+ (le chemin \mathcal{C}^{CD} se reporte uniquement sur la surface rouge de 5.6).

Donc $\psi(t) = e^{-i\hbar^{-1}E_+(\vec{R}(t'))dt' - \int_{\mathcal{C}_t^{CD} \langle +, \vec{R}|d|+, \vec{R} \rangle} |+, \vec{R}(t)\rangle$. Il ne s'est donc produit aucune transition au cours de l'évolution. Mais pour pouvoir comparer notre interprétation à celle de Yatsenko et al,

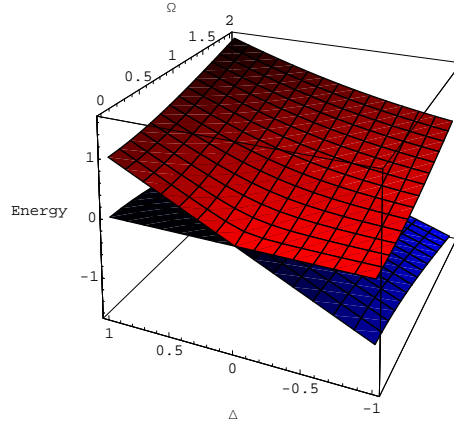


FIG. 5.6 – Surfaces énergétiques $E_+(\vec{R})$ (en rouge) et $E_-(\vec{R})$ (en bleu) en fonction des paramètres de contrôle (Ω, Δ) . On a posé $\hbar = 1$.

il faudrait raisonner dans le même choix de jauge, c'est à dire avec le choix $(|1, \vec{R}\rangle, |2, \vec{R}\rangle)$ et non $(|+, \vec{R}\rangle, |-, \vec{R}\rangle)$. Dans cette convention, ne se produit toujours aucune transition, mais le passage de la carte Sud à la carte Nord, induit la permutation $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ contenu dans le changement de jauge qui recolle les deux cartes. C'est cette permutation que l'on observe dans l'effet de chirping direct, car le chemin \mathcal{C}^{CD} doit nécessairement couper la ligne de changement de carte (et ce quelque soit la disposition arbitraire choisie pour celle-ci). Le chirping direct est donc un effet de la topologie du fibré adiabatique \mathcal{P} , pour lequel on ne peut recouvrir la variété de base que par un minimum de deux cartes, afin de pouvoir définir le potentiel de jauge A . En d'autres termes, c'est l'effet du monopôle magnétique, qui rend impossible la description de l'électromagnétisme dans l'espace des paramètres de contrôle, par le complexe de de Rham $\Omega^* \mathcal{M}$, et qui nécessite l'utilisation du complexe de Mayer-Vietoris $C^*(\{U^N, U^S\}, \Omega^* \mathcal{M})$ avec $A \in C^0(\{U^N, U^S\}, \Omega^1 \mathcal{M})$. En pratique, pour des systèmes plus complexes comme pour des systèmes équivalents à l'atome à deux niveaux, un effet de chirping direct, va se produire pour chaque chemin coupant une ligne de changement de carte émergeant d'un monopôle.

5.2 Un modèle simpliste d'ionisation

On considère un atome en interaction avec un champ laser, tel que le laser couple un état lié du système $|1\rangle$, à un état du continuum $|2\rangle$, en ne faisant intervenir aucun autre état. On suppose l'atome décrit dans une boîte de quantification (espace de configuration de l'atome), muni de frontières absorbantes (potentiels optiques) afin de décrire la possibilité pour l'électron ionisé de s'échapper de la boîte. L'Hamiltonien d'un tel système peut être écrit

$$H(\Omega, \phi, \Gamma) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega e^{i\phi} \\ \Omega e^{-i\phi} & -i\frac{\Gamma}{2} \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

où $\Omega = |\langle 1 | \vec{\mu} \cdot \vec{E} | 2 \rangle|$ avec $\vec{\mu}$ moment dipolaire électrique et E amplitude du laser, ϕ la phase du laser et Γ la largeur de la résonance ($\frac{\hbar}{\Gamma}$ est la durée de vie de l'état $|2\rangle$); dans le cas d'un atome, $|2\rangle$ est un état d'ionisation, et \hbar/Γ est la durée que met l'électron nouvellement ionisé pour quitter l'espace de configuration attaché à l'atome, cf. discussion sur les potentiels optiques).

Comme les potentiels optiques ont des effets similaires à une dilatation complexe du spectre, la situation peut être décrite par la figure 5.7.

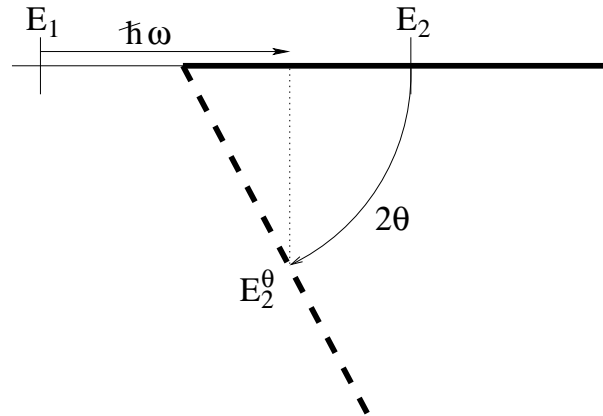


FIG. 5.7 – Spectre de l'atome avant (ligne continue) et après (ligne discontinue) une dilatation complexe d'angle $\theta < 0$.

Il est clair sur la figure 5.7, que $\Im E_2^\theta = E_2 \sin 2\theta$ est fonction de la fréquence du laser ω . Les paramètres de contrôle sont donc $\vec{R} = (\Omega, \phi, \Gamma)$. Pour des raisons de simplification, on utilisera également, les paramètres $x = \Omega \cos \phi$ et $y = \Omega \sin \phi$. L'ensemble des \vec{R} forment une variété \mathcal{M} . Le système est donc décrit par le fibré adiabatique $\mathcal{P} = (P, \mathcal{M}, GL(2, \mathbb{C}), \pi_P)$.

Dans un premier temps, on suppose Γ constant, l'espace des paramètres de contrôle se réduit alors au plan (x, y) . Après normalisation des variables, on choisit $\mathcal{M} = [-1, 1]^2$ et $\Gamma = \sqrt{2}$. Après calcul du potentiel de jauge $A = \langle 1, \vec{R} | d|1, \vec{R}\rangle$ et du champ magnétique de \mathcal{M} , $F = dA$ (flux du champ dans l'espace universel à travers l'immersion de \mathcal{M}), on trouve que F a une répartition d'intensité comme indiqué sur la figure 5.8.

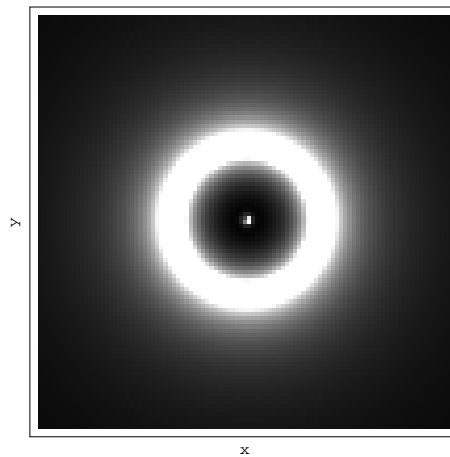


FIG. 5.8 – Intensité du champ magnétique adiabatique en fonction de la variété de contrôle $[-1, 1]^2$ (le plan (x, y)). Les zones blanches correspondent au maximum d'intensité (unités arbitraires).

On constate que le système n'est pas caractérisé par un champ radial (un monopôle magnétique ponctuel), mais par un champ émis par un cercle, donc par une corde magnétique (vortexe) fermée. Ceci est en accord avec la description des monopôles pour les systèmes dissipatifs présentée au chapitre précédent. Cette même répartition du champ est plus difficile à interpréter dans l'espace (Ω, ϕ) à cause de la forme particulière de la variété $\mathbb{R}^+ \times S^1$, cf. figure 5.9. On préfère donc utiliser les coordonnées (x, y) (de plus la figure 5.8 est en fait l'immersion de la variété 5.9 dans l'espace

universel généralisé).

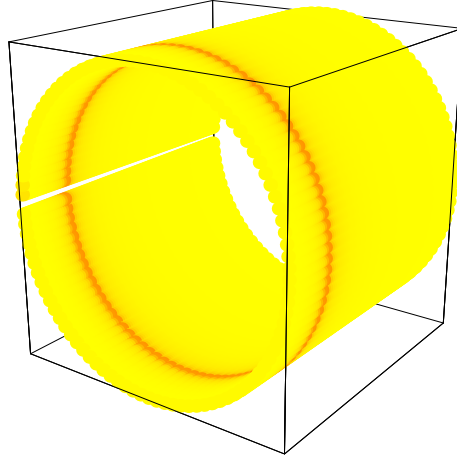


FIG. 5.9 – Intensité du champ magnétique adiabatique en fonction de la variété de contrôle $\mathbb{R}^+ \times S^1$. Les zones rouges correspondent au maximum d'intensité (unités arbitraires).

On considère la dynamique suivante dans \mathcal{M} . Le champ laser est impulsionnel

$$\Omega(t) = e^{-\frac{(t-t_0)^2}{\tau}} \quad (5.18)$$

avec des unités réduites, on pose $t_0 = 5$ et $\tau = 1$. On suppose de plus que la phase du laser dérive proportionnellement au temps

$$\phi(t) = \frac{\pi}{2} + \alpha t \quad (\text{mod } 2\pi) \quad (5.19)$$

avec $\alpha = \pi/5$. Le chemin \mathcal{C} dans \mathcal{M} associé à la paramétrisation $(\Omega(t) \cos(\phi(t)), \Omega(t) \sin(\phi(t)))$ est donnée figure 5.10.

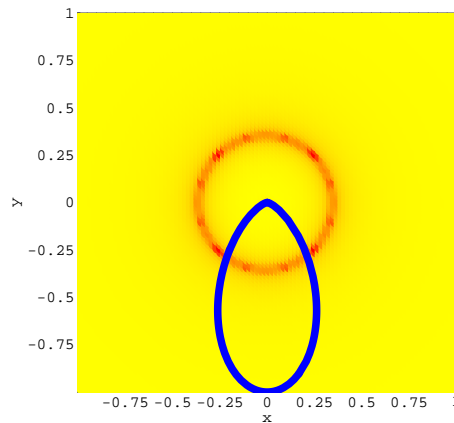


FIG. 5.10 – Chemin \mathcal{C} pour le laser impulsionnel avec une dérive de la phase dans l'espace des paramètres de contrôle de coordonnées $x = \Omega \cos \phi$ et $y = \Omega \sin \phi$. Le cercle rouge représente le maximum d'intensité du champ magnétique adiabatique (i.e. la corde magnétique).

On a représenté figure 5.11 la norme carré de la fonction d'onde $\psi(t)$ solution de l'équation de Schrödinger en fonction du temps, c'est à dire la probabilité de trouver l'électron dans la boîte de quantification au cours du temps.

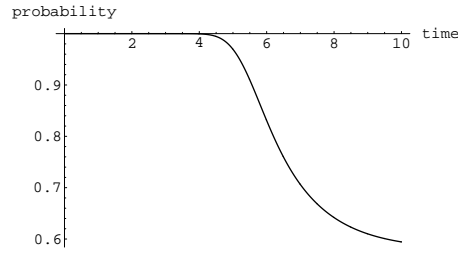


FIG. 5.11 – Probabilité de trouver l'électron dans la boîte de quantification au cours du temps, $P(t) = \|\psi(t)\|^2$.

On a, de manière équivalente, la probabilité d'ionisation au cours du temps figure 5.12.

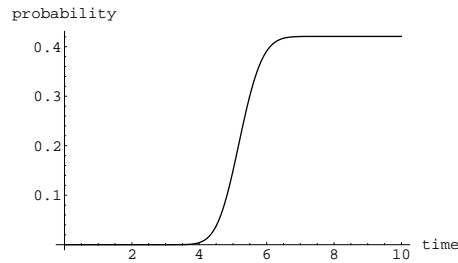


FIG. 5.12 – Probabilité d'ionisation de l'atome au cours du temps, $P(t) = 1 - |\langle 1|\psi(t)\rangle|^2$.

Dans le voisinage du vortexe-anneau magnétique, les couplages non-adiatiques sont très intenses, de sorte qu'il est très difficile de trouver une trajectoire qui corresponde à un régime : transport adiabatique pur / transition soudaine. En particulier, le champ adiabatique à l'intérieur de l'anneau, bien que moins intense que sur l'anneau, est suffisamment fort pour qu'en pratique, les effets sur la fonction d'onde quand la particule virtuelle est à l'intérieur de l'anneau, ne se distinguent pas de ceux lorsqu'elle est sur l'anneau. Cette difficulté est peut-être due au caractère particulier des régimes dissipatifs. En effet, la signification de l'approximation adiabatique et la validité de l'approximation de transition soudaine, ne sont pas claires pour les systèmes dissipatifs. On peut en effet se demander, si c'est bien le croisement dans le plan complexe des valeurs propres qui est significatif, ou le croisement de leurs parties réelles. On peut en effet remarquer que dans l'exemple présenté ici, si l'anneau correspond au croisement dans le plan complexe des valeurs propres instantanées, tout le disque interne à l'anneau correspond au croisement des parties réelles. Ce problème nécessiterait une étude particulière.

On suppose maintenant y constant (avec $y = 0.5$), par contre on fait varier Γ . La nouvelle surface de contrôle est alors $[-1, 1] \times [0, -2]$. Dans cette nouvelle configuration, la répartition de l'intensité du champ magnétique adiabatique est donnée figure 5.13.

Cette fois la corde magnétique (le vortexe) n'est plus fermée et prend une forme d'hyperbole.

5.3 Atome à 3 niveaux

On considère un atome à 3 niveaux, en interaction avec deux champs lasers, un laser pompe quasi-résonant avec la transition $1 \rightarrow 2$ et un laser sonde quasi-résonant avec la transition $2 \rightarrow 3$.

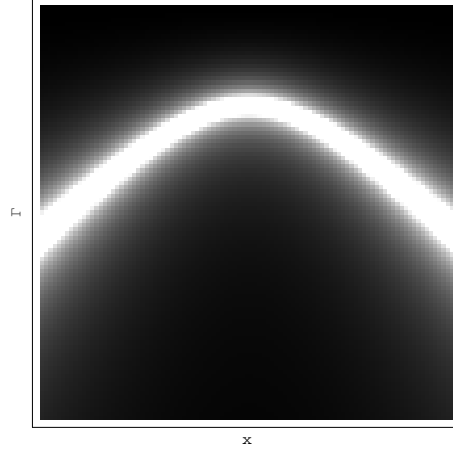


FIG. 5.13 – Intensité du champ magnétique adiabatique en fonction de la variété de contrôle (x, Γ) . Les zones blanches correspondent au maximum d'intensité (unités arbitraires).

Dans l'approximation RWA, l'Hamiltonien de l'atome habillé est

$$H(\Omega_P, \Omega_S, \Delta_P, \Delta_S, \alpha, \beta) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega_P e^{i\alpha} & 0 \\ \Omega_P e^{-i\alpha} & 2\Delta_P & \Omega_S e^{i\beta} \\ 0 & \Omega_S e^{-i\beta} & 2(\Delta_P - \Delta_S) \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

où $\Omega_P = |\langle 1 | \vec{\mu} \cdot \vec{E}_P | 2 \rangle|^2$, $\Omega_S = |\langle 2 | \vec{\mu} \cdot \vec{E}_S | 3 \rangle|^2$, $\hbar\Delta_P = E_2 - E_1 - \hbar\omega_P$ et $\hbar\Delta_S = E_3 - E_2 - \hbar\omega_S$, (E_P, ω_P, α) étant l'amplitude, la fréquence et la phase du laser pompe et (E_S, ω_S, β) étant l'amplitude, la fréquence et la phase du laser sonde, enfin $\vec{\mu}$ est le moment dipolaire électrique de l'atome. Les paramètres de contrôle sont donc $\vec{R} = (\Omega_P, \Omega_S, \Delta_P, \Delta_S, \alpha, \beta)$.

On fixe $\alpha = \beta = 0$, de plus dans des unités réduites, on fixe $\Delta_P = 1/2$ et $\Delta_S = -1/2$. On désire contrôler le transfert de population des niveaux atomiques, de façon que le système passe de l'état 1 à l'état 3 (avec une probabilité d'occupation de l'état 3 égale à 1 à la fin du processus). Le raisonnement intuitif consiste à d'abord allumer le laser pompe, afin que l'atome passe du niveau 1 vers le niveau 2 en absorbant un photon du laser pompe, puis à allumer le laser sonde afin que l'atome passe du niveau 2 vers le 3 en absorbant un photon du laser sonde. On considère donc les impulsions lasers suivantes :

$$\Omega_P(t) = \Omega_0 e^{-(t-t_P)^2/\tau_P^2} \quad (5.21)$$

$$\Omega_S(t) = \Omega_0 e^{-(t-t_S)^2/\tau_S^2} \quad (5.22)$$

avec des unités réduites : $\Omega_0 = 3.5$, $t_P = 10$, $\tau_P = 15$, $t_S = 35$ et $\tau_S = 15$. Ces impulsions paramétrisent un chemin \mathcal{C} dans l'espace des paramètres de contrôle \mathcal{M} représenté figure 5.14.

La vitesse de parcours de \mathcal{C} est suffisamment lente pour être dans un régime : transport adiabatique pur / transitions soudaines. Après intégration de l'équation de Schrödinger, les probabilités d'occupation des états propres instantanés $\{|i, \vec{R}\rangle\}_{i=1,\dots,3}$ sont données figure 5.15.

On constate que la contrôle échoue, le système passe sur l'état 2 à $t = 50$ mais ne passe jamais sur l'état 3. On teste alors un schéma contre-intuitif où on allume d'abord le laser sonde puis le pompe. Le schéma intuitif correspond au chemin 5.14 parcouru dans le sens direct, alors que le schéma contre-intuitif correspond au chemin 5.14 parcouru dans le sens indirect. Un raisonnement naïf aboutit à la conclusion que le schéma contre-intuitif doit échouer, rien ne devrait se passer lorsqu'on allume le laser sonde car celui-ci ne correspond à aucune transition depuis l'état 1, ensuite l'atome

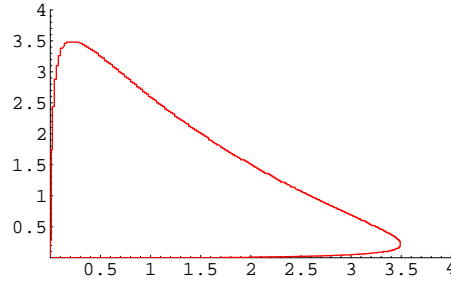


FIG. 5.14 – Chemin \mathcal{C} paramétrisé par les impulsions lasers dans le plan Ω_P (abscisses) - Ω_S (ordonnées).

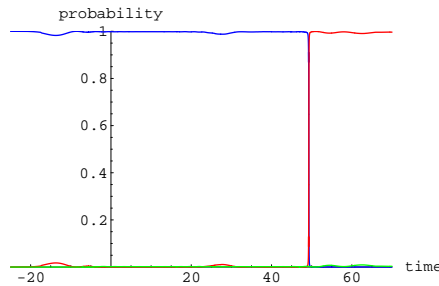


FIG. 5.15 – Probabilités d'occupation des états propres instantanés pour le schéma intuitif, en fonction du temps. $P_1(t) = |\langle 1, \vec{R}(t) | \psi(t) \rangle|^2$ en bleu, $P_2(t) = |\langle 2, \vec{R}(t) | \psi(t) \rangle|^2$ en rouge et $P_3(t) = |\langle 3, \vec{R}(t) | \psi(t) \rangle|^2$ en vert.

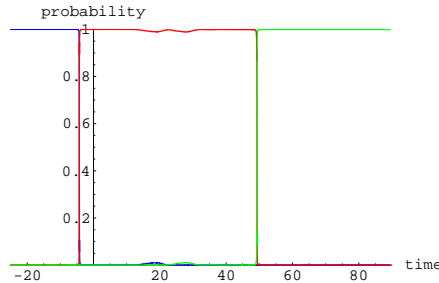


FIG. 5.16 – Probabilités d'occupation des états propres instantanés pour le schéma contre-intuitif, en fonction du temps. $P_1(t) = |\langle 1, \vec{R}(t) | \psi(t) \rangle|^2$ en bleu, $P_2(t) = |\langle 2, \vec{R}(t) | \psi(t) \rangle|^2$ en rouge et $P_3(t) = |\langle 3, \vec{R}(t) | \psi(t) \rangle|^2$ en vert.

devrait passer sur l'état 2 quand on allume le laser pompe. Mais les probabilités d'occupation des états propres instantanés, fig. 5.16, ne montrent pas ce résultat.

L'atome passe de l'état 1 vers l'état 2 puis de l'état 2 vers l'état 3. On peut interpréter en termes de photons cet effet appelé STIRAP (*STImulated Raman Adiabatic Passage*), à l'aide des probabilités d'occupation des états nus de l'atome, fig. 5.17.

Dans le schéma intuitif, on constate qu'un photon du canal P est absorbé pour passer de l'état 1 vers l'état 2, puis qu'un photon du canal S est absorbé pour passer provisoirement sur l'état 3. Mais on constate aussi un retour sur l'état 2, qui doit être dû à l'émission stimulée d'un photon sur le canal S. Ces absorptions et émissions n'étant pas localisées dans le temps comme le montre la figure 5.17 où les transitions ne sont pas instantanées. Le schéma intuitif échoue donc à cause de

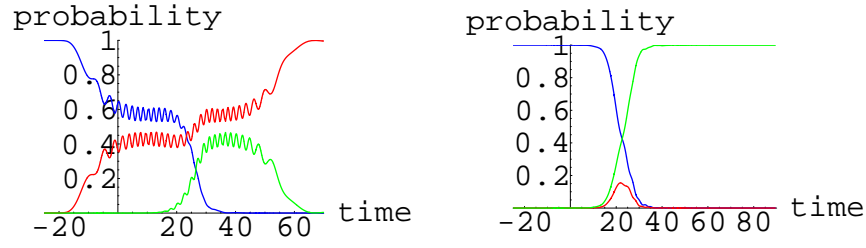


FIG. 5.17 – Probabilité d'occupation des états nus de l'atome en fonction du temps. À gauche dans le schéma intuitif et à droite dans le schéma contre-intuitif. $P_1(t) = |\langle 1|\psi(t)\rangle|^2$ en bleu, $P_2(t) = |\langle 2|\psi(t)\rangle|^2$ en rouge et $P_3(t) = |\langle 3|\psi(t)\rangle|^2$ en vert.

cette émission stimulée. On peut donc comprendre le comportement de l'atome par le schéma

$$|1\rangle \xrightarrow{-\hbar\omega_P} |2\rangle \xrightarrow{-\hbar\omega_S} |3\rangle \xrightarrow{+\hbar\omega_S} |2\rangle \quad (5.23)$$

Par contre pour le schéma contre-intuitif, on constate un passage presque instantané de l'état 1 vers l'état 3 entre $t = 20$ et $t = 40$, sans passer par l'état 2 (qui n'est presque jamais peuplé). L'intervalle $[20, 40]$ où se produit ce phénomène, est la période pendant laquelle les deux lasers sont allumés simultanément (on est en train d'éteindre le laser pompe et d'allumer le laser sonde). La réussite du contrôle s'interprète donc par l'absorption simultanée de deux photons sur les canaux S et P :

$$|1\rangle \xrightarrow{-\hbar(\omega_P+\omega_S)} |3\rangle \quad (5.24)$$

Le transfert sur l'état 3 n'est pas annulé par une émission stimulée comme dans le schéma intuitif, car après $t = 40$, le laser sonde est éteint et le laser pompe ne correspond à aucune transition depuis l'état 3.

On aurait pu prévoir ces comportements en utilisant l'interprétation gravimagnétique des systèmes dynamiques quantiques. On représente les champs magnétiques associés à chacun des états propres instantanés, figure 5.18.

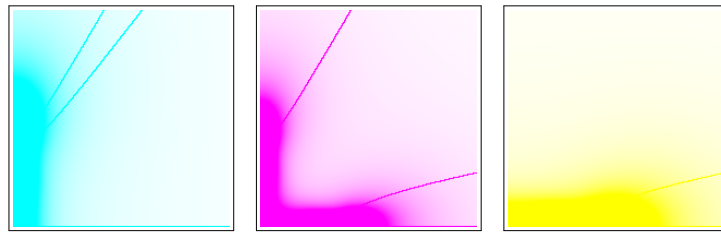


FIG. 5.18 – Intensités des champs magnétiques adiabatiques dans le plan (Ω_P, Ω_S) (unités arbitraires). De gauche à droite : $F_1 = dA_{11}$ (cyan), $F_2 = dA_{22}$ (magenta) et $F_{33} = dA_{33}$ (jaune), avec $A_{aa} = \langle a, \vec{R} | d | a, \vec{R} \rangle$. Les lignes qui partagent \mathcal{M} sont les lignes de changement de carte

On constate une coïncidence des champs magnétiques sur l'axe Ω_S entre l'état 1 et l'état 2, ce qui, en interprétant les champs comme les courbures des copies de la variété de contrôle, laisse à penser qu'il y a un trou de ver entre les espaces 1 et 2 en ce lieu. De même, il semble y avoir un trou de ver entre les espaces 2 et 3 sur l'axe Ω_P . En combinant les trois cartes précédentes, on peut avoir une carte globale de la variété de contrôle, en attribuant des couleurs aux monopôles, figure 5.19.

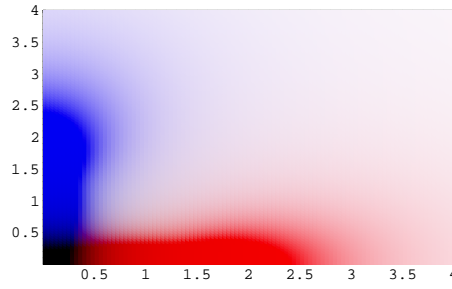


FIG. 5.19 – Intensité du champ chromatique dans le plan (Ω_P, Ω_S) (unités arbitraires). Les champs bleus correspondent à la transition 1 vers 2, les champs rouges à la transition 2 vers 3 et les champs verts à la transition 1 vers 3.

Les schémas intuitifs et contre-intuitifs, s'interprètent alors dans l'image “universs parallèles - trous de ver” comme indiqué sur la figure 5.20.

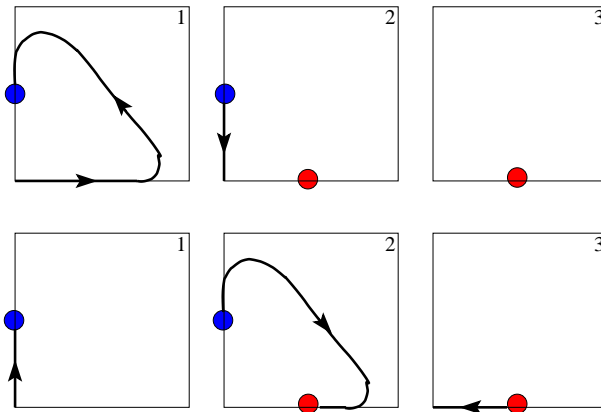


FIG. 5.20 – Trajectoires des particules virtuelles représentant le système dynamique dans les espaces parallèles associés aux trois états du système, en haut dans le parcours intuitif et en bas dans le parcours contre-intuitif. Les disques représentent les trous de ver.

On voit donc que dans le schéma intuitif, la particule se déplace sur l'espace 1 sans rencontrer aucun trou de ver, sauf à la fin de son parcours où elle rencontre le trou de ver la faisant passer sur l'espace 2. Cette trajectoire est tout à fait en accord avec les probabilités d'occupation 5.15. Dans le schéma contre-intuitif, la particule se précipite sur le trou de ver reliant l'espace 1 à l'espace 2, puis à la fin de son parcours sur l'espace 2, elle rencontre le trou de ver reliant 2 à 3, ce qui est en accord avec les probabilités d'occupation 5.16. Cette même prédiction, peut être faite en analysant la topologie des surfaces énergétiques, comme le font Yatsenko et al [148, 56].

En faisant varier Δ_P tout en laissant $\Delta_P - \Delta_S$ constant, on peut annuler l'effet observé précédemment, en faisant disparaître l'un des trous de ver. Pour $\Delta_P = -1/2$ et $\Delta_S = -3/2$, seul subsiste un trou de ver de 2 vers 3, alors que pour $\Delta_P = 3/2$ et $\Delta_S = 1/2$, ne subsiste que la transition de 1 vers 2, comme l'ont observé sur la topologie des surfaces électroniques¹ Yatsenko et al [148, 56]. On peut prévoir cette disparition, en étudiant les champs magnétiques en fonction de l'espace de contrôle $(\Omega_P, \Omega_S, \Delta_P)$, figure 5.21.

¹Yatsenko et al utilisent des labels pour désigner les états, différents des conventions adoptées ici. Les labels 1,2,3 font référence ici à l'ordre des niveaux d'énergie alors que pour Yatsenko et al ces labels font référence à l'état nu associé à l'état propre instantané. Cette différence de labélisation se traduit dans notre modèle par la présence des

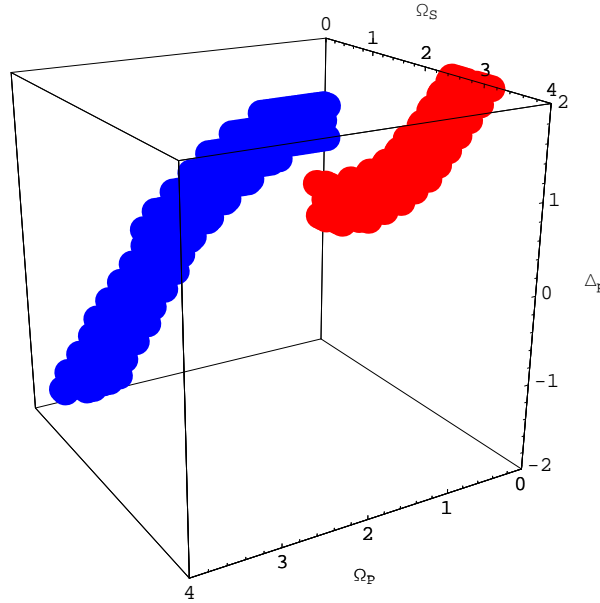


FIG. 5.21 – *Intensité du champ chromatique dans la variété de contrôle $(\Omega_P, \Omega_S, \Delta_P)$, en bleu pour le vortex de la transition 1 vers 2 et en rouge pour le vortex la transition 2 vers 3 (unités arbitraires).*

L'Hamiltonien étant réel symétrique, d'après la table 4.2, la codimension des croisements est 2, donc la dimension dans \mathbb{R}^3 , engendré par $(\Omega_P, \Omega_S, \Delta_P)$, est 1. On a donc deux vortexes magnétiques associés aux transitions 1 vers 2 et 2 vers 3, comme le montre bien la figure 5.21. Les deux cas cités plus haut, où l'une des transitions disparaît, correspond à des plans parallèles à (Ω_P, Ω_S) qui ne coupent qu'un seul des vortexes (car trop bas ou trop haut).

En résumé

On a montré que l'étude des cartes des champs magnétiques sur la variété de contrôle permettait de prédire quel chemin allait être efficace pour résoudre un problème de contrôle. La procédure consistant à étudier ces cartes, qui sont la traduction de la topologie du fibré adiabatique, est équivalente à l'étude de la topologie des surfaces électroniques développée par Yatsenko, Guérin et Jauslin [148, 56], mais avec l'avantage de pouvoir interpréter la dynamique avec un seul graphique 2D lorsque les valeurs propres sont complexes (exemples 5.8 et 5.9) pour deux paramètres de contrôle, et un seul graphique 3D pour trois paramètres de contrôle (que les valeurs propres soient réelles ou complexes) (exemple 5.21). L'étude des surfaces énergétiques nécessiterait de tracer des applications de \mathbb{R}^2 vers \mathbb{C} (dimension réelle 4), pour des valeurs propres complexes dépendant de 2 paramètres de contrôle, des applications de \mathbb{R}^3 vers \mathbb{R} (dimension 4) pour des valeurs propres réelles dépendant de 3 paramètres, et des applications de \mathbb{R}^3 vers \mathbb{C} (dimension réelle 5) pour des valeurs propres complexes dépendant de 3 paramètres. Les effets purement topologiques, tels le chirping direct de l'atome à deux niveaux, sont visibles, non pas comme dans [148, 56] par l'étude de la forme des surfaces électroniques (ce qui limite les possibilités d'étude au cas des valeurs propres réelles dépendantes de 2 paramètres), mais par l'intersection du chemin de contrôle avec la ou les lignes (ou les murs) de changement de carte (ce qui étend les possibilités d'étude au cas des valeurs propres complexes dépendant de 2 ou 3 paramètres).

lignes de changement de cartes figure 5.18.

Chapitre 6

Le modèle géométrique spatio-temporel

L'espace est un corps imaginaire comme le temps un mouvement fictif.

Paul Valéry

Dans les chapitres précédents, nous avons toujours supposé que la phase dynamique et la phase de Berry commutaient¹, ce qui permettait de considérer la fonction d'onde après élimination de la phase dynamique ψ^\sharp . Nous avons alors pu établir au chapitre 3, la structure mathématique décrivant la phase de Berry, le fibré adiabatique. Un théorème de structure définissant ce fibré, a été donné et nous avons montré que la connexion adiabatique était naturelle pour celui-ci, car elle est le pull-back de la connexion universelle (la connexion de Stiefel dans le cas conservatif). Enfin nous avons pu équiper l'espace de base du fibré, la variété des paramètres de contrôle \mathcal{M} , d'une métrique naturelle obtenue comme le pull-back de la métrique Kählerienne de la variété universelle classifiante de \mathcal{M} ; métrique qui mesure la distance quantique entre les espaces adiabatiques, distance au sens de la compatibilité probabiliste de ces espaces. Aux chapitres 4 et 5, nous avons montré que les croisements des valeurs propres de l'espace actif, apparaissent dans une analogie avec la théorie des champs, comme des monopôles magnétiques. L'hypothèse de commutativité de la phase de Berry avec la phase dynamique, rendant la théorie purement géométrique après élimination des phases dynamiques, a induit au chapitre 4 une théorie des monopôles magnétiques purement statique. Comme on le remarque table 4.4, l'analogie de \mathcal{M} en théorie des champs (ou en relativité générale) est l'espace seul et non l'espace-temps.

À présent il est temps de réintroduire le temps dans notre modèle, et de tenir compte, en plus des effets géométriques, des effets dynamiques. Le but de ce chapitre étant d'établir un modèle spatio-temporel de la dynamique quantique adiabatique, nous ne supposons plus désormais la commutativité des phases géométrique et dynamique. L'expression de la fonction d'onde du système dynamique dans le transport adiabatique généralisé est donc

$$\psi_a(t) = \sum_{b=1}^M \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(\vec{R}(t')) dt' - \int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'} \right]_{ba} |b, \vec{R}(t')\rangle \quad (6.1)$$

pour la condition initiale $\psi(0) = |a, \vec{R}(0)\rangle$. En considérant toutes les conditions initiales pures, on a la matrice

$$\Psi(t) = T(\vec{R}(t)) \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(\vec{R}(t')) dt' - \int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'} \quad (6.2)$$

¹Yatsenko et al font implicitement cette hypothèse en ne considérant que des schémas : évolution adiabatique - transition soudaine.

T étant la matrice des vecteurs propres. Enfin pour une condition initiale $\psi(0) = \sum_{a=1}^M c_a |a, \vec{R}(0)\rangle$, on a $\psi(t) = \Psi(t)C$ où C est la matrice colonne des conditions initiales, $C = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_M \end{pmatrix}$. Pour être tout

à fait général, on va de plus considérer dans ce chapitre, des cas qui échappent à l'approximation adiabatique. Pour ce faire on suppose que l'Hamiltonien dépend du temps à travers des paramètres de contrôle classiques \vec{R} à évolution lente, mais présente aussi une dépendance temporelle directe, trop rapide pour être considérée comme adiabatique : $H(\vec{R}(t), t)$. Ainsi $\forall t'$ fixe, $t \mapsto H(\vec{R}(t), t')$ induit une dynamique adiabatique mais pas $t \mapsto H(\vec{R}(t'), t)$. La formulation (t, t') constitue une séparation du “temps lent” et du “temps rapide”. Une telle séparation est courante en photophysique [38, 63]. On considère alors l'Hamiltonien

$$H : \begin{array}{l} \mathcal{M} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) \\ (\vec{R}, t) \mapsto H(\vec{R}, t) \end{array} \quad (6.3)$$

À t fixé, on peut appliquer un théorème adiabatique à $t' \mapsto H(\vec{R}(t'), t)$, avec pour base de l'espace actif adiabatique, les états propres de $H(\vec{R}, t)$:

$$\forall (\vec{R}, t) \in \mathcal{M} \times \mathbb{R}, \quad H(\vec{R}, t)|a, \vec{R}, t\rangle = E_a(\vec{R}, t)|a, \vec{R}, t\rangle \quad (6.4)$$

La fonction d'onde appartient donc à l'espace engendré par $\{|a, \vec{R}(t'), t\rangle\}_a$, pour tout (t, t') . En posant $t = t'$, la fonction d'onde appartient à $\{|a, \vec{R}(t), t\rangle\}_a$. On a alors la matrice des fonctions d'onde pour les conditions initiales pures, d'après le principe des phases de Aharonov-Anandan (pour $\tilde{\psi}_a(t) = |a, \vec{R}(t), t\rangle$) :

$$\Psi(t) = T(\vec{R}(t), t) \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(\vec{R}(t'), t') dt' - \int_0^t A_\mu(\vec{R}(t'), t') \dot{R}^\mu(t') dt' - \int_0^t A_0(\vec{R}(t'), t') dt'} \quad (6.5)$$

où $\left[A_\mu(\vec{R}, t) \right]_{ba} = \langle a(*), \vec{R}, t | \frac{\partial}{\partial R^\mu} | b, \vec{R}, t \rangle$ et $\left[A_0(\vec{R}, t) \right]_{ba} = \langle a(*), \vec{R}, t | \partial_t | b, \vec{R}, t \rangle$. Finalement $A_{\mathcal{M} \times \mathbb{R}} = A_\mu dR^\mu + A_0 dt \in \Omega^1(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathfrak{g})$.

Nous nous intéressons donc dans ce chapitre, à la structure géométrique décrivant la phase matricielle $\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(\vec{R}(t'), t') dt' - \int_0^t A_\mu(\vec{R}(t'), t') \dot{R}^\mu(t') dt' - \int_0^t A_0(\vec{R}(t'), t') dt'}$. Cette structure, décrivant à la fois l'aspect géométrique et dynamique du transport adiabatique généralisé, n'est pas décrite dans la littérature. De plus, les fondements mathématiques de celle-ci, sont très peu abordés dans la littérature. Il est donc nécessaire, dans une première section de ce chapitre, de faire un développement de pures mathématiques, afin de mettre en place les notions nécessaires, en particulier la notion de fibré composite principal. Une fois les outils mathématiques mis en place, nous introduisons le fibré composite adiabatique spatio-temporel, qui décrit la phase matricielle du transport adiabatique généralisé. Une troisième section fait le bilan du modèle géométrique avec lequel on décrit les systèmes dynamiques quantiques dans ce travail. Enfin un exemple simple, vient illustrer les compléments introduits spécifiquement par ce chapitre.

6.1 Théorie des fibrés composites principaux

La notion de fibré composite a été introduite par Sardanašvily [131, 48, 98] pour décrire les phases dynamiques et géométriques simultanément, à partir d'une différentielle covariante. La structure ainsi définie est une structure de fibré vectoriel. L'extension du modèle géométrique des phases de Berry, n'est pas complète dans ces études, car la structure “principal” n'y est pas représentée. De plus la différentielle covariante qui engendre simultanément les deux phases, est introduite de manière ad hoc. Nous montrons dans la section suivante, à partir des notions introduites dans cette

section, que la connexion du fibré composite principal décrivant dynamique et géométrie, apparaît naturellement. Nous introduisons de plus dans cette section, quelques nouvelles notions relatives aux fibrés composites, qui nous seront utiles pour la suite.

6.1.1 Définition d'un fibré composite principal

Un fibré composite est défini par la donnée de 3 variétés P^+ , S et R , et deux applications surjectives $\pi_+ : P^+ \rightarrow S$ et $\pi_S : S \rightarrow R$. On note le fibré composite $P^+ \rightarrow S \rightarrow R$. On dit qu'un fibré composite est un fibré composite principal si $S \rightarrow R$ est un fibré localement trivial avec pour fibre type une variété $M : (S, R, M, \pi_S)$, et si $P^+ \rightarrow S$ est un fibré principal avec pour groupe de structure un groupe de Lie $G : (P^+, S, G, \pi_+)$. $\forall y \in R$, on a $\pi_S^{-1}(y) \simeq M$ et on note par χ_y^S le difféomorphisme de fibre associé. Si on suppose que S a une structure d'espace cellulaire; alors $\pi_S^{-1}(y)$ et M sont eux aussi des espaces cellulaires. En utilisant le théorème de classification universelle des fibrés principaux, on définit le fibré universel (U, B, G, π) où B est l'espace classifiant de M , ϱ_U l'application universelle de M vers B et $\varrho_U \circ \chi_y^S$ l'application universelle de $\pi_S^{-1}(y)$ vers B . Finalement on définit un fibré principal (P, M, G, π_P) tel que le diagramme suivant commute :

$$\begin{array}{ccccccc} P^+ & \xleftarrow{\quad} & \chi_y^{S*} P & \xleftarrow{\chi_y^{S*}} & P & \xleftarrow{\varrho_U^*} & U \\ \pi_+ \downarrow & & \downarrow \pi_{P_y} & & \downarrow \pi_P & & \downarrow \pi_U \\ S & \xleftarrow{\quad} & \pi_S^{-1}(y) & \xrightarrow{\chi_y^S} & M & \xrightarrow{\varrho_U} & B \end{array}$$

où $P = \varrho_U^* U$ et $\chi_y^{S*} P = (\varrho_U \circ \chi_y^S)^* U$. On sait que U est indépendant de $\chi_y^{S*} P$, donc indépendant de y . De plus, comme χ_y^S est un difféomorphisme alors χ_y^{S*} est un isomorphisme de fibrés principaux, ainsi $\chi_y^{S*} P = \pi_+^{-1}(\pi_S^{-1}(y))$ et $\pi_{P_y} = \pi_+|_{\chi_y^{S*} P}$. Soit U^i une carte locale ouverte de M . On considère la trivialisations locale de (P, M, G, π_P) au dessus de U^i , $\phi_P^i : U^i \times G \rightarrow \pi_P^{-1}(U^i)$; alors la trivialisations locale de $(\chi_y^{S*} P, \pi_S^{-1}(y), G, \pi_{P_y})$ est $\phi_P^i[y] = \chi_y^{S*} \phi_P^i : \chi_y^{S^{-1}}(U^i) \times G \rightarrow \pi_+^{-1}(\chi_y^{S^{-1}}(U^i))$. Soient V^j une carte locale ouverte de R , ϕ_S^j la trivialisations locale de (S, R, M, π_S) au dessus de V^j , et ϕ_+^j la trivialisations locale de (P^+, S, G, π_+) au dessus de $\pi_S^{-1}(V^j)$. Il est clair que ces différentes trivialisations locales sont reliées par

$$\phi_+^j : \begin{array}{ccc} \pi_S^{-1}(V^j) \times G & \rightarrow & \pi_+^{-1}(\pi_S^{-1}(V^j)) \\ (s, g) & \mapsto & \phi_P^i[\text{Pr}_1 \phi_S^{j-1}(s)](\text{Pr}_2 \phi_S^{j-1}(s), g) \end{array}$$

où on a supposé que $\text{Pr}_2 \phi_S^{j-1}(s) \in U^i$. Pr_1 et Pr_2 sont les projections canoniques de $R \times M$ sur R et sur M . On appelle (P, M, G, π_P) , fibré de structure du fibré composite principal.

On peut de plus définir un nouveau fibré principal lié au fibré composite principal. Soit l'application

$$\phi_{++}^{ij} : \begin{array}{ccc} U^i \times V^j \times G & \rightarrow & P^+ \\ (x, y, g) & \mapsto & \phi_+^j(\phi_S^j(y, x), g) = \phi_P^i[y](x, g) \end{array}$$

Cette application, considérée comme une trivialisations locale, définit un fibré principal $(P^+, M \times R, G, \pi_{++})$ avec $\pi_{++} = \phi_S^{-1} \circ \pi_+$. On appelle ce fibré, fibré total du fibré composite principal.

Soit $x \in U^i$ un point fixé dans M . On définit l'application

$$\phi_Q^j[x] : \begin{array}{ccc} V^j \times G & \rightarrow & P^+ \\ (y, g) & \mapsto & \phi_{++}^{ij}(x, y, g) \end{array}$$

Si on considère cette application comme une trivialisations locale, elle définit un fibré principal (Q_x, R, G, π_{Q_x}) avec $\pi_{Q_x} = \text{Pr}_1 \circ \phi_Q^j[x]^{-1}$, que l'on appelle, fibré transverse du fibré composite principal. La situation peut être schématiquement représentée par la figure 6.1.

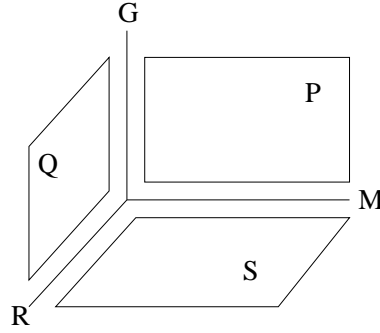


FIG. 6.1 – Schéma d'un fibré composite principal. P^+ est l'espace tridimensionnel entre les trois plans.

6.1.2 Connexions dans un fibré composite principal

On considère un fibré composite principal $P^+ \rightarrow S \rightarrow R$. (P^+, S, G, π_+) et $(P^+, M \times R, G, \pi_{++})$ ont des structures de fibrés principaux. On peut définir une connexion commune à ces fibrés. Soit $\omega \in \Omega^1(P^+, \mathfrak{g})$ sa 1-forme de connexion (\mathfrak{g} est l'algèbre de Lie du groupe G). Soit $\sigma_{M \times R}^{ij} \in \Gamma(U^i \times V^j, P^+)$ une section locale du fibré principal $(P^+, M \times R, G, \pi_{++})$. Le potentiel de jauge de ce fibré est par définition $A_{M \times R}^{ij} = \omega \circ \sigma_{M \times R}^{ij} \in \Omega^1(M \times R, \mathfrak{g})$. Soit $\sigma_S^j \in \Gamma(\pi^{-1}(V^j), P^+)$ une section locale de (P^+, S, G, π_+) . Pour simplifier le passage d'un fibré à un autre, on choisit les deux sections telles qu'elles soient compatibles, i.e. $\forall s \in \pi_S^{-1}(V^j)$, $\sigma_S^j(s) = \sigma_{M \times R}^{ij}(\phi_S^{j-1}(s))$ (on suppose que $\text{Pr}_1 \phi_S^{j-1}(s) \in U^i$), et $\forall (x, y) \in U^i \times V^j$, $\sigma_{M \times R}^{ij}(x, y) = \sigma_S^j(\phi_S^j(x, y))$. En utilisant ces relations, le potentiel de jauge du fibré (P^+, S, G, π_+) est $A_S^j = \sigma_S^{j*} \omega = \phi_S^{j-1*} \sigma_{M \times R}^{ij} \omega = \phi_S^{j-1*} A_{M \times R}^{ij} \in \Omega^1(S, \mathfrak{g})$.

$\chi_y^{S*} : P \rightarrow \pi_+^{-1}(\pi_S^{-1}(y))$ est un difféomorphisme, donc² $\chi_y^{S**} : \Omega^*(\pi_+^{-1}(\pi_S^{-1}(y))) \rightarrow \Omega^*P$. Soit $i_y : \pi_+^{-1}(\pi_S^{-1}(y)) \hookrightarrow P^+$ l'injection canonique. On définit une famille de connexions de (P, M, G, π_P) par $\omega_y = \chi_y^{S**} i_y^* \omega \in \Omega^1(P, \mathfrak{g})$, pour $y \in R$. Soit $\sigma_M^i \in \Gamma(U^i, P)$ une section locale supposée être compatible avec la section de $P^+ : \forall x \in M$, $\sigma_M^i(x) = \chi_y^{S*-1} \sigma_{M \times R}^{ij}(x, y)$ (cette section dépend de y bien qu'on ne le fasse pas figurer dans la notation). Le potentiel de jauge est alors $A_M^i(x) = \sigma_M^{i*} \omega_y = \sigma_{M \times R}^{ij} \chi_y^{S*-1*} \chi_y^{S**} i_y^* \omega = j_y^* A_{M \times R}^{ij}(x, y) \in \Omega^1(M, \mathfrak{g})$, où $j_y : \begin{array}{ccc} M & \rightarrow & M \times R \\ x & \mapsto & (x, y) \end{array}$.

Finalement, soit $i_x : \pi_{++}^{-1}(x, R) \hookrightarrow P^+$ l'injection canonique. $\omega_x = i_x^* \omega$ est une connexion du fibré transverse (Q_x, R, G, π_{Q_x}) . Soit $j_x : \begin{array}{ccc} R & \rightarrow & M \times R \\ y & \mapsto & (x, y) \end{array}$, alors $A_x = j_x^* A_{M \times R} \in \Omega^1(R, \mathfrak{g})$ est le potentiel de jauge de ce fibré.

6.1.3 Relèvement horizontal dans un fibré composite principal

Dans la théorie des fibrés principaux, la notion de relèvement horizontal d'une courbe de l'espace de base joue un grand rôle. Dans un fibré composite principal $P^+ \rightarrow S \rightarrow R$, il existe une généralisation naturelle de cette notion, mais le relèvement horizontal concerne cette fois une section du fibré de base (S, R, M, π_S) . Soit $h \in \Gamma(\ell_R, S)$ une section, où ℓ_R est une courbe dans R . h définit une courbe \mathcal{C} dans $M \times R$ paramétré par $y \in R$ avec la fonction $\phi_S^{j-1}(h(y))$ (pour simplifier la discussion, on suppose que $\ell_R \subset V^j$). Soit $i_h : h(\ell_R) \hookrightarrow S$ l'injection canonique. On considère

²remarque sur les notations : la première étoile de χ_y^{S*} désigne l'application induite par χ_y^S dans les fibrés principaux au dessus de $\pi_S^{-1}(y)$ et de M , la seconde étoile de χ_y^{S**} désigne l'application induite par χ_y^{S*} dans les fibrés cotangents de P et de $\chi_y^{S*}P$

la section locale $\sigma^h \in \Gamma(\mathcal{C}, P^+)$ du fibré $(P^+, M \times R, G, \pi_{++})$ définie par $\sigma^h = \sigma_S^j \circ \phi_S^j, \forall y \in R$, $\sigma^h(\phi_S^{j^{-1}}(h(y))) = \sigma_S^j(h(y))$. Alors le relèvement horizontal de h est défini comme le relèvement horizontal usuel de \mathcal{C} dans le fibré total du fibré composite :

$$g_h = \mathbb{P}e^{-\int_{\mathcal{C}} A_{M \times R}^{\sigma^h}} = \mathbb{P}e^{-\int_{h(\ell_R)} i_h^* A_S^j} = \mathbb{P}e^{-\int_{\ell_R} h^* A_S^j} \quad (6.6)$$

6.2 Le fibré adiabatique spatio-temporel

On revient au transport adiabatique généralisé caractérisé par la phase matricielle $\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(\vec{R}(t'), t') dt' - \int_0^t A_\mu(\vec{R}(t'), t') \dot{R}^\mu(t') dt' - \int_0^t A_0(\vec{R}(t'), t') dt'}$. Le système dynamique quantique est caractérisé par un Hamiltonien $t \mapsto H(\vec{R}(t), t)$ dans l'espace de Hilbert \mathcal{H} de dimension N avec éventuellement $N = +\infty$. Les paramètres de contrôle forment une variété \mathcal{C}^∞ , \mathcal{M} , et une dynamique particulière $t \mapsto \vec{R}(t)$ forme un chemin \mathcal{C} dans \mathcal{M} . Pour étudier le système dynamique, on doit séparer les contributions dynamiques et géométriques. Le fibré de la géométrie a été étudié dans les chapitres précédents, c'est le fibré adiabatique à droite $(P, \mathcal{M}, G, \pi_P)$, où on considère t_0 fixé, équipé de la connexion de potentiel de jauge

$$A(\vec{R}, t_0)_{ab} = \langle a(*), \vec{R}, t_0 | d_{\mathcal{M}} | b, \vec{R}, t_0 \rangle \quad (6.7)$$

Dans un deuxième temps, on fixe $\vec{R}_0 \in \mathcal{M}$, et on obtient un système purement dynamique, qui peut être modélisé par un fibré. On désigne par G le groupe de jauge du fibré adiabatique, c'est à dire $G = U(M)$ dans le cas conservatif, ou $G = GL(N, \mathbb{C})$ dans le cas dissipatif. \mathfrak{g} désigne l'algèbre de Lie de G . On note \mathcal{G} le groupe $U(N)$ ou $GL(N, \mathbb{C})$, suivant que le système est conservatif ou non, dans le cas d'un espace de Hilbert de dimension finie. Si \mathcal{H} est de dimension infinie, \mathcal{G} désigne $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ l'ensemble des opérateurs unitaires de \mathcal{H} , si le système est conservatif, sinon \mathcal{G} désigne $GL(\mathcal{H})$ l'ensemble des opérateurs inversibles de \mathcal{H} . On note \mathcal{G}^{Lie} l'algèbre de Lie de \mathcal{G} en dimension finie, en dimension infinie, \mathcal{G}^{Lie} désigne $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ l'ensemble des opérateurs de \mathcal{H} si le système est dissipatif, sinon \mathcal{G}^{Lie} est restreint aux opérateurs auto-adjoints.

6.2.1 Le fibré de la dynamique

On considère $\vec{R}_0 \in \mathcal{M}$ fixé. $t \mapsto H(\vec{R}_0, t)$ est l'Hamiltonien décrivant le système dynamique quantique dans un environnement statique caractérisé par les paramètres fixes \vec{R}_0 . Soient $t_0, t_1 \in \mathbb{R}$; l'évolution du système entre t_0 et t_1 est décrite par l'opérateur d'évolution $U(\vec{R}_0, t_0, t_1)P(t_0)$ ($P(t_0)$ est le projecteur sur l'espace actif initial) solution de

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(\vec{R}_0, t_0, t) = H(\vec{R}_0, t) U(\vec{R}_0, t_0, t) \quad (6.8)$$

avec $U(\vec{R}_0, t_0, t_0) = 1$. La solution de cette équation est

$$U(\vec{R}_0, t_0, t_1) = \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t_1} H(\vec{R}_0, t) dt} \quad (6.9)$$

Cette expression est très similaire à celle de la phase matricielle d'un relèvement horizontal, et une interprétation de la dynamique quantique comme un transport parallèle a été développée par Asorey et al [10] dans le contexte des espaces de Hilbert de dimension infinie et par Iliev [73] dans le contexte d'une formulation fibrée de la mécanique quantique non-relativiste.

Dans notre contexte, on considère le fibré principal à gauche $(\mathcal{Q}, \mathbb{R}, \mathcal{U}, \pi_{\mathcal{Q}})$ et son fibré vectoriel associé $(\mathcal{E}, \mathbb{R}, \mathcal{H}, \pi_{\mathcal{E}})$. Soit $\psi \in \Gamma(\mathbb{R}, \mathcal{E})$ solution de l'équation de Schrödinger. Soit $\tilde{\psi}(t) = U(t)\psi(t)$ un changement de jauge tel que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(t) = \tilde{H}(\vec{R}_0, t) \tilde{\psi}(t) \quad (6.10)$$

En insérant $\tilde{\psi}(t) = U(t)\psi$ dans (6.10) on a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = (U(t)^{-1} \tilde{H}(\vec{R}_0, t) U(t) - i\hbar U(t)^{-1} \dot{U}(t)) \psi \quad (6.11)$$

et donc

$$i\hbar^{-1} \tilde{H}(\vec{R}_0, t) = U(t) i\hbar^{-1} H(\vec{R}_0, t) U(t)^{-1} + \dot{U}(t) U(t)^{-1} \quad (6.12)$$

et finalement

$$i\hbar^{-1} \tilde{H}(\vec{R}_0, t) dt = U(t) i\hbar^{-1} H(\vec{R}_0, t) dt U(t)^{-1} + (d_t U(t)) U(t)^{-1} \quad (6.13)$$

où d_t est la différentielle extérieure de \mathbb{R} : $d_t f(t) = \frac{\partial f}{\partial t} dt$. L'équation (6.13) est la formule de changement de jauge familière dans un fibré à gauche, et $i\hbar^{-1} H(\vec{R}_0, t) dt \in \Omega^1(\mathbb{R}, \mathcal{G}^{Lie})$ est le potentiel de jauge de $(\mathcal{Q}, \mathbb{R}, \mathcal{U}, \pi_{\mathcal{Q}})$. $\psi \in \Gamma(\mathbb{R}, \mathcal{E})$ est horizontale si sa dérivée covariante $D\psi = d_t \psi + i\hbar^{-1} H(\vec{R}_0, t) \psi dt$ est nulle i.e. si ψ satisfait à l'équation de Schrödinger. Un relèvement horizontal de la courbe $[t_0, t_1] \subset \mathbb{R}$ est bien caractérisé par la formule de l'opérateur d'évolution.

Dans le contexte du transport adiabatique généralisé, ce n'est pas le précédent potentiel de jauge, ni même le précédent fibré qui va nous intéresser. Soit $\{|a, \vec{R}_0, t\rangle\}_{a=1, \dots, M}$ les vecteurs propres instantanés de $H(\vec{R}_0, t)$ sélectionnés par le théorème adiabatique. On sait que la fonction d'onde va se projeter dans l'espace engendré par $\{|a, \vec{R}_0, t\rangle\}_{a=1, \dots, M}$. On considère donc $(E_{\vec{R}_0}, \mathbb{R}, \mathbb{C}^M, \pi_{E_{\vec{R}_0}})$ le sous-fibré vectoriel de $(\mathcal{E}, \mathbb{R}, \mathcal{H}, \pi_{\mathcal{E}})$ engendré par $\{|a, \vec{R}_0, t\rangle\}_{a=1, \dots, M}$. Soit $(Q_{\vec{R}_0}, \mathbb{R}, G, \pi_{Q_{\vec{R}_0}})$ le fibré principal ayant $(E_{\vec{R}_0}, \mathbb{R}, \mathbb{C}^M, \pi_{E_{\vec{R}_0}})$ comme fibré associé. La connexion de \mathcal{Q} et sa dérivée covariante D sur \mathcal{E} , induit sur $Q_{\vec{R}_0}$ la connexion de potentiel de jauge $A_{Q_{\vec{R}_0}} \in \Omega^1(\mathbb{R}, \mathfrak{g})$ définie par

$$\left[A_{Q_{\vec{R}_0}} \right]_{ab} = \langle a(*), \vec{R}_0, t | D | b, \vec{R}_0, t \rangle = \langle a(*), \vec{R}_0, t | \partial_t | b, \vec{R}_0, t \rangle + i\hbar E_{ab}(\vec{R}_0, t) \quad (6.14)$$

avec $E_{ab} = \langle a(*), \vec{R}_0, t | H(\vec{R}_0, t) | b, \vec{R}_0, t \rangle$. Soit D_Q la différentielle covariante associée à cette connexion. Cette connexion dans $Q_{\vec{R}_0}$ est bien la connexion naturelle par rapport à la structure de \mathcal{Q} , car c'est la seule connexion tel que le diagramme suivant commute :

$$\begin{array}{ccc} \Gamma(\mathbb{R}, \mathcal{E}) & \xrightarrow{\frac{D}{dt}} & \Gamma(\mathbb{R}, \mathcal{E}) \\ \uparrow I & & \downarrow P \\ \Gamma(\mathbb{R}, E_{Q_{\vec{R}_0}}) & \xrightarrow{\frac{D_Q}{dt}} & \Gamma(\mathbb{R}, E_{\vec{R}_0}) \end{array}$$

où P est la projection de \mathcal{E} vers $E_{\vec{R}_0}$ et I l'injection de $E_{\vec{R}_0}$ dans \mathcal{E} .

$$P \frac{D}{dt} I \begin{pmatrix} c_1(t) \\ \vdots \\ c_M(t) \end{pmatrix} = P \frac{D}{dt} \sum_a c_a(t) |a, \vec{R}_0, t\rangle \quad (6.15)$$

$$= P \left(\sum_a \dot{c}_a(t) |a, \vec{R}_0, t\rangle + \sum_a c_a(t) \partial_t |a, \vec{R}_0, t\rangle + i\hbar^{-1} \sum_a c_a(t) H(\vec{R}_0, t) |a, \vec{R}_0, t\rangle \right) \quad (6.16)$$

$$= \begin{pmatrix} \dot{c}_1(t) \\ \vdots \\ \dot{c}_M(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum_a c_a(t) \langle 1(*) | \partial_t |a, \vec{R}_0, t\rangle \\ \vdots \\ \sum_a c_a(t) \langle M(*) | \partial_t |a, \vec{R}_0, t\rangle \end{pmatrix} + i\hbar^{-1} \begin{pmatrix} \sum_a c_a(t) \langle 1(*) | H(\vec{R}_0, t) |a, \vec{R}_0, t\rangle \\ \vdots \\ \sum_a c_a(t) \langle M(*) | H(\vec{R}_0, t) |a, \vec{R}_0, t\rangle \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

$$= \frac{D_Q}{dt} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ \vdots \\ c_M(t) \end{pmatrix} \quad (6.18)$$

Le relèvement horizontal de $[t_0, t_1] \subset \mathbb{R}$ dans $Q_{\vec{R}_0}$, donne la partie dynamique de la phase matricielle

$$D(\vec{R}_0, t_0, t_1) = \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t_1} E(\vec{R}_0, t) dt - \int_{t_0}^{t_1} A_0(\vec{R}_0, t) dt} \quad (6.19)$$

6.2.2 Le fibré de la géodynamique et sa connexion

Les discussions précédentes suggèrent que l'entité appropriée pour décrire correctement la structure géométrique de l'évolution "géodynamique" caractérisée par la phase matricielle $\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(\vec{R}(t'), t') dt' - \int_0^t A_\mu(\vec{R}(t'), t') \dot{R}^\mu(t') dt' - \int_0^t A_0(\vec{R}(t'), t') dt'}$, devrait être le fibré composite principal $P^+ \rightarrow S \rightarrow \mathbb{R}$ avec pour fibré de structure $(P, \mathcal{M}, G, \pi_P)$, fibré de base $(S, \mathbb{R}, \mathcal{M}, \pi_S)$, fibré transverse $(Q_{\vec{R}}, \mathbb{R}, G, \pi_{Q_{\vec{R}}})$ et fibré total $(P^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, G, \pi_{++})$. Notons que d'après la première section de ce chapitre, les structures de $(P, \mathcal{M}, G, \pi_P)$, $(Q_{\vec{R}}, \mathbb{R}, G, \pi_{Q_{\vec{R}}})$ et de $(S, \mathbb{R}, \mathcal{M}, \pi_S)$ sont complètement déterminées par $(P^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, G, \pi_{++})$. P et $Q_{\vec{R}}$ ont déjà été introduits. En fixant $t_0 \in \mathbb{R}$ arbitrairement, les fonctions de transitions $g^{ij}(\vec{R}, t_0) \in G$ de P , sont obtenues en posant $g_{ab}^{ij}(\vec{R}) = {}^i \langle a(*) | \vec{R}, t_0 | b, \vec{R}, t_0 \rangle^j$ où i et j représentent deux conventions possibles dans les représentations matricielles des vecteurs propres. La topologie du fibré S est déterminée par l'application χ_t^S , pour laquelle P_t défini par les fonctions de transition $T(\vec{R}, t)^{i-1} T(\vec{R}, t)^j$, est tel que $\chi_t^{S*} P = \chi_t^{S*} P_{t_0} = P_t$. Clairement, si on considère $|a, \vec{R}, t\rangle$ comme une section de \mathcal{M} à valeurs dans le fibré associé de P_t , alors

$$\chi_t^{S*} |a, \vec{R}, t_0\rangle = |a, \vec{R}, t\rangle \quad (6.20)$$

χ_t^{S*} est l'application induite par χ_t^S dans l'espace des sections.

Ceci nous conduit naturellement à choisir pour potentiel de jauge de $(P_+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, G, \pi_{++})$ la quantité

$$A_+(\vec{R}, t) = A(\vec{R}, t) + A_0(\vec{R}, t) + i\hbar^{-1} E(\vec{R}, t) dt \in \Omega^1(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathfrak{g}) \quad (6.21)$$

où A est le potentiel de jauge adiabatique. Notons que l'on peut utiliser cette expression car les deux sections locales sont compatibles. Soient $j_t : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M} \times \mathbb{R}$ et $j_{\vec{R}} : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{M} \times \mathbb{R}$, on a $A(\vec{R}, t_0) = j_{t_0}^* A_+(\vec{R}, t_0)$ et $i\hbar^{-1}E(\vec{R}_0, t)dt + A_0(\vec{R}_0, t)dt = j_{\vec{R}_0}^* A_+(\vec{R}_0, t)$.

Comme un potentiel de jauge n'est défini que localement, et comme S est localement difféomorphe à $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$, on peut écrire $A_S(\vec{R}, t) = A_\mu(\vec{R}, t)dR^\mu + i\hbar^{-1}E(\vec{R}, t)dt + A_0(\vec{R}, t)dt \in \Omega^1(S, \mathfrak{g})$. Soit $h \in \Gamma([0, t_1], S)$ une section. h définit une courbe \mathcal{C} dans $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$, et $\mathcal{L} = h([0, t_1])$ une boucle dans \mathcal{M} pour $R^\mu(t) = h^\mu(t)$. Soit le pull-back de h :

$$\begin{aligned} \Omega^* S &\rightarrow \Omega^* \mathbb{R} \\ h^* : dR^\mu &\mapsto \frac{\partial h^\mu}{\partial t} dt \\ dt &\mapsto dt \end{aligned}$$

On a donc

$$(h^* A_S)(t) = A_\mu(h(t), t) \frac{\partial h^\mu}{\partial t} dt + i\hbar^{-1}E(h(t), t)dt + A_0(h(t), t)dt \quad (6.22)$$

En utilisant l'expression (6.6), le relèvement horizontal de h est caractérisé par (avec la notation $h(t) = \vec{R}(t)$)

$$g_h = \mathbb{P}e^{-\int_{\mathcal{C}} A_+(\vec{R}, t)} = \mathbb{T}e^{-\int_0^{t_1} A_\mu(\vec{R}(t), t) \frac{\partial R^\mu(t)}{\partial t} dt - i\hbar^{-1} \int_0^{t_1} E(\vec{R}(t), t) dt - \int_0^{t_1} A_0(\vec{R}(t), t) dt} \quad (6.23)$$

Si on suppose maintenant qu'il n'y a pas d'évolution rapide en plus de l'évolution adiabatique, c'est à dire que $H(\vec{R})$ n'a pas de dépendance explicite en t , alors on a

$$g_h = \mathbb{T}e^{-\oint_{\mathcal{L}} A_\mu(\vec{R}) dR^\mu - i\hbar^{-1} \int_0^{t_1} E(\vec{R}(t)) dt} \quad (6.24)$$

Ce qui est bien l'expression de la phase non-abélienne que l'on a considérée dans les chapitres précédents.

On introduit dans $Q_{\vec{R}}$ les coordonnées fibrées locales (t, γ^i) où (γ^i) est un système de coordonnées de G . De même on introduit les coordonnées fibrées de P , (R^μ, γ^i) et les coordonnées fibrées de P^+ (R^μ, t, γ^i) . En invoquant le théorème d'Ehresmann (cf. annexe B), il est possible de construire une 1-forme de connexion avec pour potentiel de jauge A_+ . Soit $\sigma \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, P^+)$ la section utilisée pour exprimer le potentiel de jauge A_+ . $\forall (\vec{R}, t, \gamma) \in P^+$, soit $g(\vec{R}, t, \gamma)$ tel que $(\vec{R}, t, \gamma) = \sigma(\vec{R}, t)g(\vec{R}, t, \gamma)$. La 1-forme de connexion de P^+ est

$$\begin{aligned} \omega_+(\vec{R}, t, \gamma) &= g(\vec{R}, t, \gamma)^{-1} A_\mu(\vec{R}, t) g(\vec{R}, t, \gamma) dR^\mu + i\hbar^{-1} g(\vec{R}, t, \gamma)^{-1} E(\vec{R}, t) g(\vec{R}, t, \gamma) dt \\ &\quad + g(\vec{R}, t, \gamma)^{-1} \frac{\partial}{\partial R^\mu} g(\vec{R}, t, \gamma) dR^\mu + g(\vec{R}, t, \gamma)^{-1} \frac{\partial}{\partial t} g(\vec{R}, t, \gamma) dt \\ &\quad + g(\vec{R}, t, \gamma)^{-1} \frac{\partial}{\partial \gamma^i} g(\vec{R}, t, \gamma) d\gamma^i \end{aligned} \quad (6.25)$$

Le 1-forme de connexion de P pour t_0 fixé est

$$\begin{aligned} \omega_P(\vec{R}, \gamma) &= g(\vec{R}, t_0, \gamma)^{-1} A_\mu(\vec{R}, t_0) g(\vec{R}, t_0, \gamma) dR^\mu + g(\vec{R}, t_0, \gamma)^{-1} \frac{\partial}{\partial R^\mu} g(\vec{R}, t_0, \gamma) dR^\mu \\ &\quad + g(\vec{R}, t_0, \gamma)^{-1} \frac{\partial}{\partial \gamma^i} g(\vec{R}, t_0, \gamma) d\gamma^i \end{aligned} \quad (6.26)$$

et la 1-forme de connexion de $Q_{\vec{R}_0}$ pour \vec{R}_0 fixé est

$$\begin{aligned} \omega_{Q_{\vec{R}_0}}(t, \gamma) &= i\hbar^{-1} g(\vec{R}_0, t, \gamma)^{-1} E(\vec{R}_0, t) g(\vec{R}_0, t, \gamma) dt + g(\vec{R}_0, t, \gamma)^{-1} \frac{\partial}{\partial t} g(\vec{R}_0, t, \gamma) dt \\ &\quad + g(\vec{R}_0, t, \gamma)^{-1} \frac{\partial}{\partial \gamma^i} g(\vec{R}_0, t, \gamma) d\gamma^i \end{aligned} \quad (6.27)$$

Il est alors important de noter que $\omega_{P^+} \neq \omega_P + \omega_{Q_{\vec{R}}}$.

6.3 Théorie de jauge dans le fibré spatio-temporel

6.3.1 Pseudostructure de Stiefel

$\forall \psi \in \Gamma(\mathbb{R}, \mathcal{E}),$

$$D\psi = \partial_t \psi dt + i\hbar^{-1} H \psi dt \quad (6.28)$$

D est la différentielle covariante associée à la connexion de $(\mathcal{Q}, \mathbb{R}, \mathcal{G}, \pi_{\mathcal{Q}})$.

$\Omega^*(\mathcal{M} \times \mathbb{R})$ peut être considéré comme une algèbre bigraduée où $\Omega^n(\mathcal{M} \times \mathbb{R}) = \bigoplus_{p=0}^n \Omega^{p, n-p}(\mathcal{M} \times \mathbb{R})$ avec

$$\Omega^{p,q}(\mathcal{M} \times \mathbb{R}) = \Omega^p \mathcal{M} \otimes_{C^\infty(\mathcal{M} \times \mathbb{R})} \Omega^q \mathbb{R} \quad (6.29)$$

Soit $\eta \in \Omega^{p,q}(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, W)$ où W est un espace vectoriel sur lequel est représenté \mathcal{G} . En considérant η comme une p -forme de \mathcal{M} à valeurs dans $\Omega^q(\mathbb{R}, W)$, on peut définir $d_{\mathcal{M}}\eta$ en ne différentiant que par rapport aux coordonnées de \mathcal{M} . De même en considérant η comme une q -forme à valeurs dans $\Omega^p(\mathcal{M}, W)$, on peut définir la différentielle covariante D sur η . On introduit donc la différentielle \tilde{D} prolongement de D sur $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$:

$$\tilde{D}\eta = d_{\mathcal{M}}\eta + D\eta \quad (6.30)$$

On voit alors que le potentiel de jauge $A_+ \in \Omega^1(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathfrak{g})$ de P^+ prend la forme

$$A_+ = T^{-1} \tilde{D}T \quad (6.31)$$

où T est la matrice des vecteurs propres de H sélectionnés par le théorème adiabatique. A_+ a donc une structure similaire à un potentiel de Stiefel en remplaçant $d_{\mathcal{M} \times \mathbb{R}}$ par \tilde{D} . Notons que $\tilde{D}^2 \neq 0$, on n'a donc pas rigoureusement une connexion de Stiefel.

$|b, \vec{R}, t\rangle \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E_+)$ est une section du fibré vectoriel associé à P^+ , donc

$$\tilde{D}|b, \vec{R}, t\rangle = d_{\mathcal{M}}|b, \vec{R}, t\rangle + d_t|b, \vec{R}, t\rangle + i\hbar^{-1} H(\vec{R}, t)|b, \vec{R}, t\rangle dt \quad (6.32)$$

et

$$A_{+ab} = \langle a(*), \vec{R}, t | d_{\mathcal{M}} |b, \vec{R}, t\rangle + \langle a(*), \vec{R}, t | \partial_t |b, \vec{R}, t\rangle dt + i\hbar^{-1} \langle a(*), \vec{R}, t | H(\vec{R}, t) |b, \vec{R}, t\rangle dt \quad (6.33)$$

on retrouve donc

$$A_+ = A + A_0 + i\hbar^{-1} E dt \quad (6.34)$$

Soit une transformation de jauge, telle que $|\hat{a}, \vec{R}, t\rangle = \sum_b g_{ba}(\vec{R}, t) |b, \vec{R}, t\rangle$, $g(\vec{R}, t) \in G$, alors

$$(\hat{A}_+)_{ab} = \langle \hat{a}(*), \vec{R}, t | \tilde{D} | \hat{b}, \vec{R}, t \rangle \quad (6.35)$$

$$= \langle \hat{a}(*), \vec{R}, t | d_{\mathcal{M} \times \mathbb{R}} | \hat{b}, \vec{R}, t \rangle + i\hbar^{-1} \langle \hat{a}(*), \vec{R}, t | H | \hat{b}, \vec{R}, t \rangle dt \quad (6.36)$$

$$= \sum_c g_{ca}^{-1} \langle c(*), \vec{R}, t | d_{\mathcal{M} \times \mathbb{R}} \left(\sum_d g_{db} |d, \vec{R}, t\rangle \right) + i\hbar^{-1} \sum_{c,d} g_{ca}^{-1} \langle c(*), \vec{R}, t | H |d, \vec{R}, t\rangle g_{db} dt \quad (6.37)$$

$$= \sum_{c,d} g_{ca}^{-1} d_{\mathcal{M} \times \mathbb{R}} g_{db} \langle c(*), \vec{R}, t |d, \vec{R}, t\rangle + \sum_{cd} g_{ca}^{-1} g_{db} \langle c(*), \vec{R}, t | d_{\mathcal{M} \times \mathbb{R}} |d, \vec{R}, t\rangle + i\hbar^{-1} \sum_{c,d} g_{ca}^{-1} \langle c(*), \vec{R}, t | H |d, \vec{R}, t\rangle g_{db} dt \quad (6.38)$$

$$= (g^{-1} A_+ g)_{ab} + (g^{-1} dg)_{ab} \quad (6.39)$$

A_+ en tant que connexion du fibré composite, satisfait bien à la formule usuelle de changement de jauge.

6.3.2 Analogie avec la théorie des champs

Le fibré $(P^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, G, \pi_{++})$ est analogue à une théorie des champs sur l'espace-temps du contrôle $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$, de potentiel de jauge A_+ , avec un champ défini par l'équation de structure de Cartan

$$F_+ = dA_+ + A_+ \wedge A_+ \quad (6.40)$$

et qui satisfait à l'identité de Bianchi

$$dF_+ + [A_+, F_+] = 0 \quad (6.41)$$

Considérons le cas où $M = 1$ avec $G = U(1)$, on a le potentiel de jauge du composite

$$A_+ = \langle a, \vec{R}, t | \partial_\mu | a, \vec{R}, t \rangle dR^\mu + \langle a, \vec{R}, t | \partial_t | a, \vec{R}, t \rangle dt + i\hbar^{-1} E_a(\vec{R}, t) dt \quad (6.42)$$

$$F_+ = dA_+ \quad (6.43)$$

$$= \frac{1}{2}(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) dR^\mu \wedge dR^\nu + \frac{1}{2}(\partial_t A_\mu - \partial_\mu A_0) dt \wedge dR^\mu + i\hbar^{-1} \partial_\mu E_a(\vec{R}, t) dR^\mu \wedge dt \quad (6.44)$$

On peut alors interpréter dA comme un champ magnétique et $\partial_t A - d_{\mathcal{M}} A_0$ comme un champ électrique. À t fixé, A se comporte comme le potentiel magnétique de monopôles fixes, mais avec la dépendance temporelle explicite, la position des croisements (des monopôles) peut se déplacer sur \mathcal{M} en fonction de t , le champ électrique $\partial_t A - d_{\mathcal{M}} A_0$ n'est rien d'autre que le champ électrique induit par le déplacement des charges magnétiques. $A + A_0$ apparaît donc comme le potentiel électromagnétique (et non plus simplement magnétique) des monopôles et $d_{\mathcal{M} \times \mathbb{R}}(A + A_0)$ apparaît comme leur champ électromagnétique (tenseur de Faraday). L'identité de Bianchi est alors l'équivalent des deux équations de Maxwell topologiques. Pour $M > 1$, on trouve une théorie de Yang-Mills non-abélienne décrite sur l'espace-temps.

La présence du terme dynamique $i\hbar E dt$ rompt avec l'analogie parfaite entre transport adiabatique et théorie des champs. En effet dans le cas abélien, $i\hbar E_a dt$ est homogène à un potentiel électrique, mais si on se place dans le cas standard d'un croisement conique d'un système à deux niveaux, on a $i\hbar^{-1} E_a dt = i\hbar^{-1} r dt$. Le champ électrique que produirait ce potentiel serait $i\hbar^{-1} d_{\mathcal{M}} E \wedge dt \rightsquigarrow i\hbar^{-1} \frac{\vec{r}}{r}$, c'est à dire un champ électrique radial par rapport au croisement, mais dont l'intensité reste constante par rapport à la distance à celui-ci. $i\hbar^{-1} E dt$ n'a donc pas d'analogue "physique" en théorie des champs.

6.4 Un modèle de dynamique quantique contrôlée par un système classique

On considère le fibré total du composite du modèle spatio-temporel de la dynamique quantique adiabatique, $(P^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, G, \pi_{++})$. On désigne par ρ la représentation du groupe de Lie G sur l'espace vectoriel \mathbb{C}^M (en considérant G comme un groupe de matrices d'ordre M , ρ est la multiplication matricielle entre les matrices carrées et les matrices colonnes représentant des vecteurs de \mathbb{C}^M dans la base canonique). On désigne par ρ_{Lie} la représentation induite par ρ de l'algèbre de Lie \mathfrak{g} sur \mathbb{C}^M . On désigne par Ad la représentation adjointe de G sur \mathfrak{g} ($\forall g \in G, \forall X \in \mathfrak{g}, \text{Ad}(g)X = gXg^{-1}$). Soit $(E^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathbb{C}^M, \pi_{E^+})$ le fibré vectoriel associé à P^+ par l'action ρ , et $(V^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathfrak{g}, \pi_{V^+})$ le fibré vectoriel associé à P^+ par l'action Ad . Nous montrons ici, que toute les quantités de la mécanique quantique peuvent être décrites dans un modèle basé sur ces fibrés.

6.4.1 Le modèle

On considère donc un système dynamique quantique gouverné par un Hamiltonien $H(\vec{R}, t)$. Les états du système sont décrits par le $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathbb{C})$ -module $\Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$, qui est l'espace des sections (locales) de E^+ . L'équivalent du produit scalaire dans cet espace est le produit intérieur à valeurs dans $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathbb{C})$, défini par

$$\forall \psi, \phi \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+), \quad \langle \phi | \psi \rangle_{E^+}(\vec{R}, t) = \langle \psi(\vec{R}, t) | \phi(\vec{R}, t) \rangle_{\mathbb{C}^M} \quad (6.45)$$

L'interprétation physique de ce produit intérieur est transparente, $|\langle \psi | \phi \rangle_{E^+}(\vec{R}, t)|$ est la probabilité pour que les mesures effectuées sur le système dans l'état ϕ ne soient pas distinguables de mesures faites sur un système dans l'état ψ , à la date t alors que l'environnement est caractérisé par \vec{R} .

Les observables du système sont obtenues comme les sections du fibré vectoriel V^+ , l'algèbre $\Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, V^+)$ qui est équipée du crochet

$$\forall A, B \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, V^+), \quad [A, B]_{V^+}(\vec{R}, t) = \left[A(\vec{R}, t), B(\vec{R}, t) \right]_{\mathfrak{u}(M)} \quad (6.46)$$

L'interprétation physique du crochet de Lie est inchangée, $[A, B]_{V^+}$ mesure la dépendance entre deux observables. La relation d'incertitude de Heisenberg peut alors s'écrire comme suit : $\forall \psi \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$ tel que $\forall(\vec{R}, t) \|\psi\|_{E^+}(\vec{R}, t) = 1$, $\Delta_\psi A \Delta_\psi B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B]_{V^+} \psi \rangle_{E^+}|$. L'action d'une observable $A \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, V^+)$ sur un état $\psi \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$ est donnée par $(A\psi)(\vec{R}, t) = \rho_{Lie}(A(\vec{R}, t))\psi(\vec{R}, t)$. L'adjoint de $A \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, V^+)$ est défini par

$$\langle \phi | A\psi \rangle_{E^+}(\vec{R}, t) = \langle \phi(\vec{R}, t) | \rho_{Lie}(A(\vec{R}, t))\psi(\vec{R}, t) \rangle_{\mathbb{C}^M} = \langle A^\dagger \phi | \psi \rangle_{E^+}(\vec{R}, t) \quad (6.47)$$

donc $(A^\dagger \phi)(\vec{R}, t) = \rho_{Lie}(A(\vec{R}, t)^\dagger)\phi(\vec{R}, t)$, $A^\dagger(\vec{R}, t) = A(\vec{R}, t)^\dagger$.

Les transformations du système sont obtenues dans $\Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, P^+)$. Les actions d'une transformation $U \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, P^+)$ sur un état $\psi \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$ et sur une observable $A \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, V^+)$ sont données par $(U\psi)(\vec{R}, t) = \rho(U(\vec{R}, t))\psi(\vec{R}, t)$ et par $(U \cdot A)(\vec{R}, t) = \text{Ad}(U(\vec{R}, t))A(\vec{R}, t)$.

Soit $\{a, \vec{R}, t\} \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$ l'ensemble des vecteurs propres de H sélectionnés par le théorème adiabatique, considéré comme la base canonique de $\Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$. Soit $\gamma \in \Gamma(\mathbb{R}, \mathcal{M})$. La phase matricielle du transport adiabatique, que l'on désignera à partir de ce point sous le nom *d'opérateur d'holonomie*, s'écrit

$$J^{\gamma, t, t_0} = \mathbb{P}e^{-i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t E(\gamma(t'), t') dt' - \int_{t_0}^t A_\mu(\gamma(t'), t') \frac{d\gamma^\mu(t')}{dt'} dt' - \int_{t_0}^t A_0(\gamma(t'), t') dt'} \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, P^+) \quad (6.48)$$

Si $\psi(t_0) = |a, \gamma(0), 0\rangle$ alors la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger est $\psi(t) = \sum_b J_{ba}^{\gamma, t, t_0} |b, \gamma(t), t\rangle$. Il est clair que J^{γ, t, t_0} est l'opérateur d'évolution "spatio-temporel" entre t_0 et t via le chemin γ dans \mathcal{M} .

Notons une différence importante entre ce modèle fibré et les autres modèles de dynamique quantique. Dans le modèle Hilbertien standard, c'est l'espace des états, un espace de Hilbert \mathcal{H} , qui apparaît comme l'espace fondamental de la description. Les espaces des observables et des transformations n'apparaissent que comme des espaces dérivés de \mathcal{H} , à savoir respectivement l'espace des opérateurs et l'espace des opérateurs inversibles de \mathcal{H} . Dans le modèle algébrique, l'espace fondamental est l'espace des observables, à savoir une algèbre de Lie \mathfrak{g} ou une C^* -algèbre \mathfrak{A} . L'espace des états dérive de l'espace des observables, un espace vectoriel de représentation de \mathfrak{g} ou l'ensemble des fonctionnelles linéaires positives de \mathfrak{A} . L'espace des transformations en dérive également, à savoir l'un des groupes de Lie G associé à \mathfrak{g} ou l'espace des $*$ -automorphismes de \mathfrak{A} . Dans le modèle géométrique adiabatique, c'est l'espace des transformations P^+ qui apparaît comme fondamental, alors que les espaces des états E^+ et des observables V^+ apparaissent comme dérivant de l'espace

des transformations, puisque étant des fibrés associés à P^+ .

Dans la suite, de nombreux abus de notations seront fait, en ne distinguant plus les notations entre le produit scalaire de \mathbb{C}^M et le produit intérieur de E^+ , entre les crochets de Lie, et entre les “ad-jonctions”. De même, on oubliera très souvent de faire figurer explicitement les représentations ρ et ρ_{Lie} .

6.4.2 Observables généralisées

Soit $X = X^\mu \partial_\mu + X^0 \partial_t \in T(\mathcal{M} \times \mathbb{R})$ un champ de vecteurs (une section du fibré tangent) de $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$. Soit γ un chemin dans $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$ tel que $X(\gamma(t), t)$ soit le vecteur tangent en $\gamma(t)$. On rappelle que la dérivée covariante de $\psi \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$ dans la direction X est définie par

$$\nabla_X \psi(\gamma(t), t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{J^{\gamma, t+h, t^{-1}} \psi(\gamma(t+h), t+h) - \psi(\gamma(t), t)}{h} \quad (6.49)$$

$$= X^\mu (\partial_\mu + \rho_{Lie}(A_\mu)) \psi + X^0 (\partial_t + \rho_{Lie}(A_0) + i\hbar^{-1} \rho_{Lie}(E)) \psi \quad (6.50)$$

On peut considérer $\nabla_\mu = \partial_\mu + A_\mu$ ($\nabla_0 = \partial_t + A_0 + i\hbar^{-1}E$) comme le moment cinétique généralisé du système dans la direction μ en présence du champ de jauge $F_+ = dA_+ + A_+ \wedge A_+$. Pour inclure ces moments dans les observables, on définit l'ensemble des observables généralisées par TP^+ . On sait que $\Gamma TP^+ = HP^+ \oplus VP^+$ où $V_{(\bar{R}, t)} P^+ \simeq \mathfrak{g}$ est l'espace tangent vertical canonique. En utilisant l'isomorphisme avec \mathfrak{g} on obtient avec VP^+ l'ensemble des observables standards $\Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, V^+)$. $H_{(\bar{R}, t)} P^+$ est l'espace tangent horizontal défini par la connexion de potentiel de jauge $A + A_0 + i\hbar^{-1}E dt$. Soit un système de coordonnées fibrées locales (γ^i, R^μ, t) . On peut écrire $\forall \alpha \in HP^+$, $\alpha = \alpha^\mu \partial_\mu + \alpha^0 \partial_t$ (notons qu'avec une autre connexion, les coefficients de la décomposition (α^μ, α^0) seraient différents). On voit donc que HP^+ produit l'algèbre des moments cinétiques. Le crochet de Lie de TP^+ est alors le crochet des champs de vecteurs défini par

$$\forall X, Y \in \Gamma P^+, \quad [X, Y]_{TP^+} = \left(X^\alpha \frac{\partial Y^\beta}{\partial x^\alpha} - Y^\alpha \frac{\partial X^\beta}{\partial x^\alpha} \right) \frac{\partial}{\partial x^\beta} \quad (6.51)$$

où $(x^\alpha) = (\gamma^i, R^\mu, t)$. Il est bien connu que $\Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$ peut être identifié avec l'espace des fonctions $\mathcal{C}^\infty U(M)$ -équivariantes de P vers \mathbb{C}^M . On sait de plus que $\forall X \in VP^+$ (identifié à un champ de vecteurs fondamental) et pour tout $\psi U(M)$ -équivariant, on a

$$-L_X \psi = \rho_{Lie}(X) \psi \quad (6.52)$$

où L est la dérivée de Lie de la variété P^+ . Soit $X \in TP^+$ un champ de vecteurs, $X_v \in VP^+$ sa partie verticale et $X_h = X^\mu \partial_\mu + X^0 \partial_t \in HP^+$ sa partie horizontale. En utilisant l'identification $\Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+) \simeq \Omega_1^0(P^+, \mathbb{C}^M)$, on obtient

$$\forall \psi \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+), \quad -L_X \psi = -L_{X_v} \psi - L_{X_h} \psi = \rho_{Lie}(X) \psi - X^\mu \partial_\mu \psi - X^0 \partial_t \psi \quad (6.53)$$

La dérivée de Lie L apparaît donc comme l'action des observables généralisées sur les états.

Une comparaison entre le modèle standard de la mécanique quantique en dimension finie et la formulation géométrique proposée ici est donnée table 6.1.

6.5 Application

Cette section illustre les concepts formels qui ont été introduits dans ce chapitre. On considère un atome à trois niveaux interagissant avec deux lasers. Avant d'introduire le “toy-model” illustrant la théorie, on a besoin d'une brève description des systèmes à 3 niveaux

TAB. 6.1 – Comparaison entre le modèle usuel de la mécanique quantique et la formulation fibrée.

| | <i>Système à M niveaux</i> | <i>Formulation fibrée</i> |
|-----------------------------|--|--|
| Espace des scalaires | le corps \mathbb{C} | l'anneau $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathbb{C})$ |
| Espace des états | l'espace vectoriel \mathbb{C}^M | le module $\Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$ |
| Produit | le produit scalaire $\langle \cdot \cdot \rangle_{\mathbb{C}^M}$ | le produit intérieur $\langle \cdot \cdot \rangle_{E^+}$ |
| Base canonique | $\left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right)$ | $(a, \vec{R}, t\rangle)_{a=1, \dots, M}$ |
| Espace des observables | \mathfrak{ig} | TP^+ |
| Action des observables | ρ_{Lie} | $-L$ |
| Espace des transformations | G | $\Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, P^+)$ |
| Actions des transformations | ρ et Ad | ρ et Ad |
| Évolution | l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ | l'opérateur d'holonomie J^{γ, t, t_0} |
| Observables fondamentales | l'Hamiltonien H | les potentiels A_μ, A_0 et $i\hbar^{-1}Edt$ |

6.5.1 Discussion préliminaire

On considère un système à 3 niveaux, décrit par l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$. Le forme générale d'un Hamiltonien d'un système à 3 niveaux est

$$H = x^i \lambda_i \quad i = 0, \dots, 8 \quad (6.54)$$

où λ_0 est la matrice identité de $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$ et $\{\lambda_i\}_{i=1, \dots, 8}$ sont les matrices de Gell-Mann :

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

Les matrices de Gell-Mann peuvent être considérées comme les générateurs de $\mathfrak{su}(3)$. De plus, on introduit les matrices suivantes :

$$\mu_1 = \lambda_3 + \frac{1}{\sqrt{3}}\lambda_8 + \frac{2}{3}\lambda_0 \quad (6.55)$$

$$\mu_2 = -\lambda_3 + \frac{1}{\sqrt{3}}\lambda_8 + \frac{2}{3}\lambda_0 \quad (6.56)$$

$$\mu_3 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\lambda_8 + \frac{2}{3}\lambda_0 \quad (6.57)$$

Il est clair que $\{\lambda_i, \mu_j\}_{i=0,1,2,4,5,6,7;j=1,2,3}$ génèrent l'algèbre de Lie $\mathfrak{u}(3)$. On est intéressé dans cette section, par les Hamiltoniens particuliers qui sont de la forme

$$H = x^1 \lambda_1 + x^2 \lambda_2 + x^6 \lambda_6 + x^7 \lambda_7 + \tilde{x} \mu_2 \quad (6.58)$$

Puisque $\{\lambda_4, \lambda_5, \mu_1, \mu_2\}$ sont générateurs de l'algèbre de Lie $\mathfrak{u}(2)$ comme sous-algèbre de $\mathfrak{u}(3)$, alors l'Hamiltonien (6.58) est un élément de $\mathfrak{u}(3)/\mathfrak{u}(2)$ (quotient d'espaces vectoriels; $\mathfrak{u}(2)$ n'est pas un idéal de $\mathfrak{u}(3)$ et donc $\mathfrak{u}(3)/\mathfrak{u}(2)$ est un espace vectoriel sans structure d'algèbre de Lie). En

d'autres mots, l'Hamiltonien (6.58) caractérisé par $(x^1, x^2, x^6, x^7, \tilde{x})$ est déterminé par un point de la variété $U(3)/U(2)$, et on sait (cf. [128]) que

$$U(3)/U(2) = SU(3)/SU(2) = S^5 \quad (6.59)$$

Donc l'espace de contrôle associé à un Hamiltonien de la forme (6.58) peut toujours être interprété comme une sous-variété de la 5-sphère S^5 .

6.5.2 Un exemple concret

On considère un atome à 3 niveaux dans la configuration Λ , interagissant avec deux lasers, désignés par P (pour pompe) et S (pour Stokes). Les trois états nus de l'atome sont labelisés par $|a\rangle$, $|b\rangle$ et $|c\rangle$. Les paramètres de contrôle du système sont les amplitudes et les phases des lasers P et S. On désigne par ω_P la fréquence du laser P supposé quasi-résonant avec la transition $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$, et avec pour detuning Δ . Le laser S de fréquence ω_S est supposé en parfaite résonance avec la transition $|b\rangle \rightarrow |c\rangle$, cf. fig. 6.2.

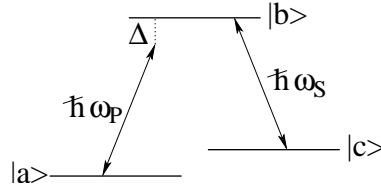


FIG. 6.2 – Schéma d'un atome à 3 niveaux

L'Hamiltonien habillé du système dans l'approximation RWA est

$$H = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & W e^{i\beta} & 0 \\ W e^{-i\beta} & 2\Delta & V e^{i\alpha} \\ 0 & V e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.60)$$

où $W = |\langle a | \vec{\mu} \cdot \vec{E}_P | b \rangle|$ et $V = |\langle b | \vec{\mu} \cdot \vec{E}_S | c \rangle|$, \vec{E}_P et \vec{E}_S étant les amplitudes des lasers et $\vec{\mu}$ étant le moment dipolaire électrique de l'atome. Afin de simplifier les notations, on pose $\Delta = 1$. L'Hamiltonien H est de la forme (6.58) et on peut calculer ses trois valeurs propres :

$$E_1 = 0 \quad (6.61)$$

$$E_2 = \frac{\hbar}{2} (1 - \sqrt{1 + V^2 + W^2}) \quad (6.62)$$

$$E_3 = \frac{\hbar}{2} (1 + \sqrt{1 + V^2 + W^2}) \quad (6.63)$$

On voit que $E_1 = E_2$ si $V = 0$ et $W = 0$, et de plus

$$\inf_{V,W} \text{dist}(\{E_1, E_2(V, W)\}; E_3(V, W)) = \hbar \quad (6.64)$$

Soient $P_1(W, V, \alpha, \beta)$, $P_2(W, V, \alpha, \beta)$ et $P_3(W, V, \alpha, \beta)$ les projecteurs propres associés à E_1 , E_2 et E_3 . Il est évident que pour toute dynamique particulière $t \mapsto (W(t), V(t), \alpha(t), \beta(t))$ l'Hamiltonien $H(t)$ avec la décomposition $\text{Sp}(H(t)) = \sigma_0(t) \cup \sigma_\perp(t)$ satisfait aux conditions du théorème adiabatique de Nenciu, où $\sigma_0(t) = \{E_1, E_2(t)\}$ et $\sigma_\perp(t) = \{E_3(t)\}$ et avec $\inf_t \text{dist}(\sigma_0(t), \sigma_\perp(t)) \geq \hbar$. En accord avec ce théorème, on a à la limite adiabatique³

$$U(t, 0)P_m(0) = P_m(t)U(t, 0) \quad (6.65)$$

³qui est approximativement obtenue si les variations de $(W(t), V(t))$ sont lentes devant le temps propre quantique $\inf_t \frac{\hbar}{E_3(t) - E_1}$; pour des paramètres classiques comme W et V cette hypothèse est consistante

où $U(t, 0)$ est l'opérateur d'évolution associé à $H(t)$ et $P_m(t) = P_1(t) + P_2(t)$. On peut alors appliquer le formalisme introduit dans ce chapitre pour $\text{Im}P_m$ ($\dim \text{Im}P_m = 2$), pour toute dynamique particulière.

Les vecteurs propres de H peuvent être choisis comme suit, pour $V \neq 0$ et $W \neq 0$:

$$|1, (\alpha, \beta, W, V)\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{V^2}{W^2}}} \begin{pmatrix} -e^{i(\alpha+\beta)} \frac{V}{W} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.66)$$

$$|2, (\alpha, \beta, W, V)\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{W^2}{V^2} + \frac{(1 - \sqrt{1+V^2+W^2})^2}{V^2}}} \begin{pmatrix} e^{i(\alpha+\beta)} \frac{W}{V} \\ e^{i\alpha} \frac{(1 - \sqrt{1+V^2+W^2})}{V} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.67)$$

$$|3, (\alpha, \beta, W, V)\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{W^2}{V^2} + \frac{(1 + \sqrt{1+V^2+W^2})^2}{V^2}}} \begin{pmatrix} e^{i(\alpha+\beta)} \frac{W}{V} \\ e^{i\alpha} \frac{(1 + \sqrt{1+V^2+W^2})}{V} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.68)$$

Soient $r = \sqrt{1 + V^2 + W^2}$ et (θ, φ) tels que $W = r \sin \varphi \cos \theta$, $V = r \sin \varphi \sin \theta$ et $r \cos \varphi = 1$ ($\theta \in]0, \frac{\pi}{2}[$ et $\varphi \in]0, \frac{\pi}{2}[$). Avec ce jeu de nouvelles variables, on a

$$|1, (\alpha, \beta, \theta, \varphi)\rangle = \begin{pmatrix} -e^{i(\alpha+\beta)} \sin \theta \\ 0 \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (6.69)$$

$$|2, (\alpha, \beta, \theta, \varphi)\rangle = \begin{pmatrix} e^{i(\alpha+\beta)} \frac{\sin \varphi \cos \theta}{\sqrt{1 - \cos \varphi}} \\ e^{i\alpha} \sqrt{1 - \cos \varphi} \\ \frac{\sin \varphi \sin \theta}{\sqrt{1 - \cos \varphi}} \end{pmatrix} \quad (6.70)$$

Soit $(\alpha, \beta, \gamma, \theta, \varphi)$ les angles qui engendrent S^5 . La sous-variété de S^5 définie par $\begin{cases} 0 < \varphi < \frac{\pi}{2} \\ 0 < \theta < \frac{\pi}{2} \\ \gamma = 0 \end{cases}$

est la variété de contrôle ; elle sera désignée dans la suite par S_+^4 .

6.5.3 Le fibré composite modélisant le système dynamique quantique

Nous appliquons à présent la construction théorique développé jusqu'ici. Premièrement on note que le choix des vecteurs propres (6.69) et (6.70) n'est pas unique. On a écrit

$$|i\rangle^{NE} = \begin{pmatrix} e^{i(\alpha+\beta)*} \\ e^{i\alpha*} \\ * \end{pmatrix} \quad (6.71)$$

où $*$ remplace les fonctions de (θ, φ) dans les expressions de $|1\rangle$ (6.69) ou de $|2\rangle$ (6.70). Pour d'autres choix de convention de phase, on peut choisir les expressions suivantes :

$$|i\rangle^{NW} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha*} \\ e^{i(\alpha-\beta)*} \\ e^{-i\beta*} \end{pmatrix} \quad |i\rangle^{SE} = \begin{pmatrix} e^{i\beta*} \\ * \\ e^{-i\alpha*} \end{pmatrix} \quad |i\rangle^{SW} = \begin{pmatrix} * \\ e^{-i\beta*} \\ e^{-i(\alpha+\beta)*} \end{pmatrix} \quad (6.72)$$

Ces différentes conventions sont associées à 4 cartes locales ouvertes de S_+^4 , $U^{NE} = \{(\alpha, \beta, \theta, \varphi) \in S_+^4 | \alpha \in]-\pi/2 - \epsilon, \pi/2 + \epsilon[, \beta \in]-\pi/2 - \epsilon, \pi/2 + \epsilon[, U^{NW} = \{(\alpha, \beta, \theta, \varphi) \in S_+^4 | \alpha \in]-\pi/2 - \epsilon, \pi/2 + \epsilon[, \beta \in$

$] \pi/2 - \epsilon, 3\pi/2 + \epsilon[$, $U^{SE} = \{(\alpha, \beta, \theta, \varphi) \in S_+^4 \mid \alpha \in] \pi/2 - \epsilon, 3\pi/2 + \epsilon[, \beta \in] - \pi/2 - \epsilon, \pi/2 + \epsilon[\text{ et } U^{SW} = \{(\alpha, \beta, \theta, \varphi) \in S_+^4 \mid \alpha \in] \pi/2 - \epsilon, 3\pi/2 + \epsilon[, \beta \in] \pi/2 - \epsilon, 3\pi/2 + \epsilon[, \text{ où } \epsilon \text{ est un petit paramètre. L'ensemble } \{U^i\}_{i=NE,NW,SE,SW} \text{ est un atlas de } S_+^4. \text{ On veut construire le fibré principal des phases géométriques. Soit } T^i = (|1\rangle^i, |2\rangle^i) \in \mathcal{M}_{3 \times 2}(\mathbb{C}) \text{ la matrice des vecteurs propres sélectionnés par le théorème adiabatique (} i = NE, NW, SE, SW \text{). On pose } \vec{R} = (\alpha, \beta, \theta, \varphi) \in S_+^4.$

$$\forall i, j, \forall \vec{R} \in U^i \cap U^j, \quad g^{ij}(\vec{R}) = T^i(\vec{R})^\dagger T^j(\vec{R}) \in U(2) \quad (6.73)$$

Les fonctions g^{ij} sont les fonctions de transitions du fibré principal de la géométrie $(P, S_+^4, U(2), \pi_P)$. Plus précisément on a

$$g^{NE,NW} = g^{SE,SW} = e^{i\beta} \quad g^{NE,SE} = g^{NW,SW} = e^{i\alpha} \quad g^{NE,SW} = e^{i(\alpha+\beta)} \quad g^{NW,SE} = e^{i(\alpha-\beta)} \quad (6.74)$$

Notons que $\forall i, j, g^{ij} \in U(1) \subset U(2)$, car les deux valeurs propres ne sont jamais globalement dégénérées sur $U^i \cap U^j$. Ces fonctions définissent complètement l'espace total P du fibré principal de la géométrie. En effet soit \sim la relation d'équivalence sur $S_+^4 \times U(2)$ définie par

$$(x, k) \sim (y, h) \text{ si } x = y \text{ et si } \exists i, j \text{ tel que } x \in U^i \cap U^j \text{ et } k = hg^{ij}$$

L'espace total est alors la variété quotient $P = S_+^4 \times U(2) / \sim$. Soit $\pi_\sim : S_+^4 \times U(2) \rightarrow P$ la projection associée à \sim , alors π_P est défini par le diagramme commutatif

$$\begin{array}{ccc} S_+^4 \times U(2) & \xrightarrow{\pi_\sim} & P \\ \text{Pr}_1 \searrow & & \swarrow \pi_P \\ & S_+^4 & \end{array}$$

Le fibré principal de la géométrie $(P, S_+^4, U(2), \pi_P)$ est alors complètement défini. De plus c'est le fibré de structure du fibré composite principal de la géodynamique. La connexion de P est définie par le potentiel de jauge

$$\forall \vec{R} \in U^i, \quad A^i = T^i(\vec{R})^\dagger d_{S^4} T^i(\vec{R}) \in \Omega^1(S_+^4, \mathfrak{u}(2)) \quad (6.75)$$

avec $A^j = (g^{ij})^{-1} A^i g^{ij} + (g^{ij})^{-1} d_{S^4} g^{ij}$ dans $U^i \cap U^j$. Soient $\{\sigma_i\}_{i=1,2,3}$ les matrices de Pauli (générateurs de $\mathfrak{su}(2)$) et σ_0 l'identité de \mathbb{C}^2 , i.e.

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Les calculs du potentiel de jauge montrent que

$$\begin{aligned} A^{NE} &= i \frac{\sin \varphi}{\sqrt{1 - \cos \varphi}} \sigma_2 d\theta - \frac{i}{2\sqrt{2}} \frac{\sin(2\theta) \sin \varphi}{\sqrt{1 - \cos \varphi}} \sigma_1 (d\alpha + d\beta) \\ &+ i \sin \theta \frac{\sigma_3 + \sigma_0}{2} (d\alpha + d\beta) + \frac{i \cos^2 \theta \sin^2 \varphi}{2} \frac{\sigma_0 - \sigma_3}{1 - \cos \varphi} (d\alpha + d\beta) \\ &+ \frac{i}{2} (1 - \cos \varphi) \frac{\sigma_0 - \sigma_3}{2} d\alpha \end{aligned} \quad (6.76)$$

Le fibré transverse pour $\vec{R} = (\alpha, \beta, \theta, \varphi) \in S_+^4$ fixé, est le fibré trivial de la dynamique $(\mathbb{R} \times U(2), \mathbb{R}, U(2), \text{Pr}_1)$ équipé de la connexion

$$\forall t \in \mathbb{R}, E(\vec{R}, t) = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{1}{\cos \varphi} \end{pmatrix} dt \quad (6.77)$$

Soit χ_t^S le difféomorphisme de fibre du fibré de base $(S, \mathbb{R}, S_+^4, \pi_S)$. Par définition on a $P_t = \chi_t^{S*} P$. L'Hamiltonien H n'ayant pas de dépendance explicite en t , il est clair que $\forall t \in \mathbb{R}, P_t = P$ et donc

χ_t^S est l'application identité. On conclut que $\pi_S^{-1}(t) = S_+^4$ et donc $S = S_+^4 \times \mathbb{R}$. Le fibré de base est le fibré trivial $(S_+^4 \times \mathbb{R}, \mathbb{R}, S_+^4, \text{Pr}_2)$. Les trivialisations locales du fibré total sont

$$\phi_{++}^{ij}(\vec{R}, t, g) = \phi_P^i[t](\vec{R}, g) = \phi_P^i(\vec{R}, g) \quad (6.78)$$

car P_t est indépendant de t . Soit $\{U^i \times \mathbb{R}\}_{i=NE,NW,SE,SW}$ l'atlas de $S_+^4 \times \mathbb{R}$, $\forall (\vec{R}, t) \in (U^i \cap U^j) \times \mathbb{R}$, on a les fonctions de transition de l'espace total P^+ du fibré total par $g_{++}^{ij}(\vec{R}, t) = g^{ij}(\vec{R})$. Il est donc clair que $P^+ = P \times \mathbb{R}$, le fibré total de la géodynamique est donc $(P \times \mathbb{R}, S_+^4 \times \mathbb{R}, U(2), (\pi_P \circ \text{Pr}_1) \times \text{Pr}_2)$. Notons que la trivialité de la fibration sur le temps, est due à l'absence de dépendance explicite de H avec t . Lorsque ce n'est pas le cas, le fibré de base n'est pas trivial.

6.5.4 Différents aspects du système dynamique dans le formalisme fibré

Tout les ingrédients du formalisme des fibrés composites ont été identifiés explicitement pour l'exemple. On veut maintenant considérer une dynamique particulière dans le but de compléter la description du système dynamique quantique dans la représentation fibrée. Afin de simplifier et de clarifier la discussion, on considère une dynamique telle que $\forall t \alpha = \beta = 0$ (carte U^{NE}) et on utilise les variables originelles (W, V) à la place de (θ, φ) ; cette variété sera notée \mathcal{M} dans ce paragraphe. Dans la suite on aura $\mu = 1, 2$, $R^1 = W$, $R^2 = V$ et $R^0 = t$. Dans ces conditions, le potentiel de jauge du fibré total P^+ sur $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$ est

$$\begin{aligned} A_+ &= i\hbar^{-1} E(W, V) dt + A(W, V) \\ &= \frac{i}{2} \left(1 - \sqrt{1 + V^2 + W^2} \right) (\sigma_0 - \sigma_3) dt \end{aligned} \quad (6.79)$$

$$+ \frac{i\sigma_2}{\sqrt{2} \sqrt{1 + \frac{V^2}{W^2}} \sqrt{\frac{1+V^2+W^2 - \sqrt{1+V^2+W^2}}{V^2}}} \left(\frac{dW}{W} - \frac{dV}{V} \right) \quad (6.80)$$

On considère la dynamique décrite par $\gamma \in \Gamma([t_0 = -25, T = 90], \mathcal{M} \times \mathbb{R})$ définie par $\gamma(t) = (3 \cos(2\pi(t - 25)/90) + 3.1; 3 \sin(2\pi(t - 25)/90) + 3.1)$ (unités arbitraires). γ induit un chemin \mathcal{C} dans $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$.

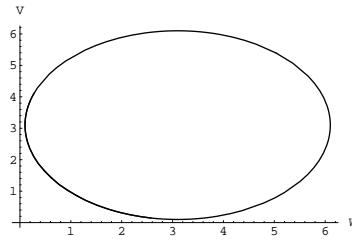


FIG. 6.3 – Le chemin induit par γ dans \mathcal{M} .

Le relèvement horizontal de \mathcal{C} définit l'opérateur d'holonomie

$$\forall t \in [t_0, T], \quad J^{\gamma, t_0, t} = \mathbb{P} e^{-i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t E(\gamma(t')) dt' - \int_{t_0}^t A_\mu(\gamma(t')) \frac{d\gamma^\mu(t')}{dt'} dt'} \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, P^+) \quad (6.81)$$

Soit $(E^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathbb{C}^2, \pi_{E^+})$ le fibré vectoriel associé à P^+ par l'action de $U(2)$ sur \mathbb{C}^2 définie par le produit matriciel. Les états du système sont décrits par le $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathbb{C})$ -module $\Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$, qui est l'espace des sections de E^+ . À $t = 0$ on suppose que $\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, \gamma(0)\rangle + |2, \gamma(0)\rangle)$; donc pour tout $t \geq t_0$

$$\psi(t) = \sum_{b=1,2} \frac{1}{\sqrt{2}} \left([J^{\gamma, t_0, t}]_{b,1} + [J^{\gamma, t_0, t}]_{b,2} \right) |b, \gamma(t)\rangle \in \Gamma(\mathcal{C}, E^+) \quad (6.82)$$

Avec le produit intérieur de $\Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$, on obtient les probabilités d'occupation instantanées des niveaux E_1 et $E_2(V, W)$:

$$P_i(t) = |\langle i | \psi \rangle_{E^+}(\gamma(t), t)|^2 \quad (6.83)$$

Ces probabilités sont tracées sur la figure 6.4.

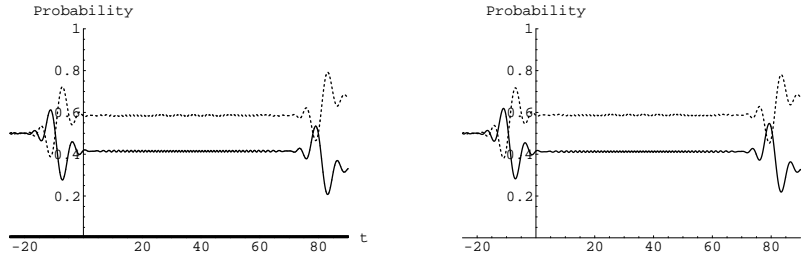


FIG. 6.4 – Gauche : Probabilités d'occupation des états $|1\rangle$ (ligne pleine), $|2\rangle$ (ligne pointillée) et $|3\rangle$ (ligne grasse) calculées par intégration directe de l'équation de Schrödinger dans \mathbb{C}^3 . Droite : Probabilités d'occupation des états $|1\rangle$ (ligne pleine), et $|2\rangle$ (ligne pointillée) calculées avec la formule (6.82) basée sur l'opérateur d'holonomie du fibré composite. On voit que les résultats obtenus en utilisant l'opérateur d'holonomie sont en parfait accord avec l'intégration directe. De plus la figure de gauche révèle que le niveau 3 n'est jamais occupé, en accord avec son élimination adiabatique dans la représentation fibrée.

On a introduit le champ F_+ dans $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$, qui est associé au monopôle magnétique en $(V, W) = (0, 0)$ et dont on sait qu'il mesure les couplages non-adiabatiques du système. Une illustration de ce champ est donnée figure 6.5.

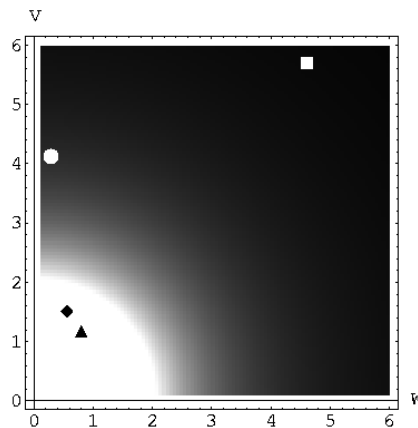


FIG. 6.5 – L'élément de matrice $(1, 2)$ de $(F_+)_{12}$ en fonction de \mathcal{M} . La région claire est caractérisée par un champ de forte intensité alors que les régions sombres correspondent à un champ faible (unités arbitraires). On a de plus indiqué quelques points du chemin \mathcal{C} , \circ : $t = -25$, \diamond : $t = -12$, \square : $t = 40$ et \triangle : $t = 80$. Par comparaison avec la figure 6.4, on voit que la fonction d'onde ne change significativement que lorsque les paramètres de contrôle se trouvent dans la région de champ fort.

Dans notre exemple d'un système à trois niveaux, il existe un ensemble d'observables qui ont une importance particulière. Soient $S_i = \frac{1}{2}\lambda_i$ pour $i = 1, \dots, 8$, et soient $S_i(t) = U(t, t_0)S_iU(t, t_0)^\dagger$, où $U(t, t_0)$ est l'opérateur d'évolution associé à l'équation de Schrödinger. Le rôle de cet ensemble d'opérateurs $S_i(t)$ pour un système à 3 niveaux a été étudié par Ho, Chu et al [70, 71, 30]. Soit ρ_0 la matrice densité de la condition initiale. On introduit le vecteur $\vec{S}(t) \in \mathbb{R}^8$ tel que $S_i(t) = \text{tr}(\rho_0 S_i(t))$ (valeur moyenne de l'observable $S_i(t)$). $\vec{S}(t)$ est appelé vecteur cohérent. De la trajectoire de ce vecteur dans l'espace universel généralisé \mathbb{R}^8 , on peut extraire des informations sur le système dynamique (pour un exposé complet de ce sujet voir [70, 71, 30]). Avec une approche utilisant le formalisme fibré, les analogues des observables $S_i(t)$ sont

$$S_i(\vec{R}) = T(\vec{R})^\dagger S_i T(\vec{R}) \in \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathfrak{u}(2)) \quad (6.84)$$

et le vecteur cohérent $\vec{S}(t)$ est obtenu par⁴

$$S_i(t) = \langle \psi | S_i \psi \rangle_{E^+}(\gamma(t), t) \quad (6.85)$$

La figure 6.6 illustre le calcul de \mathcal{S} dans le fibré composite principal.

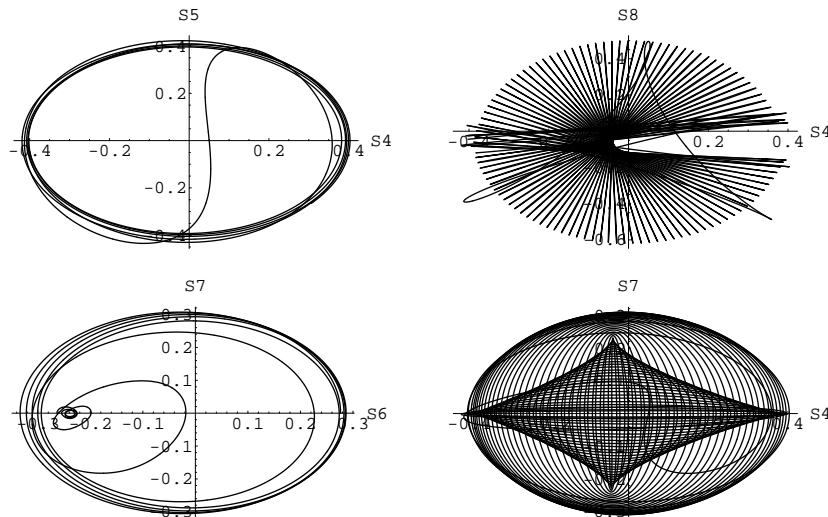


FIG. 6.6 – Trajectoires du vecteur cohérent $\vec{S}(t)$ projetées dans différents plans, pour différents intervalles de temps, calculées dans la représentation fibrée

L'exemple du système à trois niveaux, montre que l'on peut utiliser la représentation basée sur le fibré composite principal pour obtenir toutes les quantités physiques associées à un système dynamique quantique.

En résumé

Le fibré décrivant la phase matricielle du transport adiabatique, est le composite du fibré adiabatique étudié dans les chapitres précédents et du fibré "dynamique" dans lequel est décrit l'opérateur d'évolution. La connexion du fibré "géodynamique" est alors la connexion composite issue de la connexion de Berry et de la connexion Hamiltonienne du fibré de la dynamique. Nous sommes donc en mesure de représenter les "interactions non-adiabatiques" entre les espaces-temps parallèles, copies associées à chacun des états du système dynamique quantique, de l'espace-temps du contrôle,

⁴pour notre exemple $\rho_0 = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|$

produit direct de la variété des paramètres de contrôle et de la droite temporelle.

En regroupant les résultats de ce chapitre et du chapitre 3, nous pouvons définir un modèle géométrique, fondé sur la théorie des fibrés, qui décrit les systèmes dynamiques quantiques contrôlés par un système classique. La C^* -algèbre commutative des observables du système de contrôle classique $C^\infty(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathbb{C})$ joue le rôle d'espace scalaire du modèle (les résultats des mesures sur le système dynamique quantique sont dépendants de l'instant t et de la configuration \vec{R} des paramètres de contrôle au moment de la mesure). L'espace des transformations est donné par les sections du fibré principal $(P^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, G, \pi_{++})$, les états sont donnés par les sections du fibré vectoriel associé $(E^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathbb{C}^M, \pi_{E^+})$ et les observables par les sections du fibré tangent TP^+ . La variété de base $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$ est équipée d'une métrique naturelle obtenue comme étant le pull-back par f^* de la métrique Kählerienne de la variété universelle $G_M(\mathbb{C}^n)$, l'application universelle étant définie par

$$f : \begin{array}{l} \mathcal{M} \times \mathbb{R} \rightarrow G_M(\mathbb{C}^n) \\ (\vec{R}, t) \mapsto \sum_{a=1}^M |a, \vec{R}, t\rangle \langle a(*), \vec{R}, t| \end{array} \quad (6.86)$$

Cette métrique mesure la distance quantique (au sens probabiliste) entre les espaces actifs adiabatiques. Le fibré P^+ est équipé d'une connexion A_+ et d'une courbure F_+ . Un chemin $\Psi(t) \in P^+$ est un ensemble de M fonctions d'onde satisfaisant à l'équation de Schrödinger si $i\hbar i_X \text{tr} F_+ = 0$, i étant le produit intérieur de P^+ et $X(t)$ étant le vecteur tangent à Ψ . Si tel est le cas, alors on pose $(\gamma(t), t) = \pi_{++}(\Psi(t))$, on a alors

$$\Psi(t) = T(\vec{R}(t), t) J^{\gamma, 0, t} \quad (6.87)$$

où $J^{\gamma, 0, t} = \mathbb{T}e^{-\int_0^t A_+(\vec{R}(t'), t') dt'}$ porte le nom d'opérateur d'holonomie. La dérivée de Lie L de P^+ joue le rôle de l'action des observables sur les états. L'action des transformations sur les états se faisant par Ad.

En résumé, la dynamique quantique peut être décrite par la donnée de ce que l'on appelle [53] une opération d'algèbre de Lie dans une algèbre différentielle graduée, à savoir la donnée du 5-uplet $(\mathfrak{g}, i, L, \Omega^* P^+, R, d_P)$. Les transformations apparaissant comme des éléments de $\Omega^0 P^+$, les états comme des fonctions G -équivariantes de P^+ à valeurs dans \mathbb{C}^M , et les observables comme des éléments du TP^+ dual algébrique de $\Omega^1 P^+$. Le produit intérieur définit l'équation de Schrödinger. L'action à droite R de G , définit l'action des transformations. Soit $U \in \Omega^0 P^+ = \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, P^+)$ une transformation, $\psi \in \Omega_I^0(P^+, \mathbb{C}^M) = \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, E^+)$ un état, et $\eta \in VP^+ = \Gamma(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, V^+) = \Omega_I^0(P^+, \mathfrak{g})$ une observable standard, alors

$$R^*(U)\psi = U^{-1}\psi \quad R^*(U)\eta = U^{-1}\eta U \quad (6.88)$$

car rappelons que si $\eta \in \Omega^*(P^+, W)$ est G -équivariante, W étant un espace vectoriel sur lequel agit G par ρ , alors par définition $R^*(U)\eta = \rho^{-1}(U)\eta$. La dérivée de Lie apparaît comme l'action des observables, soit $\eta \in TP^+$ une observable, $\psi \in \Omega_I^0(P^+, \mathbb{C}^M)$ un état, et $\zeta \in TP^+$ une autre observable, alors l'action de η sur l'état ψ et sur l'observable ζ est bien donnée par

$$-L_\eta \psi = \rho_{Lie}(\eta_v)\psi + \eta_h(\psi) \quad L_\eta \zeta = [\eta, \zeta] \quad (6.89)$$

Chapitre 7

Théorie de jauge adiabatique sur réseaux

Bien que trente rayons convergent au milieu, c'est le vide médian qui fait marcher le char.

Lao-Tseu

L'essentiel du modèle géométrique des systèmes dynamiques quantiques a été introduit dans les chapitres précédents. Le rôle des phases géométriques, le statut des espaces actifs (adiabatiques ou non), et les analogies avec d'autres modèles physiques (théorie des champs, relativité générale et systèmes dynamiques classiques), ont été étudiés au cours de ces premiers chapitres. À ce stade, il reste trois grands problèmes pratiques, qui n'ont pas encore été abordés.

1. La méthode de transport adiabatique, que ce soit pour les régimes adiabatiques purs ou pour les régimes avec des couplages non-adiabatiques entre états de l'espace actif, nécessite la connaissance des vecteurs propres instantanés de l'Hamiltonien. Dans les exemples présentés dans les chapitres précédents, où l'on n'a traité que des systèmes atomiques simples, les Hamiltoniens étaient représentés par des matrices de petites tailles (2×2 et 3×3), permettant le calcul analytique de la diagonalisation matricielle, ou ne nécessitant l'usage que de programmes de diagonalisation standards. Mais pour l'étude de systèmes dynamiques quantiques plus complexes, comme des molécules en interaction avec un champ couplant des états liés d'une surface électronique liante à des continua d'une surface électronique antiliante, la matrice représentant numériquement l'Hamiltonien est de très grande dimension, et nécessite donc l'usage de méthodes plus sophistiquées de diagonalisation. De plus, ces systèmes complexes peuvent échapper à l'approximation adiabatique (même généralisée aux espaces actifs). Il est toujours possible, même dans ce cas d'utiliser le formalisme géométrique, mais avec une base $\{\tilde{\psi}(\vec{R}, t)\}$ (avec $\vec{R} \in \mathcal{M}$) de l'espace actif se déformant, qui n'est pas une base propre (généralisant la phase de Aharonov-Anandan non-abélienne et non la phase de Berry). Le problème est alors de trouver numériquement une telle base.
2. Dans les exemples très simples illustrant les chapitres précédents, le champ électromagnétique était décrit à l'aide de théories d'Hamiltonien habillé à 1 ou 2 photons, dans l'approximation RWA. Dans le cas de systèmes photodynamiques plus complexes, la modélisation du champ électromagnétique doit suivre une voie similaire, mais nécessite un développement plus général, afin d'être couplée à la représentation géométrique des systèmes dynamiques quantiques.
3. Il est illusoire de ne vouloir considérer que la théorie "exacte" des systèmes dynamiques quantiques. Même la plupart des systèmes photodynamiques atomiques les plus simples, ne sont pas solubles analytiquement, et pour les systèmes moléculaires, il est absolument nécessaire

de passer par des méthodes numériques. La description géométrique qui a été présentée dans les chapitres antérieurs, doit donc être adaptée aux simulations numériques. On doit donc passer de la géométrie différentielle (du “continu”) à la géométrie numérique (au “discret”).

Le point 1. fait l’objet de toute la partie 2 de cette thèse, et le point 2. sera traité dans le chapitre suivant. Le point 3. fait l’objet de ce chapitre.

La formule du transport adiabatique généralisée doit être discrétisée. On montrera section 1, qu’il existe une version naturelle du transport adiabatique discret, qui à la limite des pas tendant vers zéro, converge vers la formule de transport continue, la formule en question étant rigoureusement exacte, si l’évolution de chacun des paramètres de contrôle est une fonction en escalier. La discrétisation du modèle, nécessite de plus, de passer de la variété C^∞ des paramètres de contrôle, \mathcal{M} , à un réseau de discrétisation X . La théorie de jauge adiabatique construite sur \mathcal{M} , doit donc laisser place à une théorie de jauge sur réseau. La section 2 apporte les ingrédients mathématiques du calcul discret sur X , analogue du calcul différentiel de \mathcal{M} , qui vont permettre la discrétisation du modèle géométrique des systèmes dynamiques quantiques. L’analyse faite dans les chapitres précédents, montre que dans les régimes avec espaces actifs adiabatiques multidimensionnels, la fonction d’onde du système a des variations brutales dans le voisinage des croisements (zone de fort couplages non-adiabatiques \iff zone de forts champs magnétiques monopôlares), alors que dans les régions “vides”, celle-ci est presque inchangée. Pour décrire ces variations brutales, il est nécessaire d’avoir un réseau X avec des mailles très fines dans les régions “actives”. Par contre, conserver des mailles fines dans les régions vides, est très coûteux en temps de calculs et est très gourmand en mémoire informatique, sans apporter grand chose en précision sur les résultats. Pour avoir une méthode viable numériquement, il faut des mailles lâches dans ces régions vides. Il est donc nécessaire de manipuler un réseau X non-uniforme. Ceci fait l’objet de la section 3. Nous avons vu à plusieurs reprises, que la topologie du fibré adiabatique jouait un grand rôle dans la physique des systèmes dynamiques quantiques. Cette topologie est caractérisée, d’une part, par la position des monopôles magnétiques et la charge de ceux-ci (première classe de Chern), liés aux couplages non-adiabatiques entre états et aux transitions soudaines des systèmes en régimes adiabatiques purs; et d’autre part, par le système de cartes locales (lié aux cordes de Dirac), caractérisé par les régions de changement de carte, et responsable des effets de chirping direct. La préservation de cette topologie dans les calculs numériques et la caractérisation numérique de celle-ci, font l’objet de la section 4 de ce chapitre.

La numérisation du modèle géométrique des systèmes dynamiques quantiques est d’une importance capitale pour d’éventuelles applications à des problèmes de contrôle quantique. Comme nous l’avons déjà évoqué, la position et la charge des monopôles, ainsi que les “lignes de changement de carte” permettent dans une certaine mesure, de prédire quels seront les types de chemin dans \mathcal{M} en mesure de résoudre le problème de contrôle. Néanmoins, cette prédiction n’est que partielle dans les régimes avec des couplages non-adiabatiques (c’est à dire avec des superpositions d’espaces parallèles, induisant des interférences entre les chemins sur les différents espaces). Il sera donc nécessaire de tester plusieurs trajectoires. De plus, de nombreuses situations demandent de résoudre plusieurs problèmes de contrôle différents (comme en informatique quantique où l’on a besoin de plusieurs portes logiques), ce qui nécessite de tester encore plus de trajectoires. Si le nombre de trajectoires à tester est très grand, une méthode consistant à intégrer directement pour chacune l’équation de Schrödinger (par propagation de paquet d’onde par exemple), est très peu optimal, demandant un grand temps d’intégration à chaque nouvelle trajectoire. Sur un très grand nombre de trajectoires, l’intégration directe n’est pas optimale, car souvent plusieurs trajectoires ont des portions en commun, dont la contribution est calculée de nombreuses fois au cours d’une étude. La description géométrique permet d’éviter cela, en calculant les phases de Berry non-abélienne (principales contributrices à la fonction d’onde et qui ne dépendent que du chemin et pas du temps écoulé), dans le calcul initial de tout le réseau X . On fait en quelque sorte une fois pour toute,

une grande part du calcul de propagation sur les trajectoires. Les arrêtes du réseau X peuvent être considérées comme les portions de trajectoires qui pourront être communes à plusieurs chemins. On reviendra sur ce point tout au long de ce chapitre.

7.1 La formule de transport adiabatique discrétisée

Dans cette section, nous établirons une formule de transport adiabatique discrétisée. On rappelle que la formule de transport adiabatique continue est

$$\psi(t) = \sum_{b=1}^M \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(t') dt' - \int_0^t A(t') dt'} \right]_{ba} |\lambda_b(t)\rangle \quad (7.1)$$

où $A(t)_{ab} = \langle a, t | \partial_t | b, t \rangle$ (pour l'instant afin d'alléger l'écriture, on ne fait pas apparaître explicitement \vec{R} , sachant que dans un premier temps, on ne considère qu'un unique chemin dans \mathcal{M}). On considère une partition de $[0, t]$, $\mathcal{P}_N = \{t_0 = 0 < t_1, \dots, t_N = t\}$. La discrétisation simple du transport adiabatique donne

$$\psi(t) \simeq \sum_{b=1}^M \left[\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-i\hbar^{-1} E(t_i) \Delta t_i} e^{-A(t_i) \Delta t_i} \right]_{ba} |\lambda_b(t)\rangle \quad (7.2)$$

où $\Delta t_i = t_{i+1} - t_i$ et $\mathbb{T} \prod$ est le produit ordonné chronologiquement. En effet, la discrétisation de la série de Dyson $\mathbb{T} e^{\int X dt}$ est donnée par le produit chronologique $\mathbb{T} \prod e^{X \Delta t}$, en considérant les "séries de Riemann non-commutatives", voir l'annexe A. Cependant nous allons retrouver cette formule par une approche différente qui nous permettra de retenir une formule "intermédiaire", moins approchée que celle-ci.

7.1.1 Transport parallèle discret

On considère un système dynamique quantique conservatif gouverné par un Hamiltonien autoadjoint $H(t)$. On suppose que l'opérateur d'évolution associé à $H(t)$ satisfait à un théorème adiabatique :

$$\forall t, t' \quad U(t, t') P_m(t') = P_m(t) U(t, t') \quad (7.3)$$

$P_m(t)$ étant un projecteur sur un ensemble de vecteurs propres $\{|a, t\rangle\}_{a=1, \dots, M}$ (notons que l'on pourrait ne pas supposer que $|a, t\rangle$ sont des vecteurs propres, mais des états dépendants du temps, engendrant un espace actif se déformant). On note $T(t) \in \mathcal{M}_{n \times M}(\mathbb{C})$ la matrice de ces vecteurs propres. Soit $\mathcal{P}_N = \{t_0 = 0 < t_1 < \dots < t_N = t\}$ une partition de $[0, t]$. On a, en exploitant les propriétés des opérateurs d'évolution

$$\psi(t) = U(t, 0) |a, 0\rangle \quad (7.4)$$

$$= U(t, t_{N-1}) \dots U(t_2, t_1) U(t_1, 0) P_m(0) |a, 0\rangle \quad (7.5)$$

$$= U(t, t_{N-1}) \dots U(t_2, t_1) P_m(t_1) U(t_1, 0) P_m(0) |a, 0\rangle \quad (7.6)$$

$$\vdots \quad (7.7)$$

$$= P_m(t) U(t, t_{N-1}) P_m(t_{N-1}) \dots P_m(t_1) U(t_1, 0) P_m(0) |a, 0\rangle \quad (7.8)$$

Supposons que $t \mapsto H(t)$ soit une fonction en escalier à valeurs opérateurs, dont les sauts sont associés à la partition \mathcal{P}_N . En d'autres termes, $\forall t \in [t_i, t_{i+1}[$ on a $H(t) = H(t_i)$. Dans ces conditions,

H est constant sur les intervalles $[t_i, t_{i+1}[$ et on a $U(t_{i+1}, t_i) = e^{-i\hbar^{-1}H(t_i)\Delta t_i}$. On a alors

$$U(t_{i+1}, t_i)P_m(t_i) = \sum_{a=1}^M e^{-i\hbar^{-1}H(t_i)\Delta t_i} |a, t_i\rangle \langle a, t_i| \quad (7.9)$$

$$= \sum_{a=1}^M e^{-i\hbar^{-1}E_a(t_i)\Delta t_i} |a, t_i\rangle \langle a, t_i| \quad (7.10)$$

D'où

$$P_m(t_{i+1})U(t_{i+1}, t_i)P_m(t_i) = \sum_{a,b} e^{-i\hbar^{-1}E_a(t_i)\Delta t_i} \langle b, t_{i+1}|a, t_i\rangle |b, t_{i+1}\rangle \langle a, t_i| \quad (7.11)$$

$$= \sum_{ab} \left[T^\dagger(t_{i+1})T(t_i)e^{-i\hbar^{-1}E(t_i)\Delta t_i} \right]_{ba} |b, t_{i+1}\rangle \langle a, t_i| \quad (7.12)$$

on a alors

$$\psi(t) = \sum_{b=1}^M \left[\mathbb{T} \prod_{i=1}^{N-1} T^\dagger(t_{i+1})T(t_i)e^{-i\hbar^{-1}E(t_i)\Delta t_i} \right]_{ba} |b, t\rangle \quad (7.13)$$

Cette dernière formule étant exacte dans les conditions citées plus haut. Si on relâche la condition d'une fonction Hamiltonienne en escalier, avec un pas de discrétisation $\delta(\mathcal{P}_N) = \max_i \Delta t_i$ au voisinage de zéro, on a $U(t_{i+1}, t_i) \sim e^{-i\hbar^{-1}H(t_i)\Delta t_i}$ et on retrouve approximativement la précédente formule. Cette formule constitue la version discrète du transport adiabatique comme le montre la proposition suivante.

Proposition 8. *On considère une famille d'opérateurs auto-adjoints $t \mapsto H(t)$. Soit une partition \mathcal{P}_N de $[0, T]$ telle que $\delta(\mathcal{P}_N) \in \mathcal{V}(0)$. On a alors*

$$\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} T^\dagger(t_{i+1})T(t_i)e^{-i\hbar^{-1}E(t_i)\Delta t_i} \underset{\delta(\mathcal{P}_N) \in \mathcal{V}(0)}{\sim} \mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-A(t_i)\Delta t_i} e^{-i\hbar^{-1}E(t_i)\Delta t_i} \quad (7.14)$$

et donc

$$\psi(t) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \sum_{b=1}^M \left[\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} T^\dagger(t_{i+1})T(t_i)e^{-i\hbar^{-1}E(t_i)\Delta t_i} \right]_{ba} |b, t\rangle \quad (7.15)$$

pour une partition telle que $\lim_{N \rightarrow \infty} \delta(\mathcal{P}_N) = 0$.

Preuve :

$$T^\dagger(t_{i+1})T(t_i) = \begin{pmatrix} \langle 1, t_{i+1}|1, t_i\rangle & \dots & \langle 1, t_{i+1}|M, t_i\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle M, t_{i+1}|1, t_i\rangle & \dots & \langle M, t_{i+1}|M, t_i\rangle \end{pmatrix} \quad (7.16)$$

$$|a, t_{i+1}\rangle = |a, t_i + \Delta t_i\rangle = |a, t_i\rangle + (\partial_t |a, t\rangle)_{t=t_i} \Delta t_i + \mathcal{O}(\Delta t_i^2) \quad (7.17)$$

Rappelons que

$$\langle a, t|b, t\rangle = 0 \Rightarrow (\partial_t \langle a, t|) |b, t\rangle = -\langle a, t|\partial_t |b, t\rangle \quad (7.18)$$

donc

$$\langle a, t_{i+1}|b, t_i\rangle = \delta_{ab} - \langle a, t|\partial_t |b, t\rangle_{t=t_i} \Delta t_i + \mathcal{O}(\Delta t_i^2) \quad (7.19)$$

On en déduit que

$$T^\dagger(t_{i+1})T(t_i) = I_M - A(t_i)\Delta t_i + \mathcal{O}(\Delta t_i^2) \quad (7.20)$$

et donc

$$T^\dagger(t_{i+1})T(t_i) \underset{\Delta t_i \in \mathcal{V}(0)}{\sim} e^{-A(t_i)\Delta t_i} \quad (7.21)$$

■

Si on réintroduit la dépendance à la variété \mathcal{M} , on a

$$\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} T^\dagger(\vec{R}_{i+1})T(\vec{R}_i)e^{-i\hbar^{-1}E(\vec{R}_i)\Delta t_i} \sim \mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-A_\mu(\vec{R}_i)\Delta t_i^\mu} e^{-i\hbar^{-1}E(\vec{R}_i)\Delta t_i} \quad (7.22)$$

où $\vec{R}_i = \vec{R}(t_i)$ et $\Delta t_i^\mu = R^\mu(t_{i+1}) - R^\mu(t_i)$. La réalisation pratique de cette formule, va nécessiter l'usage d'un réseau de discrétisation X de \mathcal{M} dont les arrêtes seront les $R_{i+1}^\mu - R_i^\mu$. C'est à dire qu'afin d'utiliser la propriété des phases de Berry d'être indépendantes de la vitesse du parcours du chemin, c'est la discrétisation des paramètres adiabatiques qui sera l'opération première : on fixe une fois pour toute les éléments $x \in X$; puis pour un chemin $\vec{R}(t)$, on choisit la partition du temps telle que¹ $\forall i, \vec{R}(t_i) \in X$ (contrairement à la manière dont ont été dérivées les formules précédentes où la partition du temps imposait la discrétisation des paramètres). On reviendra sur ce point plus tard.

Ce qu'il est important de noter, c'est la succession entre phases dynamiques et phases géométriques :

$$\begin{aligned} \mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-A_\mu(\vec{R}_i)\Delta t_i^\mu} e^{-i\hbar^{-1}E(\vec{R}_i)\Delta t_i} &= e^{-A_\mu(\vec{R}_{N-1})\Delta t_{N-1}^\mu} e^{-i\hbar^{-1}E(\vec{R}_{N-1})\Delta t_{N-1}} e^{-A_\mu(\vec{R}_{N-2})\Delta t_{N-2}^\mu} \dots \\ &\dots e^{-A_\mu(\vec{R}_1)\Delta t_1^\mu} e^{-i\hbar^{-1}E(\vec{R}_1)\Delta t_1} e^{-A_\mu(\vec{R}_0)\Delta t_0^\mu} e^{-i\hbar^{-1}E(\vec{R}_0)\Delta t_0} \end{aligned} \quad (7.23)$$

Les effets dynamiques sont dus à cette alternance (donc à la non-commutativité de A et E), c'est à dire aux commutateurs $[E, A]$. En utilisant la formule Baker-Campbell-Hausdorff à l'ordre 2, on a

$$e^{-i\hbar^{-1}E(t_1)\Delta t_1} e^{-A(t_0)\Delta t_0} e^{-i\hbar^{-1}E(\vec{R}_0)\Delta t_0} \sim e^{i\hbar^{-1}[E(t_1), A(t_0)]\Delta t_0\Delta t_1} e^{-A(t_0)\Delta t_0} e^{-i\hbar^{-1}E(t_1)\Delta t_1} e^{-i\hbar^{-1}E(\vec{R}_0)\Delta t_0} \quad (7.24)$$

d'où

$$\begin{aligned} &\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-A(t_i)\Delta t_i} e^{-i\hbar^{-1}E(t_i)\Delta t_i} \\ &\sim \left(\prod_{0 \leq i < j \leq N} e^{i\hbar^{-1}[E(t_j), A(t_i)]\Delta t_i\Delta t_j} \right) \left(\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-A(t_i)\Delta t_i} \right) \left(\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-i\hbar^{-1}E(t_i)\Delta t_i} \right) \end{aligned} \quad (7.25)$$

Notons enfin, que numériquement, ne disposant pas des dérivées, dans un formalisme purement discret, on définit le potentiel de jauge discret comme $A(t_i) \equiv \frac{I_M - T^\dagger(t_{i+1})T(t_i)}{\Delta t_i}$. On rappelle encore que pour un Hamiltonien en escalier, la formule est exacte (en posant que le symbole $e^{-A(t_i)\Delta t_i}$ n'est pas, pour la définition qu'on vient de donner de A , l'exponentielle de la matrice A , mais $e^{-A(t_i)\Delta t_i} = I_M - A(t_i)\Delta t_i$).

7.1.2 Invariance par rapport aux permutations d'états

Nous avons déjà à deux reprises évoqué le fait que le système de cartes locales avait une grande importance, et que l'atlas minimum admissible, était porteur de l'information topologique sur le fibré adiabatique. Nous avons vu que pour garantir certaines conventions de suivi des états au niveau des croisements, il fallait introduire des permutations d'états au passage d'une carte à l'autre. De plus en utilisant un programme de diagonalisation pour calculer les vecteurs propres,

¹on donne ici la condition idéale, en pratique, on utilise une condition moins forte, qui sera introduite dans la suite de ce chapitre

la convention d'ordre des vecteurs propres n'est pas nécessairement maîtrisée. Le programme peut induire un système de cartes locales très complexe (non minimal), avec des changements fréquents de conventions. Un chemin \mathcal{C} discrétisé dans X , peut rencontrer un grand nombre de changements de carte, et donc un grand nombre de permutations d'états. On connaît le comportement de la forme continue du transport sous ces permutations (qui ne sont que des changements de jauge), mais on serait en droit de craindre un comportement chaotique du transport discrétisé. En fait, on peut prouver qu'il n'y a aucun effet néfaste provoqué sur la fonction d'onde pour la formule de transport discret.

Preuve :

Soit $(|a, t\rangle)_{a=1, \dots, M}$ la base de l'espace actif adiabatique caractérisée par un ordre spécifique, que l'on appellera l'ordre de référence (si on rencontre des croisements, un tel ordre est tout à fait arbitraire). Soit D la représentation du groupe de permutation S_M sur l'espace actif, définie par

$$\forall \sigma \in S_M \quad D(\sigma)|a, t\rangle = |\sigma(a), t\rangle \quad (7.26)$$

Soit $\forall i = 1, \dots, N$, $\sigma_i \in S_M$ la permutation aléatoire des états intervenant à l'instant t_i par rapport à l'ordre de référence, et induite par un choix arbitraire de l'ordre des vecteurs propres instantanés en t_i par le programme de diagonalisation. Soit $\tilde{T}(t_i)$ la matrice des vecteurs propres après permutations, et $T(t_i)$ la matrice des vecteurs propres dans l'ordre de référence. Il est clair que

$$\tilde{T}(t_i) = T(t_i)D(\sigma_i) \quad (7.27)$$

De même on a $\tilde{E}(t_i) = D(\sigma_i)^{-1}E(t_i)D(\sigma_i)$, on en conclut que

$$\begin{aligned} & \mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} \tilde{T}^\dagger(t_{i+1})\tilde{T}(t_i)e^{-i\hbar^{-1}\tilde{E}(t_i)\Delta t_i} \\ &= \tilde{T}^\dagger(t_N)\tilde{T}(t_{N-1})e^{-i\hbar\tilde{E}(t_{N-1})\Delta t_{N-1}}\tilde{T}^\dagger(t_{N-1})\tilde{T}(t_{N-2})e^{-i\hbar\tilde{E}(t_{N-2})\Delta t_{N-2}} \dots \\ & \quad \dots \tilde{T}^\dagger(t_1)\tilde{T}(t_0)e^{-i\hbar\tilde{E}(t_0)\Delta t_{N-1}} \end{aligned} \quad (7.28)$$

$$\begin{aligned} &= D(\sigma_N)^{-1}T^\dagger(t_N)T(t_{N-1})D(\sigma_{N-1})D(\sigma_{N-1})^{-1}e^{-i\hbar E(t_{N-1})\Delta t_{N-1}}D(\sigma_{N-1}) \dots \\ & \quad \dots D(\sigma_1)^{-1}T^\dagger(t_1)T(t_0)D(\sigma_0)D(\sigma_0)^{-1}e^{-i\hbar E(t_0)\Delta t_{N-1}}D(\sigma_0) \end{aligned} \quad (7.29)$$

$$= D(\sigma_N)\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} T^\dagger(t_{i+1})T(t_i)e^{-i\hbar^{-1}E(t_i)\Delta t_i} D(\sigma_0) \quad (7.30)$$

■

7.2 Théorie de jauge sur réseaux et géométrie discrète du transport adiabatique

Nous voulons à présent traduire la géométrie différentielle de \mathcal{M} , utilisée pour décrire la théorie de jauge adiabatique (locale), en une géométrie discrète de X . La façon de procéder consiste à utiliser les liens entre la cohomologie de Rham, la cohomologie de Čech et la cohomologie simplicielle, donnés par le principe de de Rham (voir annexe C). On ne considère pour l'instant que la discrétisation du calcul différentiel, la géométrie locale du fibré adiabatique. La géométrie globale (le combinatoire des cartes) et donc la simulation numérique de la topologie du fibré adiabatique sera examinée plus tard.

7.2.1 Théorie de jauge sur réseaux : discrétisation de \mathcal{M}

L'aspect géométrique du transport adiabatique est caractérisé par le fibré principal adiabatique $(P, \mathcal{M}, G, \pi_P)$ équipé du potentiel de jauge $A \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{g})$ et de la courbure $F \in \Omega^2(\mathcal{M}, \mathfrak{g})$. La structure algébrique décrivant la géométrie locale du fibré, est l'algèbre différentielle $(\Omega^*(\mathcal{M}, \mathfrak{g}), +, \wedge, d)$

(d désignant la différentielle extérieure de \mathcal{M}). Pour utiliser la formule de transport adiabatique discret, on a besoin d'une discrétisation. Soit X un ensemble de points $x \in \mathcal{M}$, tels que pour une constante fixée $\delta(X) \in \mathbb{R}^{+*}$, on a $\forall y \in \mathcal{M}, \exists x \in X$ tel que $\text{dist}(x, y) \leq \delta(X)$. Cette condition assure que X est une "approximation" de \mathcal{M} avec la précision $\delta(X)$. Le choix de $\delta(X)$, pas du réseau, est la caractéristique principale de X , du moins, relativement au choix de la distance sur \mathcal{M} . Un choix possible est $\text{dist}(x, y) = \sum_{\mu=1}^{\dim \mathcal{M}} \alpha_{\mu} |x^{\mu} - y^{\mu}|$, où α_{μ} est une constante de conversion dépendante de constantes fondamentales de la physique, et choisie de telle sorte que $\text{dist}(x, y)$ soit sans dimension. On rappelle en effet que les différentes "directions" de \mathcal{M} correspondent à des variables de contrôle, dont la nature physique est pour chacune différente. On qualifiera ce choix, de distance de contrôle (que l'on notera $\text{dist}_{\text{contr}}$), car elle est définie par rapport aux états du système classique de contrôle. Un choix plus judicieux est une distance par rapport aux propriétés physiques du système quantique contrôlé, c'est à dire la distance de Fubini-Study, $\text{dist}_{FS}(x, y) = \arccos(\det(T_x^{\dagger} T_y) \det(T_y^{\dagger} T_x))$, ou la distance cordale, $\text{dist}_{ch}(x, y) = \sqrt{2} \sqrt{M - \text{tr}(T_x^{\dagger} T_y T_y^{\dagger} T_x)}$. Le choix de la distance de Fubini-Study est sans doute le plus approprié (car plus proche des propriétés quantiques du système dynamique). T_x dans les expressions précédentes est la matrice des vecteurs propres au point $x \in X \subset \mathcal{M}$. Les points de X peuvent être considérés comme des vertexes, et donc X peut être considéré comme un complexe simpliciel. Les vertexes de X sont donc $\Delta_0 X = \{x \in X\}$, les 1-simplexes sont $\Delta_1 X = \{\langle x, y \rangle, x, y \in X\}$ c'est à dire les arrêtes orientées du réseau X , les 2-simplexes $\Delta_2 X$, sont les faces orientées du réseau X , les 3-simplexes les mailles orientées, etc... X étant considéré comme un réseau "triangulaire" (les faces sont des triangles et les mailles des tétraèdres). À tout x de X , on associe un ouvert U_x , voisinage de x , tel que $\mathcal{A} = \{U_x\}_{x \in X}$ constitue un atlas de \mathcal{M} et tel que pour tout plus proche voisin de $x, y \in X, U_y \cap U_x \neq \emptyset$, et par contre pour y non plus proche voisin de $x, U_y \cap U_x = \emptyset$. x peut alors être considéré comme le point de base de U_x . La limite $\delta(X) \rightarrow 0$ est alors équivalente à la limite du raffinement de l'atlas \mathcal{A} (qui pour une trajectoire discrétisée sur X par la partition \mathcal{P}_N , correspond à $\lim_{N \rightarrow \infty} \delta(\mathcal{P}_N) = 0$). La discrétisation de la géométrie locale, est naturellement donnée par l'algèbre différentielle ($C^*(X, \mathfrak{g}), +, \cup, \delta$) où

$$C^m(X, \mathfrak{g}) = \{\sigma \in \mathfrak{g}^{\Delta_{n+1} X} | \forall i \neq j, \sigma_{x_0, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_n} = -\sigma_{x_0, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_n}\} \quad (7.31)$$

ensemble des n -cochaînes de Čech est l'équivalent discret des n -formes différentielles $\Omega^n(\mathcal{M}, \mathfrak{g})$. L'opérateur de cobord δ (équivalent de d) et le cup-produit \cup (équivalent de \wedge) sont donnés par

$$\forall \omega \in C^m(X, \mathfrak{g}), \quad (\delta \omega)_{x_0, \dots, x_{n+1}} = \sum_{i=0}^{n+1} (-1)^i \omega_{x_0, \dots, \hat{x}_i, \dots, x_n} \quad (7.32)$$

le symbole \hat{x}_i signifiant "privé de x_i ",

$$\forall \omega \in C^p(X, \mathfrak{g}), \eta \in C^q(X, \mathfrak{g})$$

$$(\omega \cup \eta)_{x_0, \dots, x_{p+q}} = \frac{1}{(p+1)!(q+1)!} \sum_{\sigma \in S_{q+p+1}} (-1)^{\sigma} \left[\omega_{x_{\sigma(0)}, \dots, x_{\sigma(p)}}, \eta_{x_{\sigma(p)}, \dots, x_{\sigma(p+q)}} \right] \quad (7.33)$$

La discrétisation d'une forme différentielle $B \in \Omega^n(\mathcal{M}, \mathfrak{g})$ est donnée par l'application de de Rham

$$\check{B}_{x_0, \dots, x_n} = R_{\mathcal{A}}(B)_{x_0, \dots, x_n} = \int_{\langle x_0, \dots, x_n \rangle} B \quad (7.34)$$

Les équivalences entre les calculs différentiel et discret viennent du fait que $\forall B \in \Omega^n(\mathcal{M}, \mathfrak{g})$ on a

$$(\delta \check{B})_{x_0, \dots, x_{n+1}} = \int_{\langle x_0, \dots, x_{n+1} \rangle} dB \quad (7.35)$$

c'est à dire que l'action de δ est rigoureusement égale à l'intégration sur un polytope de X , de l'action de d . Par contre \cup ne fait qu'approcher \wedge à la limite $\delta(X) \rightarrow 0 : \forall B, C \in \Omega^*(\mathcal{M}, \mathfrak{g})$

$$\lim_{\mathcal{A} \downarrow} W_{\mathcal{A}}(R_{\mathcal{A}}(B) \cup R_{\mathcal{A}}(C)) = A \wedge B \quad (7.36)$$

la limite étant la limite inductive des raffinements de l'atlas dans la topologie d'une norme L^2 , $W_{\mathcal{A}}$ est l'application de Whitney (cf annexe C). Notons par ailleurs, que les deux algèbres différentielles sont liées par le fait qu'à la limite du raffinement de l'atlas, leurs groupes de cohomologie respectifs sont isomorphes (cf. annexe C).

Le nouveau fibré principal adiabatique dans la version discrétisée est alors $\mathcal{Y} = (Y, X, G, \pi_Y)$ où $Y = \bigcup_{x \in X} \pi_P^{-1}(x) \subset P$, et $\pi_Y = \pi_{P|Y}$. Le potentiel de jauge discret est alors donné par

$$\check{A}_{xy} = \int_{\langle xy \rangle} A_{\mu} dR^{\mu} \in C^1(X, \mathfrak{g}) \quad (7.37)$$

la courbure discrète est donnée par l'équation de structure de Cartan sur réseau

$$\check{F} = \delta \check{A} + \check{A} \cup \check{A} = \delta \check{A} + \frac{1}{2}[\check{A}, \check{A}] \in C^2(X, \mathfrak{g}) \quad (7.38)$$

d'autre part², si $\delta(X) \in \mathcal{V}(0)$, on a

$$\check{F}_{xyz} \sim \int_{\langle xyz \rangle} F = \int_{\langle xyz \rangle} dA + A \wedge A \quad (7.39)$$

Il est important de noter que \check{A} est une fonction d'arête et que \check{F} est une fonction de facette. Si $\dim \mathcal{M} = 2$ et si $G = U(1)$, \check{A}_{xy} est la circulation du potentiel magnétique le long du segment de droite joignant x et y , et \check{F}_{xyz} est le flux du champ magnétique à travers l'immersion du triangle $\langle xyz \rangle$ dans l'espace universel généralisé.

Nous avons une alternative à cette description de la théorie des champs sur réseau. Soit $f_x = \pi_Y^{-1}(x)$ la fibre au dessus de x . On peut considérer $e^{\check{A}_{xy}}$ comme une application $f_{xy} : f_y \rightarrow f_x$ par

$$f_{xy} : f_y \xrightarrow{\chi_y} G \xrightarrow{e^{\check{A}_{xy}}} G \xrightarrow{\chi_x^{-1}} f_x \quad (7.40)$$

où χ_x est le difféomorphisme de fibre de f_x et R l'action à droite de G sur lui-même induite par la loi de groupe. f_{xy} apparaît donc comme le passage d'une fibre à l'autre, et donc bien comme la donnée de la connexion discrète. $f_{xy} \in C^1(X, G)$ est une cochaîne de Čech non-abélienne (cf. annexe C). On a alors le nouvel opérateur de cobord δ_G , défini par $\forall g \in C^n(X, G)$

$$(\delta_G g)_{x_0, \dots, x_{n+1}} = g_{x_1, \dots, x_{n+1}} g_{x_0, x_2, \dots, x_{n+1}}^{-1} \cdots g_{x_0, \dots, \hat{x}_i, \dots, x_n}^{(-1)^i} \cdots g_{x_0, \dots, x_n}^{(-1)^{n+1}} \quad (7.41)$$

les produits et les inversions étant par rapport à la structure de groupe de G . La "courbure" $c \in C^2(X, G)$ est donnée par l'équation de structure de Cartan discrète :

$$c = \delta_G f \quad (7.42)$$

c'est à dire

$$c_{xyz} = f_{yz} f_{xz}^{-1} f_{xy} = f_{yz} f_{zx} f_{xy} \quad (7.43)$$

²attention dans ces notations $\check{F} = \delta \check{A} + \check{A} \cup \check{A} \neq R_{\mathcal{A}}(F)!$

c_{xyz} est donc l'holonomie de la boucle $(y, z, x, y) = \partial\langle xyz \rangle$. On peut voir que $\delta_G f$ correspond bien à l'équation de Cartan sur réseau, si $\delta(X) \in \mathcal{V}(0)$, on a $f_{xy} \sim 1 + \check{A}_{xy}$. Or en utilisant au second ordre la formule de Baker-Campbell-Hausdorff, on a

$$c_{xyz} = f_{yz} f_{zx} f_{xy} \quad (7.44)$$

$$= e^{\check{A}_{yz}} e^{\check{A}_{zx}} e^{\check{A}_{xy}} \quad (7.45)$$

$$= e^{\check{A}_{yz} + \check{A}_{zx} + \check{A}_{xy} + \frac{1}{2}[\check{A}_{yz}, \check{A}_{zx}] + \frac{1}{2}[\check{A}_{yz}, \check{A}_{xy}] + \frac{1}{2}[\check{A}_{zx}, \check{A}_{xy}] + \dots} \quad (7.46)$$

$$\sim 1 + \check{A}_{yz} + \check{A}_{zx} + \check{A}_{xy} + \frac{1}{2}[\check{A}_{yz}, \check{A}_{zx}] + \frac{1}{2}[\check{A}_{yz}, \check{A}_{xy}] + \frac{1}{2}[\check{A}_{zx}, \check{A}_{xy}] \quad (7.47)$$

$$\sim 1 + (\delta\check{A})_{xyz} + (\check{A} \cup \check{A})_{xyz} \quad (7.48)$$

on a bien $\check{F}_{xyz} \sim c_{xyz} - 1$. De manière similaire, on a l'identité de Bianchi sur réseau

$$\delta\check{F} + \check{A} \cup \check{F} - \check{F} \cup \check{A} = 0 \quad (7.49)$$

et l'identité de Bianchi discrète

$$c_{ywx} c_{zwy} c_{xwz} = f_{wx} c_{zxy} f_{xw} \quad (7.50)$$

On notera que dans les cochaînes non-abéliennes, il n'y pas besoin de cup-produit, la non-abélianité est contenue dans le produit de groupe (et donc aussi dans δ_G qui est plus l'analogue de la différentielle covariante que de la différentielle extérieure). Notons que l'on fait moins d'approximations en définissant la connexion discrète par

$$f_{xy} = \mathbb{T}e^{-\int_{\langle yx \rangle} A} \quad (7.51)$$

c'est à dire comme le relèvement horizontal de $\langle yx \rangle$ dans le fibré P . Enfin, dans le cadre du transport adiabatique discret, on commettra moins d'approximations encore, en posant comme définition de la connexion discrète

$$f_{xy} = T_x^\dagger T_y \quad (7.52)$$

Rappelons que dans ce cas, la formule de transport est exacte pour un Hamiltonien en escalier, c'est à dire pour un chemin qui est un polytope de X . La courbure discrète $c - 1 = \delta_G f - 1$ calculée ainsi sera une bonne approximation de la courbure adiabatique. Notons que l'on a besoin d'une précision maximale pour calculer l'opérateur d'holonomie, qui va nous donner la fonction d'onde du système dynamique quantique, alors que pour les champs adiabatiques, on n'a besoin que d'une information qualitative (où se trouvent les monopôles, quelle est l'intensité du champ magnétique,...), comme on l'a vu au chapitre 5. On n'a donc pas besoin d'une grande précision sur ce calcul. Notons enfin, que dans le but d'étudier finement les couplages entre états de l'espace actif, on peut appliquer ce formalisme aux sous-espaces actifs (avec T associée aux vecteurs du sous-espace actif).

À partir de ce point, f_{xy} et \check{A}_{xy} désigneront toujours $T_x^\dagger T_y$ et $1 - f_{xy}$ puisque ce sont les quantités qui seront effectivement disponibles dans un programme informatique.

7.2.2 Discrétisation et transport adiabatique

Dans les conditions énoncées plus haut, la formule de transport adiabatique discrétisée est exacte pour des variations des paramètres de contrôle, formant un polytope de X (cela même si le pas $\delta(X)$ est très grand). Mais dans la réalité, avoir une évolution des paramètres de contrôle qui ne soit pas continue, n'est pas le plus souvent réalisable. La condition d'un chemin de classe \mathcal{C}^∞ est beaucoup plus physique. Dans ce cas il faut impérativement que $\delta(X)$ soit suffisamment petit. On peut alors appliquer la méthode du réseau, qui est la suivante :

On choisit un réseau X de discrétisation de \mathcal{M} et on calcule les matrices $T_x \forall x \in X$. Le chemin

lisse \mathcal{C} suivi durant la dynamique est défini comme une courbe paramétrée $\vec{R}(t)$ avec $t \in [0, T]$, ce qui définit un chemin \mathcal{C} dans $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$ (graphe d'une section du fibré de base du composite spatio-temporel). La discrétisation de \mathcal{C} consiste en un polytope Γ_N de X et une partition \mathcal{P}_N de $[0, T]$:

$$\Gamma_N = (x_0, x_1, \dots, x_N) \quad \mathcal{P}_N = (t_0, \dots, t_N) \quad (7.53)$$

tel que $\forall i < N$, x_{i+1} soit l'un des plus proches voisins de x_i et tel que

$$\forall i = 0, \dots, N \quad \text{dist}(\vec{R}(t_i), x_i) \leq \delta(X) \quad (7.54)$$

$\delta(X)$ étant le pas de X et dist étant la distance choisie pour caractériser la réseau. On a alors la formule de transport, directement applicable dans un programme numérique : $\forall j \leq N$

$$\psi(t_j) = \sum_{b=1}^M \left[\mathbb{T} \prod_{i=1}^{j-1} f_{x_{i+1}, x_i} e^{-i\hbar^{-1} E(x_i) \Delta t_i} \right]_b |a, x_j\rangle \quad (7.55)$$

La seule approximation faite, est alors le remplacement du chemin lisse \mathcal{C} par le polytope Γ_N . On remarquera que c'est bien la connexion f qui permet de passer d'un point à l'autre par une arête, alors que la phase dynamique est un objet apparaissant sur les nœuds. Il est très important de noter, que ce sont les matrices de recouvrement entre plus proches voisins, $f_{xy} = T_x^\dagger T_y$, qui apparaissent dans la formule de transport comme pour le calcul des champs adiabatiques. Dans un programme informatique, on peut donc se contenter de stocker f_{xy} entre chaque couple de plus proches voisins du réseau et pas les matrices T_x . Ceci est particulièrement important car f_{xy} est une matrice $M \times M$, avec M , taille de l'espace actif, plutôt petit. Alors que T_x est une matrice $n \times M$, où n est la taille de l'espace vectoriel qui représente numériquement l'espace de Hilbert total du système. Pour un problème moléculaire, où \mathcal{H} est de dimension infinie, et où surtout n doit être très grand pour avoir une bonne description, le stockage des matrices T serait une opération extrêmement coûteuse en mémoire et en pratique impossible à réaliser.

7.3 Réseaux non-uniformes

7.3.1 Procédure numérique pour calculer un réseau 2D

On a évoqué dans l'introduction, que pour décrire les variations brutales de la fonction d'onde, on a besoin d'un réseau non-uniforme, avec des mailles fines au voisinage des croisements et des mailles lâches dans les régions vides. On va donner ici, un sens précis à ces considérations générales. Les termes mailles fines ou mailles lâches se réfèrent à la distance de contrôle. On dit d'une maille régulière ayant pour l'une de ses arêtes $\langle x, y \rangle$, qu'elle est plus fine qu'une maille régulière ayant pour l'une de ses arêtes $\langle z, t \rangle$ si

$$\text{dist}_{\text{contr}}(x, y) < \text{dist}_{\text{contr}}(z, t) \quad (7.56)$$

On considère la distance de contrôle car c'est la seule qui est disponible en début de calcul informatique. En effet, les distances quantiques, nécessitent que l'on connaisse les vecteurs propres (l'espace actif) en chaque point. Or avant la construction du réseau, ce n'est pas le cas. D'autre part, on ne connaît pas initialement la position des monopôles, par contre, une fois une cellule $\langle xyz \rangle$ créée (par créée, on entend que les matrices f_{xy} , f_{yz} et f_{zx} sont connues), on peut calculer le flux maximum des champs magnétiques par rapport à tous les espaces parallèles :

$$\phi_{xyz} = \max_{a=1, \dots, M} \left| \int_{\langle xyz \rangle} F_a \right| \simeq \max_{a=1, \dots, M} |(\delta \check{A}_{aa})_{xyz}| = \max_{a=1, \dots, M} \left| [\check{A}_{yz}]_{aa} - [\check{A}_{xz}]_{aa} + [\check{A}_{xy}]_{aa} \right| \quad (7.57)$$

(aa sont des indices matriciels, xyz sont des indices simpliciels). On peut aussi considérer d'autres critères que ϕ , dépendant des éléments de matrices de c_{xyz} , comme on le verra dans le paragraphe suivant. Pour obtenir un réseau non-uniforme (par rapport à la distance de contrôle), on peut procéder comme suit (on suppose $\dim \mathcal{M} = 2$). Premièrement on fixe $\delta(X)$ et un paramètre ϕ_m qui sera le flux minimal sur une cellule de taille $\delta(X)$, seuil en dessus duquel, on considère que l'influence des monopôles magnétiques n'est plus négligeable (seuil à partir duquel l'intensité des transitions non-adiabatiques nécessite de resserrer le réseau). Pour des raisons de convenance, on choisit un réseau à mailles rectangulaires, remarquant qu'une facette rectangulaire est un complexe de deux facettes triangulaires (deux 2-simplexes).

- i. Initialement, on construit un réseau primitif d'arêtes de tailles constantes, $\delta(X)$, au sens de la distance de contrôle, et on considère la première cellule de ce réseau primaire.
- ii. On calcule T pour les quatre vertexes de la cellule, et on en déduit la connexion discrète f pour les quatre 1-simplexes de la cellule.
- iii. On calcule le maximum sur les espaces parallèles, du champ magnétique adiabatique de la cellule : ϕ .
- iv. Si $\phi > \phi_m$ alors on divise la cellule en quatre sous-cellules plus petites, sinon on passe au point (vi).
- v. On retourne au point (ii) pour chacune des quatre sous-cellules, jusqu'à atteindre éventuellement un ordre maximum de subdivision N_m prédéterminé.
- vi. On retourne au point (ii) pour la cellule suivante du réseau primitif.

Numériquement, l'aspect non-homogène de réseau crée par dichotomie, nécessite de gérer ce réseau par des objets "point" qui, outre les coordonnées du vertexe dans la variété \mathcal{M} , doit être composé de pointeurs vers les points plus proches voisins, le nombre de plus proches voisins n'étant pas constant d'un point à l'autre. Le calcul du réseau est une longue opération, car pour chaque vertexe, on doit diagonaliser H (pour obtenir f et E). Néanmoins, cette opération n'est réalisée qu'une seule fois, et le résultat peut en être sauvegardé. On peut alors tester tous les chemins possibles (du moins tous les couples $(\Gamma_N, \mathcal{P}_N)$), par la formule de transport discret, qui ne nécessite qu'un temps de calcul infime (produit de $2N$ matrices $M \times M$). Le calcul du réseau et de la connexion discrète f , en utilisant le fait que la phase géométrique est indépendante du temps écoulé, est en quelque sorte le calcul anticipé des aspects communs à toutes les dynamiques du système.

L'algorithme résultant a trois paramètres ajustables : $\delta(X)$, ϕ_m et N_m . $\delta(X)$ la longueur des arêtes du réseau primitif, doit être suffisamment petite pour avoir une précision suffisante dans les régions sans monopôle mais suffisamment grande pour avoir un temps de calcul le plus faible possible. ϕ_m , la sensibilité au champ magnétique, doit être suffisamment petite pour pouvoir détecter les champs monopôlares impliqués dans la dynamique du système, mais suffisamment grande pour ne pas prendre en considération les champs résiduels des régions vides. N_m , la résolution du réseau, doit être suffisamment grande pour avoir une bonne précision dans le voisinage des monopôles, mais suffisamment petite pour ne pas avoir de subdivisions non-nécessaires alourdissant le temps le calcul sans apporter d'améliorations significatives à la précision des calculs. Une illustration de la construction d'un réseau non-uniforme est donnée figure 7.1

7.3.2 Signification de la non-uniformité

On a considéré dans le paragraphe précédent, comme critère de subdivision du réseau non-uniforme au sens de $\text{dist}_{\text{contr}}$, le champ magnétique abélien maximum \vec{F}_a (associé à un seul état). Dans un premier temps, on ne considère donc qu'un seul état a . Ainsi, le flux à travers une cellule

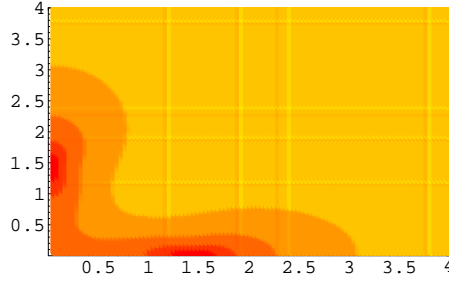


FIG. 7.1 – Densité point du réseau X de discrétisation dans la variété \mathcal{M} , dans l'exemple de l'atome à 3 niveaux dans l'effet STIRAP traité section 5.3. La densité de points suit l'intensité des champs adiabatiques. La région jaune correspond à une densité de 1 point par $10^{-4}ua^2$, l'orange clair à 2 points par $10^{-4}ua^2$, l'orange foncé à 6 points par $10^{-4}ua^2$, le rouge clair à 22 points par $10^{-4}ua^2$ et enfin le rouge foncé à 80 points par $10^{-4}ua^2$. L'unité arbitraire ua (avec laquelle est graduée la figure), est une unité sans dimension.

(carrée) $[xyzt]$ est

$$\phi([xyzt]) = \check{F}_a[xyzt] \quad (7.58)$$

$$= |[\check{A}_{xy}]_{aa} + [\check{A}_{yz}]_{aa} + [\check{A}_{zt}]_{aa} + [\check{A}_{tx}]_{aa}| \quad (7.59)$$

$$= |1 - f_{xy,aa} + 1 - f_{yz,aa} + 1 - f_{zt,aa} + 1 - f_{tx,aa}| \quad (7.60)$$

On subdivise la cellule si $\phi([xyzt]) > \phi_m$. Un autre choix de critère possible, consiste à considérer

$$\ell_{ch}(xyzt) = \sqrt{2} \left(\sqrt{1 - |f_{xy,aa}|^2} + \sqrt{1 - |f_{yz,aa}|^2} + \sqrt{1 - |f_{zt,aa}|^2} + \sqrt{1 - |f_{tx,aa}|^2} \right) \quad (7.61)$$

$$= \text{dist}_{ch}(x, y) + \text{dist}_{ch}(y, z) + \text{dist}_{ch}(z, t) + \text{dist}_{ch}(t, x) \quad (7.62)$$

On subdivise la cellule si la “longueur cordale” du bord de celle-ci, $\ell_{ch}(xyzt)$, dépasse ϕ_m . Avec ce critère, la méthode de construction du réseau non-uniforme par rapport à la distance de contrôle, revient à construire un réseau (quasiment) uniforme par rapport à la distance quantique cordale. Or la distance cordale est la distance induite par la métrique Euclidienne de l'espace universel généralisé. Le critère revient donc à construire un réseau dont l'immersion dans l'espace universel généralisé est uniforme. De même, on peut faire le choix du critère suivant

$$\ell_{FS}(xyzt) = \arccos |f_{xy,aa}|^2 + \arccos |f_{yz,aa}|^2 + \arccos |f_{zt,aa}|^2 + \arccos |f_{tx,aa}|^2 \quad (7.63)$$

$$= \text{dist}_{FS}(x, y) + \text{dist}_{FS}(y, z) + \text{dist}_{FS}(z, t) + \text{dist}_{FS}(t, x) \quad (7.64)$$

$$= \oint_{(xyzt)} \sqrt{\eta_{\mu\nu} \dot{\gamma}^\mu(t) \dot{\gamma}^\nu(t)} dt \quad (7.65)$$

où η est la métrique de Fubini-Study de \mathcal{M} (pull-back de la métrique de $\mathbb{C}P^{n-1}$), et γ est la paramétrisation dans \mathcal{M} du chemin fermé $(xyzt) = \partial[xyzt]$. Ce qui revient à construire un réseau uniforme par rapport à la distance quantique de Fubini-Study, c'est à dire un réseau uniforme sur la variété universelle équipée de la métrique quantique de Fubini-Study. Dans l'image “trou noir” des croisements, le pull-back de cette métrique sur \mathcal{M} , est la métrique “gravitationnelle”. Le réseau avec ce critère, est donc uniforme par rapport à la courbure scalaire de l'espace (qui est elle même associée à la 2-forme de courbure, qui dans notre modèle, n'est autre que F_a). Au final, les 3 critères sont plus ou moins équivalents, ϕ est associé au champ magnétique, ℓ_{ch} à l'immersion de la variété de contrôle et ℓ_{FS} à la courbure gravitationnelle. Mais comme on l'a vu dans les chapitres précédents,

ces quantités sont toutes liées au même phénomène physique, les couplages non-adiabatiques et les croisements d'états. En considérant l'aspect matriciel des champs, les trois critères sont alors

$$\phi([xyzt]) = \|4 - f_{xy} - f_{yz} - f_{zx} - f_{xt}\|_\infty \quad (7.66)$$

$$\ell_{ch}(xyzt) = \sqrt{2} \left(\sqrt{M - \text{tr}(f_{xy}f_{yx})} + \sqrt{M - \text{tr}(f_{yz}f_{zy})} + \sqrt{M - \text{tr}(f_{zt}f_{tz})} + \sqrt{M - \text{tr}(f_{tx}f_{xt})} \right) \quad (7.67)$$

$$\ell_{FS}(xyzt) = \arccos |\det f_{xy}|^2 + \arccos |\det f_{yz}|^2 + \arccos |\det f_{zt}|^2 + \arccos |\det f_{tx}|^2 \quad (7.68)$$

Le critère de Fubini-Study est le plus physique et donc le mieux adapté au problème, mais aussi le moins pratique (il faut calculer numériquement des déterminants). Mais l'usage du critère magnétique ou du critère "distance cordale", n'a pas de réelle incidence sur le résultat numérique (le choix des paramètres $\delta(X)$, $\phi_m N_m$ est seulement plus délicat qu'avec le critère de Fubini-Study).

Dans les régions vides de \mathcal{M} où les couplages non-adiabatiques sont négligeables, (où les états sont suffisamment loin les uns des autres), une variation de chemin n'a que peu d'incidence sur le résultat si l'amplitude de la variation des paramètres est faible, au sens où la longueur dans la métrique de Fubini-Study de la déformation est faible. N'induisant pratiquement pas de changement dans l'espace actif, une telle variation peut être gommée. Un pas de discrétisation plus grand que l'amplitude de cette variation, est donc suffisant. Au contraire, dans les régions à forts couplages adiabatiques, une petite variation des paramètres de contrôle (au sens de la distance de contrôle), entraîne un changement important dans l'espace actif. Il est donc nécessaire dans ces régions, d'avoir un pas suffisamment petit pour bien décrire la courbe.

Nous avons basé le modèle géométrique sur l'hypothèse de l'adiabaticité entre l'espace actif et son complémentaire. C'est à dire sur le fait qu'il n'y avait pas de transition de l'espace actif vers l'extérieur. Mais ce régime n'est satisfait que jusqu'à une certaine vitesse des paramètres de contrôle (celle-ci peut être beaucoup plus rapide que pour un régime adiabatique pur, mais est limitée tout de même). Cette vitesse devant être lente devant le temps propre quantique, temps nécessaire à une transition de l'espace actif vers l'extérieur. Le critère d'adiabaticité, couramment utilisé dans la littérature, s'écrit

$$\max_{a=1,\dots,M;\kappa=M+1,\dots,n} \frac{\langle a, \vec{R}(t) | \frac{dH}{dt} | \kappa, \vec{R}(t) \rangle}{|E_a(\vec{R}(t)) - E_\kappa(\vec{R}(t))|} < \epsilon \quad (7.69)$$

où ϵ est un petit paramètre positif et où $\{|\kappa, \vec{R}\rangle\}_{\kappa=M+1,\dots,n}$ sont les vecteurs propres de $H(\vec{R})$ externes à l'espace actif. Considérons $F = dA + A \wedge A$ le champ adiabatique associé à tout l'espace actif. En suivant un calcul qui a déjà été mené, on peut prouver que

$$F_{ab} = \sum_{\kappa=M+1}^n \frac{\langle a, \vec{R} | \partial_\mu H | \kappa, \vec{R} \rangle \langle \kappa, \vec{R} | \partial_\nu H | b, \vec{R} \rangle}{(E_a(\vec{R}) - E_\kappa(\vec{R}))(E_b(\vec{R}) - E_\kappa(\vec{R}))} dR^\mu \wedge dR^\nu \quad (7.70)$$

La condition d'adiabaticité conduit donc à :

$$\|F_{\mu\nu}\|_\infty \frac{dR^\mu}{dt} \frac{dR^\nu}{dt} < n\epsilon^2 \quad (7.71)$$

F mesurant l'intensité des transitions non-adiabatiques entre l'espace actif et l'extérieur, on peut adopter cette dernière relation comme nouvelle condition d'adiabaticité. On voit alors que la vitesse de variation des paramètres de contrôle, $\frac{d\vec{R}}{dt}$, peut être d'autant plus grande que $\|F_{\mu\nu}\|_\infty$ est

faible. La carte du champ adiabatique total, est donc d'une grande importance, puisque on peut la considérer comme la carte de prévision des vitesses de contrôle admissibles. Numériquement, c'est la quantité suivante qui va donner cette information pour chaque cellule $[xyzt]$:

$$\|c_{zxy}c_{txz} - I_M\|_\infty = \|f_{xy}f_{yz}f_{zt}f_{tx} - I_M\|_\infty \quad (7.72)$$

Notons que si un état externe venait à croiser un état de l'espace actif, alors $\|F_{\mu\nu}\|_\infty \rightarrow \infty$, et il est impossible de passer par le point de croisement sans transiter en dehors de l'espace actif. La formule de transport basée uniquement sur les états de l'espace actif devient alors fautive. Un tel état, non pris en compte dans la description, mais qui vient se coupler fortement avec les états de la description, sont appelés dans la littérature "états intrus" (*intruder states*). Dans notre image, un tel croisement est associé à un trou noir simple (pas un trou de ver), donc relié à aucun espace parallèle. Les passages par les régions actives du point de vue des états intrus devront impérativement être évités dans les simulations numériques basées sur la formule de transport adiabatique.

7.3.3 Lebesgue vs Riemann

Dans notre approche, c'est la discrétisation de l'espace de contrôle qui est première, la discrétisation du temps en dérivant. Ce qui est l'inverse du cheminement suivi usuellement. Pour l'utilisation numérique de la formule de transport adiabatique discrète, ceci est très important. Considérons le fibré de base du composite, $(S, \mathbb{R}, \mathcal{M}, \pi_S)$. Une dynamique particulière est une section locale de ce fibré, donc un élément de $\Gamma([0, T], S)$. Localement S est difféomorphe à $\mathbb{R} \times \mathcal{M}$, que l'on va considérer pour la suite. De plus, afin de simplifier la discussion, on se limitera à $\dim \mathcal{M} = 1$, sans importance pour la discussion qui va suivre. Une dynamique, se résume donc à une fonction V de $[0, T]$ vers \mathcal{M} . La voie standard vers la discrétisation, consiste à choisir une partition de $[0, T]$ adaptée à V , $\mathcal{P}_N = (t_0, \dots, t_N)$ et d'en déduire la discrétisation de \mathcal{M} via V , comme sur la figure 7.2.a. Par contre, si on change la fonction $V(t)$ en lui ajoutant une variation brutale sans changer de partition, la discrétisation de \mathcal{M} obtenue, n'est plus suffisante, cf figure 7.2.b. Si maintenant la discrétisation de \mathcal{M} est première, on obtient la partition de $[0, T]$ via V , figure 7.2.c, et cette fois, si on ajoute une variation brutale sans changer la discrétisation de \mathcal{M} , la partition de $[0, T]$ va s'adapter à la nouvelle fonction V , cf. figure 7.2.

La situation est similaire au problème de l'intégration numérique d'une fonction, où on a le choix entre une sommation de Riemann (partition de $[0, T]$ première) ou une sommation de Lebesgue (discrétisation de \mathcal{M} première). Le fait que la discrétisation de \mathcal{M} soit première, assure que la formule de transport discret, donne une estimation de la fonction d'onde suffisamment précise.

7.4 Simulation numérique de la topologie du fibré adiabatique

La topologie du fibré adiabatique a une grande importance pour l'analyse des propriétés physiques du système dynamique quantique. La position des croisements, l'amplitude des champs magnétiques (liée à la charge des monopôles, elle-même liée à la première classe de Chern du fibré), la manière dont est immergée la variété de contrôle dans l'espace universel généralisé, se retrouvent dans la topologie du réseau (à travers les zones où les mailles de celui-ci se resserrent). D'autre part, ces informations sont faciles à calculer numériquement, à travers le calcul de l'holonomie des mailles c , qui nous donne avec une bonne approximation le champ F . Mais comme on l'a déjà vu, la topologie globale, le combinatoire des cartes locales, joue un rôle important dans la physique du système à travers des effets du type chirping direct. La question est de savoir quel est le statut du système de cartes locales dans la version discrétisée, où on a déjà introduit un atlas de la variété qui est très fin, car chaque point du réseau X constitue un point de base d'une carte de l'atlas. De plus pour beaucoup de méthodes numériques de diagonalisation, on ne contrôle pas les conventions des vecteurs propres qui définissent le système de cartes locales. Pour traiter de ces questions, on

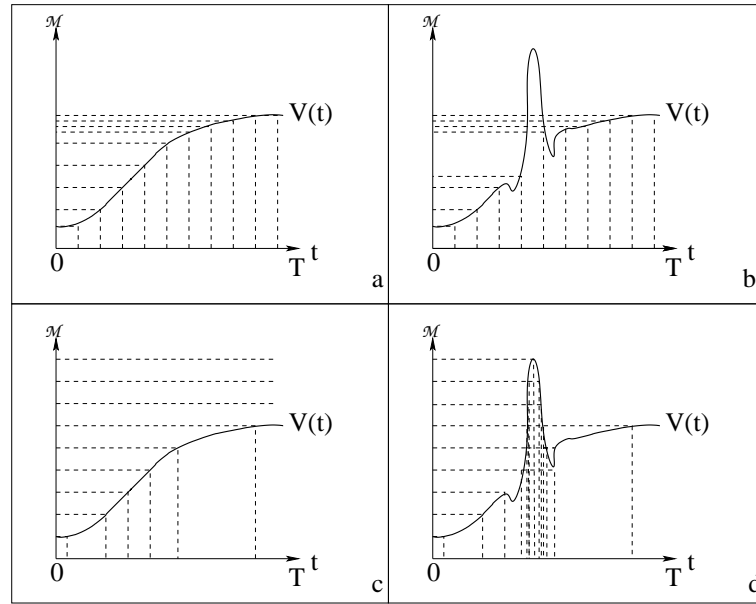


FIG. 7.2 – *Discrétisation de \mathcal{M} et partition de $[0, T]$, pour une fonction V à variations lentes (a et c) et une fonction V avec une variation brutale (b et d), avec comme première étape le partitionnement de $[0, T]$ (a et b) ou la discrétisation de \mathcal{M} (c et d).*

a besoin de revenir à la question de la cohomologie choisie pour modéliser l'électromagnétisme en présence de monopôle magnétique.

7.4.1 Cohomologies et topologie du fibré monopolaire

Nous revenons à présent au problème de la description de l'électromagnétisme en présence d'un monopôle magnétique. On rappelle que l'on se concentre sur l'espace de configuration S^2 , que l'on peut considérer comme un feuillet de \mathbb{R}^3 feuilleté par des sphères concentriques centrées sur le monopôle. Nous avons déjà vu que l'utilisation du complexe de de Rham $(\Omega^* S^2, d)$, modèle standard de l'électromagnétisme, posait des problèmes à cause des cordes de Dirac. En introduisant $\mathcal{A} = \{U^N, U^S\}$, un atlas minimal de S^2 , nous avons vu qu'un modèle beaucoup mieux adapté au problème des monopôles magnétiques, pouvait être déduit du double complexe de Mayer-Vietoris $(C^*(\mathcal{A}, \Omega^* S^2), d, \delta)$. d est l'opérateur du calcul différentiel et δ est l'opérateur de combinaison des cartes locales. Nous nous proposons ici, de donner une description de l'électromagnétisme avec un complexe simple, basé sur le principe de Mayer-Vietoris et le complexe de Čech-de Rham $(C_D^*(\mathcal{A}, S^2), D)$ qui décrit simultanément calculs différentiels et combinaisons des cartes locales (cf annexe C). Le complexe de Čech-de Rham, se déduit du complexe de Mayer-Vietoris de la façon suivante :

$$C_D^n(\mathcal{A}, S^2) = \bigoplus_{k=0}^n C^k(\mathcal{A}, \Omega^{n-k} S^2) \quad (7.73)$$

$$\forall \eta \in C^p(\mathcal{A}, \Omega^q S^2) \quad D\eta = \delta\eta + (-1)^p d\eta \quad (7.74)$$

Avec le potentiel de jauge du monopôle magnétique, $A \in C_D^1(\mathcal{A}, S^2)$, on trouve un nouveau champ

$$\mathfrak{F} = DA = dA + \delta A = F + g^{-1} dg \quad (7.75)$$

$g \in C^1(\mathcal{A}, \Omega^0 S^2)$ étant la fonction de transition du fibré monopolaire. On a $D\mathfrak{F} = 0$ et donc $\mathfrak{F} \in \mathcal{Z}_D^2(\mathcal{A}, S^2)$. Par le principe de Mayer-Vietoris (cf annexe C), on obtient la condition de quantification

de Dirac sous la forme

$$c_1 = \frac{i}{2\pi} [F]_d = \frac{i}{2\pi} [r(F)]_D = \frac{i}{2\pi} [\mathfrak{F}]_D \quad (7.76)$$

$[\cdot]_d$ désignant la classe de cohomologie de de Rham, $[\cdot]_D$ la classe de cohomologie de Čech-de Rham, et r est la restriction de S^2 à ses cartes locales. La dernière égalité dans l'expression précédente, est obtenue en utilisant le principe du zig-zag (cf. annexe C).

Le nouveau champ \mathfrak{F} a les propriétés suivantes :

$$\text{sur } U^N \quad \mathfrak{F}^{NN} = F \quad (7.77)$$

$$\text{sur } U^S \quad \mathfrak{F}^{SS} = F \quad (7.78)$$

$$\text{sur } U^N \cap U^S \quad \mathfrak{F}^{NS} = F + (g^{NS})^{-1} dg^{NS} = F - 2ig d\varphi \quad (7.79)$$

On voit donc, que le champ \mathfrak{F} ne diffère du champ F que par l'ajout dans $U^N \cap U^S$ d'un champ magnétique supplémentaire, qui dans le formalisme vectoriel s'écrit

$$\vec{B} = \frac{2g}{r \sin \theta} \vec{e}_\varphi \quad (7.80)$$

Alors que $\vec{F} = *F$ est un champ radial dans tout \mathbb{R}^3 , $\vec{B} = *(2gd\varphi)$ est un champ orthoradial qui tourne autour du monopôle et qui de plus, à la limite $\epsilon \rightarrow 0$ (ϵ est le paramètre permettant le recouvrement des cartes), n'existe que dans le plan Oxy . $*$ est l'opérateur de Hodge de l'espace Euclidien \mathbb{R}^3 . La composante orthoradiale de \mathfrak{F} n'est pas physique, puisque dépendante du choix de jauge (on peut faire tourner dans \mathbb{R}^3 , le plan dans lequel elle existe par un changement d'atlas). C'est en quelque sorte un dual des cordes de Dirac. Mais l'important avec ce champ, c'est qu'il n'existe que sur les lignes, les murs ou les régions de changement de carte. On va donc se servir de ce champ pour faire apparaître numériquement ces régions. De plus dans la pratique, c'est \mathfrak{F} que l'on saura calculer et pas F .

7.4.2 Une cohomologie de Čech non-antisymétrique

On considère à nouveau, un problème de transport adiabatique de variété de contrôle \mathcal{M} , dans laquelle on a défini un réseau X comme explicité dans les sections précédentes. On désigne par \mathcal{A} l'atlas de \mathcal{M} pour lequel les vertexes du complexe simpliciel X sont des points de base des cartes de \mathcal{A} . Il existe plusieurs conventions de vecteurs propres. Chaque point de X étant associé à une carte différente, la convention peut changer d'un point à l'autre. C'est ce qui arrive avec un réseau X calculé numériquement. La plupart des programmes de diagonalisation choisissant les conventions plus ou moins aléatoirement, il n'y aucune raison pour que des points voisins dans X aient la même convention. De plus cette non-maîtrise des conventions, fait qu'il n'y a pas moyen de savoir si des points sont ou non dans la même convention. Il est donc clair, que c'est dans une version discrète du complexe de Čech-de Rham que l'on va travailler et pas dans une version discrète du double complexe de Mayer-Vietoris, pour lequel il faudrait définir à l'avance le système de cartes et imposer des conventions cohérentes à l'intérieur de chacune. Ceci nécessiterait de connaître à l'avance, la topologie du fibré adiabatique, pour connaître le nombre minimum de cartes requises. On va donc développer ici, une version discrète du complexe de Čech-de Rham.

Dans un premier temps, on considère un atlas \mathcal{A} et un complexe simpliciel X , non-nécessairement corrélés. On considère l'application de restriction

$$r : \Omega^* \mathcal{M} \rightarrow \prod_{\alpha} \Omega^* U^\alpha = C^0(\mathcal{A}, \Omega^* \mathcal{M}) \quad (7.81)$$

et l'application de de Rham associée à X (X étant considéré comme un complexe associé à un autre atlas de \mathcal{M})

$$R_X : \Omega^* \mathcal{M} \rightarrow C_{AS}^*(X, \mathbb{R}) \quad (7.82)$$

On fait figurer explicitement par la notation “AS”, l’anti-symétrie des cochaînes de Čech. De plus, on introduit la restriction

$$\rho : C_{AS}^*(X, \mathbb{R}) \rightarrow \prod_{\alpha} C_{AS}^*(X \cap U^{\alpha}, \mathbb{R}) = C^0(\mathcal{A}, C_{AS}^*(X, \mathbb{R})) \quad (7.83)$$

et l’application locale du principe de de Rham : $\forall U \in \mathcal{A}$

$$R^U : \begin{array}{ccc} \Omega^q U & \rightarrow & C_{AS}^q(X \cap U, \mathbb{R}) \\ \omega & \mapsto & \tilde{\omega} : \Delta_q(X \cap U) \rightarrow \mathbb{R} \\ & & \sigma \mapsto \int_{\sigma} \omega \end{array} \quad (7.84)$$

On considère également, l’application $R^{\mathcal{A}} = \prod_{\alpha} R^{U^{\alpha}} : C^0(\mathcal{A}, \Omega^* \mathcal{M}) \rightarrow C^0(\mathcal{A}, C_{AS}^*(X, \mathbb{R}))$.

Propriété 14. *Le diagramme suivant commute*

$$\begin{array}{ccc} \Omega^* \mathcal{M} & \xrightarrow{r} & C^0(\mathcal{A}, \Omega^* \mathcal{M}) \\ R_X \downarrow & & \downarrow R^{\mathcal{A}} \\ C_{AS}^*(X, \mathbb{R}) & \xrightarrow{\rho} & C^0(\mathcal{A}, C_{AS}^*(X, \mathbb{R})) \end{array}$$

Preuve :

$$\rho \circ R_X(\omega) = \prod_{\alpha} R_X(\omega)|_{X \cap U^{\alpha}} = \prod_{\alpha} \left\{ \Delta_q(X \cap U^{\alpha}) \ni \sigma \mapsto \int_{\sigma} \omega \right\} \quad (7.85)$$

$$R^{\mathcal{A}} \circ r(\omega) = \prod_{\alpha} \left\{ \Delta_q(X \cap U^{\alpha}) \ni \sigma \mapsto \int_{\sigma} r(\omega) \right\} \quad (7.86)$$

mais $\forall \sigma \subset U^{\alpha}$, on a $r(\omega)|_{\sigma} = \omega|_{\sigma}$. ■

Soit δ_{\bullet} l’opérateur de cobord de Čech du complexe $C_{AS}^*(X, \mathbb{R})$ et soit δ^{\bullet} l’opérateur de cobord de Čech des complexes $C_{AS}^*(\mathcal{A}, \clubsuit)$ (avec $\clubsuit = \Omega^* \mathcal{M}$ ou $C_{AS}^*(X, \mathbb{R})$). δ_{\bullet} est donc l’opérateur de calcul différentiel discret sur les simplexes de X , et δ^{\bullet} est l’opérateur de combinaison des cartes de \mathcal{A} . Soit $D = \delta^{\bullet} + (-1)^p d$ l’opérateur de cobord du complexe Čech-de Rham $C_{AS}^*(\mathcal{A}, \Omega^* \mathcal{M})$ et $\Delta = \delta^{\bullet} + (-1)^p \delta_{\bullet}$ l’équivalent dans le complexe $C_{AS}^*(\mathcal{A}, C_{AS}^*(X, \mathbb{R}))$. Il est clair que $\Delta^2 = 0$ et donc qu’il définit une cohomologie. On désigne par $H_d^* \mathcal{M}$ le groupe de cohomologie du complexe $\Omega^* \mathcal{M}$, $\check{H}_{\delta_{\bullet}}^*(X, \mathbb{R})$ le groupe de cohomologie de $C_{AS}^*(X, \mathbb{R})$, $H_D^*(\mathcal{A}, \mathcal{M})$ le groupe de cohomologie de $\bigoplus_{p+q=*} C_{AS}^q(\mathcal{A}, \Omega^p \mathcal{M})$, et enfin $\check{H}_{\Delta}^*(\mathcal{A}, X)$ le groupe de cohomologie de $\bigoplus_{p+q=*} C_{AS}^q(\mathcal{A}, C_{AS}^p(X, \mathbb{R}))$.

Théorème 9. *On a le diagramme commutatif suivant, où à la limite $\delta(X) \rightarrow 0$ associée à la limite inductive du raffinement de l’atlas associé à X , toutes les applications sont des isomorphismes.*

$$\begin{array}{ccc} H_d^* \mathcal{M} & \xrightarrow{r} & H_D^*(\mathcal{A}, \mathcal{M}) \\ R_X \downarrow & & \downarrow R^{\mathcal{A}} \\ \check{H}_{\delta_{\bullet}}^*(X, \mathbb{R}) & \xrightarrow{\rho} & \check{H}_{\Delta}^*(\mathcal{A}, X) \end{array}$$

Preuve :

On sait déjà que R_X est un isomorphisme à la limite du raffinement (c’est l’isomorphisme de de Rham), et r est un isomorphisme en cohomologie (par le principe de Mayer-Vietoris, voir annexe C). Le principe de Mayer-Vietoris peut aisément être généralisé à ρ . En effet les démonstrations de l’exactitude de la suite de Mayer-Vietoris, du principe du zig-zag et du principe de Mayer-Vietoris ne sont pas dépendantes de l’algèbre différentielle particulière $(\Omega^* \mathcal{M}, d)$, et peuvent être

appliquées à toute algèbre différentielle, et en particulier à $(C^*(X, \mathbb{R}), \delta_\bullet)$, voir annexe C pour ces démonstrations. Comme on sait, de part la précédente propriété, que le diagramme commute, il est clair que $R^A = \rho \circ R_X \circ r^{-1}$ est un isomorphisme en cohomologie à la limite du raffinement. ■

Maintenant, on peut corrélérer l'atlas \mathcal{A} et le complexe simpliciel X , en posant que X est l'ensemble des points de base de \mathcal{A} . On note U_x la carte de \mathcal{A} ayant $x \in X$ pour point de base. De plus, on écrira désormais X pour \mathcal{A} (puisque leurs informations sont similaires), et on va considérer le complexe $C_{AS}^*(X, C_{AS}^*(X, \mathbb{R}))$. Une cochaîne $\eta \in C_{AS}^0(X, C_{AS}^0(X, \mathbb{R}))$ a donc deux indices, un indice "bas" qui indique le point de X sur lequel elle est évaluée, et un indice "haut" correspondant au point de base de la carte dont la convention est utilisée pour l'exprimer, ainsi η_x^y est la cochaîne au point x de X exprimée par rapport à la carte U_y . Si y n'est pas l'un des plus proches voisins de X , $\eta_x^y = 0$, sinon $(x \in U_y \cap U_x \neq \emptyset)$, η_x^y est η_x^x après changement de jauge g^{xy} . On introduit $C_{NAS}^*(X, \mathbb{R})$ l'ensemble des cochaînes de X non-nécessairement anti-symétriques, et on note δ_\bullet son opérateur de cobord défini par la formule usuelle. Soit l'application

$$\pi : C_{AS}^p(X, C_{AS}^q(X, \mathbb{R})) \rightarrow C_{NAS}^{p+q}(X, \mathbb{R}) \quad (7.87)$$

définie par

$$\forall \omega \in C_{AS}^p(X, C_{AS}^q(X, \mathbb{R})), \quad \pi(\omega)_{\alpha_0, \dots, \alpha_{p+q}} = \omega_{\alpha_p, \dots, \alpha_{p+q}}^{\alpha_0, \dots, \alpha_p} \quad (7.88)$$

Propriété 15. π est une application de chaîne, en d'autres termes, le diagramme suivant commute :

$$\begin{array}{ccc} C_{NAS}^n(X, \mathbb{R}) & \xrightarrow{\delta_\bullet} & C_{NAS}^{n+1}(X, \mathbb{R}) \\ \pi \uparrow & & \uparrow \pi \\ \bigoplus_{p+q=n} C_{AS}^p(X, C_{AS}^q(X, \mathbb{R})) & \xrightarrow{\Delta} & \bigoplus_{p+q=n+1} C_{AS}^p(X, C_{AS}^q(X, \mathbb{R})) \end{array}$$

Preuve :

$$\begin{aligned} (\delta_\bullet \pi(\omega))_{\alpha_0, \dots, \alpha_p, \beta_1, \dots, \beta_{q+1}} &= \sum_{i=0}^p (-1)^i \pi(\omega)_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_p, \beta_1, \dots, \beta_{q+1}} \\ &\quad + (-1)^p \sum_{i=1}^{q+1} (-1)^i \pi(\omega)_{\alpha_0, \dots, \alpha_p, \beta_1, \dots, \hat{\beta}_i, \dots, \beta_{q+1}} \end{aligned} \quad (7.89)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=0}^p (-1)^i \omega_{\beta_1, \dots, \beta_{q+1}}^{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_p, \beta_1} \\ &\quad + (-1)^p \sum_{i=1}^{q+1} (-1)^i \omega_{\alpha_p, \beta_1, \dots, \hat{\beta}_i, \dots, \beta_{q+1}}^{\alpha_0, \dots, \alpha_p} \end{aligned} \quad (7.90)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=0}^p (-1)^i \omega_{\beta_1, \dots, \beta_{q+1}}^{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_p, \beta_1} + (-1)^{p+1} \omega_{\beta_1, \dots, \beta_{q+1}}^{\alpha_0, \dots, \alpha_p} \\ &\quad + (-1)^p \omega_{\beta_1, \dots, \beta_{q+1}}^{\alpha_0, \dots, \alpha_p} + (-1)^p \sum_{i=1}^{q+1} (-1)^i \omega_{\alpha_p, \beta_1, \dots, \hat{\beta}_i, \dots, \beta_{q+1}}^{\alpha_0, \dots, \alpha_p} \end{aligned} \quad (7.91)$$

$$= (\delta_\bullet \omega)_{\beta_1, \dots, \beta_{q+1}}^{\alpha_0, \dots, \alpha_p, \beta_1} + (-1)^p (\delta_\bullet \omega)_{\alpha_p, \beta_1, \dots, \beta_{q+1}}^{\alpha_0, \dots, \alpha_p} \quad (7.92)$$

$$= \pi(\delta_\bullet \omega)_{\alpha_0, \dots, \alpha_p, \beta_1, \dots, \beta_{q+1}} + (-1)^p \pi(\delta_\bullet \omega)_{\alpha_0, \dots, \alpha_p, \beta_1, \dots, \beta_{q+1}} \quad (7.93)$$

$$= \pi(\Delta \omega)_{\alpha_0, \dots, \alpha_p, \beta_1, \dots, \beta_{q+1}} \quad (7.94)$$

■

Théorème 10. *Le diagramme suivant commute*

$$\begin{array}{ccc} \check{H}_{\delta_\bullet}^q(X, \mathbb{R}) & \xrightarrow{\rho} & \check{H}_\Delta^q(X, X) \\ & i \searrow & \downarrow \pi \\ & & \check{H}_{\delta_\bullet}^q(X, \mathbb{R}) \end{array}$$

où ρ est un isomorphisme et où π est injective, i est l'application induite en cohomologies par l'injection canonique $C_{AS}^q(X, \mathbb{R}) \hookrightarrow C_{NAS}^q(X, \mathbb{R})$.

Démonstration :

$$\rho(\omega)_{x_0, \dots, x_q}^\alpha = \begin{cases} \omega_{x_0, \dots, x_q} & \text{si } \langle x_0, \dots, x_q \rangle \in st(\alpha) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (7.95)$$

$$(\pi \circ \rho(\omega))_{x_0, \dots, x_q} = \rho(\omega)_{x_0, \dots, x_q}^{x_0} = \omega_{x_0, \dots, x_q} \quad (7.96)$$

car par définition $\langle x_0, \dots, x_q \rangle \in st(x_0)$. $st(x)$ est l'étoile de x (cf. annexe C). Donc le diagramme suivant commute

$$\begin{array}{ccc} C_{AS}^q(X, \mathbb{R}) & \xrightarrow{\rho} & C^0(X, C_{AS}^q(X, \mathbb{R})) \\ & i \searrow & \downarrow \pi \\ & & C_{NAS}^q(X, \mathbb{R}) \end{array}$$

On sait que π , ρ et i sont des applications de chaînes, donc elles induisent des applications en cohomologies, de plus, par le principe du zig-zag, on sait que la cohomologie de $\check{H}_\Delta^q(X, X)$ est obtenue par $C^0(X, C_{AS}^q(X, \mathbb{R}))$. Cela prouve la commutativité du diagramme en cohomologies. Soit $[\varphi]_\Delta \in \check{H}_\Delta^q(X, X)$ tel que $[\varphi]_\Delta \in \ker \pi$,

$$\pi([\varphi]_\Delta) = [0]_{\delta_\bullet} \quad (7.97)$$

Soit $\varphi \in [\varphi]_\Delta$, $\Delta\varphi = 0$; par le principe du zig-zag, on peut choisir $\varphi \in C^0(X, C_{AS}^q(X, \mathbb{R}))$.

$$\pi([\varphi]_\Delta) = [0]_{\delta_\bullet} \Rightarrow \exists \eta \in C_{AS}^{q-1}(X, \mathbb{R}) \quad \pi(\varphi) = \delta_\bullet \eta \quad (7.98)$$

$$\pi(\varphi) = \delta_\bullet \eta \iff \forall \alpha_i \quad \varphi_{\alpha_0, \dots, \alpha_q}^{\alpha_0} = (\delta_\bullet \eta)_{\alpha_0, \dots, \alpha_q} \quad (7.99)$$

$$\iff \forall \alpha_i \quad \varphi_{\alpha_0, \dots, \alpha_q}^{\alpha_0} = \sum_{i=0}^q (-1)^i \eta_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_q} \quad (7.100)$$

$$\Delta\varphi = 0 \iff \delta^\bullet \varphi + \delta_\bullet \varphi = 0 \quad (7.101)$$

$$\iff \forall \alpha_i, \beta_i \quad (\delta^\bullet \varphi)_{\alpha_1, \dots, \alpha_{q+1}}^{\beta_0 \beta_1} + (\delta_\bullet \varphi)_{\alpha_0, \dots, \alpha_{q+1}}^{\beta_0} = 0 \quad (7.102)$$

$$\iff \varphi_{\alpha_1, \dots, \alpha_{q+1}}^{\beta_1} - \varphi_{\alpha_1, \dots, \alpha_{q+1}}^{\beta_0} + \sum_{i=0}^{q+1} (-1)^i \varphi_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_{q+1}}^{\beta_0} = 0 \quad (7.103)$$

$$\iff \varphi_{\alpha_1, \dots, \alpha_{q+1}}^{\beta_1} + \sum_{i=1}^{q+1} (-1)^i \varphi_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_{q+1}}^{\beta_0} = 0 \quad (7.104)$$

On considère le cas particulier où $\beta_0 = \alpha_0$:

$$\varphi_{\alpha_1, \dots, \alpha_{q+1}}^{\beta_1} = \sum_{i=1}^{q+1} (-1)^{i+1} \varphi_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_{q+1}}^{\alpha_0} \quad (7.105)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^{q+1} \sum_{j=0}^{i-1} (-1)^{i+j+1} \eta_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_j, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_{q+1}} \\ &\quad + \sum_{i=1}^{q+1} \sum_{j=i+1}^{q+1} (-1)^{i+j} \eta_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \hat{\alpha}_j, \dots, \alpha_{q+1}} \end{aligned} \quad (7.106)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^{q+1} \sum_{j=0}^{i-1} (-1)^{i+j+1} \eta_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_j, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_{q+1}} \\ &\quad + \sum_{i=2}^{q+1} \sum_{j=1}^{i-1} (-1)^{i+j} \eta_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_j, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_{q+1}} \end{aligned} \quad (7.107)$$

$$= \eta_{\alpha_2, \dots, \alpha_{q+1}} + \sum_{i=1}^{q+1} (-1)^{i+1} \eta_{\alpha_1, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_{q+1}} \quad (7.108)$$

$$= \sum_{i=0}^{q+1} (-1)^{i+1} \eta_{\alpha_1, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_{q+1}} \quad (7.109)$$

$$= (\delta_{\bullet} \eta)_{\alpha_1, \dots, \alpha_{q+1}} \quad (7.110)$$

$$= \Delta(i(\eta))_{\alpha_1, \dots, \alpha_{q+1}}^{\beta_0, \beta_1} \quad (7.111)$$

On remarque que $i(\eta)$ est indépendant du choix de β_0 et de β_1 , donc $i(\eta)$ est δ_{\bullet} -fermée.

$$\varphi = \Delta i(\eta) \Rightarrow [\varphi]_{\Delta} = 0 \quad (7.112)$$

d'où

$$\pi([\varphi]_{\Delta}) = [0]_{\delta_{\bullet}} \Rightarrow [\varphi]_{\Delta} = [0]_{\Delta} \quad (7.113)$$

Ce qui prouve que π est injective. ■

Notons que $\pi : \check{H}_{\Delta}^q(X, X) \rightarrow \text{Im} \pi \subset \check{H}_{\delta_{\bullet}}^q(X, \mathbb{R})$ est un isomorphisme en cohomologies. $\pi(C^0(X, C_{AS}^q(X, \mathbb{R})))$ sont les q -cochaînes de $C_{NAS}^q(X, \mathbb{R})$ qui sont antisymétriques par rapport à l'échange de leurs indices à l'exception du premier.

π est l'application qui reproduit l'effet d'une simulation numérique imposant que l'indice de carte soit l'un des points de X où est évaluée la cochaîne. En effet, si $\eta \in C^0(X, C^0(X, \mathbb{R}))$, numériquement, comme on ne maîtrise pas la convention de la carte, celle-ci sera toujours associée au point x où on calcule η et à celui-là seulement, c'est à dire que l'on ne dispose pas de $\eta_x^y \forall x, y$, mais seulement de η_x^x , c'est à dire de $\pi(\eta)$. La propriété 15 montre que le calcul numérique avec δ_{\bullet} correspond en fait à Δ , c'est à dire à la discrétisation de D . Ainsi, le calcul du champ est en fait $\delta_{\bullet} \pi(\check{A}) = \pi(\Delta \check{A}) = \pi(\check{\mathfrak{F}})$. Soit $[xyz t]$ une cellule de X . On suppose que les cartes U_x, U_y, U_z et U_t sont toutes associées à une seule et même convention de vecteurs propres, c'est à dire que l'on pourrait unir ces cartes en une seule. Comme il n'y a pas de changement de carte "actif" dans la cellule (par actif on entend un changement de carte induisant un changement de convention), on a $g^{\alpha\beta} = 1 \forall \alpha, \beta = x, y, z, t$, $\check{\mathfrak{F}} = F$ et $\delta_{\bullet} \pi(\check{A}) = \pi(\check{F})$. En procédant de proche en proche, on peut unir l'ensemble des petites cartes $\{U_x\}_{x \in X}$ de manière à reconstruire un ensemble de grandes cartes où les conventions sont homogènes. Par contre sur une cellule $[xyz t]$ où la convention n'est pas la même pour toutes les cartes U_{α} ($\alpha = x, y, z, t$), c'est bien $\pi(\check{\mathfrak{F}})$ que l'on va obtenir, c'est à dire qu'au champ radial normal va se superposer le champ orthoradial de la zone de changement de carte. Ce champ va permettre de localiser les cellules où des changements de cartes apparaissent, et donc

marquer les frontières entre les grandes cartes homogènes issues des unions, comme on peut le voir sur la figure 7.3.

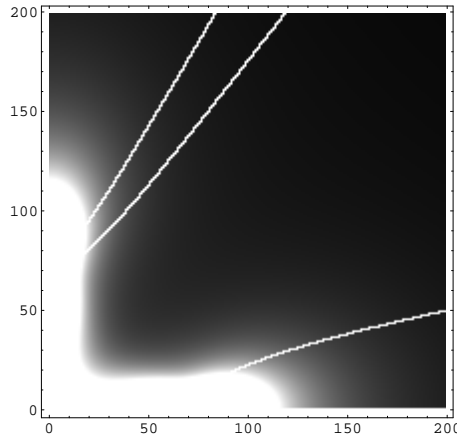


FIG. 7.3 – Le champ $\max_a |\mathfrak{F}_{aa}|$ pour $a = 1, 2, 3$ dans le cas d'un atome à trois niveaux dans l'effet STIRAP (cf. section 5.3)

Sur cette figure, on voit très clairement la composante radiale F de \mathfrak{F} , à savoir les “tâches” elliptiques centrées sur les monopôles magnétiques, ainsi que la composante orthoradiale de \mathfrak{F} , les grandes lignes qui partagent \mathcal{M} en quatre zones, les quatre grandes cartes avec des conventions homogènes. Notons, comme on peut le constater sur la figure 5.18 où on a représenté les trois éléments diagonaux de \mathfrak{F} , que seuls deux changements de carte se retrouvent sur deux des éléments diagonaux. Ces changements correspondent donc à une permutation d'états (dans la convention de continuation qui suit les états), et sont donc impliqués dans des effets de type chirping direct. Par contre la ligne qui ne se trouve que pour l'état 1, correspond à un changement de jauge du type $|1, \vec{R}\rangle \rightsquigarrow e^{i\varphi}|1, \vec{R}\rangle$ et laissant les états 2 et 3 inchangés. Ce dernier changement est purement arbitraire et n'est pas imposé par la topologie du fibré adiabatique. On voit ici un possible problème dans la méthode numérique. Il faut éviter que le programme de diagonalisation induise des changements de jauge intempestifs, qui viendraient recouvrir \mathcal{M} de lignes de changement de carte, et donc de champ orthoradial. Il est fort difficile d'assurer que l'atlas des cartes homogènes soit minimal, mais il faut au moins, qu'il ne soit pas trop grand. Des figures telles que la figure 5.18 donnent toute l'information topologique sur le fibré adiabatique.

Le théorème 10, assure que la topologie calculée numériquement, $\check{H}_{\delta\bullet}(X, \mathbb{R})$, correspond bien à celle recherchée. Par exemple en ce qui concerne la charge des monopôles, et donc la première classe de Chern, en suivant les différents résultats introduits dans cette section, on a bien à la limite du raffinement de \mathcal{A} , atlas de X

$$c_1 = \frac{i}{2\pi}[F]_d = \frac{i}{2\pi}[\mathfrak{F}]_D = \frac{i}{2\pi}[R^X(\mathfrak{F})]_\Delta = \frac{i}{2\pi}[\pi \circ R^X(\mathfrak{F})]_{\delta\bullet} \quad (7.114)$$

Dans la suite, on ne fera plus référence ni à π ni à \mathfrak{F} , mais il est sous-entendu que tous les calculs numériques se font avec eux. La principale modification étant la composante orthoradiale qui va faire apparaître les lignes de changement de carte.

En résumé

Nous avons introduit une formule discrétisée du transport adiabatique, avec une définition autonome du potentiel de jauge adiabatique discret $\check{A}_{xy} = 1 - T_x^\dagger T_y$. La formule de transport

discrète est exacte pour une variation en escaliers des paramètres de contrôle. Nous avons vu comment construire un réseau de discrétisation de la variété de contrôle, non-uniforme par rapport aux valeurs des paramètres classiques mais uniforme par rapport à la métrique quantique de \mathcal{M} , associée aux espaces actifs adiabatiques. Nous avons introduit la connexion discrète f et l'holonomie discrète c , éléments fondamentaux d'une théorie de jauge sur réseaux. Enfin nous avons montré, comment numériquement, était géré le système de cartes locales de \mathcal{M} .

Chapitre 8

Théorie de Floquet pour l'interaction matière-rayonnement

*Le temps ne se mesure pas lui-même. Il suffit de considérer un cercle et la chose devient apparente.
Franck Herbert - La maison des mères*

Les systèmes dynamiques quantiques dont l'étude est privilégiée dans ce travail, sont des systèmes atomiques ou moléculaires en interaction avec un rayonnement électromagnétique, de type champs lasers. Dans les exemples très simples qui ont été traités jusqu'à maintenant, une théorie d'atome habillé à un ou deux photons, dans l'approximation d'onde tournante, était suffisante. Afin de généraliser à tout système photodynamique quantique, on introduit dans ce chapitre, la théorie de Floquet, qui va nous fournir la description du champ électromagnétique de contrôle pour notre modèle.

La première section de ce chapitre est consacrée à la théorie de Floquet pour un champ constant. La seconde introduit la théorie de Floquet (t, θ) (dite aussi théorie de Floquet adiabatique), pour traiter des champs lasers avec modulations de fréquence et d'amplitude. La troisième section s'intéresse aux phases géométriques dans la théorie de Floquet.

8.1 Théorie de Floquet à champ constant

On considère un système atomique ou moléculaire, d'Hamiltonien H_0 , décrit sur un espace de Hilbert \mathcal{H} . On fait interagir un champ laser monochromatique, de fréquence ω et d'amplitude E_0 sur le système quantique. L'Hamiltonien du système en interaction est alors

$$H(t) = H_0 + \mu E_0 \sin(\omega t) \quad (8.1)$$

où μ est le moment dipolaire électrique du système. Il est important de noter, que $H(t)$ est $\frac{2\pi}{\omega}$ -périodique. Si on procède au changement de variable $\theta = \omega t$, alors l'équation de Schrödinger du système s'écrit

$$i\hbar\omega \frac{\partial}{\partial \theta} \psi(\theta) = (H_0 + \mu E_0 \sin \theta) \psi(\theta) \quad (8.2)$$

Équation que l'on réécrit sous la forme

$$(H_0 + \mu E_0 \sin \theta - i\hbar\omega \partial_\theta) \psi(\theta) = 0 \quad (8.3)$$

On considère alors l'angle temporel θ comme une variable quantique à part entière, c'est à dire, comme l'une des coordonnées de l'espace de configuration de l'atome. En d'autres termes, on introduit le nouvel espace de Hilbert $\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$, où $L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$ est l'espace de Hilbert des fonctions du cercle de carrés sommables, décrivant le degré de liberté (nouvellement quantique) du temps. L'équation de Schrödinger se ramène alors à un problème de valeur propre

$$H_F \psi = 0 \quad (8.4)$$

où $\psi \in \mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$ et où l'Hamiltonien de Floquet est $H_F = H_0 \otimes 1_{\mathcal{T}} + \mu E_0 \otimes \sin \theta - 1_{\mathcal{H}} \otimes i\hbar\omega \partial_{\theta} \in \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi}))$, $1_{\mathcal{H}}$ étant l'opérateur identité de \mathcal{H} et $1_{\mathcal{T}}$ l'opérateur identité de $L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$. $L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$ peut être interprété comme l'espace de Hilbert du champ électromagnétique et $i\hbar\omega \partial_{\theta}$ comme l'Hamiltonien du champ. En effet, supposons que l'atome soit placé dans une cavité de volume V . Soit \mathcal{F} l'espace de Fock décrivant le champ électromagnétique dans la cavité. L'Hamiltonien du système atome + champ, dans $\mathcal{H} \otimes \mathcal{F}$, est alors

$$H = H_0 \otimes 1_{\mathcal{F}} + 1_{\mathcal{H}} \otimes \hbar\omega a^+ a - \mu \otimes \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}} i(a - a^+) \quad (8.5)$$

ϵ_0 étant la permittivité du vide et a et a^+ les opérateurs annihilation et création de photons. Soit \bar{n} le nombre moyen de photons dans la cavité. Les travaux de Guérin [62, 57, 56] montrent qu'à la limite où le volume de la cavité devient infini, $V \in \mathcal{V}(+\infty)$, où le nombre moyen de photons devient infini, $\bar{n} \in \mathcal{V}(\infty)$, mais où la densité de photons $\rho = \frac{\bar{n}}{V}$ reste constante, on a les identifications suivantes

$$\mathcal{H} \otimes \mathcal{F} \sim \mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi}) \quad (8.6)$$

$$|n\rangle \in \mathcal{F} \sim e^{i(n-\bar{n})\theta} \in L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi}) \quad (8.7)$$

$$a^+ \sim a_{\bar{n}}^+ = \sqrt{\bar{n} - i\partial_{\theta}} e^{i\theta} \quad (8.8)$$

$$a \sim a_{\bar{n}} = e^{-i\theta} \sqrt{\bar{n} - i\partial_{\theta}} \quad (8.9)$$

$$N = a^+ a \sim N_{\bar{n}} = \bar{n} - i\partial_{\theta} \quad (8.10)$$

$$a - a^+ \sim -2i\sqrt{\bar{n}} \sin \theta \quad (8.11)$$

On en déduit l'identification

$$H_0 + \hbar\omega a^+ a - \mu \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}} i(a - a^+) - i\hbar\omega \bar{n} \sim H_0 - \mu E_0 \sin \theta - i\hbar\omega \partial_{\theta} \quad (8.12)$$

Ainsi $i\partial_{\theta}$ est l'opérateur qui mesure le nombre relatif de photons émis ou absorbés par l'atome dans le réservoir de photons que constitue le champ. Ainsi pour tout $n \in \mathbb{Z}$, le n -ième coefficient de Fourier, $c_n \in \mathcal{H}$, de $\psi(\theta) = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} c_p e^{ip\theta}$ est l'état dans lequel l'atome a émis n photons (ou absorbé n photons pour $n < 0$).

On appelle les valeurs propres de H_F des quasiénergies, les vecteurs propres associés sont les états propres du système atome + champ en interaction, c'est à dire les états de l'atome habillé du champ.

8.2 Théorie de Floquet (t, θ)

Nous présentons à présent la méthode (t, t') pour traiter l'interaction entre un système quantique et un champ laser pulsé, introduite par Drese et Hotlhaus [38] et par Guérin [63]. On considère pour cela l'Hamiltonien de la forme

$$H(t) = H_0 + \mu E(t) \cos(\omega(t)t) \quad (8.13)$$

où les modulations d'enveloppe $t \mapsto E(t)$ et de fréquence $t \mapsto \omega(t)$ sont lentes devant le temps propre quantique. On introduit également la phase temporelle

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = \omega_{eff}(t) = \omega(t) + \dot{\omega}(t)t \quad (8.14)$$

$\theta \in S^1$. En figeant les paramètres lents, on a un système quantique en interaction avec un champ constant, on peut donc appliquer la théorie de Floquet, avec comme nouvel Hamiltonien $\mathbb{R} \ni t \mapsto H(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi}))$

$$H_F(t) = H_0 + \mu E(t) \cos \theta - i\hbar \omega_{eff}(t) \partial_\theta \quad (8.15)$$

Soit $t \mapsto \psi(t) \in \mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$ solution de

$$i\hbar \partial_t \psi(t) = H_F(t) \psi(t) \quad (8.16)$$

Par décomposition de ψ sur la base de Fourier $\{e^{in\theta}\}_{n \in \mathbb{Z}}$, on obtient une fonction $\psi(t, \theta) = \langle \theta | \psi(t) \rangle$ pour laquelle $\psi(t, \omega(t)t)$ est solution de l'équation de Schrödinger dans \mathcal{H} , i.e.

$$i\hbar \partial_t \psi(t, \omega(t)t) = H(t) \psi(t, \omega(t)t) \quad (8.17)$$

Preuve :

Soit $\psi(t, \theta)$ solution de 8.16, soit $\{|\alpha\rangle\}_\alpha$ une base de \mathcal{H} et $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{Z}}$ la base de Fourier de $L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$, en décomposant sur la base $\{|\alpha\rangle \otimes |n\rangle\}_{\alpha, n}$, on a

$$\psi(t, \theta) = \sum_{\alpha=1}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_{\alpha, n}(t) \langle \theta | n \rangle |\alpha\rangle \quad (8.18)$$

avec $c_{\alpha, n} \in \mathbb{C}$. En injectant cette expression dans 8.16, il vient :

$$i\hbar \sum_{\alpha, n} \dot{c}_{\alpha n}(t) \langle \theta | n \rangle |\alpha\rangle = \sum_{\alpha, n} c_{\alpha n}(t) \langle \theta | n \rangle H(t, \theta) |\alpha\rangle - i\hbar \omega_{eff}(t) \sum_{\alpha n} c_{\alpha n}(t) \langle \theta | n \rangle' |\alpha\rangle \quad (8.19)$$

où $H(t, \theta) = H_0 + \mu E(t) \cos(\theta)$, on a alors

$$i\hbar \sum_{\alpha n} (\dot{c}_{\alpha n}(t) \langle \theta | n \rangle + c_{\alpha n}(t) \omega_{eff}(t) \langle \theta | n \rangle') |\alpha\rangle = H(t, \theta) \sum_{\alpha n} c_{\alpha n}(t) \langle \theta | n \rangle |\alpha\rangle \quad (8.20)$$

Cette dernière équation est vraie $\forall t \in \mathbb{R}$ et $\forall \theta \in S^1$, et donc en particulier pour $\theta = \omega(t)t$, d'où

$$i\hbar \sum_{\alpha n} (\dot{c}_{\alpha n}(t) \langle \omega(t)t | n \rangle + c_{\alpha n} \frac{d}{dt} \langle \omega(t)t | n \rangle) |\alpha\rangle = H(t) \sum_{\alpha n} c_{\alpha n}(t) \langle \omega(t)t | n \rangle |\alpha\rangle \quad (8.21)$$

$$\iff i\hbar \partial_t \sum_{\alpha n} c_{\alpha n}(t) \langle \omega(t)t | n \rangle |\alpha\rangle = H(t) \sum_{\alpha n} c_{\alpha n}(t) \langle \omega(t)t | n \rangle |\alpha\rangle \quad (8.22)$$

On en déduit que $\psi(t, \omega(t)t)$ est bien solution de 8.17. ■

En introduisant $\vec{R} = (E, \omega_{eff})$ comme ensemble des variables de contrôle, il apparaît $H_F(\vec{R}) = H_0 + \mu E \cos(\theta) - i\hbar \omega_{eff} \partial_\theta \in \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi}))$. On peut appliquer un théorème adiabatique sur $H_F(\vec{R})$. Dans cette approche, on sépare le “temps lent” t , qui permet d'utiliser la théorie adiabatique, du “temps rapide” θ , le temps des oscillations de la porteuse, qui est un obstacle à l'adiabaticité si on le laisse couplé à t . C'est pourquoi l'on considère θ comme une variable quantique de l'espace de configuration. Avec $i\hbar \partial_\theta$ intégré à l'Hamiltonien de Floquet, comme un opérateur de l'espace de Hilbert, $H_F(\vec{R}(t))$ est à tout instant t , un Hamiltonien dans un régime adiabatique. De même, lors du calcul des vecteurs propres, pour \vec{R} fixé, $H_F(\vec{R})$ est un Hamiltonien de Floquet à champ

constant.

Pour un système en interaction avec plusieurs champs lasers l'Hamiltonien devient :

$$H(t) = H_0 + \sum_{i=1}^l \mu E_i(t) \cos \alpha_i(t) \cos(\omega_i(t)t) \quad (8.23)$$

où $(E_i, \omega_i, \alpha_i)$ sont l'amplitude, la fréquence et l'angle de polarisation du laser i . En posant $\theta_i = \omega_i(t)t$, l'Hamiltonien de Floquet s'écrit :

$$H_F(\vec{R}(t)) = H_0 + \sum_{i=1}^l \mu E_i(t) \cos \alpha_i(t) \cos \theta_i - i\hbar \sum_{i=1}^l \omega_{eff,i}(t) \frac{\partial}{\partial \theta_i} \quad (8.24)$$

dans le nouvel espace de Hilbert $\mathcal{H} \otimes L^2(T^l, \frac{d\theta_1 \dots d\theta_l}{(2\pi)^l})$.

8.3 Théorie de Floquet et phases géométriques

8.3.1 La phase de Aharonov-Anandan de Floquet à champ constant

Nous rappelons ici des résultats énoncés par Mostafazadeh [112], Moore [108, 107, 109] et Monteoliva et al. [105]. Considérons un Hamiltonien T -périodique, et $U(t, 0)$ l'opérateur d'évolution associé. Dans ce cas $U(t, 0)$ peut se décomposer de la façon suivante :

$$U(t, 0) = Z(t)e^{iMt} \quad (8.25)$$

où $Z(t)$ est un opérateur T -périodique avec $Z(T) = Z(0) = 1$ et M est un opérateur auto-adjoint de spectre purement discret (non-dégénéré). On note $\{\mu_n\}_n$ et $\{|\mu_n\rangle\}$ ses valeurs et vecteurs propres.

Théorème 11. *On suppose que l'état initial est $\psi(0) = |\mu_n\rangle$. Après une période T , le système est dans l'état*

$$\psi(T) = e^{i\chi_n} |\mu_n\rangle \quad (8.26)$$

avec $\chi_n = \delta_n + \gamma_n$, où

$$\delta_n = -\hbar^{-1} \int_0^T \langle \mu_n | U(t, 0)^{-1} H(t) U(t, 0) | \mu_n \rangle dt \quad (8.27)$$

$$\gamma_n = i \int_0^T \langle \mu_n | Z(t)^\dagger \frac{d}{dt} Z(t) | \mu_n \rangle dt \quad (8.28)$$

Preuve : cf. [109] ■

Soit $|n(t)\rangle = Z(t)|\mu_n\rangle$, alors $\gamma_n = i \int_0^T \langle n(t) | \partial_t | n(t) \rangle dt$ est l'expression de la phase de Aharonov-Anandan associée à l'évolution cyclique. De plus on a :

Théorème 12. *$\{-\frac{\hbar}{T}\chi_n\}_n$ est l'ensemble des quasi-énergies et $\{|n(t)\rangle\}_n$ est l'ensemble des vecteurs propres de Floquet.*

Preuve : cf. [112] ■

8.3.2 Phases géométriques dans la théorie de Floquet (t, θ)

On considère un Hamiltonien de Floquet dépendant de l'ensemble des paramètres adiabatiques $\vec{R} \in \mathcal{M}$

$$H_F(\vec{R}) = H_0 + \mu E \cos \theta - i\hbar\omega_{eff}\partial_\theta \quad (8.29)$$

dans $\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$. On considère de plus un ensemble de M vecteurs propres de Floquet sélectionnés par un théorème adiabatique :

$$H_F(\vec{R})|n(\theta), \vec{R}\rangle = -\frac{\chi_n(\vec{R})}{2\pi}|n(\theta), \vec{R}\rangle \quad (8.30)$$

Remarque sur la notation : les vecteurs propres dépendent explicitement de \vec{R} , alors qu'ils dépendent de θ à travers leurs décompositions sur la base de Fourier de $L^2(S^1)$. L'adiabaticité par rapport au temps lent t , nous donne l'expression de la fonction d'onde, solution de 8.16, comme le transport adiabatique de $\psi(0) = |a(\theta), \vec{R}(0)\rangle$:

$$\langle \theta|\psi(t)\rangle = \sum_{b=1}^M \left[\mathbb{T}e^{\frac{i}{2\pi} \int_0^t \chi(\vec{R}(t')) dt' - \int_0^t A(\theta, \vec{R}(t')) dt'} \right]_{ba} |b(\theta), \vec{R}(t)\rangle \quad (8.31)$$

où $\chi(\vec{R})_{ab} = \chi_a(\vec{R})\delta_{ab}$ et $A(\theta, \vec{R})_{ab} = \langle a(\theta), \vec{R}|d|b(\theta), \vec{R}\rangle$. En utilisant les résultats précédents, on trouve

$$\mathbb{T}e^{\frac{i}{2\pi} \int_0^t \chi(\vec{R}(t')) dt' - \int_0^t A(\theta, \vec{R}(t')) dt'} = \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \int_0^{2\pi} E(\theta', \vec{R}(t')) \frac{d\theta'}{2\pi} dt' - \int_0^t \int_0^{2\pi} A_0(\theta', \vec{R}(t')) \frac{d\theta'}{2\pi} dt' - \int_0^t A(\theta, \vec{R}(t')) dt'} \quad (8.32)$$

où $E(\theta, \vec{R})_{ab} = \langle a(\theta), \vec{R}|H(\vec{R}, \theta)|b(\theta), \vec{R}\rangle$ et $A_0(\theta, \vec{R})_{ab} = \langle a(\theta), \vec{R}|\partial_\theta|b(\theta), \vec{R}\rangle$.

On a donc, la somme d'une phase de Berry adiabatique issue de l'évolution en t , générée par A , et d'une phase de Berry non-adiabatique (phase de Aharonov-Anandan), issue de l'évolution périodique en θ , et générée par A_0 . À la limite physique $\theta = \omega(t)t$ on a

$$\psi(t, \omega(t)t) = \sum_{b=1}^M \left[\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \int_0^{2\pi} E(\theta', \vec{R}(t')) \frac{d\theta'}{2\pi} dt' - \int_0^t \int_0^{2\pi} A_0(\theta', \vec{R}(t')) \frac{d\theta'}{2\pi} dt' - \int_0^t A(\omega(t')t', \vec{R}(t')) dt'} \right]_{ba} |b(\omega(t)t), t\rangle \quad (8.33)$$

La structure géométrique sous-tendant le système de double phase est le fibré composite $P^+ \rightarrow \mathcal{M} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, avec pour fibré de structure le fibré adiabatique $(P, \mathcal{M}, U(M), \pi_P)$ équipé de la connexion $A_{ab} = \langle \mu_a(\vec{R})|d|\mu_b(\vec{R})\rangle$, avec de plus $\chi_t^* P$ équipé de la connexion $\chi_t^{S*} A_{ab} = \langle a(\omega(t)t), \vec{R}|d|b(\omega(t)t), \vec{R}\rangle$ où χ_t^S est le difféomorphisme de fibre entre $\pi_S^{-1}(t)$ et \mathcal{M} , définissant le fibré de base $(S, \mathbb{R}, \mathcal{M}, \pi_S)$, avec de plus

$$\chi_t^{S*} |\mu_n, \vec{R}\rangle = |n(\omega(t)t), \vec{R}\rangle \quad (8.34)$$

c'est à dire $\chi_t^{S*} = Z(\omega(t)t)$. Le fibré transverse est $(Q_{\vec{R}}, S^1, U(M), \pi_{Q_{\vec{R}}})$ équipé du potentiel de jauge $i\hbar^{-1}E(\theta, \vec{R})\frac{d\theta}{2\pi} + A_0(\theta, \vec{R})\frac{d\theta}{2\pi}$. Par l'identification $\theta = \omega(t)t$, $d\theta = \omega_{eff}(t)dt$, on a alors le relèvement horizontal dans le composite

$$\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(\omega(t')t', \vec{R}(t')) \frac{\omega_{eff}(t')}{2\pi} dt' - \int_0^t A_0(\omega(t')t', \vec{R}(t')) \frac{\omega_{eff}(t')}{2\pi} dt' - \int_0^t A(\omega(t')t', \vec{R}(t')) dt'} \quad (8.35)$$

Ce n'est pas tout à fait l'expression 8.32, car dans la formule 8.35 c'est $H(\theta, \vec{R})$ que nous avons considéré alors que dans la véritable formule c'est $H_F(\vec{R})$ qui est retenu avec une délocalisation temporelle d'une partie de la dynamique. Ceci provient du fait que θ y est considérée comme une variable quantique, ce qui n'est jamais le cas du temps dans le transport adiabatique usuel. La théorie de Floquet (t, θ) a une structure qui n'est pas tout à fait celle d'un relèvement horizontal

dans le fibré composite (le double temps fait en sorte qu'une dynamique n'est pas une courbe mais la surface délimitée par les cercles S^1 (associés à θ), en $t = 0$ et $t = T$) sur le cylindre $S^1 \times \mathbb{R}$. On peut néanmoins relier les deux expressions par un raisonnement non-rigoureux. Soit $N \in \mathbb{N}$, le nombre d'oscillations de la porteuse du champ entre 0 et T . Par hypothèse de séparation des temps lents et des temps rapides, ce nombre d'oscillations est très grand, $N \in \mathcal{V}(+\infty)$. En supposant que les modulations de fréquences $\omega(t)$ ne s'éloignent pas trop de la fréquence moyenne $\bar{\omega} = 2\pi N$, on peut réaliser l'approximation $\omega(t) \simeq \bar{\omega}$. Soit $f(\theta, t)$ une fonction 2π -périodique par rapport à θ ($f = E$ ou A_0). On a alors

$$\int_0^T f(\omega(t)t, t) \omega_{eff}(t) dt \simeq \int_0^T f(2\pi Nt, t) 2\pi N dt \quad (8.36)$$

$$\simeq \sum_{i=0}^{N-1} \int_0^{2\pi} f\left(\theta, \frac{i}{N} + \frac{\theta}{2\pi N}\right) d\theta \quad (8.37)$$

$$\simeq \int_0^T \int_0^{2\pi} f(\theta, t) d\theta dt \quad (8.38)$$

On retrouve donc l'expression trouvée dans le cadre de la théorie de Floquet (t, θ) , néanmoins une étude plus rigoureuse de la structure géométrique de la théorie de Floquet (t, θ) serait nécessaire.

Remarque sur l'étiquetage des vecteurs propres de Floquet : supposons qu'à $t = 0$ le champ est éteint, c'est à dire que $E = 0$. On a alors

$$H_F(0) = H_0 - i\hbar\omega_{eff}(0)\partial_\theta \quad (8.39)$$

Le spectre de quasi-énergie est donc $\text{Sp}(H_F(0)) = \text{Sp}(H_0) + \mathbb{Z}\hbar\omega_{eff}(0)$ et les vecteurs propres sont de la forme $|a(\theta), \vec{R}(0)\rangle = |\alpha\rangle e^{m\theta}$, $|\alpha\rangle$ étant un vecteur propre de H_0 . Les labels a des vecteurs propres peuvent être remplacés par un double label (α, n) faisant référence à l'état moléculaire libre et au bloc Floquet. Ceci peut être généralisé à l'ensemble de l'espace de contrôle par "continuité" mais est purement conventionnel (et ne respecte pas en général la convention d'ordre énergétique). Si des croisements apparaissent à champ nul, ceci induit des lignes de changement de carte et des effets de type chirping direct, avec une analyse tout à fait similaire à celle menée section 5.1. De plus, on peut choisir comme condition initiale un état de label $(\alpha, 0)$ correspondant à l'atome non-excité, le bloc Floquet $n = 0$ correspondant à l'atome habillé d'aucun photon (ni émis ni absorbé). Remarquons toutefois que ce choix qui centre l'état initial sur l'état énergétique $n = 0$ introduit implicitement une délocalisation dans le temps, qui produit dans le cas présent une phase moyennée sur $[0, 2\pi]$ entre le système moléculaire et la perturbation du champ.

Conclusion de la partie 1

Nous avons développé un modèle décrivant les systèmes photodynamiques quantiques à l'aide de la théorie des fibrés principaux, de leurs connexions et des théories de jauge associées. Le rayonnement étant modélisé par la théorie de Floquet (t, θ) , qui permet de passer le temps rapide des oscillations de la porteuse dans les variables quantiques de l'espace de configuration de l'atome ou de la molécule, la dépendance temporelle se fait à travers les paramètres classiques lents du rayonnement (modulations d'amplitude, de fréquence, de polarisation,...). Ces paramètres apparaissent comme des variables de contrôle du système dynamique quantique, puisqu'ils décrivent un environnement du système habillé par le champ, que l'expérimentateur peut faire évoluer à sa guise. L'espace-temps du contrôle $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$, où \mathcal{M} est la variété engendrée par toutes les configurations possibles des paramètres de contrôle, est l'espace de base des fibrés décrivant le système dynamique. L'évolution des paramètres de contrôle étant lente, on peut appliquer un théorème adiabatique qui nous permet de nous restreindre à un espace actif engendré par M vecteurs propres instantanés de l'Hamiltonien de Floquet. Soit G le groupe de symétrie de cet espace actif, $G = U(M)$ si le système est conservatif ou $GL(M, \mathbb{C})$ s'il est dissipatif. Les transformations du système dynamique sont alors décrites par les sections du fibré principal $(P^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, G, \pi_{++})$, dont les fonctions de transition sont données par les matrices de recouvrement des vecteurs propres exprimés dans chacune des cartes de la transition. Ce fibré est équipé d'une connexion de potentiel de jauge $A_+ = i\hbar^{-1} E dt + A$. La transformation du système dynamique quantique sous l'influence d'un changement de son environnement $t \mapsto \vec{R}(t)$, est donnée par le relèvement horizontal de la courbe $t \mapsto (\vec{R}(t), t)$ dans P^+ , l'opérateur d'holonomie $\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(\vec{R}(t')) dt' - \int_0^t A_\mu(\vec{R}(t')) \dot{R}^\mu(t') dt'}$. Les états du système et les observables sont donnés par les sections des fibrés vectoriels associés $(E^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathbb{C}^M, \pi_{E+})$ et $(V^+, \mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathfrak{g}, \pi_{V+})$. La théorie de jauge adiabatique permet une analogie avec la théorie des champs. $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$ apparaissant comme l'analogie de l'espace-temps, le système dynamique est similaire à une particule virtuelle astreinte à se déplacer sur la ligne d'Univers $t \mapsto (\vec{R}(t), t)$, dans un espace-temps où règne un champ de Yang-Mills $F = dA + A \wedge A$. Dans la terminologie de la théorie des champs, la théorie de jauge est une théorie de "grande unification" (qui est ici virtuelle car dans un espace-temps non-physique), car on y retrouve toutes les interactions fondamentales. En effet, un croisement simple de valeurs propres apparaît comme un monopôle magnétique, la matrice extraite de A_+ associée aux deux états se croisant, apparaît alors comme un potentiel électrofaible. De même, un croisement de trois valeurs propres apparaît comme un monopôle coloré, et la matrice 3×3 extraite de A_+ qui lui est associée est similaire à un potentiel de jauge chromodynamique.

Pour un système dynamique où l'on n'applique pas l'hypothèse adiabatique, mais pour lequel on dispose d'un espace actif se déformant avec le temps, on obtient une description fibré similaire au cas adiabatique. L'espace de base est alors la variété des projecteurs sur des sous-espaces vectoriels de dimension M , c'est à dire une Grassmannienne complexe. L'espace total du fibré principal est alors une variété de Stiefel (compacte ou non suivant que le système est ou non conservatif). La Grassmannienne complexe est une variété Kählerienne équipée d'une métrique naturelle compatible avec la théorie de jauge. Cette métrique mesure la distance quantique entre espaces actifs. Deux espaces actifs sont aux antipodes de la variété s'ils sont incompatibles au sens probabiliste, i.e. s'il existe un état du premier espace tel que soit nulle la probabilité de ne pas pouvoir différentier les mesures expérimentales du système dans cet état, de mesures effectuées sur un système dans un état du deuxième espace.

Les deux descriptions géométriques sont liées par le théorème de classification universelle des fibrés principaux. La Grassmannienne complexe étant la variété universelle classifiante pour les fibrés $U(M)$ -principaux, il existe une application de \mathcal{M} vers cette variété tel que le fibré induit sur \mathcal{M} par cette application soit le fibré adiabatique. Le pull-back de la métrique quantique de la Grassmannienne par cette application, nous fournit la métrique de \mathcal{M} associée aux propriétés physiques du système contrôlé, sachant que plus la distance parcourue dans \mathcal{M} est grande (au sens de la mé-

trique quantique), plus l'évolution de l'environnement a de l'influence sur le système. Ce fait nous a conduit à proposer une méthode numérique de simulation des systèmes dynamiques quantiques, fondée sur un réseau de discrétisation de \mathcal{M} , non-uniforme au sens de la métrique Euclidienne de \mathcal{M} , mais uniforme au sens de la métrique quantique. Cette même métrique nous fournit une analogie avec la relativité générale, dans laquelle les croisements apparaissent comme des trous de ver permettant de passer d'un état à l'autre.

La topologie du fibré adiabatique (position et charge des monopôles, système des cartes locales) est reliée aux propriétés physiques du système dynamique. Les cartes des champs adiabatiques devraient permettre d'aider à trouver des trajectoires résolvant des problèmes de contrôle. Mais notons que dans les régions à forts couplages non-adiabatiques, les oscillations de Rabi induites par les phases dynamiques sont difficilement contrôlables. Il est donc nécessaire en pratique, de tester plusieurs trajectoires (avec plusieurs vitesses) afin de trouver la mieux adaptée. C'est pour cela qu'il est préférable que la part importante du transport, nécessitant un long temps de calcul, soit faite une fois pour toutes.

Un résumé schématique de la partie 1 est donné figure 8.1.

À ce stade, il reste un certain nombre de problèmes pratiques. Comment trouver la base de l'espace actif se déformant? Dans le cas adiabatique, il faut une méthode de diagonalisation de la matrice Hamiltonienne et surtout une méthode qui permette de sélectionner parmi les vecteurs propres ceux qui vont entrer dans l'espace adiabatique. De plus, il serait bon d'avoir à disposition une méthode qui permette d'estimer le degré d'adiabaticité d'un système dynamique en fonction de l'espace actif (c'est l'adiabaticité entre l'espace actif et l'extérieur qui nous intéresse). La théorie des opérateurs d'onde va nous fournir des réponses à ces questions. C'est l'objet de la seconde partie, qui de plus, étudie la compatibilité et les liens entre cette théorie et la théorie de jauge adiabatique.

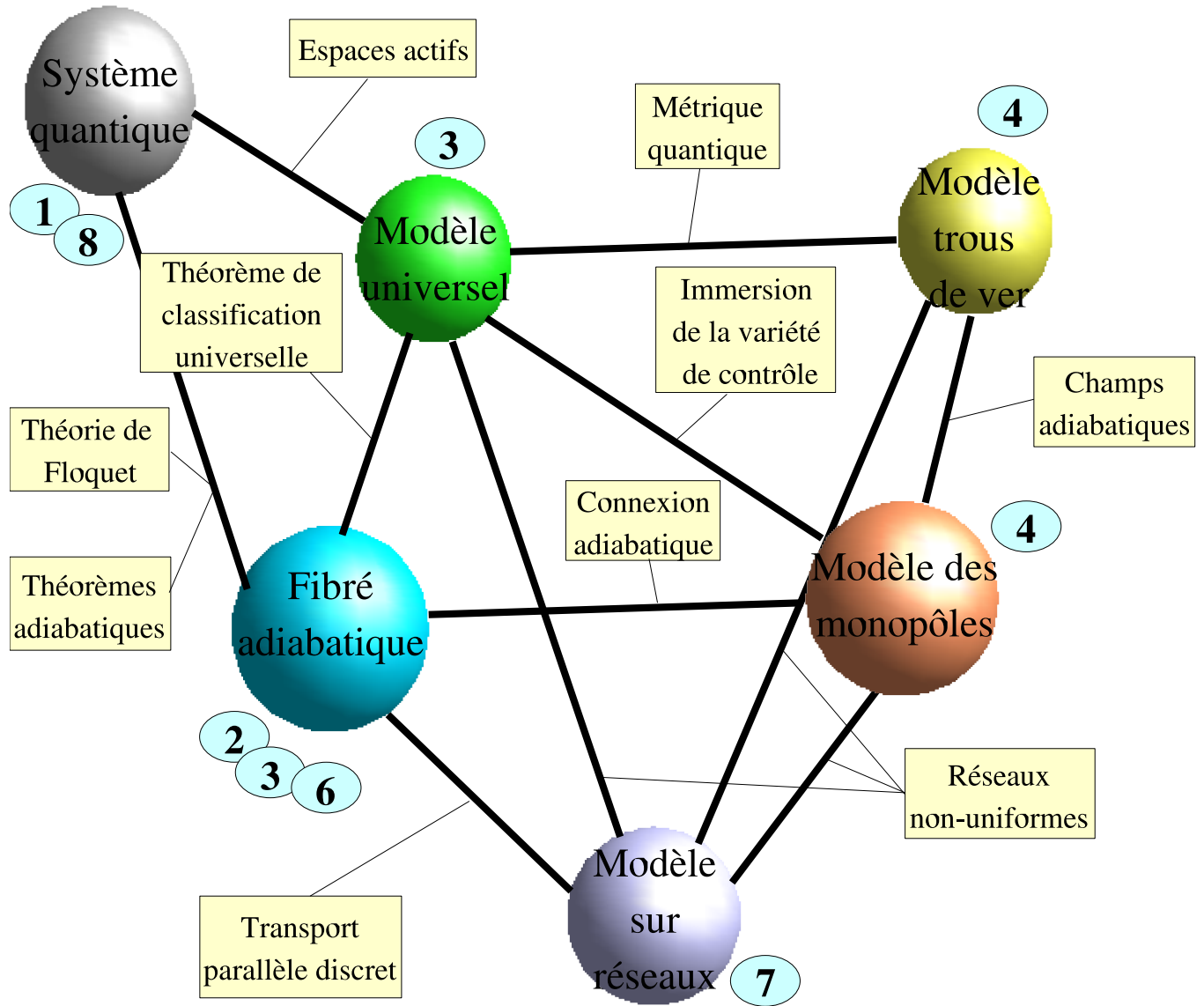


FIG. 8.1 – Résumé schématique de la structure développée au cours de la partie 1. Les modèles sont représentés par des sphères et les notions liant les modèles par des encarts. Les numéros de chapitres auxquels se réfèrent les modèles sont indiqués dans les bulles.

Deuxième partie

Théories adiabatique et géométrique des opérateurs d'onde

Introduction

Pour appliquer les formules de transport adiabatique, nous avons besoin des vecteurs propres instantanés de l'Hamiltonien (de Floquet) dépendant du temps. Pour les problèmes moléculaires, l'espace vectoriel représentant \mathcal{H} dans les simulations numériques, est en général de très grande dimension. Il est en effet nécessaire de représenter des continua, ce qui nécessite une base de grande dimension. De plus en champs intenses, des processus multi-photoniques doivent être pris en compte, ce qui oblige à considérer beaucoup de blocs Floquet de $L^2(S^1)$. La matrice représentant l'Hamiltonien est en conséquence très grande. Il est donc nécessaire d'avoir à sa disposition une méthode de diagonalisation efficace pour les grandes matrices. Si on désire tracer les lignes de changement de carte, afin de prédire des effets de type chirping direct, certaines contraintes s'imposent à la méthode de diagonalisation. Celle-ci doit respecter une certaine continuité d'un point à l'autre de X (le réseau de discrétisation de \mathcal{M}), afin que les conventions des vecteurs propres restent homogènes sur de grandes zones de \mathcal{M} . Ainsi les cartes locales homogènes sont les plus grandes possibles, afin de générer le plus petit atlas possible et limiter le nombre de lignes de changement de cartes. Il s'agit donc d'éviter des changements intempestifs de conventions, qui rempliraient \mathcal{M} de lignes de changement de carte, la plupart inutiles, et qui rendraient impossible l'analyse de ces lignes à des fins prédictives. Inversement, il faut que la "rupture" des conventions soit possible. Si la méthode numérique force les conventions des vecteurs propres à rester inchangées, aucune ligne de changement de carte n'apparaîtra sur \mathcal{M} et la convention initiale sera appliquée sur toute la variété. Dans ce cas, suivant la méthode de diagonalisation, il y a deux possibilités pour les points appartenant à la corde de Dirac associée à l'unique convention imposée par le programme. Soit le programme de diagonalisation ne converge pas sur ces points, car il tente de leur imposer une convention impossible à appliquer, soit il change la convention uniquement pour ces points. C'est donc une corde de Dirac que ferait apparaître une telle méthode et non les lignes de changement de carte (en fait dans le deuxième cas, la ligne de changement de carte se superpose à la corde de Dirac). Les deux conditions, continuité et rupture, sont antagonistes, et rendent le choix de la méthode de diagonalisation délicat.

On distingue ici, deux types de méthodes de diagonalisation :

Type 1. Les méthodes directes qui calculent vecteurs et valeurs propres, avec comme seule entrée, la matrice Hamiltonienne. Le calcul des vecteurs propres ne dépend alors que du point $x \in X$ où le calcul est effectué, et absolument pas des points proches voisins dans X . Ces méthodes n'ont donc rien dans leurs principes qui assure la continuité des conventions.

Type 2. Les méthodes récursives, qui calculent vecteurs et valeurs propres par une formule de récurrence, qui ont donc deux entrées, la matrice Hamiltonienne et des vecteurs d'initialisation de la récurrence. De telles méthodes peuvent assurer la continuité en prenant comme vecteurs d'initialisation, les vecteurs propres déjà connus d'un point proche voisin sur le réseau.

Il est clair que c'est plutôt une méthode de type 2. qui va nous intéresser. On va propager d'un point à l'autre du réseau les vecteurs propres, en prenant en chaque point comme vecteurs d'initialisation, les vecteurs propres qui viennent d'être calculés au point précédent. Pour initialiser la propagation, il faut au moins un point de X où soient déjà connus les vecteurs propres (ou à défaut des vecteurs d'essais satisfaisants). Dans les problèmes de photodynamique de tels vecteurs d'essais existent toujours, ce sont les points correspondants au champ nul, où les vecteurs propres sont les produits des états propres de la molécule isolée par les états de Fourier (c'est la base qui représente l'espace de Hilbert). On supposera ici que les vecteurs propres du problème stationnaire de la molécule isolée (sans interactions) sont connus, leur calcul ne fait donc pas l'objet de cette thèse.

La validité de la méthode va dépendre du degré de dépendance de la récurrence aux vecteurs initiaux. Si l'algorithme est peu sensible aux vecteurs initiaux, la continuité peut ne pas être assurée, inversement, une sensibilité trop grande, risque d'imposer la convention initiale à toute la variété.

Notons que des méthodes de type 1. peuvent pour certains problèmes engendrer une continuité bien que rien dans leur algorithme ne l'impose. Dans la section 5.3 on a traité le cas d'un atome à 3 niveaux en STIRAP, avec une méthode de type 1. ; on a obtenu un système de cartes, certes pas minimum, mais tout de même très bon. À l'inverse, pour le même système et avec la même méthode de diagonalisation mais en changeant la valeur du detuning, on a obtenu "un nœud" très dense de lignes de changement de carte inutiles.

Même après diagonalisation, il reste le problème de sélection de l'espace actif adiabatique. Parmi tous les vecteurs propres, quels sont ceux qui vont entrer dans l'espace actif? Si on utilise une méthode de type 2. la propagation assurera que c'est bien le même espace propre d'un point à l'autre de la grille, mais il n'en subsiste toujours pas moins le problème de la sélection de l'espace actif sur le point initial de la propagation.

Pour un système où ne s'applique pas l'hypothèse adiabatique, le problème revient à trouver une base de l'espace actif se déformant d'un point à l'autre de X . On a donc à nouveau le problème de sélection de l'espace actif, mais aussi celui de continuité, car il est préférable que les vecteurs de base dépendant de la position sur \mathcal{M} , soient continus et même différentiables. De plus il serait bon de disposer d'une méthode mixte, qui dans la propagation de la base de l'espace actif sur X , calcule une base de vecteurs propres pour la majorité des points (déterminant par la même les phases de Berry-Simon) mais qui puisse, pour les points où se pose un problème de non-adiabaticité du par exemple à un état intrus, calculer une base de l'espace actif se déformant, non-engendrée par de vecteurs propres, et accéder ainsi aux phases de Aharonov-Anandan. Cette souplesse permettrait de corriger d'éventuelles erreurs à l'adiabaticité par rapport à un espace actif engendré par des états propres sélectionnés par un théorème adiabatique. Le terme d'"adiabaticité" est utilisé ici au sens fort et la modification de base corrigeant les erreurs à l'adiabaticité correspondrait en fait à passer à un régime adiabatique au sens faible. Remarquons enfin que les états intrus évoqués posent le problème de la dimension de l'espace actif, dimension qui est l'un des paramètres ajustables de notre programme. Le temps de calcul et le stockage mémoire ne permettent pas de prendre une dimension trop grande, mais à l'opposé, une dimension trop petite fournira un espace actif mal isolé et générera beaucoup d'états intrus et d'erreurs. Il serait donc souhaitable que cette méthode qui permette les corrections à l'adiabaticité au sens fort, puisse également estimer a priori l'adiabaticité du système en fonction de la taille de l'espace actif.

La théorie des opérateurs d'onde fournit des réponses à ces différents problèmes. Le premier chapitre de cette partie est un rappel de cette théorie. Dans le second, nous introduisons un théorème adiabatique des opérateurs d'onde temporel. Ces deux premiers chapitres montrent que l'on peut utiliser la méthode des opérateurs d'onde pour résoudre le problème du calcul des vecteurs propres (avec continuité). Nous y analysons le rapport entre les phases géométriques et les opérateurs d'onde et nous y développons de plus une méthode d'analyse de l'adiabaticité. Dans le chapitre suivant, nous nous intéressons à la construction d'un réseau d'espaces actifs se déformant sur \mathcal{M} , non-adiabatique au sens fort, à l'aide de la théorie des opérateurs d'onde. Enfin cette partie se termine par une digression en introduisant la méthode numérique CATM (*Constrained Adiabatic Trajectory Method*) qui adopte un point de vue très différent en forçant artificiellement l'adiabaticité au sens faible d'un système.

Chapitre 9

Théorie des opérateurs d'onde

Le concept d'opérateur d'onde est apparu en physique pour la première fois, pour traiter des problèmes de diffusion quantique. Pour un système quantique d'Hamiltonien H_0 sur lequel agit à $t = 0$ un centre diffuseur, on définit les opérateurs d'onde de Møller par

$$\Omega^\pm = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{-i\hbar^{-1}Ht} e^{i\hbar^{-1}H_0t} \quad (9.1)$$

si les limites existent. H est l'Hamiltonien du système modifié par la diffusion. Ω^+ compare donc les dynamiques asymptotiques du système : la dynamique libre du système engendrée par H_0 , d'un passé lointain avant diffusion vers $t = 0$; et la dynamique en cours de diffusion, engendrée par H , de $t = 0$ vers le futur. La dynamique de diffusion du système est alors gouvernée par un opérateur, appelé opérateur de diffusion (ou matrice S), défini par

$$S = \Omega^{-\dagger} \Omega^+ \quad (9.2)$$

S a pour objet d'amener le système du passé lointain avant diffusion, où sa dynamique est libre, à la dynamique modifiée par la diffusion, et enfin vers un futur lointain après diffusion, où la dynamique du système est à nouveau libre. Le formalisme de la matrice S et des opérateurs d'onde de Møller est d'usage courant en physique quantique, notamment en physique des particules, pour toutes les situations modélisables par une diffusion.

L'idée essentielle de la théorie des opérateurs d'onde de Møller, est la comparaison entre la dynamique simple sans interactions, gouvernée par H_0 , et la dynamique complexe du système sur le centre diffuseur, gouvernée par H . Cette idée peut être étendue à des situations autres que les processus de diffusion. Les travaux de Bloch, Ôkubo et des Cloizeaux, ont généralisé cette idée aux problèmes stationnaires, où dans la recherche des états propres, on compare les états propres de l'Hamiltonien réel à ceux d'un Hamiltonien plus simple, dit effectif, à l'aide d'un opérateur d'onde stationnaire, lié à des techniques dites de partitionnement. Enfin pour des systèmes gouvernés par un Hamiltonien dépendant du temps, on peut définir un opérateur d'onde temporel, qui compare la dynamique réelle du système à une dynamique effective plus simple. De nombreux travaux sur les opérateurs d'onde de Bloch (stationnaires) et temporels ont été menés par différents auteurs, principalement par Jolicard et Killingbeck [76, 78, 77, 75] et par Durand et Paidarová [39, 40, 121]. Un exposé complet sur le formalisme des opérateurs d'onde de Møller et de la matrice S , peut être trouvé dans l'ouvrage de Reed et Simon [125], sur les opérateurs d'onde stationnaires (de Bloch) et les techniques de partitionnement dans l'article revue de Killingbeck et Jolicard [85], et sur les opérateurs d'onde temporels et leurs liens avec la théorie de Floquet dans l'article revue de Jolicard et Killingbeck [79]. Dans ce chapitre, nous nous contenterons de donner les idées essentielles de cette théorie qui sont nécessaires pour la suite.

9.1 L'opérateur d'onde de Bloch

Soit un système quantique stationnaire d'Hamiltonien H dans un espace de Hilbert \mathcal{H} . Nous nous intéressons aux états propres du système qui se trouvent dans un sous-espace vectoriel de dimension finie M de \mathcal{H} , noté S et appelé espace cible :

$$H\psi = \lambda\psi \quad \psi \in S \iff P\psi = \psi \quad (9.3)$$

P étant le projecteur orthogonal sur S . L'espace cible est fixé par le problème physique que l'on considère. Nous introduisons un autre sous-espace de \mathcal{H} , de même dimension que S , appelé espace actif S_0 tel que $\text{dist}_{FS}(S_0, S) < \frac{\pi}{2}$. S_0 est convenablement choisi pour que l'on puisse définir un Hamiltonien effectif, $H^{eff} \in \mathcal{L}(S_0)$, qui représente le système quantique restreint à S_0 et pour lequel le problème aux valeurs propres soit plus simple à résoudre :

$$H^{eff}\psi_0 = \lambda\psi_0 \quad \psi_0 = P_0\psi \quad (9.4)$$

L'opérateur d'onde de Bloch permet, à partir du vecteur propre effectif, de retrouver le vecteur propre vrai :

$$\Omega : \begin{array}{ccc} S_0 & \rightarrow & S \\ \psi_0 & \mapsto & \psi \end{array} \quad (9.5)$$

L'Hamiltonien effectif est alors défini par $H^{eff} = P_0 H \Omega$ et l'opérateur d'onde de Bloch par

$$\Omega = P(P_0 P P_0)^{-1} \quad (9.6)$$

où $(P_0 P P_0)^{-1}$ n'est pas l'inverse de l'opérateur $P_0 P P_0$ (qui d'ailleurs n'est pas inversible), mais le calcul fonctionnel de l'opérateur par la fonction $x \mapsto \frac{1}{x}$, c'est à dire que $A^{-1} = \int_{\text{Sp}(A) \setminus \{0\}} \frac{1}{\lambda} dP_\lambda$ (dP_λ étant la mesure spectrale de A). On a donc $\text{Dom} (P_0 P P_0)^{-1} = S_0$ (matriciellement $(P_0 P P_0)^{-1}$ est l'inverse de la matrice extraite de la représentante de P sur le bloc correspondant à S_0). La condition $\text{dist}_{FS}(P_0, P) < \frac{\pi}{2}$ assure que $(P_0 P P_0)^{-1}$ existe. Si l'espace actif et l'espace cible se trouvent aux antipodes de $G_M(\mathbb{C}^\infty)$, il n'est pas possible de retrouver le système gouverné par H à partir de celui gouverné par H^{eff} (ce qui est parfaitement logique puisque ces systèmes sont alors quantiquement incompatibles). L'opérateur d'onde de Bloch est gouverné par une équation aux valeurs propres généralisée, appelée équation de Bloch :

$$H\Omega = \Omega H\Omega = \Omega H^{eff} \quad (9.7)$$

où les inconnues sont l'opérateur d'onde Ω (équivalent aux vecteurs propres dans un équation aux valeurs propres simple) et l'Hamiltonien effectif H^{eff} (équivalent aux valeurs propres). Il est important de remarquer que $\psi_0 = P_0\psi$ n'est pas normé et que H^{eff} n'est pas auto-adjoint même si H l'est. Si on désire une théorie effective qui conserve l'auto-adjonction, on peut utiliser à la place de l'Hamiltonien effectif de Bloch, celui de des Cloizeaux défini comme une renormalisation de H^{eff}

$$H^{eff,dC} = (\Omega^\dagger \Omega)^{-1/2} \Omega^\dagger H \Omega (\Omega^\dagger \Omega)^{-1/2} \quad (9.8)$$

Pour l'analyse locale des monopôles magnétiques, telle qu'explicitée dans les sections 4.5 à 4.7, on peut utiliser cet Hamiltonien effectif. Ainsi au voisinage d'un croisement en \vec{R}_0 impliquant N valeurs propres, la valeur au point \vec{R} dans le voisinage de \vec{R}_0 , de l'immersion de \mathcal{M} , sera donnée par les composantes de la matrice $N \times N$, $H^{eff,dC}$ où P_0 est le projecteur sur l'espace actif adiabatique au point \vec{R}_0 et P le projecteur au point \vec{R} .

Enfin il est d'usage de décomposer l'opérateur d'onde de Bloch sous la forme $\Omega = P_0 + X$ où $X = Q_0 P (P_0 P P_0)^{-1}$ (Q_0 étant le projecteur sur le supplémentaire orthogonal de S_0 , S_0^\perp). L'opérateur d'onde réduit X est l'opérateur qui corrige l'approximation effective.

9.2 L'opérateur d'onde temporel

Nous considérons un système dynamique quantique d'Hamiltonien $t \mapsto H(t)$, sur un espace de Hilbert \mathcal{H} . L'idée de la théorie des opérateurs d'onde temporels est de considérer un sous-espace actif S_0 de \mathcal{H} , dans lequel on peut définir une dynamique effective, qui est facilement intégrable, et qui contient l'essentiel des informations sur la dynamique réelle du système. L'opérateur d'onde temporel compare les dynamiques réelles et effectives, et permet de retrouver la fonction d'onde vraie à partir d'une fonction d'onde effective :

$$\forall t \quad \Omega(t) : \begin{array}{l} S_0 \rightarrow \mathcal{H} \\ \psi_0(t) \mapsto \psi(t) \end{array} \quad (9.9)$$

où $t \mapsto \psi(t)$ est solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi(t) = H(t)\psi(t) \quad (9.10)$$

et $t \mapsto \psi_0(t)$ est solution d'une équation de Schrödinger effective

$$i\hbar\partial_t\psi_0(t) = H^{eff}(t)\psi_0(t) \quad (9.11)$$

l'Hamiltonien effectif est défini par $H^{eff}(t) = P_0H(t)\Omega(t) \in \mathcal{L}(S_0)$. L'opérateur d'onde temporel est défini par

$$\Omega(t) = U(t, 0)(P_0U(t, 0)P_0)^{-1} \quad (9.12)$$

où $U(t, 0)$ est l'opérateur d'évolution engendré par $H(t)$, le symbole $^{-1}$ désignant toujours le calcul fonctionnel. $\Omega(t)$ existe si et seulement si $\text{dist}_{FS}(S_0, S(t)) < \frac{\pi}{2}$ où $S(t) = U(t, 0)S_0$. On notera l'analogie avec l'opérateur d'onde de Bloch, puisque $\Omega(t) = P(t)(P_0P(t)P_0)^{-1}$ ($P(t)$ étant le projecteur orthogonal sur $U(t, 0)S_0$), mais aussi avec celui de Møller que l'on peut écrire $\Omega^+ = \text{s-lim}_{t \rightarrow +\infty} U(t, 0)U_0(t, 0)^{-1}$. L'opérateur d'onde temporel est solution de l'équation différentielle

$$(H(t) - i\hbar\partial_t)\Omega(t) = \Omega(t)(H(t) - i\hbar\partial_t)\Omega(t) \quad (9.13)$$

Si le problème traité est celui d'une interaction moléculaire avec un champ constant, la théorie de Floquet peut être utilisée en considérant l'espace de Hilbert $\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$. L'équation précédente peut alors se réécrire en introduisant $H_F = H(\theta) - i\hbar\omega\partial_\theta$

$$H_F\Omega(\theta) = \Omega(\theta)H_F\Omega(\theta) \quad (9.14)$$

qui est l'équation de Bloch, avec pour espace actif $S_0 \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$. La décomposition de l'opérateur d'onde temporel sous la forme $\Omega(t) = P_0 + X(t)$ avec $X(t) = Q_0U(t, 0)P_0(P_0U(t, 0)P_0)^{-1}$ conduit à l'équation

$$i\hbar\frac{dX(t)}{dt} = Q_0(1 - X(t))H(t)(1 + X(t))P_0 \quad (9.15)$$

9.3 Intégration de l'équation de Bloch

La théorie des opérateurs d'onde de Bloch va nous permettre de calculer les vecteurs propres de Floquet dans les problèmes de transport adiabatique discrétisé. Rappelons qu'en chaque point du réseau, c'est un problème d'interaction molécule - champ stationnaire, traité par la théorie de Floquet, qui est considéré. Comme nous l'avons vu chapitre 8, la théorie de Floquet permet de traiter ce problème dynamique comme un problème stationnaire. La compatibilité de la théorie des opérateurs d'onde avec cette méthode est en effet assurée par le fait que l'opérateur temporel est, dans la théorie de Floquet, un opérateur de Bloch. On a donc besoin d'une méthode d'intégration de l'équation de Bloch. Nous retiendrons ici la méthode "Recursive Distorted Wave Approximation" (RDWA) :

Proposition 9. *Considérons un système quantique d'Hamiltonien H dans \mathcal{H} . Soit S_0 un espace actif de dimension M de projecteur P_0 , et $X \in \mathcal{L}(S_0, S_0^\perp)$ et $H^{eff} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ l'opérateur d'onde et l'Hamiltonien effectif (supposé inversible), solutions de l'équation de Bloch. Soit $\mathcal{B}^\perp = (|f\rangle)_f$ une base hermitienne de S_0^\perp . On considère la suite $(X_n) \in \mathcal{L}(S_0, S_0^\perp)^\mathbb{N}$ définie par $\forall |f\rangle \in \mathcal{B}^\perp$*

$$X_0 = 0 \quad (9.16)$$

$$\forall n \in \mathbb{N}^* \quad \langle f|X_{n+1} = \langle f|(HP_0 + (H - H^{test})X_n)V_n(D_n - E_f^{test}I_M)^{-1}V_n^{-1} \quad (9.17)$$

où H^{test} est un opérateur quelconque de $\mathcal{L}(S_0^\perp)$, diagonal dans \mathcal{B}^\perp , E_f^{test} est la valeur propre de H^{test} pour $|f\rangle$ telle que la résolvante effective $R^{eff}(z) = (H^{eff} - zP_0)^{-1}$ soit définie en $z = E_f^{test}$. D_n est la matrice diagonale de $H_n^{eff} = P_0H(1 + X_n)$ et $V_n \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^M, S_0)$ est l'opérateur de diagonalisation de H_n^{eff} . On a alors

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \langle f|X_n = \langle f|X \quad ; \quad \lim_{n \rightarrow +\infty} H_n^{eff} = H^{eff} \quad (9.18)$$

Démonstration :

$$H\Omega = \Omega H^{eff} \iff H(P_0 + X) = (P_0 + X)H^{eff} \quad (9.19)$$

En projetant cette équation sur S_0^\perp on a

$$Q_0HX - XH^{eff} = -Q_0HP_0 \quad (9.20)$$

Soit $H^{test} \in \mathcal{L}(S_0^\perp)$ diagonale dans \mathcal{B}^\perp avec $H^{test}|f\rangle = E_f^{test}|f\rangle$. On a alors

$$Q_0(H - H^{test})X + H^{test}X - XH^{eff} = -Q_0HP_0 \quad (9.21)$$

d'où

$$Q_0(H - H^{test})X(H^{eff})^{-1} + H^{test}X(H^{eff})^{-1} - X = -Q_0HP_0(H^{eff})^{-1} \quad (9.22)$$

$$\iff X - H^{test}X(H^{eff})^{-1} = (Q_0HP_0 + Q_0(H - H^{test})X)(H^{eff})^{-1} \quad (9.23)$$

On projette cette équation sur $|f\rangle \in \mathcal{B}^\perp$

$$\langle f|X(P_0 - E_f^{test}(H^{eff})^{-1}) = \langle f|(HP_0 + (H - H^{test})X)(H^{eff})^{-1} \quad (9.24)$$

comme $H^{eff}(H^{eff})^{-1} = P_0$, on a

$$\langle f|X(H^{eff} - E_f^{test}P_0)(H^{eff})^{-1} = \langle f|(HP_0 + (H - H^{test})X)(H^{eff})^{-1} \quad (9.25)$$

d'où en multipliant à droite par H^{eff}

$$\langle f|X(H^{eff} - E_f^{test}P_0) = \langle f|(HP_0 + (H - H^{test})X) \quad (9.26)$$

Si E_f^{test} n'est pas une valeur propre de H^{eff} alors E_f^{test} est dans le domaine résolvant de H^{eff} , c'est à dire que la résolvante $R^{eff}(z) = (H^{eff} - zP_0)^{-1}$ est définie en E_f^{test} , d'où

$$\langle f|X = \langle f|(HP_0 + (H - H^{test})X)(H^{eff} - E_f^{test}P_0)^{-1} \quad (9.27)$$

On a alors une équation du type $\langle f|X = \langle f|F(X)$, par le théorème du point fixe, on cherche la solution comme la limite de la suite $\langle f|X_{n+1} = \langle f|F(X_n)$:

$$\langle f|X_{n+1} = \langle f|(HP_0 + (H - H^{test})X_n)(H_n^{eff} - E_f^{test}P_0)^{-1} \quad (9.28)$$

Soit $V_n : \mathbb{C}^M \rightarrow S_0$ diagonalisant $H_n^{eff} : V_n^{-1}H_n^{eff}V_n = D_n \in \mathcal{M}_{M \times M}(\mathbb{C})$, $V_nV_n^{-1} = P_0$ et $V_n^{-1}V_n = I_M$. On a alors

$$H_n^{eff} - E_f^{test}P_0 = V_n(V_n^{-1}H_n^{eff}V_n)V_n^{-1} - E_f^{test}V_nV_n^{-1} \quad (9.29)$$

$$= V_n(D_n - E_f^{test}I_M)V_n^{-1} \quad (9.30)$$

d'où

$$(H_n^{eff} - E_f^{test} P_0)^{-1} = V_n (D_n - E_f^{test} I_M)^{-1} V_n^{-1} \quad (9.31)$$

On en conclut que

$$\langle f | X_{n+1} = \langle f | (H P_0 + (H - H^{test}) X_n) V_n (D_n - E_f^{test})^{-1} V_n^{-1} \quad (9.32)$$

■

Sachant que $|a_n\rangle + X_n|a_n\rangle$ est une approximation d'un vecteur propre de H si n est grand et si $|a_n\rangle$ est un vecteur propre de H_n^{eff} , RDWA peut être considéré comme une méthode récursive pour calculer des vecteurs propres. Dans le problème du calcul des vecteurs propres sur chaque point x du réseau dans le transport adiabatique discret, on utilisera pour initialiser la récurrence, non pas $X_0(x) = 0$ mais $X_0(x) = X_p(y)$ où y est l'un des plus proches voisins de x (p étant l'ordre de récurrence sur lequel on s'est arrêté en y). On utilisera l'initialisation nulle seulement pour le premier point calculé. Ceci devrait assurer une certaine continuité dans les conventions. En revanche, à chaque pas de la récurrence, on doit diagonaliser la petite matrice H_n^{eff} pour obtenir D_n , cette diagonalisation se fait à l'aide d'une méthode directe standard. Une telle méthode n'assurant pas, dans son principe, la continuité, elle introduit la possibilité de rupture dans les conventions. Nous avons toutefois fait le pari de supposer que d'une part l'initialisation avec un opérateur d'onde d'un point proche voisin a suffisamment d'influence pour empêcher les changements de conventions intempestifs, et que d'autre part la diagonalisation de H_n^{eff} a suffisamment d'influence pour rompre avec les conventions le nombre de fois qu'il est nécessaire.

Le choix de H^{test} est arbitraire, mais influence la vitesse et le rayon de convergence de la suite. Le choix le plus simple, consiste en la matrice diagonale des moyennes de l'Hamiltonien dans les états de S_0^\perp , i.e. $H_{fg}^{test} = \langle f | H | f \rangle \delta_{fg}$. Avec ce choix, l'algorithme précédent est équivalent à une méthode connue dans la littérature sous le nom d'algorithme de Davidson¹. Un autre choix, plus judicieux, consiste à prendre en compte les couplages entre S_0 et S_0^\perp , avec une matrice test qui dépend de l'ordre d'itération :

$$(H_n^{test})_{fg} = \langle f | (1 - X_n) H (1 + X_n) | f \rangle \delta_{fg} \quad (9.33)$$

Ce choix correspond à la méthode RDWA standard exposée dans la littérature. Le rayon de convergence de l'algorithme est fini, et est étroitement relié aux dénominateurs $\left\{ \frac{1}{E_{i,n}^{eff} - E_f^{test}} \right\}_{i=1,\dots,M; f > M}$ où $E_{i,n}^{eff}$ est la i -ème valeur propre de H_n^{eff} . Pour améliorer la convergence, on peut utiliser un opérateur H^{test} dépendant de l'ordre d'itération, et choisi tel que $\forall i \leq M, f > M, |E_{i,n}^{eff} - E_{f,n}^{test}| > \epsilon$, où $\epsilon > 0$ est un paramètre prédéfini. Cela revient à imposer à $E_{f,n}^{test}$ d'être à l'extérieur du cercle de rayon ϵ centré sur $E_{i,n}^{eff}$ dans le plan complexe. On peut encore augmenter l'efficacité de cette technique en utilisant des transformations non-linéaires comme des Padé approximants. On sélectionne pour cela les éléments de l'opérateur d'onde, $X_{fi} = \langle f | X | i \rangle$ ($|i\rangle \in S_0, |f\rangle \in S_0^\perp$), qui posent problème dans la convergence. On considère une suite finie d'itérations de l'algorithme et on stocke la suite en question : $((X_n)_{fi})_{n=0,\dots,N}$, où $N \in \mathbb{N}$. Une procédure Padé (*scalar Wynn epsilon algorithm*) (cf. [80, 84, 88]) permet de déduire de cette suite, une valeur mieux convergée de X_{fi} . Il est toutefois délicat d'utiliser des Padé approximants, car si la suite était déjà relativement bien convergée, alors les Padé peuvent avoir un effet inverse et aboutir à une mauvaise valeur approchée de X_{fi} . Il est donc nécessaire d'écarter de la procédure les suites qui satisfont, par exemple, à un critère de type Cauchy : $\forall n, p, N_0 < p < n \leq N; |(X_n)_{fi} - (X_p)_{fi}| < \epsilon$ où $N_0 \in \mathbb{N}$ est un paramètre prédéfini ainsi que la précision ϵ (typiquement $\epsilon = 10^{-4}$). La figure 9.1 illustre les problèmes de la convergence et les méthodes pour forcer celle-ci.

¹en toute rigueur, l'algorithme de Davidson utilise l'itération de façon variationnelle en travaillant dans un espace de Krylov, alors que l'algorithme présenté ici, utilise l'itération de façon perturbative

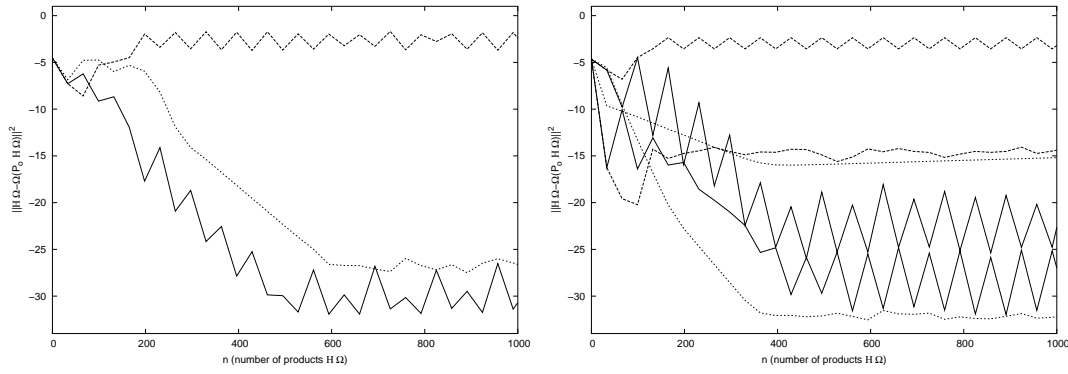


FIG. 9.1 – Illustration du choix de la matrice H_n^{test} et de l'utilisation d'une procédure Padé dans l'intégration de l'équation de Bloch. La figure présente l'erreur $\|H\Omega - \Omega H\Omega\|^2$ dans une échelle logarithmique, en fonction du nombre de produit $H\Omega$ effectués durant le calcul. Les lignes tirets correspondent au calcul en n'utilisant ni procédure écartant les valeurs tests $E_{f,n}^{test}$ des valeurs propres de H_n^{eff} , ni procédure Padé. Les lignes pointillées correspondent au calcul avec une procédure imposant $|E_{i,n}^{eff} - E_{f,n}^{test}| > 10^{-3}$ sans utilisation d'une procédure Padé. Enfin les lignes continues correspondent au calcul avec une procédure Padé sans utilisation de procédure écartant les valeurs tests des valeurs propres effectives. Le système sur lequel est testé l'algorithme correspond à la photodissociation de H_2^+ (cf. partie III), à gauche pour un espace actif unidimensionnel et à droite pour un espace actif bidimensionnel.

L'intégration de l'équation de Bloch ($H\Omega = \Omega H\Omega$) permet de calculer des vecteurs propres de H , mais aussi des vecteurs propres de Floquet en considérant l'opérateur d'onde temporel comme un opérateur stationnaire dans $\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$ (cf. équation 9.14). En fait, l'utilisation de la théorie des opérateurs d'onde donne une écriture identique aux équations aux valeurs propres dans l'espace de Hilbert \mathcal{H} et à l'équation de Schrödinger dans l'espace de Hilbert étendu $\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$, soit $H\Omega = \Omega H\Omega \leftrightarrow H_F\Omega = \Omega H_F\Omega$, alors que les écritures équivalentes standard dans l'espace de Hilbert sont différentes : $(H - E)\psi = 0 \not\leftrightarrow H_F\psi = 0$. Ceci a pour conséquence que l'intégration d'une même équation, $H_F\Omega = \Omega H_F\Omega$ peut conduire, soit à un vecteur propre de Floquet, soit à la solution de l'équation de Schrödinger. Le choix entre les deux options est conditionné par les conditions aux limites en $\theta = 0$ et $\theta = 2\pi$. Un vecteur propre de Floquet est un vecteur périodique et ses composantes asymptotiques en 0 et 2π ne sont pas arbitraires mais sont assujetties à la nature de l'Hamiltonien de Floquet. Au contraire la fonction d'onde n'est pas périodique sur $[0, 2\pi]$ à l'exception de situations très particulières et sa valeur initiale est variable et imposée "de l'extérieur".

Cette bivalence est une richesse qui peut nous permettre de jouer sur les deux tableaux : Au début de ce paragraphe nous avons proposé une recherche des vecteurs propres de Floquet fondée sur l'intégration de $H_F\Omega = \Omega H_F\Omega$. À présent, nous proposons une intégration différente fondée sur l'intégration de l'équation équivalente $i\hbar\partial_t X = Q_0(1 - X)H(1 + X)P_0$. Il faudra néanmoins que cette intégration impose la condition de périodicité afin de ne pas retenir une solution quelconque de l'équation de Schrödinger. À l'inverse nous verrons ultérieurement, avec la méthode CATM, que l'on peut déterminer la solution de l'équation de Schrödinger assujettie à des conditions initiales en intégrant $H_F\Omega = \Omega H_F\Omega$ mais au prix d'un artifice de calcul qui préserve les conditions initiales imposées.

Proposition 10. Soit un système dynamique quantique gouverné par un Hamiltonien $t \mapsto H(t)$. Soit S_0 un espace actif de dimension M de projecteur P_0 . On considère $t \mapsto X(t) \in \mathcal{L}(S_0, S_0^\perp)$

l'opérateur d'onde solution de l'équation

$$i\hbar \frac{dX(t)}{dt} = Q_0(1 - X(t))H(t)(1 + X(t))P_0 \quad (9.34)$$

Soit $\mathcal{B}_0 = \{|i\rangle\}_{i=1,\dots,M}$ une base orthonormée de S_0 et $\mathcal{B}^\perp = \{|f\rangle\}_{f>M}$ une base hermitienne de S_0^\perp . $\forall i \leq M$ et $f > M$, on introduit les fréquences

$$\omega_{if}(t) = \frac{\langle i|H(t)|i\rangle - \langle f|H(t)|f\rangle}{\hbar} \quad (9.35)$$

Soit $\mathcal{P}_N = (0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T)$ une équipartition de $[0, T]$ de pas $\Delta t \in \mathcal{V}(0)$, T étant la durée de l'interaction. Soit $|i\rangle \in \mathcal{B}_0$ et $|f\rangle \in \mathcal{B}^\perp$, alors on a $\forall j = 1, \dots, N-1$,

$$\begin{aligned} \langle f|X(t_{j+1})|i\rangle &= \langle f|X(t_j)|i\rangle + \frac{\langle f|(1 - X(t_j))H(t_j)(1 + X(t_j))|i\rangle}{\hbar\omega_{if}(t_j)} \\ &+ \left(\langle f|X(t_{j-1})|i\rangle - \langle f|X(t_j)|i\rangle - \frac{\langle f|(1 - X(t_j))H(t_j)(1 + X(t_j))|i\rangle}{\hbar\omega_{if}(t_j)} \right) e^{2i\omega_{if}(t_j)\Delta t} \\ &+ \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned} \quad (9.36)$$

Démonstration :

Soit $H^{diag} = \sum_{k=1}^{+\infty} \langle k|H|k\rangle|k\rangle\langle k|$ et $D(t) = \int_0^t H^{diag}(t')dt'$. On a

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \left(e^{i\hbar^{-1}D(t)} X(t) e^{-i\hbar^{-1}D(t)} \right) &= \left[e^{i\hbar^{-1}D(t)} X(t) e^{-i\hbar^{-1}D(t)}, H^{diag}(t) \right] + e^{i\hbar D(t)} \frac{dX}{dt} e^{-i\hbar D(t)} \\ &= \left[e^{i\hbar^{-1}D(t)} X(t) e^{-i\hbar^{-1}D(t)}, H^{diag}(t) \right] \\ &+ e^{i\hbar D(t)} Q_0(1 - X)H(1 + X)P_0 e^{-i\hbar D(t)} \end{aligned} \quad (9.37)$$

On pose $\tilde{H}(t) = Q_0(1 - X(t))H(t)(1 + X(t))P_0$. $\forall A \in \mathcal{L}(S_0, S_0^\perp)$, on a

$$e^{i\hbar^{-1}D} A e^{-i\hbar^{-1}D} = \sum_{if} e^{i\hbar^{-1}D} |f\rangle\langle f| A |i\rangle\langle i| e^{-i\hbar^{-1}D} \quad (9.39)$$

$$= \sum_{if} A_{fi} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t (H_{ii}(t') - H_{ff}(t')) dt'} |f\rangle\langle i| \quad (9.40)$$

$$= \sum_{if} A_{fi} e^{-i \int_0^t \omega_{if}(t') dt'} |f\rangle\langle i| \quad (9.41)$$

d'où l'équation

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \sum_{if} X_{fi} e^{-i \int_0^t \omega_{fi}(t') dt'} |f\rangle\langle i| \\ = \sum_{if} (X_{fi}(H_{ii} - H_{ff}) + \tilde{H}_{fi}) e^{-i \int_0^t \omega_{if}(t') dt'} |f\rangle\langle i| \end{aligned} \quad (9.42)$$

Or $\frac{df(t)}{dt} = \frac{f(t+\Delta t) - f(t-\Delta t)}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2)$ d'où

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{X_{fi}(t + \Delta t) e^{-i \int_0^{t+\Delta t} \omega_{if} dt'} - X_{fi}(t - \Delta t) e^{-i \int_0^{t-\Delta t} \omega_{if} dt'}}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ = (X_{fi}(t)\hbar\omega_{if} + \tilde{H}_{fi}) e^{-i \int_0^t \omega_{if} dt'} \end{aligned} \quad (9.43)$$

Mais

$$\frac{d}{dt} e^{-i \int_0^t \omega_{if} dt'} = -i\omega_{if}(t) e^{-i \int_0^t \omega_{if} dt'} \quad (9.44)$$

d'où

$$e^{-i \int_0^t \omega_{if} dt'} = i \frac{\partial_t e^{-i \int_0^t \omega_{if} dt'}}{\omega_{if}(t)} \quad (9.45)$$

$$= i \frac{e^{-i \int_0^{t+\Delta t} \omega_{if} dt'} - e^{-i \int_0^{t-\Delta t} \omega_{if} dt'}}{2\omega_{if}(t)\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (9.46)$$

et donc

$$\begin{aligned} & X_{fi}(t+\Delta t)e^{-i \int_0^{t+\Delta t} \omega_{if} dt'} - X_{fi}(t-\Delta t)e^{-i \int_0^{t-\Delta t} \omega_{if} dt'} \\ &= \left(X_{fi}(t) + \frac{\tilde{H}_{fi}(t)}{\hbar\omega_{if}} \right) \left(e^{-i \int_0^{t+\Delta t} \omega_{if} dt'} - e^{-i \int_0^{t-\Delta t} \omega_{if} dt'} \right) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned} \quad (9.47)$$

de plus

$$e^{-i \int_0^{t+\Delta t} \omega_{fi}(t') dt'} = e^{-i \int_0^t \omega_{fi}(t') dt' - i\omega_{fi}(t)\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (9.48)$$

$$e^{-i \int_0^{t-\Delta t} \omega_{fi}(t') dt'} = e^{-i \int_0^t \omega_{fi}(t') dt' + i\omega_{fi}(t)\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (9.49)$$

On en conclut que

$$\begin{aligned} & \left(X_{fi}(t+\Delta t) - X_{fi}(t-\Delta t) e^{2i\omega_{if}(t)\Delta t} \right) e^{-i \int_0^t \omega_{if} dt' - i\omega_{fi}(t)\Delta t} \\ &= \left(X_{fi}(t) + \frac{\tilde{H}_{fi}(t)}{\hbar\omega_{if}} \right) \left(1 - e^{2i\omega_{if}(t)\Delta t} \right) e^{-i \int_0^t \omega_{if} dt' - i\omega_{fi}(t)\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned} \quad (9.50)$$

et donc finalement

$$X_{fi}(t+\Delta t) = X_{fi}(t) + \left(X_{fi}(t-\Delta t) - X_{fi}(t) - \frac{\tilde{H}_{fi}(t)}{\hbar\omega_{if}(t)} \right) e^{2i\omega_{if}(t)\Delta t} + \frac{\tilde{H}_{fi}(t)}{\hbar\omega_{if}(t)} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (9.51)$$

■

Cette méthode qui calcule l'opérateur d'onde temporel peut également être utilisée pour calculer l'opérateur d'onde stationnaire, ou même un opérateur d'onde de Floquet si H_F est considéré à la place de H dans l'espace de Hilbert étendu. Supposons que l'on dispose d'un opérateur d'onde réduit d'ordre zéro $X_0(t)$, avec éventuellement $X_0(t) = 0$. On peut réaliser la décomposition suivante

$$H = H_0 + V \quad (9.52)$$

$$= (H - Q_0(1 - X_0)H(1 + X_0)P_0) + (Q_0(1 - X_0)H(1 + X_0)P_0) \quad (9.53)$$

et introduire une dépendance temporelle de la perturbation

$$H(t) = H_0 + V f(t)$$

où $f \in \mathcal{C}^\infty([0, T], [0, 1])$, avec $f(0) = 0$ et $\forall t \in [T_0, T]$, $f(t) = 1$, $T_0 \in [0, T]$. Avec ce choix, $X_0(t = 0)$ est l'opérateur d'onde réduit exact associé à $H_0 = H(t = 0)$. En faisant tendre la dépendance temporelle vers sa limite adiabatique, soit $T \in \mathcal{V}(+\infty)$, l'intégration 9.36 donne l'opérateur d'onde stationnaire associé à H à l'instant $T \in \mathcal{V}(+\infty)$.

Dans la pratique il est toutefois impossible d'établir la perturbation sur un laps de temps infini. Nous devons l'établir sur un temps fini en adaptant l'intégration, quitte à laisser subsister quelques défauts de non-adiabaticité. On rejoint ici la discussion que nous avons réalisé dans l'introduction de la partie II, car ces défauts nous font passer du concept d'adiabaticité au sens fort à celui d'adiabaticité au sens faible.

9.4 Sélection de l'espace actif

La première étape dans l'utilisation de la théorie des opérateurs d'onde est la sélection de l'espace actif S_0 . De même dans le transport adiabatique, il faut sélectionner les vecteurs propres à champ nul qui vont entrer dans l'espace actif du point initial. Enfin sur un réseau d'espaces actifs se déformant (non-adiabatique = théorie des phases de Aharonov-Anandan non-abéliennes), il faut trouver les bases des espaces actifs, et donc opérer une sélection. Pour l'ensemble de ces tâches nous utiliserons l'algorithme de sélection par opérateur d'onde (*Wave Operator Sorting Algorithm* (WOSA)) proposé par Wyatt et Iung [147]. Cet algorithme utilise la récurrence RDWA à un faible ordre d'itération (typiquement 10), pour calculer une forme approchée de l'opérateur d'onde $\Omega^0(t)$ associé à un espace actif unidimensionnel généré par $|i\rangle$ (l'état initial de la molécule, qui appartient obligatoirement à l'espace actif final). On sélectionne un vecteur $|\lambda\rangle$ si $\exists x$ tel que $|\langle\lambda|X^0(x)|i\rangle|$ soit grand, c'est à dire s'il existe un point sur la grille pour lequel $|\lambda\rangle$ est fortement couplé à $|i\rangle$. Numériquement, on choisit aléatoirement un certain nombre de points sur le réseau, on calcule pour chaque vecteur propre de H_0 l'intensité totale du couplage avec $|i\rangle$ sur l'ensemble des points tests, et on sélectionne les M vecteurs les plus couplés en au moins un des points.

9.5 Opérateur d'onde et théorie de Floquet (t, θ)

Nous avons vu que la théorie des opérateurs d'onde était compatible avec la théorie de Floquet à champ constant. Nous nous intéressons ici à la cohérence de cette théorie avec la théorie de Floquet (t, θ) , à deux temps, qui est à la base de notre description des systèmes photodynamiques.

Théorème 13. *Soit un système photodynamique d'Hamiltonien $H(t, \theta)$ dans \mathcal{H} dépendant du temps t et de la phase temporelle θ ($H(t, \theta) = H_0 + \mu E(t) \cos(\theta)$). Soit $X(t)$ l'opérateur d'onde réduit de \mathcal{H} , solution de*

$$i\hbar\partial_t X(t) = Q_0(1 - X(t))H(t, \omega(t)t)(1 + X(t))P_0 \quad (9.54)$$

$\omega(t)$ étant la fréquence modulée du rayonnement. Soit $X_F(t, \theta)$ l'opérateur réduit dans $\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$, solution de

$$i\hbar\partial_t X_F(t, \theta) = Q_0(1 - X_F(t, \theta))H_F(t, \theta)(1 + X_F(t, \theta))P_0 \quad (9.55)$$

avec

$$H_F(t, \theta) = H(t, \theta) - i\hbar\omega_{eff}(t)\partial_\theta \quad (9.56)$$

$\omega_{eff}(t) = \omega(t) + \dot{\omega}(t)t$. Alors $X_F(t, \omega(t)t)$ est solution de 9.54, c'est à dire $X_F(t, \omega(t)t) = X(t)$.

Ainsi donc l'opérateur d'onde à double temps $X_F(t, \theta)$ défini dans un espace étendu peut être utilisé pour construire l'opérateur d'onde "standard" à la limite $\theta = \omega(t)t$ et extraire les résultats physiques attachées à cette limite. Le passage de 9.54 à 9.55 apparaît comme une complication. C'est pourtant ce passage qui nous permettra plus loin de séparer temps rapide et temps lent au niveau des opérateurs d'onde et de réaliser une approche adiabatique pour ce second temps, le premier étant traité par Floquet.

Preuve :

$$X_F : S_0 \otimes L^2(S^1) \rightarrow S_0^\perp \otimes L^2(S^1) \quad (9.57)$$

Soit $\{|\alpha\rangle\}_\alpha$ une base hermitienne de \mathcal{H} et $\{|m\rangle\}_{m \in \mathbb{Z}}$ la base de Fourier de $L^2(S^1)$.

$$X_F(t, \theta) = \sum_{\alpha \in S_0} \sum_{\beta \in S_0^\perp} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \langle\theta|n\rangle \chi_{\beta n, \alpha m}(t) \langle m|\theta\rangle |\beta\rangle \langle\alpha| \quad (9.58)$$

avec

$$X_{\beta n, \alpha m}(t) = \langle \beta | \otimes \langle n | X_F(t, \theta) | \alpha \rangle \otimes | m \rangle \quad (9.59)$$

$$= \int_0^{2\pi} \langle \beta | X_F(t, \theta) | \alpha \rangle \langle n | \theta \rangle \langle \theta | m \rangle \frac{d\theta}{2\pi} \quad (9.60)$$

Soit $I = \{\alpha, \beta, n, m\}$ pour $\alpha \in S_0, \beta \in S_0^\perp, n \in \mathbb{Z}, m \in \mathbb{Z}$. L'équation 9.55 devient

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_I \langle \theta | n \rangle \dot{\chi}_I(t) \langle m | \theta \rangle | \beta \rangle \langle \alpha | &= Q_0(1 - X_F(t, \theta))H(t, \theta)(1 + X_F(t, \theta))P_0 \\ &\quad - i\hbar \omega_{eff}(t) Q_0(1 - X_F(t, \theta)) \sum_I \chi_I(t) (\langle \theta | n \rangle' \langle m | \theta \rangle \\ &\quad + \langle \theta | n \rangle \langle m | \theta \rangle') | \beta \rangle \langle \alpha | \end{aligned} \quad (9.61)$$

On a $X_F| \beta \rangle = 0$ car $X_F = Q_0 X_F P_0$ et $| \beta \rangle \in S_0^\perp$; d'où

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_I (\omega_{eff}(t) \langle \theta | n \rangle' \langle m | \theta \rangle \chi_I(t) + \omega_{eff}(t) \langle \theta | n \rangle \langle m | \theta \rangle' \chi_I(t) + \langle \theta | n \rangle \langle m | \theta \rangle \dot{\chi}_I(t)) | \beta \rangle \langle \alpha | \\ = Q_0(1 - X_F(t, \theta))H(t, \theta)(1 + X_F(t, \theta))P_0 \end{aligned} \quad (9.62)$$

Cette expression étant vraie $\forall t$ et $\forall \theta \in S^1$, elle l'est en particulier pour $\theta = \omega(t)t$, d'où

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_I \frac{d}{dt} (\langle \omega(t)t | n \rangle \langle m | \omega(t)t \rangle \chi_I(t)) | \beta \rangle \langle \alpha | \\ = Q_0(1 - X_F(t, \omega(t)t))H(t, \omega(t)t)(1 + X_F(t, \omega(t)t))P_0 \end{aligned} \quad (9.63)$$

$$\begin{aligned} \iff i\hbar \frac{dX_F(t, \omega(t)t)}{dt} \\ = Q_0(1 - X_F(t, \omega(t)t))H(t, \omega(t)t)(1 + X_F(t, \omega(t)t))P_0 \end{aligned} \quad (9.64)$$

$X_F(t, \omega(t)t)$ est donc solution de 9.54. ■

Chapitre 10

Théorème adiabatique de l'opérateur d'onde temporel et phases géométriques

Les sciences n'essaient pas d'expliquer, elles essaient à peine d'interpréter, elles font principalement des modèles. Par modèle on entend une construction mathématique qui, par l'addition de quelques interprétations verbales, décrit les phénomènes observés. La justification d'une telle construction mathématique est uniquement précisément qu'elle est censée marcher.

John von Neumann

Le modèle de photodynamique présenté dans la partie I, repose sur une approche adiabatique du système dynamique quantique dans son temps lent t (le temps rapide θ ayant été rejeté dans l'espace de configuration par la théorie de Floquet). Si l'on veut utiliser la théorie des opérateurs d'onde avec notre modèle, il faut analyser la compatibilité de celle-ci avec l'approche adiabatique. La première section de ce chapitre, analyse le comportement de l'opérateur d'onde temporel à la limite adiabatique. La seconde montre que l'utilisation des opérateurs d'onde est compatible avec le calcul des phases géométriques de Aharonov-Anandan. Le cas des phases de Berry-Simon est étudié dans la troisième section.

10.1 Théorème adiabatique de l'opérateur d'onde temporel

On considère un système dynamique quantique, décrit sur l'intervalle de temps $[0, T]$. Soit $U_T(s, 0)$ l'opérateur d'évolution de ce système, s étant le temps réduit, i.e. $s = t/T$. On suppose que le système dynamique satisfait aux hypothèses du théorème adiabatique de Nenciu. L'espace actif qui participe à la définition de l'opérateur d'onde temporel peut être identifié à l'un des sous-espaces spectraux du théorème de Nenciu. En effet, supposons que la fonction d'onde soit

$$\psi(s) = U_\infty(s, 0)|i\rangle \tag{10.1}$$

où $U_\infty(s, 0)$ est une notation simplifiée pour $\lim_{T \rightarrow \infty} U_T(s, 0)$. Un vecteur $|\lambda\rangle \in \mathcal{H}$ doit être inclus dans l'espace actif si $\exists \sigma \in [0, 1]$ tel que $|\langle \lambda | \psi(\sigma) \rangle|$ est grand. Ce critère est cohérent avec le critère de

la méthode WOSA, pour laquelle on sélectionne $|\lambda\rangle$ si $|\langle\lambda|X^0(\sigma)|i\rangle|$ est grand, X^0 étant l'opérateur d'onde pour l'espace actif unidimensionnel induit par $|i\rangle$. Comme on a

$$\Omega^0(s) = \frac{|\psi(s)\rangle\langle i|}{\langle i|\psi(s)\rangle} \quad (10.2)$$

alors

$$|\langle\lambda|X^0(s)|i\rangle| = \frac{|\langle\lambda|\psi(s)\rangle|}{|\langle i|\psi(s)\rangle|} \quad (10.3)$$

Le critère de WOSA implique donc la même amplitude $|\langle\lambda|\psi(s)\rangle|$. Si les conditions du théorème de Nenciu sont satisfaites et si l'état initial satisfait $|i\rangle \in \text{Im}P_I(0)$, où $P_I(s)$ est un des projecteurs spectraux du théorème de Nenciu (ou une somme de ces projecteurs spectraux), alors

$$\langle\lambda|\psi(s)\rangle = \langle\lambda|U_\infty(s,0)|i\rangle = \langle\lambda|U_\infty(s,0)P_I(0)|i\rangle = \langle\lambda|P_I(s)U_\infty(s,0)|i\rangle \quad (10.4)$$

L'amplitude $|\langle\lambda|\psi(s)\rangle|$ est grande si $|\lambda\rangle \in \text{Im}P_I(s)$ puisque $|\langle\lambda|P_I(s)U_\infty(s,0)|i\rangle| = 0$ si $|\lambda\rangle \in \text{Im}P_I(s)^\perp$. Un bon choix d'espace actif serait donc $\int_{[0,1]}^\oplus \text{Im}P_I(s)ds$, mais malheureusement cet espace peut être très grand. Toutefois si l'on assure que les couplages ne sont pas assez forts pour modifier significativement l'espace cible, i.e. $\forall s, \text{Im}P_I(0) \cap \text{Im}P_I(s)^\perp = \{0\}$ ($\forall s \text{ dist}_{FS}(P_I(0), P_I(s)) < \frac{\pi}{2}$), alors un choix raisonnable d'espace actif est $\text{Im}P_I(0)$.

Dans le cadre du théorème adiabatique de Nenciu, il est alors possible d'énoncer un théorème adiabatique pour les opérateurs d'onde temporels.

Théorème 14 (Théorème adiabatique de l'opérateur d'onde temporel). *Soit $s \mapsto H(s)$ une famille d'Hamiltoniens auto-adjoints. On suppose que $\{H(s)\}_{s \in [0,1]}$ ont un domaine commun dense dans \mathcal{H} et que l'équation $i\hbar\partial_s U_T(s,0) = TH(s)U_T(s,0)$ admet une solution fortement continue. On suppose enfin, que le spectre instantané de $H(s)$ se décompose de la façon suivante :*

$$\text{Sp}(H(s)) = \sigma_0(s) \cup \sigma_\perp(s) \quad (10.5)$$

avec les propriétés suivantes

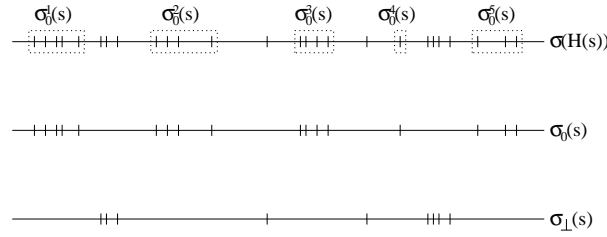
- (i) $\exists d > 0, \forall s \in [0,1], \text{dist}(\sigma_0(s), \sigma_\perp(s)) \geq d$;
- (ii) $\sigma_0(s)$ est borné $\forall s$ et a un nombre fini de parties connexes par rapport à $\text{Sp}(H(s))$;
- (iii) $P(s), Q(s) \in \mathcal{C}^2([0,1], \mathcal{B}(\mathcal{H}))$, où $P(s)$ est le projecteur spectral instantané associé à $\sigma_0(s)$ et $Q(s)$ le projecteur associé à $\sigma_\perp(s)$;
- (iv) $\forall s \in [0,1], \text{Im}P(s) \oplus \text{Im}Q(s) = \mathcal{H}$;
- (v) $\text{Im}P(0) \perp \text{Im}Q(0)$;
- (vi) $\forall s \in [0,1], \text{dist}_{FS}(P(s), P(0)) < \frac{\pi}{2}$;
- (vii) $R(s,z) = (H(s) - z)^{-1}$ est différentiable par rapport à s et $\forall \delta > 0, \exists K_\delta \in \mathbb{R}^+$ tel que $\|dR/ds\| \leq K_\delta/\text{dist}(z, \text{Sp}(H(s)))$, $\forall z$ tel que $\text{dist}(z, \text{Sp}(H(s))) > \delta$.

Soit $\Omega_T(s) = U_T(s,0)(P(0)U_T(s,0)P(0))^{-1}$ l'opérateur d'onde avec $\text{Im}P(0)$ comme espace actif. Alors $\lim_{T \rightarrow +\infty} \Omega_T(s)$ est une succession d'opérateurs d'onde de Bloch instantanés avec $\text{Im}P(0)$ comme espace actif et $\text{Im}P(s)$ comme espace cible. En d'autres termes on a

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \Omega_T(s) = P(s)(P(0)P(s)P(0))^{-1} \quad (10.6)$$

Démonstration :

On décompose $\text{Sp}(H(s))$ comme suit : les valeurs spectrales de $\sigma_0(s)$ et de $\sigma_\perp(s)$ sont ordonnées et groupées de la plus petite à la plus grande. Le spectre a alors la décomposition $\text{Sp}(H(s)) = \bigcup_i \sigma_0^i(s) \cup \bigcup_j \sigma_\perp^j(s)$ (cf. fig. 10.1).


 FIG. 10.1 – Exemple de décomposition de $\text{Sp}(H(s))$

Les conditions (i), (ii), (iii) et (vii) permettent d'appliquer le théorème de Nenciu :

$$\forall i \quad \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s, 0) P_i(0) = P_i(s) \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s, 0) \quad (10.7)$$

$$\Rightarrow \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s, 0) \sum_i P_i(0) = \sum_i P_i(s) \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s, 0) \quad (10.8)$$

$\sum_i P_i(s) = P(s)$, $\forall s$ on a

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s, 0) P(0) = P(s) \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s, 0) \quad (10.9)$$

$$\Omega_T(s) = U_T(s, 0) (P(0) U_T(s, 0) P(0))^{-1} \quad (10.10)$$

$$\Omega_T(s) = U_T(s, 0) P(0) (P(0) U_T(s, 0) P(0))^{-1} \quad (10.11)$$

$$\Omega_T(s) P(0) U_T(s, 0) P(0) = U_T(s) P(0) \quad (10.12)$$

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} (\Omega_T(s) P(0) U_T(s, 0) P(0)) = \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s) P(0) \quad (10.13)$$

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \Omega_T(s) P(0) \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s) P(0) = \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s) P(0) \quad (10.14)$$

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \Omega_T(s) P(0) P(s) \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s) = P(s) \lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s) \quad (10.15)$$

Comme $\forall T$, $U_T(s, 0)$ est inversible, $\lim_{T \rightarrow +\infty} U_T(s, 0)$ est inversible,

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \Omega_T(s) P(0) P(s) = P(s) \quad (10.16)$$

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \Omega_T(s) P(0) P(s) P(0) = P(s) P(0) \quad (10.17)$$

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \Omega_T(s) = P(s) P(0) (P(0) P(s) P(0))^{-1} \quad (10.18)$$

■

Ce théorème permet de formuler des critères très précis d'adiabaticité des systèmes quantiques. Par définition l'opérateur d'onde temporel satisfait à l'équation différentielle

$$(TH(s) - i\hbar\partial_s)\Omega_T(s) = \Omega_T(s)(TH(s) - i\hbar\partial_s)\Omega_T(s) \quad (10.19)$$

Mais si $H(s)$ satisfait aux conditions du théorème 14 à la limite adiabatique, $T \in \mathcal{V}(+\infty)$, on a $\Omega_T(s) \sim P(s)(P(0)P(s)P(0))^{-1}$, qui est donc une succession d'opérateurs d'onde de Bloch instantanés, et qui pour $\forall s$ satisfait à l'équation de Bloch

$$H(s)\Omega_T(s) \sim \Omega_T(s)H(s)\Omega_T(s) = \Omega_T(s)H_T^{eff}(s) \quad (10.20)$$

À la limite adiabatique, les termes issus des dérivations en s sont donc négligeables, puisque le passage de l'équation 10.19 à l'équation des opérateurs d'onde instantanés 10.20 se fait simplement en négligeant les termes dérivées. Ceci nous donne un critère permettant de mesurer la non-adiabaticité

d'un système dynamique, en testant si l'opérateur d'onde temporel $\Omega_T(s)$ calculé exactement satisfait à l'équation de Bloch. La quantité mesurant la non-adiabaticité est prise égale à :

$$\Xi_1(s) = \|H(s)\Omega_T(s) - \Omega_T(s)H_T^{eff}(s)\|^2 \quad (10.21)$$

De même, H_T^{eff} est solution de

$$\frac{i\hbar}{T} \frac{dX_T(s)}{ds} = (Q_0 - X_T(s))H_T^{eff}(s) \quad (10.22)$$

qui, si le théorème adiabatique est satisfait, donne $(Q_0 - X_T(s))H_T^{eff}(s) \sim 0$. Ceci nous donne un second critère de non-adiabaticité en comparant H_T^{eff} solution de 10.22 et $H_\infty^{eff}(s)$ solution de $(Q_0 - Q_0P(s)(P(0)P(s)P(0))^{-1})H_\infty^{eff}(s) = 0$:

$$\Xi_2(s) = \|H_T^{eff}(s) - H_\infty^{eff}(s)\|^2 \quad (10.23)$$

Il faut toutefois rappeler que le terme adiabatique est relatif à la dynamique de l'espace actif par rapport à son supplémentaire. Le résultat $\Xi_i(s) = 0$, $i = 1$ ou 2 , n'empêche nullement des transitions non-adiabatiques à l'intérieur de l'espace actif.

Reprenons à présent les développements adiabatiques précédents dans le cadre de la théorie de Floquet (t, θ) , avec laquelle on modélise les systèmes photodynamiques quantiques. Nous considérons pour cela l'Hamiltonien $H_F(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi}))$. Si $s \mapsto H_F(s)$ satisfait au théorème de Nenciu (pour le temps lent t), l'application du théorème adiabatique précédent nous donne

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \Omega_F^T(s) = P(s) (P_0 \otimes 1_{L^2(S^1)} P(s) P_0 \otimes 1_{L^2(S^1)})^{-1} \quad (10.24)$$

où $P(s)$ est un projecteur orthogonal sur un sous-espace de $\mathcal{H} \otimes L^2(S^1)$. Ω_F^T satisfait à l'équation fondamentale des opérateurs d'onde temporels, i.e.

$$(TH_F(s) - i\hbar\partial_s)\Omega_F^T(s) = \Omega_F^T(s)(TH_F(s) - i\hbar\partial_s)\Omega_F^T(s) \quad (10.25)$$

En faisant réapparaître la variable θ dont dépendent implicitement tous les termes de l'équation précédente (car θ fait partie des variables quantiques avec un statut équivalent aux variables de l'espace de configuration)), on obtient

$$(TH(s, \theta) - T i\hbar\Omega_{eff}(s)\partial_\theta - i\hbar\partial_s)\Omega_F^T(s, \theta) = \Omega_F^T(s, \theta)(TH(s, \theta) - T i\hbar\Omega_{eff}(s)\partial_\theta - i\hbar\partial_s)\Omega_F^T(s, \theta) \quad (10.26)$$

Enfin, pour $T \in \mathcal{V}(+\infty)$ on a

$$(H(s, \theta) - i\hbar\Omega_{eff}(s)\partial_\theta)\Omega_F^T(s, \theta) \sim \Omega_F^T(s, \theta)(H(s, \theta) - i\hbar\Omega_{eff}(s)\partial_\theta)\Omega_F^T(s, \theta) \quad (10.27)$$

10.2 Opérateurs d'onde et phases géométriques non-adiabatiques

Nous nous intéressons à présent, à la possibilité de calculer les phases géométriques en ne disposant que de la théorie effective. Autrement dit, nous désirons savoir s'il est possible d'extraire les phases géométriques des seuls vecteurs qui composent l'espace actif.

10.2.1 Cas unidimensionnel

Soit $\psi^0(t)$ la solution de l'équation de Schrödinger effective avec $P_0 = |i\rangle\langle i|$. Nous supposons, conformément à la périodicité de l'Hamiltonien et au caractère unidimensionnel de l'espace actif que $\psi^0(T) = e^{i\varphi}\psi^0(0)$. En procédant au changement de jauge tel que $\psi^0(t) = e^{if(t)}\tilde{\psi}^0(t)$ avec $\tilde{\psi}^0(T) = \tilde{\psi}^0(0)$, et en insérant l'expression de ψ^0 dans l'équation de Schrödinger effective, on trouve

$$-\hbar f'(t)\tilde{\psi}^0(t) + i\hbar\partial_t\tilde{\psi}^0(t) = H^{eff}(t)\tilde{\psi}^0(t) \quad (10.28)$$

en projetant sur $\tilde{\psi}^0(t)$ on a

$$if'(t) = -\frac{\langle\tilde{\psi}^0(t)|\partial_t\tilde{\psi}^0(t)\rangle}{\langle\tilde{\psi}^0(t)|\tilde{\psi}^0(t)\rangle} - i\hbar^{-1}\frac{\langle\tilde{\psi}^0(t)|H^{eff}(t)|\tilde{\psi}^0(t)\rangle}{\langle\tilde{\psi}^0(t)|\tilde{\psi}^0(t)\rangle} \quad (10.29)$$

d'où

$$\psi^0(t) = e^{-i\hbar^{-1}\int_0^t\frac{\langle\tilde{\psi}^0(t')|H^{eff}(t')|\tilde{\psi}^0(t')\rangle}{\langle\tilde{\psi}^0(t')|\tilde{\psi}^0(t')\rangle}dt' - \int_0^t\frac{\langle\tilde{\psi}^0(t')|\partial_{t'}\tilde{\psi}^0(t')\rangle}{\langle\tilde{\psi}^0(t')|\tilde{\psi}^0(t')\rangle}dt'}\tilde{\psi}^0(t) \quad (10.30)$$

qui est l'expression du transport parallèle par rapport à une section $\tilde{\psi}^0$ non-normée. On retrouve la fonction d'onde vraie à l'aide de l'opérateur d'onde :

$$\psi(t) = e^{-i\hbar^{-1}\int_0^t\frac{\langle\tilde{\psi}^0(t')|H^{eff}(t')|\tilde{\psi}^0(t')\rangle}{\langle\tilde{\psi}^0(t')|\tilde{\psi}^0(t')\rangle}dt' - \int_0^t\frac{\langle\tilde{\psi}^0(t')|\partial_{t'}\tilde{\psi}^0(t')\rangle}{\langle\tilde{\psi}^0(t')|\tilde{\psi}^0(t')\rangle}dt'}\Omega(t)\tilde{\psi}^0(t) \quad (10.31)$$

Cette expression ne semble pas être celle d'un transport parallèle, le potentiel de jauge dans l'exponentielle est exprimé à l'aide de la section $\tilde{\psi}^0$ alors que la section de référence semble être $\Omega\tilde{\psi}^0$. On va montrer qu'en fait, l'opérateur d'onde transforme bien le transport parallèle dans S_0 en celui dans \mathcal{H} , le potentiel de jauge exprimé avec $\tilde{\psi}^0$ étant égal à celui exprimé avec $\Omega\tilde{\psi}^0$. Par définition $\Omega(t)\psi^0(t) = \psi(t)$ d'où

$$\Omega(t) = \frac{|\psi(t)\rangle\langle i|}{\langle i|\psi(t)\rangle} \quad (10.32)$$

et donc

$$\Omega(t)^\dagger\Omega(t) = \frac{|i\rangle\langle i|}{\langle\psi^0(t)|\psi^0(t)\rangle} \quad (10.33)$$

ψ^0 et $\tilde{\psi}^0$ ne différant que par une phase, on a

$$\Omega(t)^\dagger\Omega(t) = \frac{|i\rangle\langle i|}{\langle\tilde{\psi}^0(t)|\tilde{\psi}^0(t)\rangle} \quad (10.34)$$

finalemt, en utilisant l'équation $(H - i\hbar\partial_t)\Omega = \Omega(H^{eff} - i\hbar\partial_t)$, on trouve

$$i\hbar^{-1}E^{eff} + A^{eff} = i\hbar^{-1}\frac{\langle\tilde{\psi}^0(t)|H^{eff}(t)|\tilde{\psi}^0(t)\rangle}{\langle\tilde{\psi}^0(t)|\tilde{\psi}^0(t)\rangle} + \frac{\langle\tilde{\psi}^0(t)|\partial_t\tilde{\psi}^0(t)\rangle}{\langle\tilde{\psi}^0(t)|\tilde{\psi}^0(t)\rangle} \quad (10.35)$$

$$= i\hbar^{-1}\langle\tilde{\psi}^0|\Omega^\dagger\Omega H^{eff}|\tilde{\psi}^0\rangle + \langle\tilde{\psi}^0|\Omega^\dagger\Omega\partial_t|\tilde{\psi}^0\rangle \quad (10.36)$$

$$= i\hbar^{-1}\langle\tilde{\psi}^0|\Omega^\dagger\Omega(H^{eff} + \partial_t)|\tilde{\psi}^0\rangle \quad (10.37)$$

$$= i\hbar^{-1}\langle\tilde{\psi}^0|\Omega^\dagger(H - i\hbar\partial_t)\Omega|\tilde{\psi}^0\rangle \quad (10.38)$$

$$= i\hbar^{-1}\langle\Omega\tilde{\psi}^0|H|\Omega\tilde{\psi}^0\rangle + \langle\Omega\tilde{\psi}^0|\partial_t|\Omega\tilde{\psi}^0\rangle \quad (10.39)$$

On en déduit que

$$\psi(t) = e^{-i\hbar^{-1}\int_0^t\langle\Omega(t')\tilde{\psi}^0(t')|H(t')|\Omega(t')\tilde{\psi}^0(t')\rangle dt' - \int_0^t\langle\Omega(t')\tilde{\psi}^0(t')|\partial_{t'}|\Omega(t')\tilde{\psi}^0(t')\rangle dt'}|\Omega(t)\tilde{\psi}^0(t)\rangle \quad (10.40)$$

$\psi(t)$ calculée à partir d'un transport parallèle de section $\tilde{\psi}^0$, est donc bien un transport parallèle avec pour section $\Omega\tilde{\psi}^0$. On peut de plus calculer la phase à partir de l'Hamiltonien effectif car celle-ci est identique avec celle qui serait calculée avec l'Hamiltonien vrai. Notons que le transport parallèle de ψ^0 se fait sur un autre fibré que celui de ψ . En effet, la fibre type du fibré vectoriel est \mathbb{C} (l'espace vectoriel engendré par $|i\rangle$) et l'espace de base est $\mathbb{C}/U(1) = \mathbb{R}$ (l'espace des normes). De plus on a

$$\Omega(t)|\psi^0(t)\rangle\langle\psi^0(t)|\Omega^\dagger(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \quad (10.41)$$

avec $|\psi^0(t)\rangle\langle\psi^0(t)| \in \mathbb{R}$ et $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \in \mathbb{C}P^\infty$. Le fait que le transport parallèle dans la théorie effective se transforme en un transport parallèle dans la théorie réelle, se traduit par le diagramme commutatif suivant

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{C}^{[0,T]} & \xrightarrow{\Omega} & \mathcal{H}^{[0,T]} \\ R^{eff} \uparrow & & \uparrow R \\ \mathbb{R}^{[0,T]} & \xrightarrow{\Omega \cdot \Omega^\dagger} & (\mathbb{C}P^\infty)^{[0,T]} \end{array}$$

où $X^{[0,T]}$ est l'ensemble des applications de $[0, T]$ dans l'espace X , et R et R^{eff} sont respectivement les opérations de relèvement horizontaux pour la connexion $i\hbar^{-1}Edt + A$ et pour la connexion effective $i\hbar^{-1}E^{eff}dt + A^{eff}$

10.2.2 Cas multidimensionnel

Nous allons montrer que comme dans le cas d'un espace actif unidimensionnel, la phase effective est une phase standard exprimée à l'aide d'une section obtenue par l'action de l'opérateur d'onde. Soit $P_0 = \sum_i |i\rangle\langle i|$ le projecteur associé à l'espace actif S_0 . $\forall i$, soit $\psi_i^0(t)$ la solution de l'équation de Schrödinger effective avec pour condition initiale $\psi_i^0(0) = |i\rangle$. Soit $\tilde{\psi}_i^0(t) = \sum_j U_{ji} \tilde{\psi}_j^0(t)$ un changement de jauge unitaire tel que $\tilde{\psi}_i^0(T) = \tilde{\psi}_i^0(0) = |i\rangle$. Avec des calculs analogues à ceux du paragraphe précédent on a

$$i\hbar \sum_k \dot{U}_{ki} \langle \tilde{\psi}_j^0 | \tilde{\psi}_k^0 \rangle + i\hbar \sum_k U_{ki} \langle \tilde{\psi}_j^0 | \partial_t | \tilde{\psi}_k^0 \rangle = \sum_k U_{ki} \langle \tilde{\psi}_j^0 | H^{eff} | \tilde{\psi}_k^0 \rangle \quad (10.42)$$

L'introduction de la matrice de recouvrement $T_{jk} = \langle \tilde{\psi}_j^0 | \tilde{\psi}_k^0 \rangle$ donne

$$i\hbar (T\dot{U})_{ji} + i\hbar \sum_k U_{ki} \langle \tilde{\psi}_j^0 | \partial_t | \tilde{\psi}_k^0 \rangle = \sum_k U_{ki} \langle \tilde{\psi}_j^0 | H^{eff} | \tilde{\psi}_k^0 \rangle \quad (10.43)$$

d'où

$$(\dot{U}U^{-1})_{ml} = (T^{-1}T\dot{U}U^{-1})_{ml} \quad (10.44)$$

$$= \sum_{j,i} T_{mj}^{-1} (T\dot{U})_{ji} U_{il}^{-1} \quad (10.45)$$

$$\begin{aligned} &= -i\hbar^{-1} \sum_{i,j,k} T_{mj}^{-1} U_{ki} U_{il}^{-1} \langle \tilde{\psi}_j^0 | H^{eff} | \tilde{\psi}_k^0 \rangle \\ &\quad - \sum_{i,j,k} T_{mj}^{-1} U_{ki} U_{il}^{-1} \langle \tilde{\psi}_j^0 | \partial_t | \tilde{\psi}_k^0 \rangle \end{aligned} \quad (10.46)$$

$$= -i\hbar^{-1} \sum_j T_{mj}^{-1} \langle \tilde{\psi}_j^0 | H^{eff} | \tilde{\psi}_l^0 \rangle - \sum_j T_{mj}^{-1} \langle \tilde{\psi}_j^0 | \partial_t | \tilde{\psi}_l^0 \rangle \quad (10.47)$$

Ainsi le transport parallèle dans l'espace actif s'écrit

$$\psi_i^0(t) = \sum_j \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E^{eff}(t') dt' - \int_0^t A^{eff}(t') dt'} \right]_{ji} \tilde{\psi}_j^0(t) \quad (10.48)$$

avec $E^{eff}(t)_{ij} = \sum_k T_{ik}^{-1} \langle \tilde{\psi}_k^0(t) | H^{eff}(t) | \tilde{\psi}_j^0(t) \rangle$ et $A^{eff}(t)_{ij} = \sum_k T_{ik}^{-1} \langle \tilde{\psi}_k^0(t) | \partial_t | \tilde{\psi}_j^0(t) \rangle$.

On veut montrer que $\psi_i(t) = \Omega(t) \psi_i^0(t)$ est aussi un transport parallèle. On définit $\tilde{\psi}_i(t)$ comme étant $\Omega(t) \tilde{\psi}_i^0(t)$. Par définition $\Omega(t) \psi_i^0(t) = \psi_i(t)$. On pose $\Omega = \sum_{j,k} c_{j,k} |\psi_j\rangle \langle \psi_k^0|$, on a alors $\langle \psi_j | \Omega | \psi_i^0 \rangle = \delta_{ij} \iff \sum_k c_{jk} \langle \psi_k^0 | \psi_i^0 \rangle = \delta_{ij}$, mais

$$\langle \psi_j^0 | \psi_k^0 \rangle = \sum_{il} U_{kl} U_{ji}^{-1} \langle \tilde{\psi}_i^0 | \tilde{\psi}_k^0 \rangle = (U^{-1} T U)_{jk} \quad (10.49)$$

d'où

$$\Omega(t) = \sum_{jk} (U^{-1} T U)_{jk}^{-1} |\psi_j\rangle \langle \psi_k^0| \quad (10.50)$$

On a donc

$$\Omega^\dagger \Omega = \sum_{jkn} (U^{-1} T U)_{nj}^{-1} (U^{-1} T U)_{jl}^{-1} |\psi_n^0\rangle \langle \psi_k^0| \quad (10.51)$$

$$= \sum_{jkn} (T U)_{nj}^{-1} (U^{-1} T)_{jl}^{-1} |\psi_n^0\rangle \langle \psi_k^0| \quad (10.52)$$

On a donc

$$\langle \tilde{\psi}_i^0 | \Omega^\dagger \Omega = \sum_{jknl} (T U)_{nj}^{-1} (U^{-1} T)_{jk}^{-1} U_{il} \langle \psi_l^0 | \psi_n^0 \rangle \langle \psi_k^0| \quad (10.53)$$

$$= \sum_{jknl} (T U)_{nj}^{-1} (U^{-1} T)_{jk}^{-1} U_{il} (U^{-1} T U)_{ln} \langle \psi_k^0| \quad (10.54)$$

$$= \sum_{jkn} (T U)_{in} (T U)_{nj}^{-1} (U^{-1} T)_{jk}^{-1} \langle \psi_k^0| \quad (10.55)$$

$$= \sum_k (U^{-1} T)_{ik} \langle \psi_k^0| \quad (10.56)$$

$$= \sum_{kl} T_{il}^{-1} U_{lk} \langle \psi_k^0| \quad (10.57)$$

$$= \sum_l T_{il}^{-1} \langle \tilde{\psi}_l^0| \quad (10.58)$$

et finalement

$$\begin{aligned} (i\hbar^{-1} E^{eff} + A^{eff})_{ij} &= \sum_k T_{ik}^{-1} \langle \tilde{\psi}_k^0 | H^{eff} | \tilde{\psi}_j^0 \rangle \\ &\quad + \sum_k T_{ik}^{-1} \langle \tilde{\psi}_k^0 | \partial_t | \tilde{\psi}_j^0 \rangle \end{aligned} \quad (10.59)$$

$$= i\hbar^{-1} \langle \tilde{\psi}_i^0 | \Omega^\dagger \Omega (H^{eff} - i\hbar \partial_t) | \tilde{\psi}_j^0 \rangle \quad (10.60)$$

$$= i\hbar^{-1} \langle \tilde{\psi}_i | (H - i\hbar \partial_t) | \tilde{\psi}_j \rangle \quad (10.61)$$

$$= i\hbar^{-1} \langle \tilde{\psi}_i | H | \tilde{\psi}_j \rangle + \langle \tilde{\psi}_i | \partial_t | \tilde{\psi}_j \rangle \quad (10.62)$$

Ainsi, si $\{\psi_i^0(t)\}$ est obtenue par transport parallèle dans l'espace actif à partir d'une section $\{\tilde{\psi}_i^0\}$, alors $\{\psi_i\}$ est obtenue par transport parallèle à partir de la section $\{\psi_i \equiv \Omega \tilde{\psi}_i^0\}$. La phase non-abélienne de $\{\psi_i\}$ peut donc être obtenue à partir de la phase non-abélienne effective. On a alors le diagramme commutatif suivant

$$\begin{array}{ccc} S_0^{[0,T]} & \xrightarrow{\Omega} & \mathcal{H}^{[0,T]} \\ R^{eff} \uparrow & & \uparrow R \\ (S_0/U(M))^{[0,T]} & \xrightarrow{\Omega \cdot \Omega^\dagger} & G_M(\mathbb{C}^\infty)^{[0,T]} \end{array}$$

10.3 Transport adiabatique dans l'espace actif de l'opérateur d'onde temporel

Nous avons vu qu'à la limite adiabatique l'opérateur d'onde est $\Omega_\infty(s) = P(s)(P(0)P(s)P(0))^{-1}$, c'est à dire un opérateur qui se contente de transformer les états propres instantanés au temps $t = 0$ en des états propres instantanés au temps s . L'opérateur d'onde ne contient donc pas de phase. La fonction d'onde du système est donnée par $\psi(s) = \Omega_\infty(s)U^{eff}(s, 0)|i\rangle$. ψ est un transport parallèle par rapport aux vecteurs propres instantanés $\{|i, t\rangle\}$. Puisque le théorème adiabatique s'applique et puisque Ω_∞ ne contient pas de termes de phase, la phase de Berry et la phase dynamique doivent être contenues dans $U^{eff}(s, 0)$. C'est ce que nous démontrons dans ce paragraphe. Il faut noter que la faculté de l'opérateur d'onde à séparer ces termes de phase du reste des autres termes d'évolution est un atout majeur.

10.3.1 Cas unidimensionnel

Nous considérons le cas d'un sous-espace de dimension 1, S_0 engendré par $|i, 0\rangle \equiv |i\rangle$, et $S(s)$ engendré par $|i, s\rangle$. Si T (le temps d'interaction) est au voisinage de $+\infty$, alors la fonction d'onde peut être exprimée comme un transport adiabatique

$$\psi_T(s) \sim \psi_\infty(s) = e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s \lambda_i(s')ds' - \int_0^s \langle i, s' | \partial_{s'} | i, s' \rangle ds'} |i, s\rangle \quad (10.63)$$

où ψ_T est solution de l'équation de Schrödinger sans approximation adiabatique, c'est à dire qu'elle vérifie l'équation :

$$i\hbar \partial_s \psi_T(s) = TH(s)\psi_T(s) \quad (10.64)$$

En considérant la formulation des opérateurs d'onde.

$$P_i(0)P_i(s)P_i(0) = \langle i | i, s \rangle \langle i, s | i \rangle |i\rangle \langle i| \quad (10.65)$$

$$\Rightarrow (P_i(0)P_i(s)P_i(0))^{-1} = \frac{|i\rangle \langle i|}{\langle i | i, s \rangle \langle i, s | i \rangle} \quad (10.66)$$

et donc

$$\Omega_\infty(s) = \frac{|i, s\rangle \langle i, s | i \rangle \langle i|}{\langle i | i, s \rangle \langle i, s | i \rangle} = \frac{|i, s\rangle \langle i|}{\langle i | i, s \rangle} \quad (10.67)$$

En introduisant l'état propre projeté : $|i^0, s\rangle = P_i(0)|i, s\rangle = \langle i | i, s \rangle |i\rangle$, il est clair que

$$\Omega_\infty(s)|i^0, s\rangle = |i, s\rangle \quad (10.68)$$

L'Hamiltonien effectif correspondant est

$$H_T^{eff}(s) = P_i(0)H(s)\Omega_T(s) = \frac{\langle i | H(s) | \psi_T(s) \rangle}{\langle i | \psi_T(s) \rangle} |i\rangle \langle i| \quad (10.69)$$

et sa limite adiabatique est

$$H_\infty^{eff}(s) = \lim_{T \rightarrow \infty} H_T^{eff} \quad (10.70)$$

$$= P_i(0)H(s)\Omega_\infty(s) \quad (10.71)$$

$$= \frac{\langle i | H(s) | i, s \rangle}{\langle i | i, s \rangle} |i\rangle \langle i| \quad (10.72)$$

$$= \lambda_i(s) |i\rangle \langle i| \quad (10.73)$$

On ne peut malheureusement pas appliquer la formule de transport adiabatique usuelle avec la théorie effective, car H_T^{eff} dépend de T , la variable dont on prend la limite. Soit $U_T(s, 0)$ l'opérateur

d'évolution associé à l'équation de Schrödinger vraie, et $U_T^{eff}(s, 0)$ l'opérateur d'évolution dans S_0 généré par $H_T^{eff}(s)$. Par définition ces deux opérateurs sont liés par la relation

$$U(s, 0)P_i(0) = \Omega_T(s)U_T^{eff}(s)P_i(0) \quad (10.74)$$

En utilisant l'expression 10.69 et l'identité $\langle i|H|\psi_T(s)\rangle = \frac{\hbar}{T}\langle i|\partial_s|\psi_T(s)\rangle$ on a

$$U_T^{eff}(s) = e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s H_T^{eff}(s')ds'} \quad (10.75)$$

$$= e^{\int_0^s \frac{\langle i|\partial_{s'}|\psi_T(s')\rangle}{\langle i|\psi_T(s')\rangle} ds'} |i\rangle \langle i| \quad (10.76)$$

$$= e^{\int_0^s \partial_{s'} \ln \langle i|\psi_T(s')\rangle ds'} |i\rangle \langle i| \quad (10.77)$$

$$= e^{\ln \langle i|\psi_T(s)\rangle} |i\rangle \langle i| \quad (10.78)$$

$$= \langle i|\psi_T(s)\rangle |i\rangle \langle i| \quad (10.79)$$

donc pour $T \in \mathcal{V}(+\infty)$ $U_T^{eff} \sim \langle i|\psi_\infty(s)\rangle |i\rangle \langle i|$. On a donc

$$\psi_\infty^0 = U_\infty^{eff}(s)|i\rangle \quad (10.80)$$

$$= \langle i|\psi_\infty(s)\rangle |i\rangle \quad (10.81)$$

$$= e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s \lambda_i(s')ds' - \int_0^s \langle i,s'|\partial_{s'}|i,s'\rangle ds'} \langle i|i, s\rangle |i\rangle \quad (10.82)$$

$$= e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s \lambda_i(s')ds' - \int_0^s \langle i,s'|\partial_{s'}|i,s'\rangle ds'} |i^0, s\rangle \quad (10.83)$$

Les phases géométrique et dynamique sont donc bien contenues dans l'opérateur d'évolution effectif. Notons que ce qui empêche d'utiliser la formule usuelle de transport adiabatique dans S_0 et ainsi de définir des phases dynamique et géométrique effectives (comme dans la section précédente), est le caractère non-uniforme de la limite adiabatique

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^s H_T^{eff}(s')ds' \neq \int_0^s \lim_{T \rightarrow \infty} H_T^{eff}(s')ds' \quad (10.84)$$

le membre de gauche de cette inégalité contient les phases dynamique et géométrique alors que le membre de droite ne contient que le terme dynamique.

10.3.2 Cas multidimensionnel

Comme pour le cas unidimensionnel, nous prouverons que les termes de phases se trouvent dans l'opérateur d'évolution effectif. En accord avec le théorème adiabatique, nous supposons que la dynamique est confinée dans l'espace engendré par $\{|i, s\rangle\}_{i=1, \dots, M}$. L'espace adiabatique de ce problème est $S_0 = \langle |i, 0\rangle \rangle_{i=1, \dots, M}$ et on écrit $|i\rangle$ pour $|i, 0\rangle$. Comme dans le cas unidimensionnel, on a pour $T \in \mathcal{V}(+\infty)$

$$\psi_\infty^0(s) = U_\infty^{eff}(s, 0)|i\rangle \sim \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s H_T^{eff}(s')ds'} |i\rangle \quad (10.85)$$

avec

$$\Omega_T(s)U_T^{eff}(s, 0)P(0) = U_T(s, 0)P(0) \quad (10.86)$$

et donc à la limite adiabatique

$$\Omega_\infty(s)U_\infty^{eff}(s, 0)P(0) = U_\infty(s, 0)P(0) = P(s)U_\infty(s, 0) \quad (10.87)$$

d'où

$$\Omega_\infty(s)\psi_\infty^0(s) = P(s)U_\infty(s)|i\rangle \quad (10.88)$$

$$= \psi_\infty(s) \quad (10.89)$$

$$= \sum_{j=1}^M \left[\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s E(s')ds' - \int_0^s A(s')ds'} \right]_{ji} |j, s\rangle \quad (10.90)$$

$$(10.91)$$

et donc en projetant cette équation sur l'espace actif

$$\sum_{j,k=1}^M [\Omega_\infty(s)]_{kj} [U^{eff}(s, 0)]_{ji} |k\rangle = \sum_{j,k=1}^M \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s E(s') ds' - \int_0^s A(s') ds'} \right]_{ji} \langle k|j, s\rangle |k\rangle \quad (10.92)$$

Mais comme $\Omega_\infty(s) = P(0) + Q(0)X(s)P(0)$, on a $\langle k|\Omega_\infty(s)|j\rangle = \delta_{jk}$, d'où

$$\left[U_\infty^{eff}(s, 0) \right]_{ki} = \sum_{j=1}^M \langle k|j, s\rangle \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s E(s') ds' - \int_0^s A(s') ds'} \right]_{ji} \quad (10.93)$$

Finalement, l'expression du transport adiabatique dans S_0 peut être écrite sous la forme

$$\psi_\infty^0(s) = \sum_{k=1}^M \left[U_\infty^{eff}(s, 0) \right]_{ki} |k\rangle \quad (10.94)$$

$$= \sum_{k,j} \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s E(s') ds' - \int_0^s A(s') ds'} \right]_{ji} \langle k|j, s\rangle |k\rangle \quad (10.95)$$

$$= \sum_j \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s E(s') ds' - \int_0^s A(s') ds'} \right]_{ji} \sum_k |k\rangle \langle k|j, s\rangle \quad (10.96)$$

$$= \sum_j \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s E(s') ds' - \int_0^s A(s') ds'} \right]_{ji} |j^0, s\rangle \quad (10.97)$$

10.3.3 Phases standards vs phases effectives

Nous revenons ici sur le fait qu'il nous a été impossible de définir de phases effectives dans le cas adiabatique. La difficulté est due à la définition plus subtile de la phase dynamique effective à la limite adiabatique. Nous analyserons ici ce phénomène, en considérant à nouveau le cas unidimensionnel.

Une expression naïve de la phase dynamique effective serait, par analogie avec tous les cas étudiés jusqu'à présent :

$$\lambda_{naive}^{eff}(s) = \frac{\langle \psi_\infty^0(s) | H_\infty^{eff}(s) | \psi_\infty^0(s) \rangle}{\langle \psi_\infty^0(s) | \psi_\infty^0(s) \rangle} \quad (10.98)$$

Mais nous avons vu que $H_\infty^{eff}(s) = \lambda_i(s)|i\rangle\langle i|$ et donc $\lambda_{naive}^{eff}(s) = \lambda_i(s)$. Il est clair que cette expression ne peut être correcte, car $A^{eff}(s) = \frac{\langle i^0, s | \partial_s | i^0, s \rangle}{\langle i^0, s | i^0, s \rangle} \neq \langle i, s | \partial_s | i, s \rangle$, de sorte que la somme des phases dynamique et géométrique n'est pas préservée.

Soit la fonction

$$\psi_T^0(s) = e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^s \frac{\langle \tilde{\psi}_T^0(s') | H_T^{eff}(s) | \tilde{\psi}_T^0(s') \rangle}{\langle \tilde{\psi}_T^0(s') | \tilde{\psi}_T^0(s') \rangle} ds' - \int_0^s \frac{\langle \tilde{\psi}_T^0(s') | \partial_{s'} | \tilde{\psi}_T^0(s') \rangle}{\langle \tilde{\psi}_T^0(s') | \tilde{\psi}_T^0(s') \rangle} ds'} \tilde{\psi}_T^0(s) \quad (10.99)$$

où $\lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{\psi}_T^0(s) = |i^0, s\rangle$.

La phase dynamique qui est générée par le terme H_T^{eff} n'est pas égale à la phase naïve à cause du caractère non-uniforme de la limite adiabatique

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^s \frac{\langle \tilde{\psi}_T^0(s') | H_T^{eff}(s) | \tilde{\psi}_T^0(s') \rangle}{\langle \tilde{\psi}_T^0(s') | \tilde{\psi}_T^0(s') \rangle} ds' \neq \int_0^s \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\langle \tilde{\psi}_T^0(s') | H_T^{eff}(s) | \tilde{\psi}_T^0(s') \rangle}{\langle \tilde{\psi}_T^0(s') | \tilde{\psi}_T^0(s') \rangle} ds' \quad (10.100)$$

$$\neq \int_0^s \frac{\langle \tilde{\psi}_\infty^0(s') | H_\infty^{eff}(s) | \tilde{\psi}_\infty^0(s') \rangle}{\langle \tilde{\psi}_\infty^0(s') | \tilde{\psi}_\infty^0(s') \rangle} ds' \quad (10.101)$$

$$\neq \int_0^s \lambda_{naive}^{eff}(s') ds' \quad (10.102)$$

La véritable phase dynamique effective est définie par

$$\lambda_\infty^{eff}(s) = \frac{d}{ds} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^s \frac{\langle \tilde{\psi}_T^0(s') | H_T^{eff}(s) | \tilde{\psi}_T^0(s') \rangle}{\langle \tilde{\psi}_T^0(s') | \tilde{\psi}_T^0(s') \rangle} ds' \quad (10.103)$$

et avec $\lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{\psi}_T^0(s) = |i^0, s\rangle$, on obtient finalement pour $T \in \mathcal{V}(\infty)$

$$\psi_T^0(s) \sim e^{-i\hbar^{-1}T \int_0^t \lambda_\infty^{eff}(s') ds' - \int_0^s \frac{\langle i^0, s' | \partial_{s'} | i^0, s' \rangle}{\langle i^0, s' | i^0, s' \rangle} ds'} |i^0, s\rangle \quad (10.104)$$

Avec cette définition de la phase dynamique effective, on retrouve bien la conservation de la phase totale

$$i\hbar^{-1}T \lambda_\infty^{eff}(s) + \frac{\langle i^0, s | \partial_s | i^0, s \rangle}{\langle i^0, s | i^0, s \rangle} ds \sim i\hbar^{-1}T \lambda_i(s) + \langle i, s | \partial_s | i, s \rangle \quad (10.105)$$

Preuve :

$$i\hbar^{-1}T \int_0^s \lambda_\infty^{eff}(s') ds' \sim i\hbar^{-1}T \int_0^s \frac{\langle \psi_T^0(s') | H_T^{eff}(s) | \psi_T^0(s') \rangle}{\langle \psi_T^0(s') | \psi_T^0(s') \rangle} ds' \quad (10.106)$$

$$\sim i\hbar^{-1}T \int_0^s \frac{\langle \psi_T^0(s') | H(s') \Omega_T(s') | \psi_T^0(s') \rangle}{\langle \psi_T^0(s') | \psi_T^0(s') \rangle} ds' \quad (10.107)$$

$$\sim i\hbar^{-1}T \int_0^s \frac{\langle \psi_T(s') | i \rangle \langle i | H(s') | \psi_T(s') \rangle \langle i | \psi_T(s') \rangle}{\langle i | \psi_T(s') \rangle \langle \psi_T(s') | i \rangle \langle i | \psi_T(s') \rangle} ds' \quad (10.108)$$

$$\sim i\hbar^{-1}T \int_0^s \frac{\langle i | H(s') | \psi_T(s') \rangle}{\langle i | \psi_T(s') \rangle} ds' \quad (10.109)$$

$$\sim i\hbar^{-1}T \int_0^s \frac{i\hbar \langle i | \partial_{s'} | \psi_T(s') \rangle}{T \langle i | \psi_T(s') \rangle} ds' \quad (10.110)$$

$$\sim i\hbar^{-1}T \int_0^s \frac{i\hbar}{T} \frac{\partial}{\partial s'} \ln \langle i | \psi_T(s') \rangle ds' \quad (10.111)$$

$$\sim -\ln \langle i | \psi_T(s) \rangle \quad (10.112)$$

$$\sim -\ln \langle i | \psi_\infty(s) \rangle \quad (10.113)$$

$$i\hbar^{-1}T \lambda_\infty^{eff}(s) \sim -\frac{\partial}{\partial s} \ln \langle i | \psi_\infty(s) \rangle \quad (10.114)$$

$$\sim -\frac{\langle i | \partial_s | \psi_\infty(s) \rangle}{\langle i | \psi_\infty(s) \rangle} \quad (10.115)$$

$$\sim i\hbar^{-1}T \lambda_i(s) + \langle i, s | \partial_s | i, s \rangle - \frac{\langle i | \partial_s | i, s \rangle}{\langle i | i, s \rangle} \quad (10.116)$$

$$\sim i\hbar^{-1}T \lambda_i(s) + \langle i, s | \partial_s | i, s \rangle - \frac{\langle i, s | i \rangle \langle i | i, s \rangle \langle i | i \rangle}{\langle i | i, s \rangle \langle i, s | i \rangle} \quad (10.117)$$

$$\sim i\hbar^{-1}T \lambda_i(s) + \langle i, s | \partial_s | i, s \rangle - \frac{\langle i^0, s | \partial_s | i^0, s \rangle}{\langle i^0, s | i^0, s \rangle} \quad (10.118)$$

et finalement

$$i\hbar^{-1}T \lambda_\infty^{eff}(s) + \frac{\langle i^0, s | \partial_s | i^0, s \rangle}{\langle i^0, s | i^0, s \rangle} \sim i\hbar^{-1}T \lambda_i(s) + \langle i, s | \partial_s | i, s \rangle \quad (10.119)$$

■

On peut illustrer différemment cette difficulté liée à la phase dynamique. Soit $\hat{H}_\infty^{eff}(s) = \lambda_\infty^{eff}(s)|i\rangle\langle i| \neq \lambda_i(s)|i\rangle\langle i| = H_\infty^{eff}(s)$. On a

$$\hat{H}_\infty^{eff}(s)|\psi_\infty^0(s)\rangle = \lambda_\infty^{eff}(s)\langle i|\psi_\infty^0(s)\rangle|i\rangle \quad (10.120)$$

$$\sim \frac{i\hbar}{T} \frac{\langle i|\partial_s|\psi_\infty(s)\rangle}{\langle i|\psi_\infty(s)\rangle} \langle i|\psi_\infty^0(s)\rangle|i\rangle \quad (10.121)$$

$$\sim \frac{i\hbar}{T} \langle i|\partial_s\psi_\infty(s)\rangle|i\rangle \quad (10.122)$$

$$\sim \frac{i\hbar}{T} \partial_s \langle i|\psi_\infty(s)\rangle|i\rangle \quad (10.123)$$

$$\sim \frac{i\hbar}{T} \partial_s |\psi_\infty^0(s)\rangle \quad (10.124)$$

avec de plus

$$H_\infty^{eff}(s)|\psi_\infty^0(s)\rangle = \lambda_i(s)|\psi_\infty^0(s)\rangle \quad (10.125)$$

ψ_∞^0 est donc un vecteur propre instantané de H_∞^{eff} et c'est en même temps la solution de l'équation de Schrödinger de \hat{H}_∞^{eff} . Ceci montre la difficulté du passage à la limite adiabatique dans l'approximation effective. Pour un opérateur indépendant de T , la fonction d'onde est à la fois état propre instantané et solution de l'équation de Schrödinger pour cet opérateur, alors que dans la théorie effective, on ne conserve cette propriété qu'au prix de l'introduction de deux Hamiltoniens effectifs, un pour lequel la fonction d'onde effective est état propre et l'autre pour lequel elle est solution de l'équation de Schrödinger.

La démonstration peut être généralisée sans difficultés au cas multidimensionnel, avec

$$E_\infty^{eff}(s)_{ij} = \frac{d}{ds} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^s \sum_k T_{ik,T}^{-1}(s') \langle \tilde{\psi}_{k,T}^0(s') | H_T^{eff}(s') | \tilde{\psi}_{j,T}^0(s') \rangle ds' \quad (10.126)$$

où $\lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{\psi}_{i,T}^0 = |i^0, s\rangle$, et

$$i\hbar^{-1} T E_\infty^{eff}(s)_{ij} + \sum_k T_{ik}^{-1}(s) \langle k^0, s | \partial_s | j^0, s \rangle \sim i\hbar^{-1} \lambda_i(s) \delta_{ij} + \langle i, s | \partial_s | j, s \rangle \quad (10.127)$$

avec $T_{ik}(s) = \langle i^0, s | k^0, s \rangle$.

En résumé

Nous avons vu dans ce chapitre qu'à la limite adiabatique, l'opérateur d'onde temporel est une succession d'opérateurs d'onde stationnaires instantanés. Cette propriété nous a permis de définir deux mesures de la non-adiabaticité d'un système dynamique. Nous avons vu par ailleurs, que les phases géométrique et dynamique du transport parallèle étaient contenues dans l'opérateur d'évolution effectif, mais que la nature non-uniforme de la limite adiabatique, rendait délicat le calcul de la phase dynamique à partir de l'Hamiltonien effectif. D'autre part, que ce soit dans le cas adiabatique ou non, l'action de l'opérateur d'onde sur une fonction définie comme un transport parallèle, donne une fonction qui a la forme d'un transport parallèle, de même opérateur d'holonomie (la phase totale se conserve dans le passage d'une théorie effective à la théorie naturelle). Notons que c'est la phase totale qui se conserve et pas les phases géométrique et dynamique individuellement. Dans le chapitre suivant, le résultat concernant la limite adiabatique de l'opérateur va être mis à profit dans le problème du calcul de la base des espaces actifs sur le réseau de discrétisation de \mathcal{M} . L'identité des phases, permettrait de se contenter de faire les calculs à partir de H^{eff} avec pour espace actif, l'espace sélectionné au point initial du réseau (champ nul). Mais les difficultés concernant la phase dynamique à la limite adiabatique, incitent plutôt à faire les calculs avec l'Hamiltonien vrai H .

Chapitre 11

Transport parallèle et opérateurs d'onde

Une proposition en géométrie n'est souvent rien qu'une autre vue sous un angle différent.

Georg Christoph Lichtenberg - Le miroir de l'âme

Nous avons vu au chapitre 9, que la théorie des opérateurs d'onde, permet de calculer des vecteurs propres de l'Hamiltonien (de Floquet ou non, en (t, θ) ou non). Ces opérateurs peuvent être déterminés numériquement en utilisant un algorithme d'intégration de l'équation de Bloch, type RDWA, ou une méthode dépendante du temps. Enfin l'algorithme WOSA permet de sélectionner l'espace actif associé à l'opérateur d'onde. Chapitre 10, nous avons vu que l'opérateur d'onde temporel est, à la limite adiabatique, une succession d'opérateurs d'onde de Bloch instantanés. Nous allons dans ce chapitre, exploiter ces résultats pour notre modèle géométrique de dynamique quantique.

On a déjà évoqué la façon d'utiliser la théorie des opérateurs d'onde pour le calcul des vecteurs propres instantanés en chaque point du réseau X du transport adiabatique discret. On va voir ici, que la théorie des opérateurs d'onde, permet de plus, de corriger d'éventuelles erreurs à l'adiabaticité forte. Partie I chapitre 3, a été étudiée la théorie des espaces actifs se déformant, qui est décrite par le fibré universel $(V_M^{(U)}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), G, \pi_U)$. On a vu comment le cas adiabatique se plongeait dans ce modèle (par le théorème de classification universelle) et on a donné une version discrète de celui-ci. Mais pour les systèmes où l'adiabaticité forte n'est jamais vérifiée, mais pour lesquels une adiabaticité faible peut être définie, ce travail n'a pas été effectué. Ainsi si on désigne par \mathcal{M} la variété de contrôle d'un système dynamique satisfaisant à une condition d'adiabaticité faible, on a un diagramme commutatif :

$$\begin{array}{ccc} J & \xleftarrow{f^*} & V_M^{(U)}(\mathbb{C}^n) \\ \pi_J \downarrow & & \downarrow \pi_U \\ \mathcal{M} & \xrightarrow{f} & G_M(\mathbb{C}^n) \end{array}$$

où $(J, \mathcal{M}, G, \pi_J)$ est le fibré principal des espaces actifs se déformant **sur** la variété de contrôle, et

$$f : \begin{array}{l} \mathcal{M} \rightarrow G_M(\mathbb{C}^n) \\ \vec{R} \mapsto \sum_{a=1}^M |\tilde{\psi}_a(\vec{R})\rangle \langle \tilde{\psi}_a(\vec{R})| \end{array} \quad (11.1)$$

où $(|\tilde{\psi}_a(\vec{R})\rangle)_{a=1, \dots, M}$ est une base de l'espace actif se déformant sur \mathcal{M} . Le transport parallèle dans J engendre une phase de Aharonov-Anandan. Le problème est de trouver la fonction f ;

fonction qui définit complètement le modèle d'espace actif se déformant, ce qui revient à sélectionner les vecteurs $\{|\tilde{\psi}_a(\vec{R})\rangle\}$. Dans le cas adiabatique au sens fort, on sait que l'image de f est une sous-variété de projecteurs spectraux. On propose ici, de donner (dans le cas discret), un modèle basé sur la théorie des opérateurs d'onde, qui va définir f . De plus, c'est le "mixage" de ce modèle de transport parallèle non-adiabatique discret avec le modèle de transport adiabatique discret, qui va nous donner une méthode de correction des erreurs à l'adiabaticité forte, le lien entre les deux modèles étant le théorème adiabatique de l'opérateur d'onde. Tout ceci fait l'objet de la première section de ce chapitre. Dans la seconde, nous proposons une formulation géométrique de la théorie des opérateurs d'onde temporel, que l'on peut considérer comme la version continue du modèle discret de la première section.

11.1 Transport parallèle discret par succession d'opérateurs d'onde temporels

Dans cette section, nous établissons une formule de transport parallèle discret (sans hypothèses adiabatiques fortes), puis nous explicitons l'usage des opérateurs d'onde dans la méthode numérique de transport adiabatique discret.

11.1.1 Transport parallèle discret

On considère un système dynamique quantique d'Hamiltonien $t \mapsto H(t)$ sur un espace de Hilbert \mathcal{H} . On désigne par $U(t, 0)$ l'opérateur d'évolution engendré par $H(t)$. Soit $\mathcal{P}_N = \{0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N = t\}$ une partition de $[0, t]$ telle que $\Delta t_i = t_{i+1} - t_i$ puisse être considéré comme au voisinage de zéro par rapport au temps d'interaction expérimentalement significatif. Soit S_0 un espace actif de dimension M sélectionné au temps $t = 0$. On a $U(t, 0) = \mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} U(t_{i+1}, t_i)$. On désigne par $S_i = U(t_i, 0)S_0 = U(t_i, t_{i-1})S_{i-1}$ l'espace actif déformé au temps t_i et par P_i le projecteur orthogonal sur S_i (on remarquera que $\dim S_{i+1} = \dim S_i$). Soit $\Omega_i = U(t_{i+1}, t_i)(P_i U(t_{i+1}, t_i)P_i)^{-1}$ l'opérateur d'onde temporel au temps t_i (on suppose la partition \mathcal{P}_N choisie de manière à ce que $\text{dist}_{FS}(S_{i+1}, S_i) < \frac{\pi}{2}$), et soit $U^{eff}(t_{i+1}, t_i)$ l'opérateur d'évolution effectif engendré par $H_i^{eff}(t) = P_i H(t) \Omega_i(t)$. Au lieu de ne considérer qu'une seule étape avec un seul opérateur d'onde associé à S_0 , on considère une succession d'opérateurs d'onde associés aux espaces S_i qui se déforment en fonction de la partition du temps. Une telle méthode multipas, peut être utile si par exemple $\text{dist}_{FS}(S_N, S_0) = \frac{\pi}{2}$ où le traitement en un pas est impossible. On a clairement la propriété fondamentale suivante :

$$\forall i, \quad U(t_{i+1}, t_i)P_i = \Omega_i U^{eff}(t_{i+1}, t_i)P_i \quad (11.2)$$

d'où

$$U(t, 0) = \mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} \Omega_i U^{eff}(t_{i+1}, t_i)P_i \quad (11.3)$$

Soit $(\tilde{\psi}_a^i)_{a=1, \dots, M}$ une base orthonormée de S_i . Une analyse continue requerrait une condition \mathcal{C}^1 sur cette base, mais dans une analyse discrète, on n'a besoin que d'une condition plus faible, que l'on désignera par \mathcal{C}^1 -faible, et donnée par :

$$\langle \tilde{\psi}_a^{i+1} | \tilde{\psi}_b^i \rangle + \langle \tilde{\psi}_a^i | \tilde{\psi}_b^{i+1} \rangle = 2\delta_{ab} + \mathcal{O}(\Delta t_i^2) \quad (11.4)$$

Soit $\forall i < N$, $\tilde{\psi}_a^{0, i+1} = P_i \tilde{\psi}_a^{i+1}$ la projection du a -ième vecteur de la $(i+1)$ -ième base sur le i -ième espace actif. Soit Z_i la matrice dont la a -ième colonne est la liste des composantes de $\tilde{\psi}_a^i$ dans une base de référence de \mathcal{H} . Notons que $Z_i^\dagger Z_i = I_M$. On a de plus

$$\Omega_i = \sum_{a, b} (U_i^{-1} T_{i+1} U_i)_{ab}^{-1} |\psi_a^{i+1}\rangle \langle \psi_b^{0, i+1}| \quad (11.5)$$

où $(T_{i+1})_{ab} = \langle \tilde{\psi}_a^{0,i+1} | \tilde{\psi}_b^{0,i+1} \rangle$ et où $U_i \in U(M)$ est tel que $\psi_b^{0,i+1} = \sum_b (U_i)_{ba} \psi_b^{0,i}$ soit la solution à $t = t_{i+1}$ de l'équation $i\hbar \partial_t \psi(t) = H_i^{eff}(t) \psi(t)$ avec $\psi(t_i) = \tilde{\psi}_a^{0,i}$.

$$\Omega_i = \sum_{abcd} (U_i^{-1})_{ac} (T_{i+1}^{-1})_{cd} (U_i)_{db} |\psi_a^{i+1}\rangle \langle \psi_b^{0,i+1}| \quad (11.6)$$

$$= \sum_{cd} (T_{i+1}^{-1})_{cd} \left(\sum_a (U_i^{-1})_{ac} |\psi_a^{i+1}\rangle \right) \left(\sum_b (U_i)_{db} \langle \psi_b^{0,i+1}| \right) \quad (11.7)$$

$$= \sum_{cd} (T_{i+1}^{-1})_{cd} |\tilde{\psi}_c^{i+1}\rangle \langle \tilde{\psi}_d^{0,i+1}| \quad (11.8)$$

On définit A_i (le potentiel de jauge discret) par

$$A_i \Delta t_i = I_M - Z_{i+1}^\dagger Z_i \quad (11.9)$$

En utilisant la condition \mathcal{C}^1 -faible, on trouve

$$\left[Z_{i+1}^\dagger Z_{i+1} \right]_{ab} = \delta_{ab} + (A_i)_{ab} \Delta t_i + \mathcal{O}(\Delta t_i) \quad (11.10)$$

avec $(A_i)_{ab} = \frac{\delta_{ab} - \langle \tilde{\psi}_a^{i+1} | \tilde{\psi}_b^i \rangle}{\Delta t_i}$. On a de plus

$$(T_{i+1})_{ab} = \sum_{cd} \langle \tilde{\psi}_a^{i+1} | \tilde{\psi}_c^i \rangle \langle \tilde{\psi}_d^i | \tilde{\psi}_b^{i+1} \rangle \langle \tilde{\psi}_c^i | \tilde{\psi}_d^i \rangle \quad (11.11)$$

$$= \sum_c \langle \tilde{\psi}_a^{i+1} | \tilde{\psi}_c^i \rangle \langle \tilde{\psi}_c^i | \tilde{\psi}_b^{i+1} \rangle \quad (11.12)$$

$$= \left[Z_{i+1}^\dagger Z_i Z_i^\dagger Z_{i+1} \right]_{ab} \quad (11.13)$$

$$= \delta_{ab} + \mathcal{O}(\Delta t_i^2) \quad (11.14)$$

et on trouve

$$\Omega_i = \sum_{abc} (T_{i+1}^{-1})_{ab} \langle \tilde{\psi}_b^{i+1} | \tilde{\psi}_c^i \rangle |\tilde{\psi}_a^{i+1}\rangle \langle \tilde{\psi}_c^i| \quad (11.15)$$

$$= \sum_{ac} \left[Z_{i+1}^\dagger Z_i \right]_{ac} |\tilde{\psi}_a^{i+1}\rangle \langle \tilde{\psi}_c^i| + \mathcal{O}(\Delta t_i^2) \quad (11.16)$$

$$= \sum_{ac} [I_M - A_i \Delta t_i]_{ac} |\tilde{\psi}_a^{i+1}\rangle \langle \tilde{\psi}_c^i| + \mathcal{O}(\Delta t_i^2) \quad (11.17)$$

$$= \sum_{ac} [e^{-A_i \Delta t_i}]_{ac} |\tilde{\psi}_a^{i+1}\rangle \langle \tilde{\psi}_c^i| + \mathcal{O}(\Delta t_i^2) \quad (11.18)$$

de plus

$$H_i^{eff}(t_i) \Delta t_i = \sum_{ab} \langle \tilde{\psi}_a^i | P_i H(t_i) \Omega_i | \tilde{\psi}_b^i \rangle |\tilde{\psi}_a^i\rangle \langle \tilde{\psi}_b^i| \Delta t_i \quad (11.19)$$

$$= \sum_{ab} \langle \tilde{\psi}_a^i | H(t_i) | \tilde{\psi}_b^i \rangle \Delta t_i |\tilde{\psi}_a^i\rangle \langle \tilde{\psi}_b^i| + \mathcal{O}(\Delta t_i^2) \quad (11.20)$$

$$= \sum_{ab} (E_i)_{ab} \Delta t_i |\tilde{\psi}_a^i\rangle \langle \tilde{\psi}_b^i| + \mathcal{O}(\Delta t_i^2) \quad (11.21)$$

En écrivant que $U^{eff}(t_{i+1}, t_i) \sim e^{-i\hbar^{-1} H_i^{eff}(t_i) \Delta t_i} \sim \sum_{ab} [e^{-i\hbar^{-1} E_i \Delta t_i}]_{ab} |\tilde{\psi}_a^i\rangle \langle \tilde{\psi}_b^i|$, on a

$$U(t, 0) P_0 \sim \mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} \left(\sum_{abc} [e^{-A_i \Delta t_i}]_{bc} [e^{-i\hbar^{-1} E_i \Delta t_i}]_{ca} |\tilde{\psi}_b^{i+1}\rangle \langle \tilde{\psi}_a^i| \right) \quad (11.22)$$

$$\sim \sum_{ab} \left[\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-A_i \Delta t_i} e^{-i\hbar^{-1} E_i \Delta t_i} \right]_{ba} |\tilde{\psi}_b^N\rangle \langle \tilde{\psi}_a^0| \quad (11.23)$$

En enfin, si $\psi(0) = \tilde{\psi}_a^0$ alors

$$\psi(t) = \mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} \Omega_i U^{eff}(t_{i+1}, t_i) \tilde{\psi}_a^0 \quad (11.24)$$

$$= \sum_b \left[\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-A_i \Delta t_i} e^{-i \hbar^{-1} E_i \Delta t_i} \right]_{ba} \tilde{\psi}_b^N \quad (11.25)$$

Une succession de transformations opérateurs d'onde est donc un transport parallèle discret, pour lequel la succession des Hamiltoniens effectifs est responsable de la phase dynamique non-abélienne et la succession des opérateurs d'onde est responsable de la phase de Aharonov-Anandan non-abélienne. Comme dans le cas du transport adiabatique discret, on a une définition intrinsèque du potentiel de jauge discret : $(A_i)_{ab} = \frac{\delta_{ab} - \langle \tilde{\psi}_a^{i+1} | \Omega_i | \tilde{\psi}_b^i \rangle}{\Delta t_i}$. Notons que la formule 11.24 est exacte, ainsi que la formule

$$\psi(t) = \sum_b \left[\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} \Omega_i e^{-i \hbar^{-1} H_i^{eff}(t_i) \Delta t_i} \right]_{ba} \tilde{\psi}_b^N \quad (11.26)$$

si l'Hamiltonien est une fonction en escalier associée à la partition \mathcal{P}_N . Notons enfin la grande similitude avec le transport adiabatique discret, qui est de plus renforcée par le fait qu'à la limite adiabatique $\langle \tilde{\psi}_a^{i+1} | \Omega_i | \tilde{\psi}_b^i \rangle = \langle a, i+1 | P_{i+1} (P_i P_{i+1} P_i)^{-1} | b, i \rangle = \langle a, i+1 | b, i \rangle + \mathcal{O}(\Delta t_i^2)$, ce qui assure que le transport parallèle discret associé à une succession d'opérateurs d'onde est un transport adiabatique discret à la limite adiabatique.

Cette formule nous permet de considérer un modèle géométrique discret analogue à celui du chapitre 7, mais pour une adiabaticité faible (espaces actifs se déformant). Soit X un réseau de discrétisation de \mathcal{M} , construit à la manière du chapitre 7 avec des mailles uniformes par rapport à la distance de Fubini-Study (ou à la distance cordale). Le réseau X étant choisi de manière que d'un point à un de ses plus proches voisins, un seul paramètre de contrôle varie, on calcule pour chaque point $x \in X$, $(E_i)_{ab} = \langle \psi_a^i | H(x) | \psi_b^i \rangle$, $H(x)$ étant l'Hamiltonien pour les paramètres de contrôle en x , et pour chaque arête $\langle xy \rangle$ entre plus proches voisins, on calcule Ω_{xy} correspondant à l'Hamiltonien $H(\vec{R}(t))$ où $t \mapsto \vec{R}(t)$ est une interpolation linéaire telle que $\vec{R}(0) = x$ et $\vec{R}(\Delta t_{xy}) = y$, sur une durée arbitraire Δt_{xy} . Notons que les vitesses de parcours dans X , entre les points x et y ne devront par trop s'écarter de la durée Δt_{xy} pour que la description reste valide. Comme dans le cas adiabatique la matrice $f_{xy} \in C^1(X, GL(M, \mathbb{C}))$ telle que $(f_{xy})_{ab} = \langle \psi_a^y | \Omega_{xy} | \psi_b^x \rangle$, constitue la connexion discrète. Si le système vérifie un théorème adiabatique (régime adiabatique au sens fort), alors le réseau X d'espaces actifs, du fait du théorème adiabatique des opérateurs d'onde, devient un réseau d'espaces actifs adiabatiques comme dans le chapitre 7.

11.1.2 Opérateurs d'onde et transport adiabatique discret

Comme nous l'avons déjà expliqué, la construction de X dans le cas du transport adiabatique discret, se fait en calculant les vecteurs propres instantanés à l'aide des opérateurs d'onde de Bloch, eux-mêmes calculés à partir de l'algorithme RDWA. Lorsque des difficultés se présentent en un point x (par exemple à cause d'un état intrus), on peut utiliser la méthode dépendante du temps explicitée au chapitre 9 par calculer l'opérateur d'onde temporel afin d'obtenir des vecteurs propres (moins convergés), avec $H(t) = H_x + (H_y - H_x)f(t)$ où $f(t) = t/\Delta t_{xy}$ pour $t \in [0, \Delta t_{xy}]$. Ceci est équivalent à utiliser l'opérateur d'onde temporel comme dans le paragraphe précédent : on calcule en fait une base de l'espace actif (non-adiabatique) en y à partir de x , mais proche (au sens de Fubini-Study) des vecteurs propres. Les points ou les zones où on a recours à cette méthode ne correspondent plus au transport adiabatique (adiabaticité forte), mais à des régions où le régime devient adiabatique faible, la base de l'espace actif, qui n'est plus tout à fait une base propre, prenant en compte l'effet des états intrus. Ce subterfuge permet de corriger les erreurs à l'adiabaticité forte, la cohérence

étant assurée par le théorème adiabatique de l'opérateur d'onde, qui affirme que dans les zones où le régime peut être considéré comme adiabatique fort, le transport parallèle discret par opérateurs d'onde est le transport adiabatique discret.

11.2 Formulation géométrique des opérateurs d'onde temporels

On a vu dans le chapitre précédent que la théorie effective des opérateurs d'onde préservait le transport parallèle, les phases de Berry et dynamique étant contenues dans l'opérateur d'évolution effectif. Dans la section précédente, on a vu qu'une succession de transformations opérateurs d'onde, est un transport parallèle discret, où l'opérateur d'onde est responsable du phénomène de phase géométrique et où l'Hamiltonien effectif est responsable de la phase dynamique. Dans cette section, nous montrerons que l'opérateur d'onde associé à une transformation en un seul pas, est lui-même un transport parallèle. La théorie des opérateurs d'onde ne conservant pas l'auto-adjonction, on se place directement dans le fibré universel dissipatif $\mathcal{U}^{\mathbb{U}} = (V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$, et on reprend les notations des sections 3.4 et 3.5.

Avant d'introduire cette formulation géométrique des opérateurs d'onde, nous devons toutefois préciser certains points.

11.2.1 Généralisation maximale de la théorie des phases géométriques en mécanique quantique

À de nombreuses reprises au cours de ce texte, nous avons introduit des propositions exprimant la fonction d'onde d'un système dynamique quantique en termes d'une phase géométrique et d'une phase dynamique, la proposition la plus générale portant sur un espace actif se déformant. C'est cette dernière proposition que l'on généralise ici.

Proposition 11. *Soit un système dynamique quantique gouverné par un Hamiltonien $t \mapsto H(t)$ sur \mathcal{H} . Soit $t \mapsto S(t)$ un espace actif se déformant de projecteur orthogonal $P(t)$ qui par définition satisfait à l'équation de Schrödinger-von Neumann*

$$i\hbar \frac{dP(t)}{dt} = [H(t), P(t)] \quad (11.27)$$

Soit $(|\alpha(t)\rangle)_{\alpha=1, \dots, M}$ une base de $S(t)$ (sans aucune hypothèse d'orthonormalisation) et soit $(|\alpha(t)\#\rangle)_{\alpha=1, \dots, M}$ une base qui lui est biorthogonale, c'est à dire telle que

$$\forall t, \forall \alpha, \beta = 1, \dots, M \quad \langle \alpha(t)\# | \beta(t) \rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad (11.28)$$

Soit $t \mapsto \psi_{\alpha}(t)$ solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \partial_t \psi_{\alpha}(t) = H(t) \psi_{\alpha}(t) \quad \psi_{\alpha}(0) = |\alpha(0)\rangle \quad (11.29)$$

Par définition de l'espace actif se déformant, on a $\psi_{\alpha}(t) \in S(t)$. Alors la représentation de ψ_{α} dans l'espace actif est

$$\psi_{\alpha}(t) = \sum_{\beta=1}^M \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(t') dt' - \int_0^t A(t') dt'} \right]_{\beta\alpha} |\beta(t)\rangle \quad (11.30)$$

où les matrices E et A de $\mathcal{M}_{M \times M}(\mathbb{C})$ sont définies par

$$E(t)_{\alpha\beta} = \langle \alpha(t)\# | H(t) | \beta(t) \rangle \quad A(t)_{\alpha\beta} = \langle \alpha(t)\# | \partial_t | \beta(t) \rangle \quad (11.31)$$

Preuve :

On sait que $\psi_\alpha(t) \in S(t) \forall t$, comme $\{|\alpha(t)\rangle\}$ est une base de $S(t)$, $\forall \alpha$ et $\forall t$, $\exists \{U_{\beta\alpha}(t) \in \mathbb{C}\}_{\beta=1, \dots, M}$ tel que

$$\psi_\alpha(t) = \sum_{\beta=1}^M U_{\beta\alpha}(t) |\beta(t)\rangle \quad (11.32)$$

On groupe les nombres $\{U_{\beta\alpha}\}_{\alpha, \beta}$ au sein d'une matrice $U \in \mathcal{M}_{M \times M}(\mathbb{C})$. ψ_α étant solution de l'équation de Schrödinger, on a

$$i\hbar \sum_{\beta} \dot{U}_{\beta\alpha}(t) |\beta(t)\rangle + i\hbar \sum_{\beta} U_{\beta\alpha}(t) \partial_t |\beta(t)\rangle = \sum_{\beta} U_{\beta\alpha}(t) H(t) |\beta(t)\rangle \quad (11.33)$$

En projetant cette équation sur $|\gamma(t)\rangle$, on a

$$\dot{U}_{\gamma\alpha} = -i\hbar^{-1} \sum_{\beta} U_{\beta\alpha} \langle \gamma(t) | H(t) | \beta(t) \rangle - \sum_{\beta} U_{\beta\alpha} \langle \gamma(t) | \partial_t | \alpha(t) \rangle \quad (11.34)$$

en réécrivant cette équation sous forme matricielle

$$\partial_t U = (-i\hbar^{-1} E(t) - A(t)) U \quad (11.35)$$

qui a pour solution

$$U(t) = \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(t') dt' - \int_0^t A(t') dt'} \quad (11.36)$$

■

Cette proposition est le contexte le plus général d'apparition d'un phénomène de phase géométrique en mécanique quantique. Si on suppose $\{|\alpha(t)\rangle\}$ orthonormée (et donc biorthogonale à elle-même), on retrouve la théorie des phases de Aharonov-Anandan non-abéliennes introduite chapitre 3. De même si H est auto-adjoint, avec pour $\{|\alpha(t)\rangle\}$ une base de vecteurs propres instantanés, où si H n'est pas auto-adjoint avec pour $\{|\alpha\rangle\}$ une base de vecteurs propres généralisés et $|\alpha^\sharp\rangle = |\alpha^*\rangle$, on retrouve la théorie des phases de Berry-Simon non-abéliennes. Enfin les phases dynamique et géométrique effectives introduites au chapitre précédent satisfont à cette proposition. En introduisant $Z(t)$ la matrice des vecteurs $\{|\alpha(t)\rangle\}$ dans une base de référence de \mathcal{H} , et $Z^\sharp(t)$ la matrice des vecteurs $\{|\alpha(t)\rangle^\sharp\}$ dans cette même base, on a

$$E(t) = Z^\sharp(t)^\dagger H(t) Z(t) \quad A(t) = Z^\sharp(t)^\dagger \partial_t Z(t) \quad (11.37)$$

$A = Z^\sharp dZ$ est le potentiel de jauge d'une connexion de $(V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$ dont la condition d'horizontalité est donnée par la propriété suivante.

Propriété 16. Soit $\{t \mapsto \psi_\alpha(t)\}_{\alpha=1, \dots, M}$ un ensemble de fonctions de $S(t)$ telles que $\psi_\alpha(0) = |\alpha(0)\rangle$. $\{\psi_\alpha\}$ sont les fonctions d'onde de l'espace actif se déformant sans phase dynamique, i.e.

$$\psi_\alpha(t) = \sum_{\beta=1}^M \left[\mathbb{T} e^{-\int_0^t A(t') dt'} \right]_{\beta\alpha} |\beta(t)\rangle \quad (11.38)$$

si et seulement si

$$\langle C^\sharp(t) \psi_\alpha(t) | \partial_t | \psi_\beta(t) \rangle = 0 \quad \forall \alpha, \beta \quad (11.39)$$

où $C^\sharp(t)$ est un opérateur de $S(t)$ défini par

$$\forall \alpha, \quad C^\sharp(t) |\alpha(t)\rangle = |\alpha(t)\rangle^\sharp \quad (11.40)$$

Preuve :

Premièrement. On suppose que ψ_α est la fonction d'onde de l'espace actif se déformant, i.e. $\psi_\alpha(t) = \sum_\beta U_{\beta\alpha} |\beta(t)\rangle$, avec $U(t) = \mathbb{T}e^{-\int_0^t A(t') dt'}$. Par définition $\frac{dU}{dt} = -AU$, donc

$$\partial_t \psi_\alpha = - \sum_{\beta\gamma} A_{\beta\gamma} U_{\gamma\alpha} |\beta(t)\rangle + \sum_\beta U_{\beta\alpha} \partial_t |\beta(t)\rangle \quad (11.41)$$

On projette cette équation sur $\langle C^\sharp \psi_\epsilon | = \sum_\delta U_{\epsilon\delta}^* \langle \delta(t) | \sharp$

$$\langle C^\sharp \psi_\epsilon | \partial_t | \psi_\alpha \rangle = - [U^\dagger AU]_{\epsilon\alpha} + [U^\dagger AU]_{\epsilon\alpha} = 0 \quad (11.42)$$

Deuxièmement. On suppose que $\langle C^\sharp \psi_\gamma | \partial_t | \psi_\alpha \rangle = 0$. $\psi_\alpha(t) \in S(t)$ et $\{|\alpha(t)\rangle\}$ est une base de $S(t)$, donc $\exists U_{\beta\alpha}(t) \in \mathbb{C}$ tels que $\psi_\alpha(t) = \sum_\beta U_{\beta\alpha}(t) |\beta(t)\rangle$, d'où

$$\langle C^\sharp \psi_\gamma | \partial_t | \psi_\alpha \rangle = 0 \Rightarrow \sum_{\delta\beta} U_{\beta\alpha}^* \dot{U}_{\beta\alpha} \langle \delta(t) | \sharp | \beta(t) \rangle + \sum_{\beta\gamma} U_{\beta\gamma}^* U_{\beta\alpha} \langle \delta(t) | \sharp | \partial_t | \beta(t) \rangle \quad (11.43)$$

$$\Rightarrow [U^\dagger \dot{U}]_{\gamma\alpha} = - [U^\dagger AU]_{\gamma\alpha} \quad (11.44)$$

et donc $\dot{U} = -AU$. ■

La réintégration de la phase dynamique se fait en utilisant un composite comme explicité chapitre 6.

11.2.2 Expression géométrique des opérateurs d'onde

Soit $P_0, P \in G_M(\mathbb{C}^n)$, $Z \in \pi_U^{-1}(P)$ et $Z_0 \in \pi_U^{-1}(P_0)$ (i.e. $P = ZZ^\dagger$ et $P_0 = Z_0 Z_0^\dagger$). Si $\text{dist}_{FS}(Z, Z_0) < \frac{\pi}{2}$ alors $(P_0 P P_0)^{-1}$ existe et peut définir un opérateur d'onde de Bloch généralisé $P(P_0 P P_0)^{-1}$ (généralisé car pour l'opérateur d'onde de Bloch usuel, P et P_0 doivent être des projecteurs spectraux). Soient $\{|\alpha_0\rangle\}$ et $\{|\alpha\rangle\}$ des bases de Z_0 et Z . On a

$$P_0 P P_0 = \sum_{\alpha\beta\gamma} |\alpha_0\rangle \langle \alpha_0 | \beta \rangle \langle \beta | \gamma_0 \rangle \langle \gamma_0 | \quad (11.45)$$

$$= \sum_{\alpha\gamma} [Z_0^\dagger Z Z^\dagger Z_0]_{\alpha\gamma} |\alpha_0\rangle \langle \gamma_0 | \quad (11.46)$$

d'où

$$(P_0 P P_0)^{-1} = \sum_{\alpha\gamma} [(Z^\dagger Z_0)^{-1} (Z_0^\dagger Z)^{-1}]_{\alpha\gamma} |\alpha_0\rangle \langle \gamma_0 | \quad (11.47)$$

et donc

$$P(P_0 P P_0)^{-1} = \sum_{\alpha\beta\gamma} [(Z^\dagger Z_0)^{-1} (Z_0^\dagger Z)^{-1}]_{\alpha\gamma} |\beta\rangle \langle \beta | \alpha_0 \rangle \langle \gamma_0 | \quad (11.48)$$

$$= \sum_{\beta\gamma} [Z^\dagger Z_0 (Z^\dagger Z_0)^{-1} (Z_0^\dagger Z)^{-1}]_{\beta\gamma} |\beta\rangle \langle \gamma_0 | \quad (11.49)$$

$$= \sum_{\beta\gamma} [(Z_0^\dagger Z)^{-1}]_{\beta\gamma} |\beta\rangle \langle \gamma_0 | \quad (11.50)$$

L'opérateur d'onde de Bloch $P(P_0 P P_0)^{-1}$ est donc une application linéaire de $\pi_E^{-1}(P_0)$ vers $\pi_E^{-1}(P)$ représentée par la matrice $(Z_0^\dagger Z)^{-1}$ (on rappelle que $(E, G_M(\mathbb{C}^n), \mathbb{C}^M, \pi_E)$ est le fibré vectoriel associé à $\mathcal{U}^{\dot{U}}$).

Considérons maintenant l'opérateur d'onde temporel $\Omega(t) = U(t, 0)(P(0)U(t, 0)P(0))^{-1}$. Soit $V(t) = \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E(t')dt' - \int_0^t A(t')dt'}$ où $E(t) = Z(t)^\dagger H(t)Z(t)$, $A(t) = Z(t)^\dagger \partial_t Z(t)$ et où $\pi_U(Z(t)) = P(t)$ est solution de l'équation de Schrödinger-von Neumann :

$$i\hbar \frac{dP(t)}{dt} = [H(t), P(t)] \quad (11.51)$$

On a alors pour la fonction d'onde correspondant à la condition initiale $\psi_\alpha(0) = |\alpha(0)\rangle$, et compte tenu de la théorie des phases de Aharonov-Anandan

$$\psi_\alpha(t) = U(t, 0)|\alpha(0)\rangle = \sum_{\beta} V(t)_{\beta\alpha} |\beta(t)\rangle \quad (11.52)$$

donc $\langle \beta(t) | U(t, 0) | \alpha(0) \rangle = V(t)_{\beta\alpha}$,

$$U(t, 0) = \sum_{\alpha\beta} V(t)_{\beta\alpha} |\beta(t)\rangle \langle \alpha(0)| \quad (11.53)$$

On peut donc écrire

$$P(0)U(t, 0)P(0) = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V(t)_{\beta\alpha} |\gamma(0)\rangle \langle \gamma(0) | \beta(t)\rangle \langle \alpha(0) | \delta(0)\rangle \langle \delta(0)| \quad (11.54)$$

$$= \sum_{\gamma\alpha} \left[Z^\dagger(0)Z(t)V(t) \right]_{\gamma\alpha} |\gamma(0)\rangle \langle \alpha(0)| \quad (11.55)$$

donc

$$(P(0)U(t, 0)P(0))^{-1} = \sum_{\gamma\alpha} \left[V(t)^{-1}(Z^\dagger(0)Z(t))^{-1} \right]_{\gamma\alpha} |\gamma(0)\rangle \langle \alpha(0)| \quad (11.56)$$

et finalement

$$U(t, 0)(P(0)U(t, 0)P(0))^{-1} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V(t)_{\beta\delta} \left[V(t)^{-1}(Z^\dagger(0)Z(t))^{-1} \right]_{\gamma\alpha} |\beta(t)\rangle \langle \delta(0) | \gamma(0)\rangle \langle \alpha(0)| \quad (11.57)$$

$$= \sum_{\beta\alpha} \left[V(t)V(t)^{-1}(Z^\dagger(0)Z(t))^{-1} \right]_{\beta\alpha} |\beta(t)\rangle \langle \alpha(0)| \quad (11.58)$$

$$= \sum_{\beta\alpha} \left[(Z^\dagger(0)Z(t))^{-1} \right]_{\beta\alpha} |\beta(t)\rangle \langle \alpha(0)| \quad (11.59)$$

11.2.3 L'opérateur d'onde temporel en tant que relèvement horizontal dans le fibré des espaces actifs

Soit $Z \in V_M(\mathbb{C}^n)$, $\forall W \in V_M(\mathbb{C}^n)$ tel que $\text{dist}_{FS}(W, Z) < \frac{\pi}{2}$, $Z_W = W(Z^\dagger W)^{-1}$ est tel que $Z_W^\dagger Z = I_M$, en effet $Z_W^\dagger Z = (W^\dagger Z)^{-1} W^\dagger Z = I_M$. L'ensemble de vecteurs défini par Z_W est biorthogonal à la base définie par Z . On considère maintenant $t \mapsto Z(t) \in V_M(\mathbb{C}^n)$ tel que $\pi_U(Z(t)) = P(t)$ soit solution de l'équation de Schrödinger-von Neumann et tel que $\forall t$, $\text{dist}_{FS}(Z(t), Z(0)) < \frac{\pi}{2}$. On sait que la fonction d'onde matricielle obtenue pour toutes les conditions initiales pures, Ψ , solution de l'équation de Schrödinger, est

$$\Psi(t) = Z(t) \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E_0^\sharp(t')dt' - \int_0^t A_0^\sharp(t')dt'} \quad (11.60)$$

où

$$A_0^\sharp(t) = (Z^\dagger(0)Z(t))^{-1} Z^\dagger(0) \partial_t Z(t) \quad E_0^\sharp(t) = (Z^\dagger(0)Z(t))^{-1} Z^\dagger(0) H(t) Z(t) \quad (11.61)$$

en d'autres termes $A_0^\sharp = Z_{Z(0)}^\dagger(t)\partial_t Z(t)$ et $E_0^\sharp = Z_{Z(0)}^\dagger(t)H(t)Z(t)$.

Soit $\tilde{\Omega}(t) = (Z^\dagger(0)Z(t))^{-1}$, alors

$$\frac{d}{dt}(Z^\dagger(0)Z(t))^{-1} = -(Z^\dagger(0)Z(t))^{-1}Z^\dagger(0)\frac{dZ(t)}{dt}(Z^\dagger(0)Z(t))^{-1} \quad (11.62)$$

en d'autres termes

$$\frac{d\tilde{\Omega}(t)}{dt} = -A_0^\sharp(t)\tilde{\Omega}(t) \quad (11.63)$$

On en conclut que

$$\Omega(t) = \sum_{\alpha\beta} \left[\mathbb{T}e^{-\int_0^t A_0^\sharp(t')dt'} \right]_{\beta\alpha} |\beta(t)\rangle \langle \alpha(0)| \quad (11.64)$$

L'opérateur d'onde temporel est donc un relèvement horizontal dans $(V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), GL(M, \mathbb{C}), \pi_U)$ pour la connexion définie par le potentiel de jauge $A_{Z(0)}^\sharp(ZZ^\dagger) = (Z(0)^\dagger Z)^{-1}Z^\dagger(0)dZ \in \Omega^1(G_M(\mathbb{C}^n), \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C}))$. En fait la théorie des opérateurs d'onde est associée à une famille de connexions définies par

$$\begin{aligned} V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) &\rightarrow \Omega^1(G_M(\mathbb{C}^n), \mathfrak{gl}(M, \mathbb{C})) \\ W &\mapsto A_W^\sharp(ZZ^\dagger) = (W^\dagger Z)^{-1}W^\dagger dZ = Z_W^\dagger dZ \end{aligned} \quad (11.65)$$

cette famille de connexions est aussi définie par une famille de 1-forme de connexion ω_W :

$$\forall F \in V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n), \forall \Phi \in T_F V_M^{\mathbb{U}}(\mathbb{C}^n) \quad \omega_W(\Phi) = (W^\dagger F)^{-1}W^\dagger \Phi \quad (11.66)$$

pour lesquels, les conditions d'horizontalité sont

$$(W^\dagger \Psi(t))^{-1}W^\dagger \partial_t \Psi(t) = 0 \quad (11.67)$$

On retrouve la structure générale des phases géométriques introduite en début de section. Dans la théorie usuelle des opérateurs d'onde, on choisit la connexion associée à la condition initiale $W = Z(0)$.

On veut séparer dans l'expression de ψ_α la phase géométrique de la phase dynamique. En vertu du théorème de la représentation intermédiaire (cf. annexe A), on a

$$\psi_\alpha(t) = \sum_{\beta} \left[\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E_0^\sharp(t')dt' - \int_0^t A_0^\sharp(t')dt'} \right]_{\beta\alpha} |\beta(t)\rangle \quad (11.68)$$

$$= \sum_{\beta\gamma} \underbrace{\left[\mathbb{T}e^{-\int_0^t A_0^\sharp(t')dt'} \right]_{\beta\gamma}}_{\tilde{\Omega}(t)_{\beta\gamma}} \left[\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \tilde{\Omega}(t')^{-1} E_0^\sharp(t') \tilde{\Omega}(t') dt'} \right]_{\gamma\alpha} |\beta(t)\rangle \quad (11.69)$$

Mais

$$\tilde{\Omega}^{-1}(t)E_0^\sharp(t)\tilde{\Omega}(t) = Z^\dagger(0)Z(t)(Z^\dagger(0)Z(t))^{-1}Z^\dagger(0)H(t)Z(t)(Z^\dagger(0)Z(t))^{-1} \quad (11.70)$$

$$= Z^\dagger(0)H(t)Z(t)(Z^\dagger(0)Z(t))^{-1} \quad (11.71)$$

et donc

$$\left[\tilde{\Omega}(t)^{-1}E_0^\sharp(t)\tilde{\Omega}(t) \right]_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma} \langle \alpha(0)|H(t)|\gamma(t)\rangle \langle \gamma(t)|\Omega(t)|\beta(0)\rangle \quad (11.72)$$

et finalement

$$\sum_{\alpha\beta} \left[\tilde{\Omega}(t)^{-1}E_0^\sharp(t)\tilde{\Omega}(t) \right]_{\alpha\beta} |\alpha(0)\rangle \langle \beta(0)| = P(0)H(t)\Omega(t) = H^{eff}(t) \quad (11.73)$$

et donc

$$\psi_\alpha(t) = \Omega(t) \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t H^{eff}(t') dt'} |\alpha(0)\rangle \quad (11.74)$$

On voit que la théorie des opérateurs d'onde temporels est simplement un phénomène de phase géométrique où on a séparé phases géométrique et dynamique. L'Hamiltonien effectif associé à l'opérateur d'onde, émerge spontanément comme le générateur de la phase dynamique conjugué par la phase géométrique apportée par l'opérateur d'onde.

Notons le point important suivant. Contrairement à la connexion universelle, les connexions des opérateurs d'onde ne sont pas définies sur toute la variété de base $G_M(\mathbb{C}^n)$. Soit $W \in V_M(\mathbb{C}^n)$, le potentiel de jauge de l'opérateur d'onde, $A_W^\sharp = (W^\dagger Z)^{-1} W^\dagger dZ$ est défini seulement pour $\pi_U(Z)$ dans la boule ouverte de centre $\pi_U(W)$ et de rayon $\frac{\pi}{2}$ (au sens de la distance de Fubini-Study), en d'autres termes

$$\text{Dom } A_W^\sharp = \{ZZ^\dagger \in G_M(\mathbb{C}^n) \mid \text{dist}_{FS}(W, Z) < \frac{\pi}{2}\} \quad (11.75)$$

La connexion de l'opérateur d'onde ω_W est donc une connexion pour le sous-fibré $\pi_U^{-1}(\text{Dom } A_W^\sharp)$. La connexion de l'opérateur d'onde est plate, en effet si on calcule la courbure de l'opérateur d'onde, on trouve

$$F_W^\sharp = dA_W^\sharp + A_W^\sharp \wedge A_W^\sharp = -(W^\dagger Z)^{-2} W^\dagger dZ \wedge W^\dagger dZ + (W^\dagger Z)^{-1} W^\dagger dZ \wedge (W^\dagger Z)^{-1} W^\dagger dZ = 0 \quad (11.76)$$

En résumé

Nous avons défini une formule de transport parallèle discret basée sur la théorie des opérateurs d'onde, et qui à la limite adiabatique tend vers la formule du transport adiabatique discret étudiée au chapitre 7. Considérons à présent $\{\tilde{\psi}_b^0(t)\}$ la projection d'une base de l'espace actif se déformant sur $S(0)$. Nous avons vu au chapitre précédent que

$$\psi_a^0(t) = U^{eff}(t, 0) \tilde{\psi}_a^0(0) = \sum_b \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E^{eff}(t') dt' - \int_0^t A^{eff}(t') dt'} \right]_{ba} \tilde{\psi}_b^0(t) \quad (11.77)$$

où $\Omega(t) \psi_a^0(t) = \psi_a(t)$. Le présent chapitre a montré que

$$\psi_a(t) = \Omega(t) U^{eff}(t, 0) \tilde{\psi}_a^0(0) \quad (11.78)$$

$$= \sum_{bc} \left[\mathbb{T} e^{-\int_0^t A_0^\sharp(t') dt'} \right]_{bc} \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t \tilde{\Omega}^{-1}(t') E_0^\sharp(t') \tilde{\Omega}(t') dt'} \right]_{ca} \tilde{\psi}_b^0(t) \quad (11.79)$$

on en conclut que $E^{eff}(t) + A^{eff}(t) = \tilde{\Omega}^{-1}(t) E_0^\sharp \tilde{\Omega}(t)$ et donc que

$$\psi_a(t) = \sum_{bc} \left[\mathbb{T} e^{-\int_0^t A_0^\sharp(t') dt'} \right]_{bc} \left[\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E^{eff}(t') dt' - \int_0^t A^{eff}(t') dt'} \right]_{ca} \tilde{\psi}_b(t) \quad (11.80)$$

La méthode des opérateurs d'onde temporels fait donc apparaître deux phénomènes de phases géométriques, un associé au relèvement par l'opérateur d'onde, A_0^\sharp , et un associé au transport interne à $S(0)$, A^{eff} , qui est la partie géométrique issue de la conjugaison du générateur de la phase dynamique par la phase géométrique de l'opérateur d'onde. En appliquant ces résultats à chaque pas du transport parallèle discret, calculé sans approximation, pour toute partition de $[0, t]$, on obtient

$$\psi_a(t) = \mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} \Omega_i U_i^{eff} |\tilde{\psi}_a^0(0)\rangle \quad (11.81)$$

$$= \sum_b \left[\mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-\int_{t_i}^{t_{i+1}} A_i^\sharp(t') dt'} e^{-i\hbar^{-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} E_i^{eff}(t') dt' - \int_{t_i}^{t_{i+1}} A_i^{eff}(t') dt'} \right]_{ba} \tilde{\psi}_b^0(t) \quad (11.82)$$

où $(E_i^{eff})_{ab} = \sum_c T_{i,ac}^{-1} \langle \tilde{\psi}_a^i(t) | H_i^{eff}(t) | \tilde{\psi}_b^i(t) \rangle$, $(A_i^{eff})_{ab} = \sum_c T_{i,ac}^{-1} \langle \tilde{\psi}_a^i(t) | \partial_t | \tilde{\psi}_b^i(t) \rangle$, où $\tilde{\psi}_b^i(t) = \sum_d \langle \tilde{\psi}_c(t_i) | \tilde{\psi}_b(t) \rangle | \tilde{\psi}_c(t_i) \rangle$ et $T_{i,ab} = \langle \tilde{\psi}_a^i | \tilde{\psi}_b^i \rangle$, et $(A_i^\#)_{ab} = \sum_c Y_{i,ac}^{-1} \langle \tilde{\psi}_c(t_i) | \partial_t | \tilde{\psi}_b(t) \rangle$ avec $Y_{i,ab} = \langle \psi_a(t_i) | \psi_b(t) \rangle$.

Chapitre 12

CATM

Ainsi, il franchit les rideaux du Temps, il fit de l'avenir et du passé une seule et même chose.

Franck Herbert - Les enfants de Dune

Dans ce chapitre, nous nous intéressons au cas des systèmes dynamiques quantiques dans des régimes où même l'adiabaticité faible n'est pas satisfaite. À priori, pour de tels systèmes où l'on ne peut dégager aucun espace actif, les discussions précédentes ne s'appliquent pas. Nous allons donc changer radicalement de point de vue. Nous ne cherchons pas à trouver pour cette dynamique fortement non-adiabatique, une série d'espaces actifs se déformant, car il faudrait donner à ceux-ci des dimensions proches de celle de l'espace de Hilbert total, ce qui enlève à la méthode tout intérêt. Nous allons au contraire essayer, via un artifice purement numérique, de rendre artificiellement adiabatique sur un domaine temporel étendu un processus qui ne l'est pas sur son domaine de départ. Pour cela nous introduirons la “*Méthode de la trajectoire adiabatique contrainte*” (CATM) qui utilise un artifice numérique pour décrire le système dynamique sur un espace actif artificiel. Cette méthode est basée sur l'usage de potentiels optiques et sur la théorie de Floquet. Mais les potentiels optiques que l'on considère, ne sont pas ici des frontières absorbantes semblables à celles utilisées dans la recherche des résonances moléculaires, mais des potentiels temporels, non localisés spatialement, qui apparaissent à une certaine date pour absorber certaines composantes de la fonction d'onde. D'autre part, ce n'est pas la théorie de Floquet usuelle que l'on considère, mais la théorie de Floquet généralisée. Soit $[0, T] \ni t \mapsto H(t)$ l'Hamiltonien d'un système dynamique quantique défini sur une durée d'interaction T . La théorie de Floquet généralisée reproduit artificiellement l'interaction sur des périodes de T , et considère donc :

$$H^\circ : \begin{array}{ll} \mathbb{R} & \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) \\ t & \mapsto H(t - nT) \quad \text{avec } n = [t/T] \text{ division Euclidienne de } t \text{ par } T \end{array} \quad (12.1)$$

H° est alors périodique, on peut donc appliquer la théorie de Floquet, en posant $\theta = \frac{2\pi}{T}t$, $H_F^\circ = H^\circ(\theta) - i\hbar\frac{2\pi}{T}\partial_\theta \in \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi}))$. Les solutions de $H_F^\circ\psi = 0$, projetées sur le premier bloc Floquet $|0\rangle \in L^2(S^1)$, sont solutions de l'équation de Schrödinger $i\hbar\partial_t\psi(t) = H(t)\psi(t)$ (pour $t = \theta T/(2\pi)$). À la limite adiabatique la fonction d'onde serait, au sein de la théorie de Floquet, proportionnelle à un vecteur propre de Floquet, solution de l'équation fondamentale $H_F^\circ\psi_n = \epsilon_n\psi_n$. Le problème qui rend caduque l'hypothèse adiabatique est que l'on ne maîtrise pas les conditions aux limites de ce vecteur propre : $\psi_n(2\pi) = \psi_n(0)$, alors qu'au contraire la condition initiale de la fonction d'onde $\psi(0) = \psi_0$ est fixée par le problème physique avec en plus dans la quasi-totalité des cas $\psi(T) \neq \psi(0)$. La solution ψ sera donc obtenue comme une superposition de tous les états propres de Floquet, afin de reproduire les bonnes conditions aux limites : $\psi(\theta) = \sum_n c_n\psi_n(\theta)$ avec

$\sum_n c_n \psi_n(0) = \psi_0$. La méthode CATM permet une adiabaticité faible artificielle, en introduisant des artifices qui permettent à ψ de ne se projeter que sur un seul état de Floquet.

12.1 Le concept de potentiel optique temporel

On considère un système dynamique quantique, d'Hamiltonien autoadjoint $[0, T_0] \ni t \mapsto H(t) = H_0 + V(t)$, où l'on suppose que $V(0) = V(T_0) = 0$. Soient $\{|k\rangle\}_k$ les vecteurs propres de H_0 (supposé de spectre purement ponctuel). On suppose que l'état initial de la dynamique est $\psi(0) = |i\rangle$. On suppose être dans le cas le plus général où $\psi(T_0) \neq \psi(0)$. On prolonge le temps d'interaction sur une durée artificielle $[T_0, T]$, sur laquelle on introduit des potentiels optiques temporels. Ces potentiels sont présents sur tous les canaux $k \neq i$ afin d'absorber les composantes de la fonction d'onde sur ceux-ci, mais pas sur le canal initial i , afin d'obtenir une cyclicité artificielle sur la nouvelle fonction d'onde $\psi^\circ \in \mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$ avec $\theta = \frac{2\pi}{T}t$: $|\langle \psi^\circ(2\pi) | \psi^\circ(0) \rangle| = 1$. Dans ces conditions, en utilisant la théorie de Floquet généralisée, on a

$$H_F^\circ \psi^\circ = 0 \quad (12.2)$$

et

$$\psi^\circ(\theta) = e^{-i\hbar^{-1} \frac{ET\theta}{2\pi}} |\lambda_E(\theta)\rangle \quad (12.3)$$

avec

$$H_F^\circ |\lambda_E\rangle = E |\lambda_E\rangle \quad E \in \mathbb{C} \quad (12.4)$$

E est une quasi-énergie de H_F° , la phase dynamique de Floquet apparaissant dans la formule 12.3 est la somme de la phase dynamique usuelle et de la phase de Aharonov-Anandan due à la cyclicité artificielle que l'on impose à ψ° (cf. chapitre 8). On trouve la solution réelle de l'équation de Schrödinger à la fin de l'interaction physique T_0 , par

$$\psi(T_0) = \psi^\circ(2\pi \frac{T_0}{T}) \quad (12.5)$$

La figure 12.1 représente schématiquement la méthode CATM.

12.2 Analyse asymptotique

On analyse ici l'effet du potentiel optique durant la période artificielle $[T_0, T]$, afin de vérifier que l'on obtient bien le comportement attendu.

Propriété 17. Soit $|\lambda_E\rangle \in \mathcal{H} \otimes L^2(S^1)$ le vecteur propre de

$$H_F^\circ = H_0 + V(\theta T/(2\pi)) - iV_{opt}(\theta T/(2\pi)) \sum_{k \neq i} |k\rangle \langle k| - i\hbar \frac{2\pi}{T} \partial_\theta \quad (12.6)$$

où $\text{supp} V_{opt} \subset [T_0, T]$ avec $V_{opt} \geq 0$, et V est prolongé par $\forall t \in [T_0, T], V(t) = 0$. Alors on a

$$\forall t \in [T_0, T] \quad \begin{cases} \langle k | \lambda_E(2\pi t/T) \rangle = \langle k | \lambda_E(2\pi T_0/T) \rangle e^{i\hbar^{-1}(\Re E - E_k)(t-T_0)} e^{-\hbar^{-1} \int_{T_0}^t (\Im E + V_{opt}(t')) dt'} & \text{si } k \neq i \\ \langle i | \lambda_E(2\pi t/T) \rangle = \langle i | \lambda_E(2\pi T_0/T) \rangle e^{i\hbar^{-1}(\Re E - E_i)(t-T_0)} e^{-\hbar^{-1} \Im E (t-T_0)} \end{cases} \quad (12.7)$$

où $H_0 |k\rangle = E_k |k\rangle$.

Démonstration :

Par définition on a

$$H_F^\circ |\lambda_E\rangle = E |\lambda_E\rangle \quad (12.8)$$

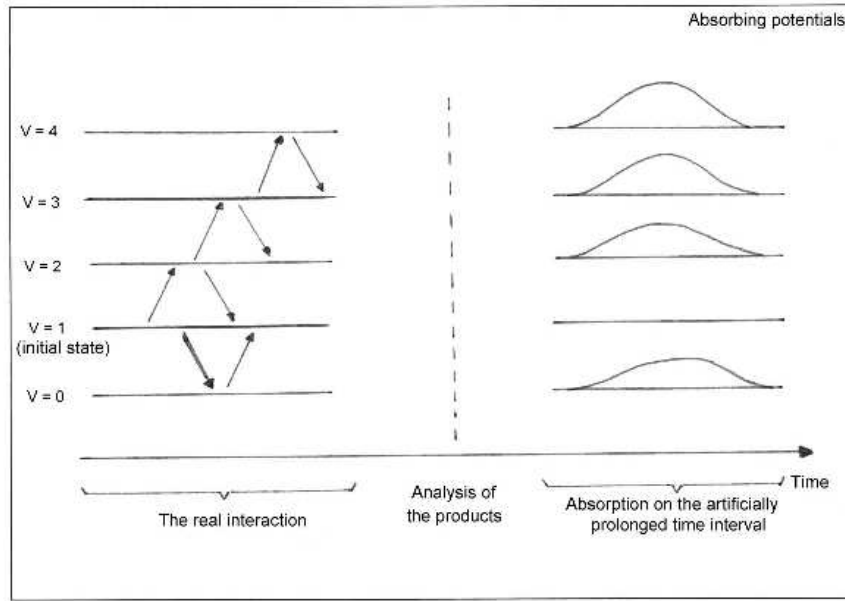


FIG. 12.1 – Représentation schématique de la méthode CATM, avec le temps en abscisse et les canaux moléculaires en ordonnée. Durant la période physique $[0, T_0]$, la fonction d'onde se répartit depuis le canal initial (ici noté $v = 1$), vers tous les autres canaux. Des potentiels optiques absorbants sont introduits durant la période artificielle $[T_0, T]$ afin d'absorber le flux quantique sur les différents canaux à l'exception du canal initial. Le résultat physique réel est obtenu par l'analyse de la fonction en $t = T_0$.

c'est à dire

$$\left(H_0 + V \left(\frac{\theta T}{2\pi} \right) - iV_{opt} \left(\frac{\theta T}{2\pi} \right) \sum_{k \neq i} |k\rangle\langle k| - i\hbar \frac{2\pi}{T} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) |\lambda_E(\theta)\rangle = E |\lambda_E(\theta)\rangle \quad (12.9)$$

d'où $\forall \theta > 2\pi \frac{T_0}{T}$

$$i\hbar \frac{2\pi}{T} \frac{\partial}{\partial \theta} |\lambda_E(\theta)\rangle = \left(H_0 - E - iV_{opt} \left(\frac{\theta T}{2\pi} \right) \sum_{k \neq i} |k\rangle\langle k| \right) |\lambda_E(\theta)\rangle \quad (12.10)$$

en projetant cette équation sur $|k\rangle$ ($k \neq i$) et sur $|i\rangle$ on a

$$i\hbar \frac{2\pi}{T} \frac{\partial}{\partial \theta} \langle k | \lambda_E(\theta) \rangle = \left(E_k - E - iV_{opt} \left(\frac{\theta T}{2\pi} \right) \right) \langle k | \lambda_E(\theta) \rangle \quad (12.11)$$

$$i\hbar \frac{2\pi}{T} \frac{\partial}{\partial \theta} \langle i | \lambda_E(\theta) \rangle = (E_i - E) \langle i | \lambda_E(\theta) \rangle \quad (12.12)$$

Ces deux équations sont des équations différentielles ordinaires du premier ordre du type $f'(\theta) = \lambda(\theta)f(\theta)$, qui ont pour solution $f(\theta) = f(\theta_0)e^{\int_{\theta_0}^{\theta} \lambda(\theta')d\theta'}$. D'où $\forall \theta > 2\pi T_0/T$

$$\langle i | \lambda_E(\theta) \rangle = \langle i | \lambda_E(2\pi T_0/T) \rangle e^{-i\hbar^{-1} \frac{T}{2\pi} (E_i - E)(\theta - 2\pi \frac{T_0}{T})} \quad (12.13)$$

$$= \langle i | \lambda_E(2\pi T_0/T) \rangle e^{-i\hbar^{-1} (E_i - E)(t - T_0)} \quad (12.14)$$

$$\langle k | \lambda_E(\theta) \rangle = \langle i | \lambda_E(2\pi T_0/T) \rangle e^{-i\hbar^{-1} (E_k - \Re E)(t - T_0)} e^{-\frac{\hbar^{-1} T}{2\pi} \int_{2\pi T_0/T}^{\theta} (\Im E + V_{opt}(\theta' T / (2\pi))) d\theta'} \quad (12.15)$$

$$= \langle i | \lambda_E(2\pi T_0/T) \rangle e^{-i\hbar^{-1} (E_k - \Re E)(t - T_0)} e^{-\hbar^{-1} \int_{T_0}^t (\Im E + V_{opt}(t')) dt'} \quad (12.16)$$

■

Notons que cet effet asymptotique du potentiel optique temporel, est du au fait qu'il n'apparaît dans l'Hamiltonien qu'une dérivée première du temps, ce qui induit "une flèche du temps". Le potentiel temporel n'a d'influence sur le système qu'après avoir été allumé $t > T_0$. Au contraire pour les potentiels optiques spatiaux utilisés comme frontières absorbantes, la présence de dérivées secondes de l'espace dans l'Hamiltonien influence la système à gauche et à droite du point de départ des potentiels.

On rappelle que les résonances apparaissent dans le plan complexe inférieur, et que par conséquent $\Im E < 0$. On voit donc qu'il existe deux situations :

1. $|\Im E|(T - T_0) \ll \int_{T_0}^T V_{opt}(t') dt'$, alors si le potentiel optique est choisi de manière à ce que $e^{-\hbar^{-1} \int_{T_0}^T V_{opt}(t') dt'}$ soit négligeable par rapport à la précision expérimentale souhaitée, $\forall k \neq i$, $\langle k | \lambda_E(2\pi) \rangle \simeq 0$ et $\langle i | \lambda_E(2\pi) \rangle \simeq \langle i | \lambda_E(2\pi T_0/T) \rangle e^{i\hbar^{-1}(\Re E - E_i)(T - T_0)}$. On trouve bien la condition de cyclicité souhaitée : $|\langle \psi^\circ(2\pi) | i \rangle| = 1$ (en renormalisant par $\langle i | \lambda_E(2\pi T_0/T) \rangle$).
2. $|\Im E|(T - T_0)$ est du même ordre ou est supérieur à $\int_{T_0}^T V_{opt}(t') dt'$, alors le terme de création de flux $e^{-\hbar^{-1} \Im E(T - T_0)}$ va s'opposer au terme d'absorption $e^{-\hbar^{-1} \int_{T_0}^T V_{opt}(t') dt'}$, le flux quantique sur les canaux $k \neq i$ ne va donc pas s'annuler à $\theta = 2\pi$, et la cyclicité souhaitée n'est pas vérifiée. La méthode CATM échoue donc.

La difficulté est que la quasi-énergie E , est l'énergie du système "délocalisée dans le temps", elle tient donc compte de toute la période $[0, T]$. Ainsi E (et donc $\Im E$) dépend implicitement de la fonction $V_{opt}(t)$.

Lorsqu'elle fonctionne, la méthode CATM permet de forcer l'adiabaticité faible, en imposant à la fonction d'onde, l'espace actif unidimensionnel $\{|\lambda_E\rangle\}$. Il serait nécessaire de développer une généralisation multipas de cette méthode, pour pouvoir appliquer une théorie de transport parallèle discret (comme au chapitre précédent) à des systèmes ne présentant pas d'adiabaticité faible.

Conclusion de la partie II

On a vu au cours de cette partie, comment la théorie des opérateurs d'onde pouvait nous aider dans le calcul numérique du transport adiabatique discret. L'algorithme WOSA, permet de sélectionner l'espace actif au point initial du réseau correspondant au champ nul. Dans les régions de la variété de contrôle \mathcal{M} où l'on peut définir un régime adiabatique fort, les vecteurs propres instantanés sont calculés en chaque point à partir de l'opérateur d'onde de Bloch, lui-même calculé avec l'algorithme RDWA initialisé par l'opérateur d'onde d'un point proche voisin déjà connu. On "propage" donc les vecteurs propres (ou plutôt les opérateurs d'onde de Bloch) d'un point à l'autre. Cette "propagation" devrait permettre d'assurer une certaine continuité dans les conventions de jauge. Cette continuité peut toutefois être rompue du fait d'une diagonalisation directe de l'Hamiltonien effectif à l'intérieur de la procédure RDWA. La méthode RDWA peut être améliorée par l'usage d'une procédure Padé ou d'une procédure qui écarte les valeurs tests de l'algorithme des valeurs propres effectives.

Dans les régions où un régime d'adiabaticité forte n'est pas possible, mais où il est possible de définir une adiabaticité faible, on considère des successions d'opérateurs d'onde temporels, qui permettent de définir une base d'un espace actif (non-adiabatique) en chaque point de ces régions. En imposant à cette base de ne pas trop s'écarter d'une base de vecteurs propres, la procédure revient à calculer des pseudo-vecteurs propres par un algorithme d'intégration de l'équation de Bloch dépendant du temps, ces pseudo-vecteurs propres étant des corrections aux vecteurs propres (mal isolés), tenant compte des états intrus. La cohérence entre les régions des deux régimes, est assurée par le théorème adiabatique de l'opérateur d'onde, qui assure que si le régime devient adiabatique, le transport parallèle par succession d'opérateurs d'onde, est équivalent au transport adiabatique discret.

Enfin pour des régions où même l'adiabaticité faible n'est pas définie, il semble possible avec une généralisation multipas et non-abélienne de la méthode CATM de forcer artificiellement l'adiabaticité faible. La succession d'opérations CATM pourrait apparaître comme un propagateur similaire à un transport parallèle discret (d'un autre type que celui des opérateurs d'onde).

Un résumé schématique de cette partie est donné figure 12.2, qui correspond aussi au schéma algorithmique de la méthode numérique de transport discret.

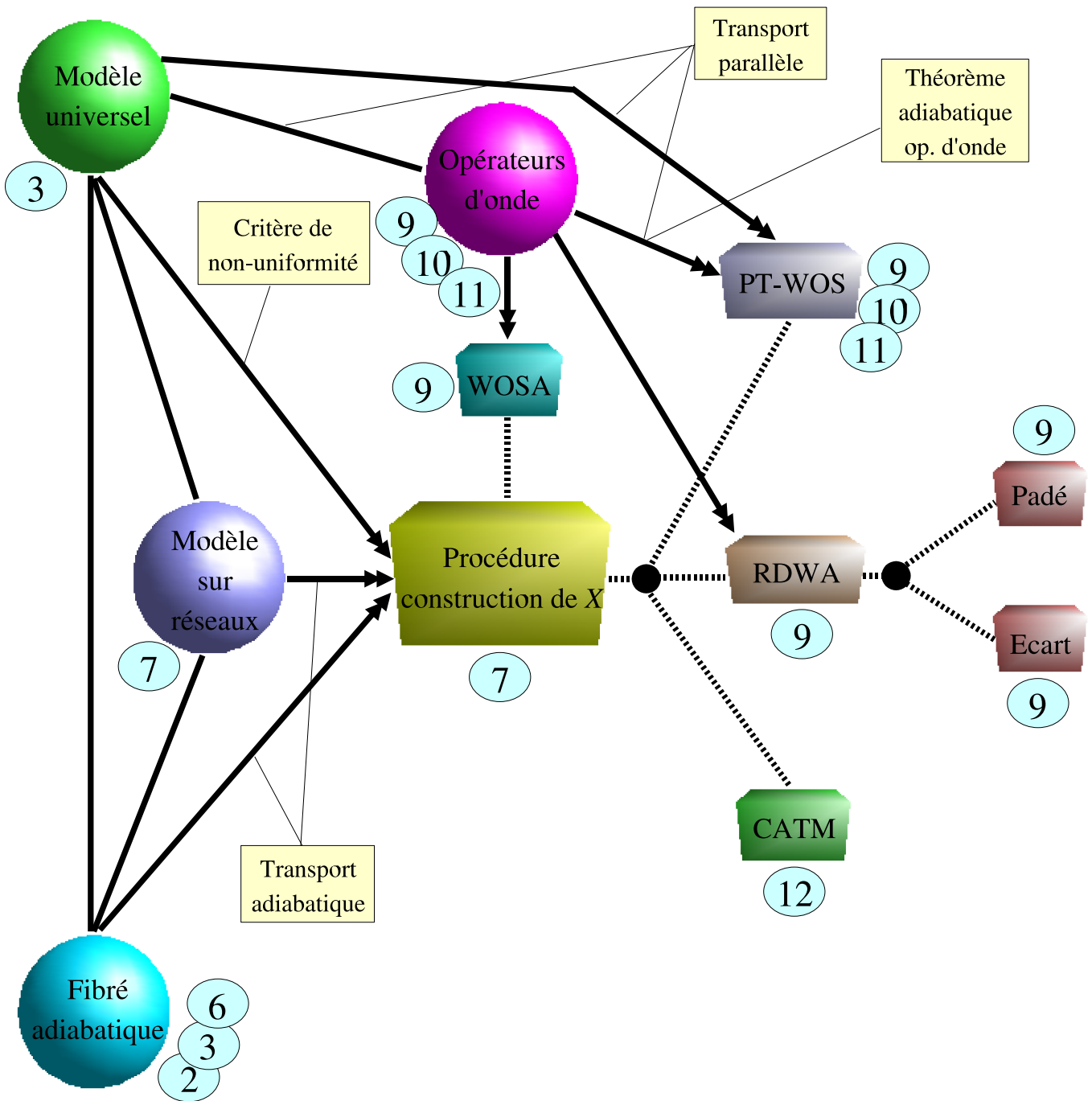


FIG. 12.2 – Résumé schématique de la partie II. Les sphères sont associées à des modèles physiques et les boîtes à des algorithmes. Les numéros de chapitres auxquels se réfèrent théories ou algorithmes sont indiqués par les bulles. PT-WOS = transport parallèle par succession d'opérateurs d'onde (procédure temporelle du calcul des opérateurs d'onde). Ecart = procédure qui écarte les valeurs tests des valeurs propres effectifs. Les lignes pleines correspondent aux interdépendances entre modèles et méthodes, les lignes pointillées correspondent aux appels entre algorithmes (les nœuds étant associés à des choix entre plusieurs procédures).

Troisième partie

Application générale : l'ion moléculaire H_2^+

Introduction

Dans les parties I et II, nous avons développé un modèle décrivant les systèmes photodynamiques quantiques, bien adapté à la résolution de problèmes de contrôle, et qui est traduisible en une méthode numérique. Les systèmes dynamiques traités comme exemples dans les chapitres précédents étaient très simples, essentiellement des atomes à 2 ou 3 niveaux. Nous nous intéressons dans cette partie à l'application de l'ensemble des modèles et méthodes introduites dans les chapitres précédents, à un système plus complexe, l'ion moléculaire H_2^+ . Bien que ce système reste très simple, il présente les caractéristiques essentielles des systèmes moléculaires (plusieurs états électroniques, présence de continua,...). Présentant les ingrédients de la complexité tout en restant de taille raisonnable, H_2^+ est un bon système test, premier pas vers des applications plus difficiles à la physique moléculaire.

Dans le milieu interstellaire, des molécules H_2^+ sont créées par association radiative d'atomes d'hydrogène, par photoionisation de molécules H_2 , et par interaction de celles-ci avec des rayonnements cosmiques. Ces ions moléculaires H_2^+ du milieu interstellaire, sont alors détruits par photodissociation, recombinaison radiative et par production d'ions H_3^+ . Nous nous intéressons ici au processus de photodissociation de cette molécule.

H_2^+ est composée de deux noyaux hydrogènes, et d'un électron. L'Hamiltonien de la molécule libre s'écrit donc

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_p}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - e^2 \left(\frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}|} + \frac{1}{|\vec{x}_2 - \vec{x}|} - \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \right) \quad (12.17)$$

où \vec{x}_i sont les coordonnées des protons de masse m_p , \vec{x} est la position de l'électron de masse m_e . On effectue l'opération classique consistant à séparer le mouvement du centre de masse de la molécule du mouvement relatif de ses constituants. De plus, la masse des protons étant beaucoup plus grande que la masse de l'électron, on peut appliquer la méthode de Born-Oppenheimer et calculer les états électroniques avec les noyaux figés. Ces états électroniques sont recherchés comme des combinaisons linéaires des états des atomes d'hydrogène associés à chaque noyau (méthode LCAO). En ne conservant que l'état électronique fondamental et le premier état excité (les autres n'intervenant pas dans les applications qui vont suivre), on a une orbitale liante, $^2\Sigma_g^+$, pour laquelle l'électron joue le rôle de liaison entre les noyaux, et une orbitale antiliante, $^2\Sigma_u^+$, pour laquelle les noyaux sont libres l'un par rapport à l'autre. On ne considère ni la translation globale, ni la rotation de la molécule. Ces choix sont liés au fait que seules les transitions vibrationnelles et la photodissociation sont étudiées dans ce chapitre. Cependant, ne pas retenir la rotation qui module le couplage $\vec{\mu} \cdot \vec{E}$ demeure une approximation d'autant plus valable que le rotateur est peu excité et l'impulsion laser de courte durée. Enfin, on suppose que la molécule est en interaction avec un champ d'amplitude E et de fréquence effective ω_{eff} (si la fréquence est modulée alors $\omega_{eff}(t) = \omega(t) + \dot{\omega}(t)t$). L'ion moléculaire est alors décrit par l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^+, dr) \otimes \mathbb{C}^2 \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$, où \mathbb{C}^2 est l'espace de Hilbert de l'électron, auquel on associe la base des états électroniques ($|^2\Sigma_g^+\rangle, |^2\Sigma_u^+\rangle$), $L^2(\mathbb{R}^+, dr)$ est l'espace de Hilbert décrivant la vibration de la molécule, r étant la distance internucléaire. Enfin, $L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$ est l'espace de Hilbert décrivant les photons de la molécule habillée du rayonnement (cf. chapitre 8 sur la théorie de Floquet). L'Hamiltonien décrivant H_2^+ habillée du champ est

$$H_F = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \otimes 1_{\mathbb{C}^2} \otimes 1_{L^2(S^1)} \quad (12.18)$$

$$+ \left(V_{2\Sigma_g^+}(r) \otimes |^2\Sigma_g^+\rangle\langle^2\Sigma_g^+| + V_{2\Sigma_u^+}(r) \otimes |^2\Sigma_u^+\rangle\langle^2\Sigma_u^+| \right) \otimes 1_{L^2(S^1)} \quad (12.19)$$

$$+ \mu(r) \otimes (|^2\Sigma_u^+\rangle\langle^2\Sigma_g^+| + |^2\Sigma_g^+\rangle\langle^2\Sigma_u^+|) \otimes E \cos(\theta) \quad (12.20)$$

$$- 1_{L^2(\mathbb{R}^+)} \otimes 1_{\mathbb{C}^2} \otimes i\hbar\omega_{eff} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (12.21)$$

μ est le moment dipolaire électrique (on remarquera qu'il couple l'orbitale liante avec l'antiliante), et m est la masse réduite du diatome. Enfin $V_{2\Sigma_{u/g}^+}(r)$ sont les surfaces d'énergie potentielle, cf. 12.3.

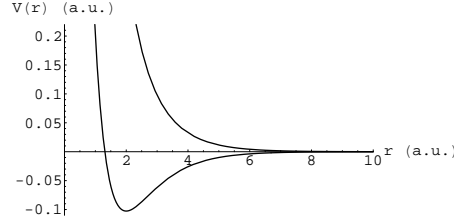


FIG. 12.3 – Les surfaces d'énergie potentielle $V_{2\Sigma_{u/g}^+}(r)$ en fonction de la distance internucléaire r (unités atomiques).

Les paramètres de contrôle du système sont $\vec{R} = (E, \omega_{eff})$, qui forment la variété \mathcal{M} . On note $H_0 = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{2\Sigma_{u/g}^+}(r)$ l'Hamiltonien de la molécule libre (sans le champ). Une dynamique particulière, apparaît donc comme une application

$$t \mapsto H_F(t) = H_0 + \mu(r)E(t) \cos(\theta) - i\hbar\omega_{eff}(t)\partial_\theta \quad (12.22)$$

t étant le temps lent. Dans l'état électronique $2\Sigma_g^+$ la molécule possède dix-huit états liés dans le puits de potentiel. De plus, elle présente deux continua, l'un associé à la surface $2\Sigma_g^+$ et situé au dessus du puits, l'autre associé à l'état électronique $2\Sigma_g^+$. On note Sp_d le spectre discret sous-ensemble de $[E_0, 0]$ associé aux états liés, et $\text{Sp}_{cont}^i = [0, +\infty[$ les continua des deux surfaces, cf. figure 12.4.

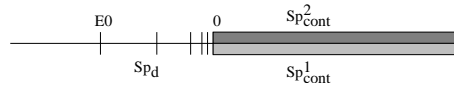


FIG. 12.4 – Schéma du spectre de l'ion moléculaire H_2^+ : $\text{Sp}(H_0)$

Afin de traiter les continua et de mettre en évidence les résonances, on utilise un potentiel optique jouant le rôle de frontière absorbante. Celui-ci réduit l'espace de Hilbert de la vibration à $L^2([0, r_1], dr)$ et le nouvel Hamiltonien $\tilde{H}_0 = H_0 - iV_{opt}(r)$, $\text{supp}V_{opt} \subset [r_0, r_1]$, r_0 étant choisi suffisamment loin du puits de potentiel de $V_{2\Sigma_g^+}$ afin de ne pas affecter les états liés. Le travaux de Moiseyev [102] ayant montré une certaine équivalence entre l'usage de potentiels optiques spatiaux et l'usage d'une dilatation complexe, on suppose que le théorème d'Aguilar-Baslev-Combes-Simon [69, 124] s'applique : sous l'effet de cette transformation, les continua de H_2^+ tournent dans le plan complexe inférieur et font apparaître des résonances, cf. fig. 12.5.

On considère maintenant l'Hamiltonien de la molécule avec le champ mais sans couplages, i.e. $\tilde{H}_F^0 = \tilde{H}_0 - i\hbar\omega_{eff}\partial_\theta$. Le spectre du système est périodique (il a une structure en zones de Brillouin), puisque $\text{Sp}(\tilde{H}_F^0) = \text{Sp}(\tilde{H}_0) + \hbar\omega_{eff}\mathbb{Z}$, cf. figure 12.6.

Soit ψ_n un état propre correspondant à n photons absorbés. En prenant comme état de référence initial, avant l'établissement du couplage champ-matière, un état à zéro photon — il s'agit d'un choix arbitraire sans conséquence pour nos calculs — ψ_n apparaît comme un état à $(-n)$ photons. En suivant l'évolution du temps lent, c'est-à-dire en donnant des valeurs constantes aux

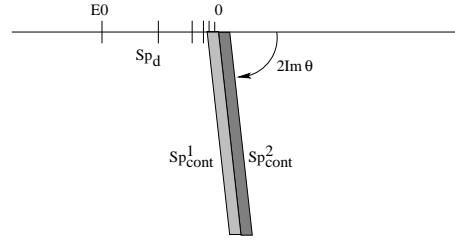


FIG. 12.5 – Spectre de H_2^+ après une rotation complexe d'angle θ : $\text{Sp}(\tilde{H}_0)$

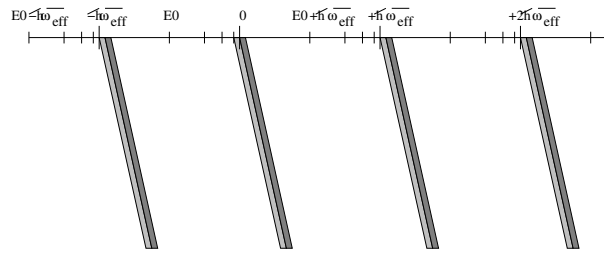


FIG. 12.6 – Spectre de H_2^+ avec le champ sans couplage : $\text{Sp}(\tilde{H}_F^0) = \text{Sp}(\tilde{H}_0 - i\hbar\omega_{eff}\partial_\theta)$.

deux paramètres adiabatiques E et ω_{eff} , cet état de Floquet “instantané”, $\psi = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \psi_n e^{in\theta}$, est solution de l'équation :

$$H_F \psi = E \psi \iff \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{2\Sigma_{u/g}^+}(r) + \mu(r)E \cos \theta - n\hbar\omega_{eff} \right) \psi_n e^{in\theta} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} E \psi_n e^{in\theta} \tag{12.23}$$

Cette équation est similaire à une superposition d'équations de Schrödinger stationnaires avec pour potentiels $V_{2\Sigma_{u/g}^+}(r) - n\hbar\omega_{eff}$. En considérant chaque $n \in \mathbb{Z}$, on a un ensemble périodique de surfaces énergétiques obtenues à partir des deux surfaces originales décalées de $n\hbar\omega_{eff}$. Ceci est représenté sur la figure 12.6. La surface du haut, décalée de $-\hbar\omega_{eff}$ peut donc croiser la surface du bas (non décalée). Ces deux surfaces sont couplées par le terme $\vec{\mu}(r) \cdot \vec{E}$. Si ce couplage est non nul dans les régions du croisement, il produira un croisement évité des surfaces correspondant aux couples $(n, n \pm 1)$ et engendrera des nouvelles surfaces adiabatiques (cf. fig. 12.7).

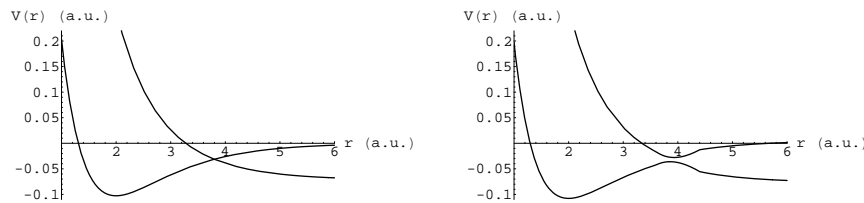


FIG. 12.7 – À gauche : La surface $2\Sigma_g^+$ de H_2^+ et la surface $2\Sigma_u^+$ décalée de $-\hbar\omega_{eff}$. À droite : les surfaces adiabatiques associées.

Par une analyse du type WKB ([101]), on voit que le spectre des deux surfaces présente éven-

tuellement des états liés, cf. fig. 12.8. Il s'agit toutefois d'états liés temporaires créés par le couplage champ-matière et qui n'existent que durant la durée de l'impulsion laser.

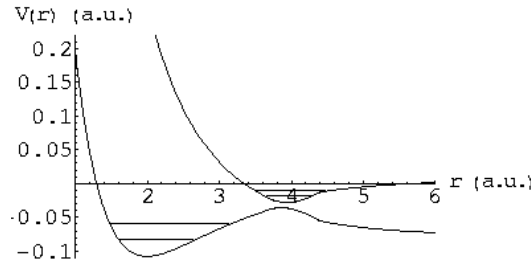


FIG. 12.8 – Les surfaces adiabatiques de H_2^+ et de possibles états liés.

Dynamiquement, les modulations de fréquence et d'amplitude changent la position de la surface du haut, le gap entre les deux surfaces et les positions des états liés instantanés. Avant le croisement des surfaces, la surface du haut est associée à un spectre purement continu, après le croisement, elle peut inclure du spectre discret. On ne peut expliquer ceci, que si durant l'évolution avec le couplage, des valeurs propres ont migré du continuum vers l'axe réel, cf. fig. 12.9.

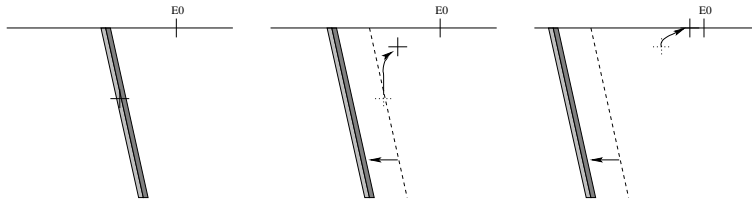
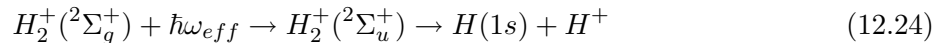


FIG. 12.9 – Évolution de $\text{Sp}(\tilde{H}_F(t))$ avec le temps. Une valeur propre migre du continuum vers l'axe réel.

Les valeurs propres quittant le continuum peuvent croiser l'un des états liés de la surface fondamentale et on peut avoir un transfert de population de la surface du bas vers celle du haut, le nouvel état lié qui se forme résultant d'une superposition d'états liés de la surface fondamentale et d'états du continuum de la surface excitée. Le puits de la surface adiabatique du haut apparaît donc comme un piège, où la fonction d'onde se trouve projetée sur des états liés ne subsistant que pendant la durée où le champ décale les surfaces. Lorsque ce n'est plus le cas, on peut, suivant la façon dont on éteint le laser, reprojeter la fonction piégée sur les états liés de ${}^2\Sigma_g^+$ ou dans le continuum de la surface ${}^2\Sigma_u^+$. On a dans ce dernier cas un processus de photodissociation :



engendrant deux fragments, un atome d'hydrogène H dans l'état $1s$ et un noyau hydrogène H^+ . Le contrôle de ce piégeage de H_2^+ , devrait nous permettre le contrôle de sa photodissociation et du spectre énergétique des fragments produits ou encore le contrôle de transitions entre états liés de la même surface ${}^2\Sigma_g^+$. Enfin, si on augmente ω_{eff} , de manière à ce que la base de la surface ${}^2\Sigma_u^+$ soit plus basse que le puits de ${}^2\Sigma_g^+$, alors la surface adiabatique fondamentale ne présente plus aucun état lié, mais seulement des résonances dont les durées de vie sont associées à la vitesse de l'effet tunnel de franchissement du mur de potentiel constitué par la surface adiabatique.

Nous traiterons la photodissociation de H_2^+ par les méthodes adiabatiques introduites dans les chapitres précédents, afin d'illustrer les différentes théories et méthodes qui y ont été développées. Le chapitre 13 étudie plus particulièrement l'adiabaticité du processus photoréactif et les phases géométriques qu'il génère. Le chapitre 14 est un chapitre de prospective qui pose le problème du contrôle du piégeage et indirectement de celui de la photodissociation et des transitions états liés \rightarrow états liés dans le cadre de la méthode des champs adiabatiques développée dans cette thèse. Ce chapitre peut être relié à la riche littérature sur le contrôle moléculaire, voir par exemple [140, 139, 12, 13, 15, 34, 11]. Pour les besoins de l'illustration des différents ingrédients introduits dans ce travail, nous considérerons aussi, le "toy-model" d'une molécule très similaire à H_2^+ (même masse réduite et même moment dipolaire électrique), ayant pour état électronique fondamental, la même surface $^2\Sigma_g^+$, mais pour surface du haut, le potentiel de Hulburt-Hirschfelder [72], qui présente des états liés et des résonances de forme, cf. fig. 12.10.

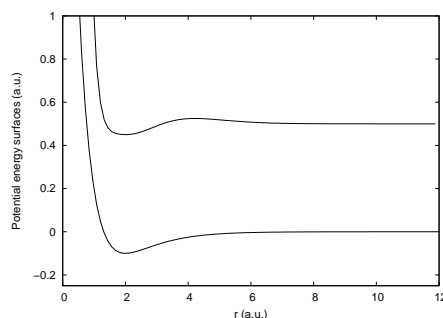


FIG. 12.10 – *Les surfaces d'énergie potentielle de la molécule "toy-model".*

Remarque : en pratique on n'utilise pas les potentiels optiques de Moiseyev (qui sont équivalents à une dilatation complexe), mais des potentiels de formes plus simples. L'effet de ces potentiels sur le spectre continu sera donc plus compliqué qu'une simple rotation dans le plan complexe, comme vont le montrer les différents spectres présentés dans cette partie.

Chapitre 13

Adiabaticité et phases géométriques dans la photodissociation de H_2^+

(...) je ne voudrais pas rentrer dans des choses trop dimensionnelles.

Jean-Claude Van Damme

Ce chapitre est une étude préliminaire de l'adiabaticité de la molécule H_2^+ dans le processus de photodissociation décrit dans l'introduction de cette partie, en vue de la description par la méthode adiabatique sur réseau du contrôle de ce processus, description qui fera l'objet du chapitre suivant. Nous considérons pour cela les deux mesures de non-adiabaticité introduites au chapitre 10, et reliées au théorème adiabatique des opérateurs d'onde :

$$\Xi_1(t) = \|\tilde{H}_F(t)\Omega(t) - \Omega(t)\tilde{H}_F^{eff}(t)\|^2 \quad (13.1)$$

et

$$\Xi_2(t) = \|\tilde{H}_F^{eff}(t) - \tilde{H}_\infty^{eff}\|^2 \quad (13.2)$$

où Ω est solution de l'équation

$$(\tilde{H}_F(t) - i\hbar\partial_t)\Omega(t) = \Omega(t)(\tilde{H}_F(t) - i\hbar\partial_t)\Omega(t) \quad (13.3)$$

$\tilde{H}_F^{eff} = P_0\tilde{H}_F(t)\Omega(t)$, et \tilde{H}_∞^{eff} est solution de

$$(Q_0 - Q_0P(t)(P_0P(t)P_0)^{-1})\tilde{H}_\infty^{eff}(t) = 0 \quad (13.4)$$

P_0 étant le projecteur sur l'espace actif (sélectionné par WOSA), Q_0 le projecteur sur son supplémentaire orthogonal, et $P(t)$ est le projecteur sur l'espace cible. La première section de ce chapitre est consacrée à ces mesures dans un régime favorable à l'adiabaticité de H_2^+ . Nous étudions également la phase de Berry de H_2^+ , en particulier, nous y illustrons l'égalité entre phases standards et phases effectives. La deuxième section est similaire à la première, mais elle considère la molécule "toy-model" et non H_2^+ . Ces sections illustrent le théorème adiabatique de l'opérateur d'onde (chapitre 10) et le formalisme de Floquet (t, θ) (chapitre 9) par l'analyse de modèles simples de molécules sujettes à un laser impulsionnel ultrabref. Enfin la troisième section, est une application de la méthode CATM à H_2^+ dans un régime défavorable à l'adiabaticité.

13.1 Adiabaticité et phase de Aharonov-Anandan de H_2^+

13.1.1 Mesure de l'adiabaticité de H_2^+

Nous considérons ici la photodissociation de H_2^+ induite par un laser de fréquence (non-modulée) $\omega_0 = 0.295868u.a.$, dont le champ est caractérisé par un maximum d'intensité $I = 10^{12}W/cm^2$ et une enveloppe gaussienne de la forme

$$E(t) = \begin{cases} E_0 e^{-\frac{(t-t_1)^2}{\tau^2}} & \text{si } t \leq t_1 \\ E_0 & \text{si } t_1 \leq t \leq t_2 \\ E_0 e^{-\frac{(t-t_2)^2}{\tau^2}} & \text{si } t \geq t_2 \end{cases} \quad (13.5)$$

avec un temps d'établissement $\tau = 25u.a.$ et un plateau compris entre $t_1 = 200u.a.$ et $t_2 = 300u.a.$.

On ne peut pas rigoureusement appliquer le théorème adiabatique de l'opérateur d'onde tel que nous l'avons établi, car \tilde{H}_F n'est pas auto-adjoint, et de plus, nous devons faire intervenir des états du continuum dans l'espace actif. Mais le caractère dissipatif du processus n'est pas réellement un problème car l'utilisation d'une base biorthogonale reproduit le flux quantique sortant. Nous utilisons par ailleurs un ensemble fini de fonctions $\{e^{m\theta}\}$ engendrant un espace approchant $L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$. Cette approximation est cohérente avec le formalisme de Floquet, où $n \in \mathbb{Z}$ est associé au nombre de photons habillant la molécule, si le nombre de photons échangés est faible devant le nombre moyen de photons (cf. chapitre 8). L'état de Floquet initial est $|i\rangle = |v=0, {}^2\Sigma_g^+\rangle \otimes |n=0\rangle$, où $|v=0, {}^2\Sigma_g^+\rangle$ est l'état vibrationnel fondamental de la surface ${}^2\Sigma_g^+$. Le choix arbitraire de la première zone de Brillouin $n=0$ revient à prendre la moyenne uniforme sur $[0, \pi]$ de la phase entre l'état moléculaire et le champ. Ce choix à l'avantage de reproduire correctement des situations expérimentales où de nombreuses molécules croisent le faisceau laser.

On a dit dans l'introduction de cette partie, que la présence du potentiel optique tournait le spectre continu dans le plan complexe inférieur à la manière d'une dilatation complexe. Mais contrairement à une dilatation, la méthode des potentiels optiques induit un changement d'espace de configuration, qui devient la boîte $[0, r_1]$ avec une frontière absorbante sur $[r_0, r_1]$ qui reproduit la perte de flux quantique s'échappant en dehors de la boîte. Or l'usage de la boîte de quantification, discrétise les continua moléculaires, qui sont remplacés par des spectres discrets plus ou moins denses (suivant la taille de la boîte). Il en résulte que les états de diffusion sont considérablement modifiés par ce traitement. Néanmoins, les propriétés fondamentales du système sont préservées, et cette discrétisation permet d'utiliser le formalisme adiabatique.

Dans le nouvel espace discrétisé, la fonction d'onde issue de l'état $|i\rangle$ peut être exprimée sur la base des états propres instantanés. Un bon indicateur de l'adiabaticité est le spectre complexe de quasi-énergie au voisinage de la valeur propre initiale. La taille de l'espace de Hilbert étendu $\mathcal{H} \otimes L^2(S^1)$ étant très grande, il est impossible de calculer ce spectre, mais le spectre de la molécule sans couplage, $\text{Sp}(\tilde{H}_F^0) = \text{Sp}(\tilde{H}_0 - i\hbar\omega_0\partial_\theta)$, reste significatif tant qu'on l'interprète en tenant compte des éventuelles distorsions apportées par le couplage. Ce spectre est représenté figure 13.1.

L'état initial (■) n'est pas parfaitement isolé comme il le devrait dans un processus adiabatique parfait. Néanmoins, les quasiénergies les plus proches, correspondant aux états liés $|v=1, {}^2\Sigma_g^+\rangle \otimes |n=0\rangle$ et $|v=2, {}^2\Sigma_g^+\rangle \otimes |n=0\rangle$, ne sont pas sélectionnées par WOSA. En effet, le moment dipolaire électrique de H_2^+ ne couple pas directement les états liés entre eux. Seul des processus à deux photons, et donc d'ordre perturbatif supérieur, permettent d'amener le système de $v=0$ à $v=1$ ou 2 , par l'absorption d'un photon qui conduit le système sur ${}^2\Sigma_u^+$, suivie d'une émission stimulée pour redescendre sur ${}^2\Sigma_g^+$. L'intensité du laser considérée ici, n'étant pas suffisante pour que la probabilité d'un tel processus soit significative, on comprend pourquoi ces états ne sont pas retenus pour entrer dans l'espace actif. À l'inverse, WOSA sélectionne des états du continuum

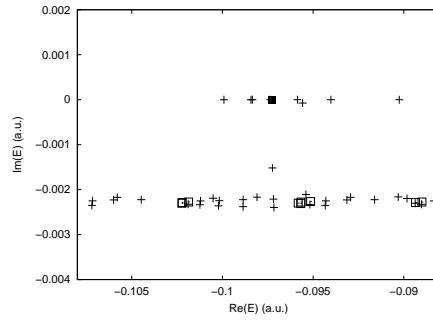


FIG. 13.1 – Spectre de H_2^+ avec le champ mais sans couplages : $\text{Sp}(\tilde{H}_F^{0,\odot})$, autour de la quasiénergie de l'état initial (■). □ : les 10 premiers états sélectionnés par WOSA, et + : les autres quasiénergies.

qui sont loin de l'axe réel, mais qui sont couplés directement par le moment dipolaire. Les états sélectionnés par WOSA (□) étant loin de l'état initial (■), on peut espérer que le système présente un caractère adiabatique très fort, et que la fonction d'onde ne se décompose approximativement que sur un seul état propre de Floquet

La figure 13.2 présente les probabilités de transition sous l'effet du rayonnement.

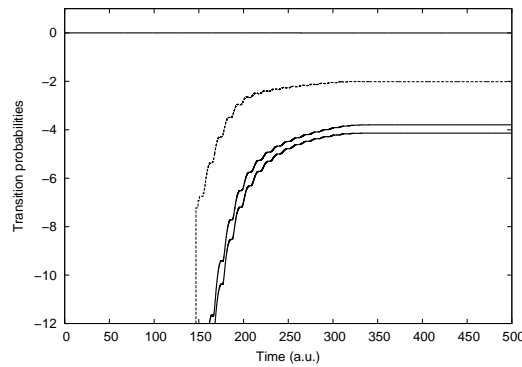


FIG. 13.2 – Probabilités de transition de H_2^+ sous l'effet du pulse laser, sur une échelle logarithmique en fonction du temps. Les lignes continues représentent (du haut vers le bas), la probabilité de survie de l'état initial $P_{(v=0,2\Sigma_g^+,n=0)}(t) = |\langle v=0,2\Sigma_g^+,n=0|\psi(t)\rangle|^2$, de transition vers les deux premiers états liés excités : $P_{(v=0,2\Sigma_g^+,n=0)\rightarrow(v=1,n=0)}(t) = |\langle v=1,2\Sigma_g^+,n=0|\psi(t)\rangle|^2$ et $P_{(v=0,2\Sigma_g^+,n=0)\rightarrow(v=2,n=0)}(t) = |\langle v=2,2\Sigma_g^+,n=0|\psi(t)\rangle|^2$. La ligne pointillée indique la probabilité de dissociation : $P_{diss}(t) = 1 - \sum_{v,n} |\langle v,2\Sigma_g^+,n|\psi(t)\rangle|^2$.

On constate qu'effectivement les probabilités de transition vers les états liés excités sont très faibles ($< 10^{-4}$). La probabilité de dissociation est elle beaucoup plus grande (environ 10^{-2}) mais sa valeur n'est due qu'à la partie imaginaire de $E_{0,0}$ et non à des processus non-adiabatiques. On peut donc conclure que la photodissociation de H_2^+ n'est pas parfaitement adiabatique mais présente un caractère adiabatique fort. Un seul état de Floquet, $|\lambda_{v=0,n=0}(t)\rangle$, semble suffisant pour engendrer un bon espace actif.

La figure 13.3 présente les mesures de non-adiabaticité de H_2^+ pour un espace actif unidimensionnel, où seul l'amplitude $E(t)$ du laser évolue avec le temps.

Les deux mesures de non-adiabaticité Ξ_1 et Ξ_2 apparaissent comme plus ou moins proportionnelles. Il est important de remarquer, que cette non-adiabaticité est inférieure à 10^{-30} lorsque le paramètre de contrôle (ici E seul) est constant. Ce résultat était attendu puisqu'il correspond à

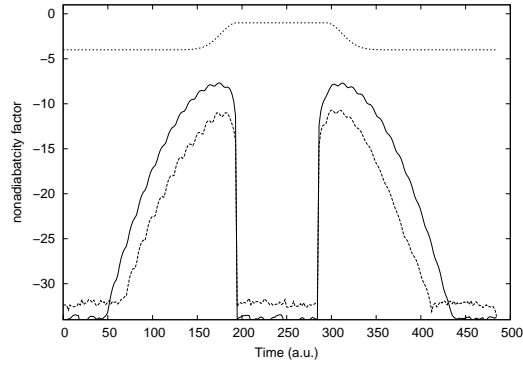


FIG. 13.3 – Les deux mesures de la non-adiabaticité dans un processus de photodissociation de H_2^+ , sur une échelle logarithmique, $\Xi_1(t)$ en ligne continue, et $\Xi_2(t)$ en ligne pointillée. Les variations de l'enveloppe du laser sont représentées en haut de la figure.

la seule situation rigoureusement adiabatique où la vitesse de variation du paramètre adiabatique est infiniment lente. Par contre dès que la vitesse de variation augmente, à l'établissement et à l'extinction du pulse, la non-adiabaticité augmente. Ceci est à nouveau en accord avec l'idée selon laquelle la non-adiabaticité est proportionnelle à la vitesse de variation des paramètres de contrôle. Mais on doit noter, qu'à la vitesse maximum de variation, la non-adiabaticité présentée par H_2^+ reste tout à fait raisonnable, ce qui conforte l'idée qu'un espace actif unidimensionnel est suffisant pour décrire le système. Cette non-adiabaticité doit diminuer si on considère des variations plus lentes, c'est ce que l'on peut constater sur la figure 13.4 où le temps d'établissement du couplage est passé de 25 u.a. à 100 u.a. Le pic de non-adiabaticité de la figure 13.3 est environ deux ordres de grandeur plus grand que celui de la figure 13.4.

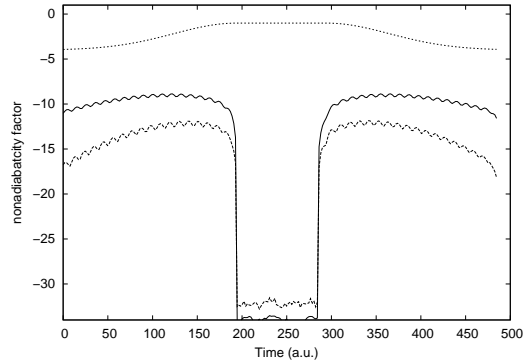


FIG. 13.4 – Même figure que 13.3, mais avec une enveloppe laser ayant des variations plus lentes, le temps d'établissement τ ayant été passé de 25u.a. à 100u.a..

13.1.2 La phase de Aharonov-Anandan de H_2^+

Nous nous intéressons ici à la phase géométrique abélienne, introduite par l'évolution dans l'espace actif unidimensionnel. Nous considérons à nouveau l'Hamiltonien $\tilde{H}_F(t) = \tilde{H}(t, \theta) - i\hbar\omega_0\partial_\theta$ avec le même pulse laser que dans la section précédente. L'analyse de la phase géométrique se fonde sur la théorie de Floquet généralisée, c'est à dire que l'on corrèle les temps, et on reproduit les impulsions lasers périodiquement de $[0, T]$ vers $[T, 2T]$, $[2T, 3T]$, etc., seule toutefois la première

impulsion qui a une réalité est considérée dans le calcul. Le nouvel Hamiltonien est alors

$$\tilde{H}_F^\circ(\theta) = \tilde{H}_0 + \mu(r)E(\theta T/(2\pi)) \cos\left(\frac{\omega_0 T}{2\pi}\theta\right) - i\hbar\frac{2\pi}{T}\partial_\theta \quad (13.6)$$

dans l'espace de Hilbert étendu $\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$ avec $\theta = \frac{2\pi}{T}t$ (notons que les zones de Brillouin représentent une des impulsions, et non pas un photon). L'espace actif étant engendré par $|\lambda_{0,0}\rangle$, la fonction d'onde prend la forme

$$\psi^\circ(\theta) = e^{-\frac{i\hbar^{-1}T}{2\pi}\chi_{0,0}\theta} |\mu_{0,0}(\theta)\rangle \quad (13.7)$$

$|\mu_{0,0}\rangle$ étant l'état propre de \tilde{H}_F° relié à $|\lambda_{0,0}(t, \theta)\rangle$ état propre de $\tilde{H}_F(t, \theta)$ (i.e. $|\mu_{0,0}(\theta)\rangle = |\lambda_{0,0}(\theta T/2\pi, \theta)\rangle$). $\chi_{0,0}$ est la quasiénergie de \tilde{H}_F° associée. La véritable fonction d'onde est, $\forall t \in [0, T]$, $\psi(t) = \psi^\circ(2\pi t/T)$. La phase dynamique de Floquet se décompose en une phase dynamique usuelle et une phase de Aharonov-Anandan, cf. chapitre 8.

$$\frac{i\hbar^{-1}T}{2\pi}\chi_{0,0}\theta = \frac{i\hbar^{-1}T}{2\pi} \int_0^\theta \langle \mu_{0,0}(\theta') | \tilde{H}^\circ(\theta') | \mu_{0,0}(\theta') \rangle d\theta' + \int_0^\theta \langle \mu_{0,0}(\theta') | \partial_{\theta'} | \mu_{0,0}(\theta') \rangle d\theta' \quad (13.8)$$

Soit $\tilde{H}^{\circ,eff}(\theta) = P_0 \tilde{H}^\circ(\theta) \Omega(\theta)$ l'Hamiltonien effectif, avec $P_0 = |\mu_{0,0}(0)\rangle \langle \mu_{0,0}(0)|$ et Ω l'opérateur d'onde associé à cet espace actif. $|\mu_{0,0}(\theta)\rangle$ étant la base de l'espace actif se déformant, on note $|\mu_{0,0}^0(\theta)\rangle = \langle \mu_{0,0}(0) | \mu_{0,0}(\theta) \rangle |\mu_{0,0}(0)\rangle$, on sait d'après la section 10.2 que¹ :

$$\chi_1 + \frac{2\pi i\hbar}{T} \frac{\langle \mu_{0,0}^0(\theta) | \partial_\theta | \mu_{0,0}^0(\theta) \rangle}{\langle \mu_{0,0}^0(\theta) | \mu_{0,0}^0(\theta) \rangle} = \frac{\langle \mu_{0,0}^0(\theta) | \tilde{H}^{\circ,eff}(\theta) | \mu_{0,0}^0(\theta) \rangle}{\langle \mu_{0,0}^0(\theta) | \mu_{0,0}^0(\theta) \rangle} \quad (13.9)$$

$$= \frac{\langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \tilde{H}^\circ(\theta) | \mu_{0,0}(\theta) \rangle}{\langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \mu_{0,0}(\theta) \rangle} \quad (13.10)$$

$$= \frac{\langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \tilde{H}^\circ(\theta) | \psi^\circ(\theta) \rangle}{\langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \psi^\circ(\theta) \rangle} \quad (13.11)$$

Le membre de gauche de l'équation 13.9 peut être calculé pour des valeurs discrètes θ_i d'une base DVR après avoir déterminé les vecteurs propres. Le membre de droite de 13.11 peut être calculé continûment, par l'intégration de l'équation de Schrödinger qui nous donne ψ° . Les résultats de ces calculs sont présentés par la figure 13.5.

Cette figure montre le très bon accord entre les deux calculs, confirmant les résultats de la section 10.2 sur l'égalité entre phases réelles et phases effectives.

La périodicité du générateur de la phase dynamique effective, $\frac{\langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \tilde{H}^\circ(\theta) \psi^\circ(\theta) \rangle}{\langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \psi^\circ(\theta) \rangle} = \frac{2\pi i\hbar}{T} \frac{\langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \partial_\theta | \psi^\circ(\theta) \rangle}{\langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \psi^\circ(\theta) \rangle}$, est un bon indicateur du caractère adiabatique avec espace actif unidimensionnel, de la photodissociation de H_2^+ . Cette périodicité se traduit, par des ellipses parfaitement superposées sur la figure 13.5. C'est la périodicité de l'unique état $|\mu_{0,0}(\theta)\rangle$ intervenant dans ψ° qui induit la périodicité de l'énergie effective. À l'inverse, si l'adiabaticité n'était pas vérifiée en dimension 1, nous aurions eu à la place de l'équation 13.7

$$\psi^\circ(\theta) = \sum_i c_i e^{-\frac{i\hbar^{-1}T}{2\pi}\chi_{i,0}\theta} |\mu_{i,0}(\theta)\rangle \quad (13.12)$$

avec $c_i \in \mathbb{C}$ et $\sum_i |c_i|^2 = 1$, d'où

$$\frac{\langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \tilde{H}^\circ(\theta) | \psi^\circ(\theta) \rangle}{\langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \psi^\circ(\theta) \rangle} = \frac{\sum_i c_i e^{-\frac{i\hbar^{-1}T}{2\pi}\chi_{i,0}\theta} \langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \tilde{H}^\circ(\theta) | \mu_{i,0}(\theta) \rangle}{\sum_i c_i e^{-\frac{i\hbar^{-1}T}{2\pi}\chi_{i,0}\theta} \langle v=0, {}^2\Sigma_g^+ | \mu_{i,0}(\theta) \rangle} \quad (13.13)$$

¹dans les notations de la section 10.2, $|\mu_{0,0}^0(\theta)\rangle = |\tilde{\psi}^0(\theta)\rangle$

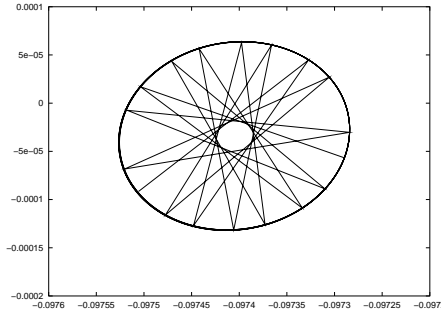


FIG. 13.5 – Trajectoire dans le plan complexe de la différence entre phase de Floquet (somme de la phase dynamique usuelle et de la phase de Aharonov-Anandan) et la phase de Aharonov-Anandan effective (membre de gauche de 13.9). L’aspect de ligne brisée est dû au fait que l’on ne dispose des valeurs de cette phase que pour des valeurs discrètes de θ . Seuls les sommets de l’étoile ont donc un sens. L’ellipse continue est la phase dynamique effective de H_2^+ (membre de droite de 13.11).

Les interférences dues aux différentes phases de Floquet $\{e^{-\frac{i\hbar^{-1}T}{2\pi}\chi_{i,0}\theta}\}$ détruisent la périodicité. En augmentant l’intensité du laser, les processus à deux photons qui n’intervenaient pas jusqu’alors, rendent non valide la description par un espace actif de dimension 1. Ceci détruit la périodicité de la phase dynamique effective, comme on le voit sur la figure 13.6.

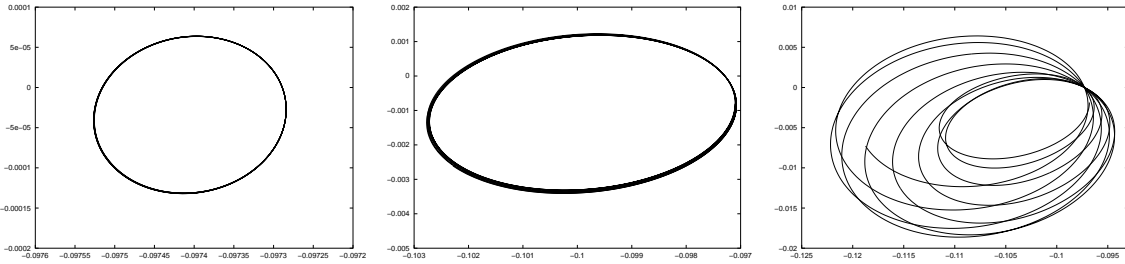


FIG. 13.6 – Trajectoires dans le plan complexe de $\frac{\langle v=0, 2\Sigma_g^+ | \hat{H}^\circ(\theta) \psi^\circ(\theta) \rangle}{\langle v=0, 2\Sigma_g^+ | \psi^\circ(\theta) \rangle}$ pour des intensités maximales du laser (de gauche à droite) de 10^{12}W/cm^2 , 10^{13}W/cm^2 et 10^{14}W/cm^2

Il est donc clair que la description avec un espace actif de dimension 1, n’est plus suffisante pour une intensité de 10^{13}W/cm^2 et est même très mauvaise pour une intensité qui dépasse 10^{14}W/cm^2 .

13.2 Adiabaticité et phase de Aharonov-Anandan de la molécule “toy-model”

13.2.1 Mesure de l’adiabaticité de la molécule “toy-model”

Nous reprenons l’étude précédente mais en remplaçant la surface excitée de H_2^+ par le potentiel de Hulbert-Hirschfedfer. Cette surface excitée du haut présentant des états liés, ceux-ci vont intervenir dans la dynamique. Les facteurs de Franck-Condon rendent les transitions liés-liés très probables de sorte qu’un seul état n’est sans doute plus suffisant pour décrire le système. L’enveloppe du laser

est prise égale à

$$E(t) = \begin{cases} E_0 e^{-\frac{(t-t_1)^2}{\tau^2}} & \text{si } t \leq t_1 \\ E_0 & \text{si } t_1 \leq t \leq t_2 \\ E_0 e^{-\frac{(t-t_2)^2}{\tau^2}} & \text{si } t \geq t_2 \end{cases} \quad (13.14)$$

avec $\tau = 15u.a.$, $t_1 = 50u.a.$ et $t_2 = 450u.a.$, et une intensité maximale $I = 10^{10}W/cm^2$. De plus une modulation de fréquence est introduite :

$$\omega(t) = \begin{cases} \omega_0 & \text{si } t \leq t_3 \\ \omega_0 + \Delta\omega \frac{t-t_3}{t_4-t_3} & \text{si } t_3 \leq t \leq t_4 \\ \omega_0 + \Delta\omega & \text{si } t_4 \leq t \leq t_5 \\ \omega_0 + \Delta\omega \frac{t_6-t}{t_6-t_5} & \text{si } t_5 \leq t \leq t_6 \\ \omega_0 & \text{si } t \geq t_6 \end{cases} \quad (13.15)$$

où $t_3 = 130u.a.$, $t_4 = 230u.a.$, $t_5 = 350u.a.$ et $t_6 = 450u.a.$, la fréquence initiale étant $\omega_0 = 0.544a.u.$ avec le shift $\Delta\omega = 0.002u.a.$. Nous avons choisi des variations linéaires de la fréquence afin d'avoir une relation analytique simple entre t (temps réel) et θ (phase temporelle de Floquet), i.e.

$$d\theta = \omega_{eff}(t)dt \quad (13.16)$$

avec

$$\omega_{eff}(t) = \begin{cases} \omega_0 & \text{si } t \leq t_3 \\ \omega_0 + \Delta\omega \frac{2t-t_3}{t_4-t_3} & \text{si } t_3 \leq t \leq t_4 \\ \omega_0 + \Delta\omega & \text{si } t_4 \leq t \leq t_5 \\ \omega_0 + \Delta\omega \frac{t_6-2t}{t_6-t_5} & \text{si } t_5 \leq t \leq t_6 \\ \omega_0 & \text{si } t \geq t_6 \end{cases} \quad (13.17)$$

À cause de la modulation de fréquence, le laser se trouve accordé à certains instants avec la transition $|v = 0, {}^2\Sigma_g^+\rangle \rightarrow |v = 0, hh\rangle$ (le symbole ${}^2\Sigma_g^+$ faisant référence à la surface du bas et le symbole hh à celle du haut), faisant passer la molécule de l'état fondamental vibrationnel dans l'état fondamental électronique à l'état fondamental vibrationnel dans le premier état excité électronique. Cette possible transition, nous invite à incorporer à l'espace actif l'état $|v = 0, hh\rangle \otimes |n = 1\rangle$, en plus de $|v = 0, {}^2\Sigma_g^+\rangle \otimes |n = 0\rangle$. La figure 13.7 présentant $\text{Sp}(\tilde{H}_F^0)$ pour la molécule toy-model, au voisinage de la quasiénergie initiale $E_{0,0}$, confirme cette analyse, puisqu'un groupe de quasiénergies sélectionnées par WOSA se trouvent à proximité de $E_{0,0}$.

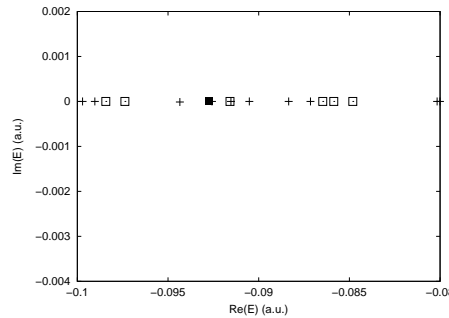


FIG. 13.7 – Spectre de la molécule toy-model avec le champ mais sans couplage : $\text{Sp}(\tilde{H}_F^0)$. ■ : quasiénergie initiale, □ : les 10 premiers états sélectionnés par WOSA, et + : les autres quasiénergies.

WOSA sélectionne sur l'axe réel, les états $\{|v, {}^2\Sigma_g^+\rangle \otimes |n=0\rangle, |v, hh\rangle \otimes |n=1\rangle\}_{v=0,1,2}$ qui sont issus des états liés des deux surfaces. Les probabilités des transitions inélastiques à un photon entre ces états sont relativement importantes, comme on le voit sur la figure 13.8, les transitions à 2 photons (retour vers ${}^2\Sigma_g^+$) restent quant à elles de probabilités très faibles.

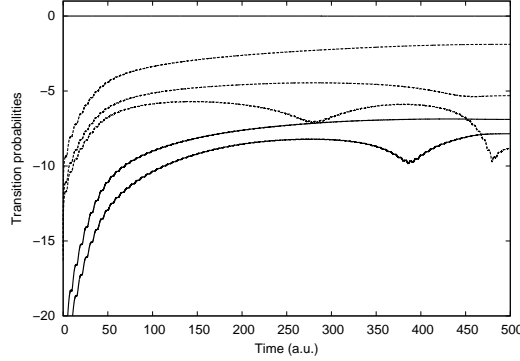


FIG. 13.8 – Probabilités de transition de la molécule toy-model sous l'effet du champ, sur une échelle logarithmique, en fonction du temps. Les lignes continues représentent (de haut en bas), la probabilité de survie de l'état initial $P_{(v=0, {}^2\Sigma_g^+, n=0)}(t) = |\langle v=0, {}^2\Sigma_g^+, n=0 | \psi(t) \rangle|^2$, les probabilités de transition vers les états liés excités de la surface du bas : $P_{(v=0, {}^2\Sigma_g^+, n=0) \rightarrow (v=1, {}^2\Sigma_g^+, n=0)}(t) = |\langle v=1, {}^2\Sigma_g^+, n=0 | \psi(t) \rangle|^2$ et $P_{(v=0, {}^2\Sigma_g^+, n=0) \rightarrow (v=2, {}^2\Sigma_g^+, n=0)}(t) = |\langle v=2, {}^2\Sigma_g^+, n=0 | \psi(t) \rangle|^2$. Les lignes pointillées représentent (de haut en bas) les probabilités de transition vers les états liés de la surface du haut : $P_{(v=0, {}^2\Sigma_g^+, n=0) \rightarrow (v=0, hh, n=1)}(t) = |\langle v=0, hh, n=1 | \psi(t) \rangle|^2$, $P_{(v=0, {}^2\Sigma_g^+, n=0) \rightarrow (v=1, hh, n=1)}(t) = |\langle v=1, hh, n=1 | \psi(t) \rangle|^2$, et $P_{(v=0, {}^2\Sigma_g^+, n=0) \rightarrow (v=2, hh, n=1)}(t) = |\langle v=2, hh, n=1 | \psi(t) \rangle|^2$.

On a représenté figure 13.9 les mesures de non-adiabaticité de la molécule toy-model.

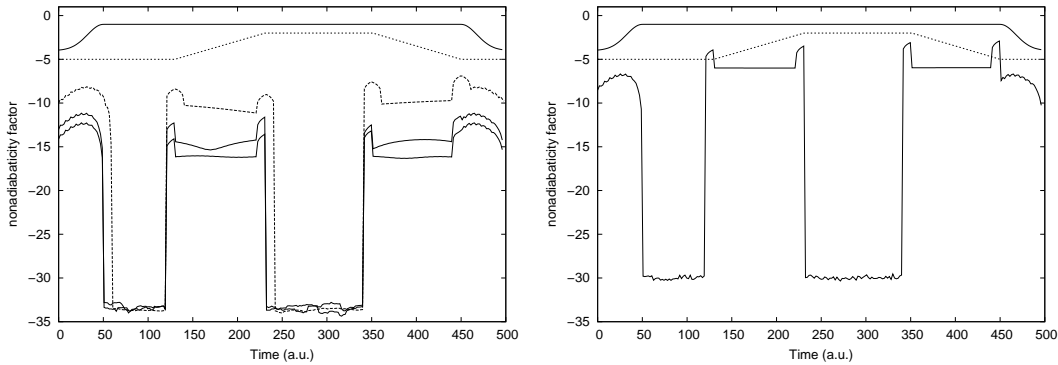


FIG. 13.9 – À droite la mesure de non-adiabaticité $\Xi_1(t)$, pour la molécule toy-model, dans une échelle logarithmique, en fonction du temps. Les modulations d'enveloppe et de fréquence sont représentées en haut de la figure. Trois cas sont considérés, avec un espace actif de dimension 1 (ligne pointillée), avec un espace actif de dimension 5 et un de dimension 10 (lignes continues). À gauche, $\Xi_2(t)$ pour l'espace actif de dimension 5.

Avec un espace actif unidimensionnel, la non-adiabaticité de la molécule toy-model est du même ordre que celle de H_2^+ , alors que nous avons considéré une intensité du laser cent fois plus faible. Ceci confirme la non-validité de la description de la molécule toy-modèle avec un espace de dimension 1.

Par contre, si on augmente la dimension de l'espace actif, on constate une importante diminution de la non-adiabaticité. On gagne ainsi environ quatre ordres de grandeur pour les valeurs maximales de non-adiabaticité en passant d'une base à un état à une base à cinq états. Un à deux ordres de grandeur sont à nouveau gagnés en passant de cinq à dix. On constatera par ailleurs, des "sauts" de non-adiabaticité aux instants où l'évolution de la fréquence est non-dérivable, en accord avec le fait que le régime n'est pas adiabatique si la vitesse de variation des paramètres de contrôle est grande.

13.2.2 Phase de Aharonov-Anandan non-abélienne de la molécule "toy-model"

Afin d'étudier la phase de Aharonov-Anandan de la molécule toy-model, nous considérons l'Hamiltonien \tilde{H}_F^\odot de la molécule dans la théorie de Floquet généralisée. La forme du pulse laser est la même que dans le paragraphe précédent, mais avec une intensité maximale $I = 4.10^{10} \text{W/cm}^2$. En revanche la fréquence du laser est posée constante à $\omega = 0.546u.a.$, accordée sur la transition $|v = 0, {}^2\Sigma_g^+\rangle \rightarrow |v = 0, hh\rangle$. Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, il est nécessaire d'utiliser un espace actif multidimensionnel, aussi considérons-nous un espace de dimension 3, engendré par $\{|v = 0, {}^2\Sigma_g^+\rangle, |v = 0, hh\rangle, |v = 1, hh\rangle\}$. Les trois états propres de \tilde{H}_F^\odot , $|\mu_{0,0}\rangle$, $|\mu_{0,1}\rangle$ et $|\mu_{1,1}\rangle$ reliés aux trois états précédents, constituent l'espace actif se déformant. Soit P_0 le projecteur sur l'espace actif initial,

$$P_0 = |v = 0, {}^2\Sigma_g^+\rangle\langle v = 0, {}^2\Sigma_g^+| + |v = 0, hh\rangle\langle v = 0, hh| + |v = 1, hh\rangle\langle v = 1, hh| \quad (13.18)$$

Soit $B \in \mathcal{M}_{3 \times 3}(\mathbb{C})$ la matrice définie par

$$(B^{-1})_{ij} = \langle i | P_0 | \mu_j(\theta = 0) \rangle \quad (13.19)$$

où les indices i et j correspondent à $(v = 0, {}^2\Sigma_g^+)$, $(v = 0, hh)$, $(v = 1, hh)$. Nous pouvons dès lors introduire les fonctions

$$\tilde{\psi}_i(\theta) = \sum_j B_{ji} |\mu_j(\theta)\rangle \quad (13.20)$$

qui satisfont à la condition $\tilde{\psi}_{v, {}^2\Sigma_g^+/hh}(2\pi) = \tilde{\psi}_{v, {}^2\Sigma_g^+/hh}(0) = |v, {}^2\Sigma_g^+/hh\rangle$. Soit $\mu \in \mathcal{M}_{n \times 3}(\mathbb{C})$ la matrice des vecteurs $|\mu_j\rangle$. L'égalité entre phases standard et effective, s'écrit alors

$$\begin{aligned} \Delta &= B^\dagger \mu H_F^\odot \mu B \\ &\quad - (B^\dagger \mu^\dagger P_0 \mu B)^{-1} B^\dagger \mu^\dagger P_0 H_F^{\odot, eff} P_0 \mu B \\ &\quad + \frac{2\pi i \hbar}{T} (B^\dagger \mu^\dagger P_0 \mu B)^{-1} (B^\dagger \mu^\dagger P_0 \partial_\theta P_0 \mu B) \\ &\quad - \frac{2\pi i \hbar}{T} B^\dagger \mu^\dagger \partial_\theta \mu B \end{aligned} \quad (13.21)$$

$$= 0 \quad (13.22)$$

Les éléments de matrice du défaut Δ sont représentés figure 13.10 pour trois espaces actifs de taille croissante.

Avec un espace actif unidimensionnel le défaut à l'égalité des phases standard et effective est important avec un module d'environ 10^{-2} , en accord avec la discussion du paragraphe précédent indiquant qu'un espace actif de dimension 1 est insuffisant. En incluant dans l'espace actif initial, l'état lié fondamental de la surface du haut, l'amplitude du défaut décroît de trois ordres de grandeur. Enfin en incluant le premier état lié excité de la surface du haut, on réduit encore l'amplitude du défaut d'un ordre de grandeur. On observe donc comme attendu, que la matrice Δ converge rapidement vers 0. Le défaut qui subsiste avec un espace tridimensionnel est de module égal à environ 10^{-6} , ce qui modifie les valeurs des probabilités de transitions inélastiques vers les états de

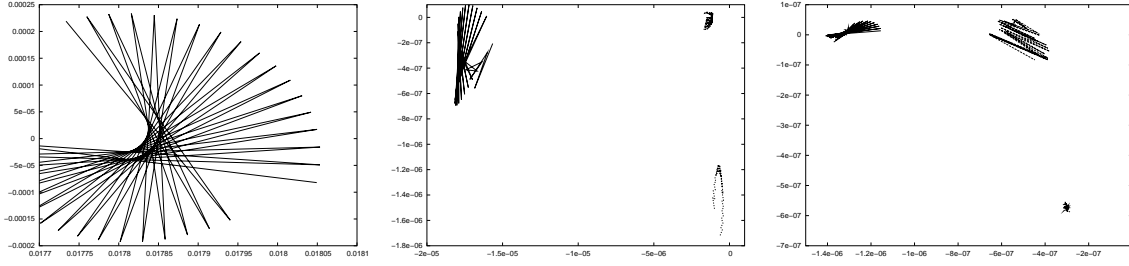


FIG. 13.10 – Les éléments de matrice dans le plan complexe de la différence entre la phase standard non-abélienne et la phase effective non-abélienne : $\Delta_{11}(\theta)$ ligne continue, $\Delta_{12}(\theta)$ ligne pointillée, Δ_{22} ligne tirets. Le calcul est effectué pour des valeurs discrètes de θ , rendant un aspect en lignes brisées dont seuls les sommets ont un sens physique. De gauche à droite, avec un espace actif de dimension 1 engendré par $|v = 0, {}^2\Sigma_g^+\rangle$, un espace actif de dimension 2 engendré par $\{|v = 0, {}^2\Sigma_g^+\rangle, |v = 0, hh\rangle\}$; et un espace actif de dimension 3 engendré par $\{|v = 0, {}^2\Sigma_g^+\rangle, |v = 0, hh\rangle, |v = 1, hh\rangle\}$.

la surface du haut, d'un terme en 10^{-12} , qui est tout à fait négligeable par rapport à la valeur de ces probabilités (cf. fig. 13.8). Ceci confirme la possibilité évoquée chapitre 10, de calculer la phase standard à partir de l'Hamiltonien effectif de l'espace actif. La subsistance d'un défaut à l'égalité des phases, est due à la non-complétude de la base de l'espace actif se déformant. La figure 13.11 présente les facteurs d'orthonormalisation des états $\tilde{\psi}_{v=0, {}^2\Sigma_g^+}$ et $\tilde{\psi}_{v=0, hh}$ calculés dans l'espace actif tridimensionnel.

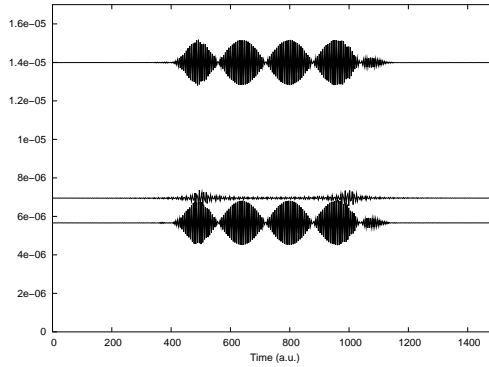


FIG. 13.11 – Les facteurs d'orthonormalisation instantanés en fonction du temps, calculés dans l'espace actif tridimensionnel. Les trois courbes correspondent de haut en bas à : $|\langle \tilde{\psi}_{v=0, {}^2\Sigma_g^+}(\theta) | \tilde{\psi}_{v=0, {}^2\Sigma_g^+}(\theta) \rangle - 1|$, $|\langle \tilde{\psi}_{v=0, {}^2\Sigma_g^+}(\theta) | \tilde{\psi}_{v=0, hh}(\theta) \rangle|$ et $|\langle \tilde{\psi}_{v=0, hh}(\theta) | \tilde{\psi}_{v=0, hh}(\theta) \rangle - 1|$.

Les états de Floquet généralisés $|\mu_i(\theta)\rangle$ vérifient parfaitement l'orthonormalisation, mais seulement sur la délocalisation temporelle, i.e.

$$\langle \mu_i | \mu_j \rangle_{\mathcal{H} \otimes L^2(S^1)} = \int_0^{2\pi} \langle \mu_i(\theta) | \mu_j(\theta) \rangle_{\mathcal{H}} \frac{d\theta}{2\pi} = \delta_{ij} \quad (13.23)$$

mais cette même relation n'est pas satisfaite instantanément par $\tilde{\psi}_i$. Les erreurs de la figure 13.11 sont quasi-constantes sur l'ensemble du temps, avec de petites modulations durant la période de fort couplage dans l'interaction matière-rayonnement. Asymptotiquement, les états $\tilde{\psi}_{v=0, {}^2\Sigma_g^+}(0)$ et $\tilde{\psi}_{v=0, hh}(0)$ sont égaux à $|v = 0, {}^2\Sigma_g^+\rangle$ et $|v = 0, hh\rangle$, les orthonormalités instantanées devraient

donc être vérifiée. Les erreurs doivent donc être attribuées aux composantes au dehors de l'espace actif $\langle k|(1 - P_0)\mu_i(0)\rangle$.

13.3 Adiabaticité contrainte de H_2^+

Comme nous l'avons vu dans la première section de ce chapitre, un espace actif unidimensionnel n'est pas suffisant pour décrire H_2^+ si on augmente l'intensité du laser. Par ailleurs, même avec une intensité raisonnable, les transitions inélastiques (à deux photons), de probabilités très faibles, ne sont pas décrites avec un espace de dimension 1. En revanche la méthode CATM, introduite chapitre 12, permet à l'aide d'un seul état de Floquet généralisé, de décrire ces transitions, comme on peut le voir figure 13.12.

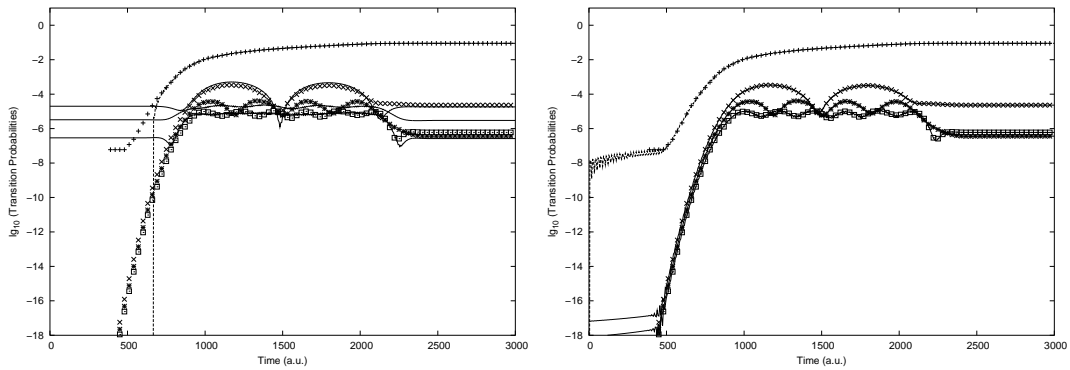


FIG. 13.12 – Probabilités de transition de H_2^+ sur une échelle logarithmique en fonction du temps, pour un laser pulsé d'intensité $I = 10^{12} \text{W/cm}^2$ et une fréquence de $\omega_0 = 0.295868$. + : probabilité de dissociation $P_{diss}(t) = 1 - \sum_v |\langle v, {}^2\Sigma_g^+ | \psi(t) \rangle|^2$; × : probabilité de transition $P_{(v=0, {}^2\Sigma_g^+) \rightarrow (v=1, {}^2\Sigma_g^+)}(t) = |\langle v=1, {}^2\Sigma_g^+ | \psi(t) \rangle|^2$; * : $P_{(v=0, {}^2\Sigma_g^+) \rightarrow (v=2, {}^2\Sigma_g^+)}(t) = |\langle v=2, {}^2\Sigma_g^+ | \psi(t) \rangle|^2$; □ : $P_{(v=0, {}^2\Sigma_g^+) \rightarrow (v=3, {}^2\Sigma_g^+)}(t) = |\langle v=3, {}^2\Sigma_g^+ | \psi(t) \rangle|^2$. Ces probabilités sont calculées par une intégration directe de l'équation de Schrödinger. Les lignes continues correspondent à une projection de la fonction d'onde dans un espace actif unidimensionnel constitué d'un seul état de Floquet généralisé, à gauche sans potentiel optique temporel, à droite avec potentiel optique temporel (CATM).

Le potentiel optique temporel utilisé pour la méthode CATM est

$$-iV_{opt}(t) = -iAe^{-\frac{(t-t_0)^2}{\tau^2}} \sum_{k \neq i} |k\rangle \langle k| \quad (13.24)$$

Sans l'usage du potentiel optique temporel (et de la prolongation artificielle du temps), un espace actif unidimensionnel n'est absolument pas suffisant pour décrire les transitions inélastiques, comme le montre le figure 13.12 gauche. En particulier, on constate que les probabilités de transition sont non-nulles dès l'instant initial $t = 0$, ce qui physiquement est absurde puisque le couplage champ-matière est nul. Ce problème est entièrement corrigé par l'usage du potentiel optique temporel de la méthode CATM, fig. 13.12 droite. L'effet du potentiel temporel, qui permet la description avec un seul état de Floquet généralisé, est visible sur le spectre de quasiénergie 13.13, où l'on constate que dans le spectre déformé par le potentiel optique temporel, la quasiénergie initiale est isolée des autres quasiénergies, ce qui n'est pas le cas sans le potentiel temporel.

La dernière figure 13.14 montre que la qualité des résultats obtenus en utilisant CATM n'est pas altérée par un accroissement significatif de l'intensité du laser. Ceci n'a rien de surprenant dans la mesure où CATM repose sur un schéma rigoureux : si le potentiel optique temporel parvient

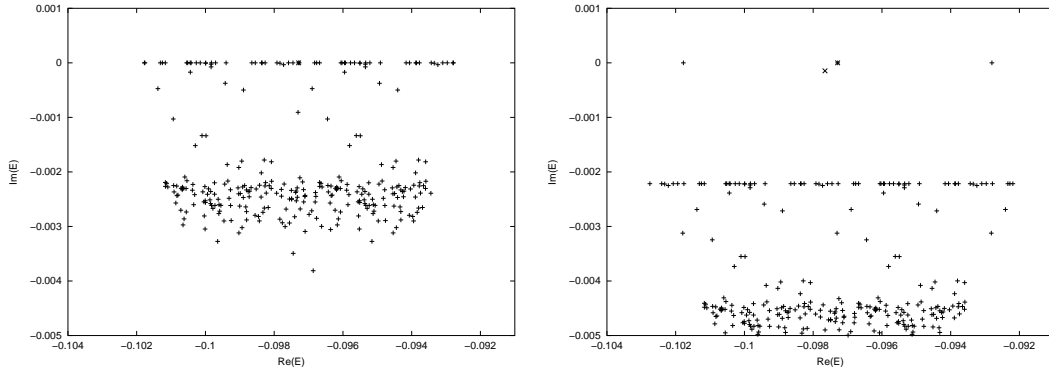


FIG. 13.13 – Spectre de H_2^+ avec le champ, mais sans couplage, dans la théorie de Floquet généralisée : $\text{Sp}(H_F^{0,\odot})$. À gauche sans potentiel optique temporel, à droite en présence de potentiel optique temporel. * : quasiénergie initiale, + : autres quasiénergies, × : quasiénergie initiale calculée avec le couplage. On peut se rendre compte que le déplacement due au couplage (distance entre * et ×) reste mineure par rapport aux distances aux voisins les plus proches

effectivement à imposer à l'état propre de Floquet sélectionné des conditions asymptotiques identiques aux conditions initiales de la fonction d'onde, alors la fonction d'onde est rigoureusement proportionnelle à cet état propre.

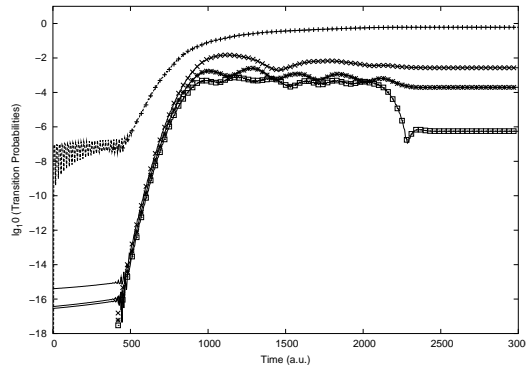


FIG. 13.14 – Même figure que 13.12 mais avec une intensité $I = 9.10^{12} \text{W}/\text{cm}^2$.

L'adiabaticité d'un processus photoréactif — i.e. sa capacité à être reproduit par un seul vecteur propre de Floquet généralisé — est lié au comportement asymptotique de ce vecteur propre. CATM permet de résoudre ce problème en imposant artificiellement les conditions asymptotiques souhaitées. Toutefois l'intérêt de la méthode peut sembler être davantage conceptuel que pratique, car la construction du vecteur propre de Floquet généralisé apparaît au moins aussi compliquée que l'intégration directe de l'équation de Schrödinger.

Cependant les premiers calculs illustrés par les figure de ce paragraphe révèlent un fait intéressant : l'effet principal des potentiels optiques temporels est d'isoler dans le plan complexe la valeur propre de l'état de Floquet qui, à lui seul, reproduit la fonction d'onde du système. À posteriori cette conséquence apparaît logique puisque cet isolement est le garant d'une absence de transitions non-adiabatiques. Toutefois il revêt pour nos calculs un intérêt tout particulier. Les calculs itératifs du vecteur propre de Floquet, fondés sur une méthode RDWA, convergent extrêmement rapidement même dans les régimes de fort couplages. Sur les exemples présentés ici, la résolution itérative est par exemple plus rapide que l'intégration de l'équation de Schrödinger.

Chapitre 14

Piégeage électromagnétique de H_2^+

Ce n'est pas le puits qui est trop profond, mais la corde qui est trop courte.

Proverbe chinois

14.1 Position du problème

Le contrôle de systèmes moléculaires présentant des continua rencontre de sérieuses difficultés dues aux durées de vie finies des états qui y participent. En effet le contrôle est souvent fondé sur des schémas adiabatiques qui requièrent une évolution lente des paramètres de contrôle et cela va à l'encontre des processus dissipatifs irréversibles qui sont souvent très rapides.

Le piégeage électromagnétique peut cependant constituer une solution pour remédier à cette irréversibilité trop rapide. La création de structures quasi-stables directement engendrées par le couplage champ-matière peut fournir des durées de vie suffisantes et des facteurs de Franck-Condon favorables à des transitions sélectionnées. On peut donc envisager dans ce cadre le contrôle de transitions inélastiques, a priori peu probables, ou encore le contrôle de photodissociations, soit au niveau de leur probabilités de réalisation, soit au niveau du spectre de fragmentation.

La faisabilité d'un tel projet, dans le cadre des théories développées dans ce manuscrit, peut être testée pour le cas de l'ion H_2^+ soumis à une impulsion laser. Pour ce système les deux paramètres de contrôle (modulés avec le temps), conditionnant en particulier l'apparition d'états piégés temporairement, sont l'amplitude du champ électrique et la fréquence de la porteuse. En présence d'un laser ultraviolet correctement accordé sur les transitions entre les surfaces $^2\Sigma_g^+$ et $^2\Sigma_u^+$, les transitions entre états liés de la surfaces $^2\Sigma_g^+$ sont possibles mais nécessitent de forts champs, car elles mettent en œuvre des processus multiphotoniques. D'autre part elles sont non-négligeables uniquement si l'impulsion laser possède une largeur spectrale suffisante.

Le schéma envisagé dans le cadre du piégeage électromagnétique est très différent mais il demeure trop complexe pour que l'on puisse espérer le circonscrire en analysant les résultats d'un grand nombre d'essais pour des conditions différentes et surtout pour des formes d'impulsions lasers différentes. L'analyse de certains mécanismes de transitions dans les modèles atomiques à deux ou trois niveaux a fait apparaître des scenari efficaces totalement contre-intuitifs et une dynamique finale conditionnée par l'interférence subtile de plusieurs mécanismes élémentaires. Nul doute que c'est le cas encore ici avec en prime la participation des continua moléculaires. C'est pourquoi nous pensons que le succès de l'entreprise consistant en la recherche d'une trajectoire dans l'espace de configuration, nécessite préalablement le tracé des cartes des couplages non-adiabatiques et de piégeage.

Une difficulté importante subsiste néanmoins dans ce schéma, car le piégeage électromagnétique dans H_2^+ nécessite des champs intenses qui sont la source de difficultés dans le calcul des vecteurs propres engendrant les espaces actifs évolutifs.

La molécule H_2^+ , contrôlée par un champ laser, est décrite par l'Hamiltonien :

$$H_F(E, \omega_{eff}) = H_0 + \mu E \cos(\theta) - i\hbar\omega_{eff}\partial_\theta \quad (14.1)$$

dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H} \otimes L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$. Les paramètres de contrôle sont (E, ω_{eff}) . Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux champs adiabatiques sur la variété de contrôle engendrée par ces paramètres. La variété en question est $\mathcal{M} = \{0.33 \leq \omega_{eff} \leq 0.35\} \times \{0 \leq E \leq 0.7\}$ ¹. $L^2(\mathbb{R}^+, dr)$ est numériquement représenté par un espace vectoriel de dimension 100, et donc $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^+, dr) \otimes \mathbb{C}^2$ est numériquement représenté par un espace de dimension 200. Enfin $L^2(S^1, \frac{d\theta}{2\pi})$ est numériquement représenté par un espace vectoriel de dimension 4 (4 blocs Floquet centrés sur le bloc correspondant à 0 photon), soit au total, un espace vectoriel primaire de dimension 800. Le mécanisme du piégeage est analysé de manière heuristique dans l'introduction de cette partie. La surface ${}^2\Sigma_u^+$ habillée d'un photon croisant la surface ${}^2\Sigma_g^+$, des états liés apparaissent sur la surface adiabatique du haut dans un puits de potentiel résultant du croisement. Le contrôle du piégeage nécessite donc de considérer les croisements entre divers états issus du continuum de ${}^2\Sigma_u^+$ et d'états liés des états liés de ${}^2\Sigma_g^+$. La dimension de l'espace actif est choisie suffisamment large, pour tenir compte des divers croisements éventuels, en l'occurrence $\dim S_0 = 10$. À partir d'un espace actif initial sélectionné par WOSA, l'espace actif est déformé d'un point à l'autre du réseau X de discrétisation de \mathcal{M} , comme explicité dans les parties précédentes. L'espace actif initial sélectionné par WOSA est donné table 14.1.

TAB. 14.1 – Vecteurs engendrant l'espace actif initial S_0 au point $E = 0, \omega_{eff} = 0.33$, pour H_2^+ , ordonnés par ordre décroissant de couplage avec l'état initial. n est le nombre de photons habillant la molécule dans cet état (le bloc Floquet), k est le numéro de l'état sur sa surface, E est la valeur propre associée (unité atomique).

| | Surface | n | k | $\Re E$ | $\Im E$ |
|----|------------------|-----|-----|----------------------------|-----------------------------|
| 1 | ${}^2\Sigma_g^+$ | 0 | 3 | -0.773871×10^{-1} | $-0.379449 \times 10^{-11}$ |
| 2 | ${}^2\Sigma_g^+$ | 0 | 2 | -0.870537×10^{-1} | $-0.866770 \times 10^{-12}$ |
| 3 | ${}^2\Sigma_g^+$ | 0 | 4 | -0.682893×10^{-1} | $-0.139227 \times 10^{-10}$ |
| 4 | ${}^2\Sigma_u^+$ | -1 | 64 | -0.618018×10^{-1} | -0.720876×10^{-2} |
| 5 | ${}^2\Sigma_g^+$ | 0 | 1 | -0.972891×10^{-1} | $-0.135401 \times 10^{-12}$ |
| 6 | ${}^2\Sigma_u^+$ | -1 | 62 | -0.751160×10^{-1} | -0.719907×10^{-2} |
| 7 | ${}^2\Sigma_u^+$ | -1 | 63 | -0.684977×10^{-1} | -0.719867×10^{-2} |
| 8 | ${}^2\Sigma_u^+$ | -1 | 61 | -0.816598×10^{-1} | -0.720510×10^{-2} |
| 9 | ${}^2\Sigma_u^+$ | -1 | 65 | -0.550235×10^{-1} | -0.723916×10^{-2} |
| 10 | ${}^2\Sigma_g^+$ | 0 | 5 | -0.597601×10^{-1} | $-0.461802 \times 10^{-10}$ |

Le spectre de $\tilde{H}_F(0, 0.33)$ est représenté figure 14.1.

Entrent donc dans l'espace actif, 5 états liés de la surface liante ${}^2\Sigma_g^+$, et une bande du continuum de la surface antiliante ${}^2\Sigma_u^+$ pour un photon absorbé, bande représentée numériquement par 5 états.

¹L'unité retenue est telle que $E = 1$ correspond à une intensité de $10^{14} \text{ W.cm}^{-2}$, les fréquences sont en unité atomique

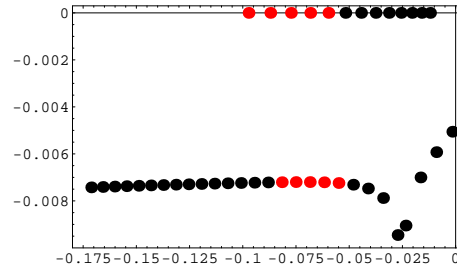


FIG. 14.1 – Spectre de H_2^+ dans le plan complexe pour les paramètres $E = 0$ et $\omega_{eff} = 0.33$: $\text{Sp}(H_F^0(0, 0.33))$. En rouge les valeurs propres de l'espace actif.

14.2 Difficultés du problème

Le problème du contrôle de H_2^+ est beaucoup plus difficile que les problèmes traités dans la partie I. La matrice représentant l'Hamiltonien est d'ordre 800, elle est non-hermitienne, et intègre des valeurs propres représentant les continua. Ces caractéristiques engendrent un très grand nombre de problèmes.

14.2.1 Calcul des vecteurs propres

Les vecteurs propres instantanés sont calculés en utilisant la méthode des opérateurs d'onde (cf. partie II). On considère dans cette étude des intensités du laser très importantes (au delà de 0.6, i.e. proches de 10^{14}W.cm^{-2}), pour lesquelles la diagonalisation de la matrice Hamiltonienne devient un problème très délicat. Au demeurant certains états du continuum de très hautes énergies posent des problèmes dans l'algorithme de diagonalisation. Ces problèmes sont dus au potentiel optique, qui se montre incapable lorsqu'on monte en énergie, d'absorber ces états. Les réflexions engendrées sur les murs de la boîte par cette mauvaise absorption, font prendre des formes non-physiques aux états de hautes énergies. De plus, les potentiels et le moment dipolaire électrique utilisés par nos calculs, n'approchent que de manière grossière la réalité : $V_{2\Sigma_g^+}$ ne diverge pas en 0 et $\mu(r)$ diverge en $r \in \mathcal{V}(+\infty)$. Enfin à forte intensité, des états intrus issus du continuum viennent perturber les calculs. Ces problèmes engendrent des difficultés de convergence de l'algorithme récursif de calcul des vecteurs propres comme le montre la figure 14.2, mais ces difficultés restent concentrées sur des intensités situées entre 0.6 et 0.7.

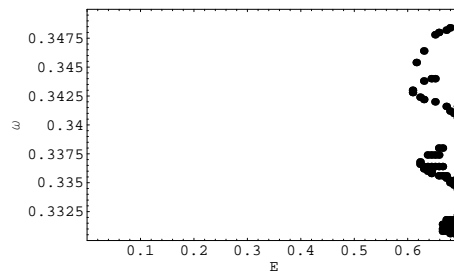


FIG. 14.2 – Points où l'algorithme de calcul des vecteurs propres n'a pas convergé dans \mathcal{M} .

14.2.2 Changements de jauge intempestifs

Nous avons déjà évoqué le fait que les programmes de diagonalisation pouvaient engendrer des changements de jauge intempestifs, soit en changeant la phase (resp. la norme) des vecteurs propres vraies (resp. généralisés) :

$$|a, \vec{R}\rangle \rightsquigarrow g|a, \vec{R}\rangle \quad g \in U(1) \text{ ou } \mathbb{C}^* \quad (14.2)$$

soit en permutant deux états propres. Ces changements de jauge engendrent des lignes de changement de cartes intempestives qui vont rendre la lecture des cartes difficiles. Bien que l'on utilise les vecteurs propres d'un point connu pour initialiser la récurrence en un point proche voisin, un très grand nombre de changements de jauge intempestifs apparaissent au cours du calcul, comme le montre la figure 14.3.



FIG. 14.3 – *Système de cartes locales induites par le calcul numérique, les lignes de changements de cartes sont les lignes claires se superposant au champ adiabatique abélien (figure associée à l'état 5).*

Sur cette figure le champ adiabatique sur une cellule $[xyzt]$ est calculé à partir de la formule :

$$F_{[xyzt]} = (f_{xy} - 1) + (f_{yz} - 1) + (f_{zt} - 1) + (f_{tx} - 1) \quad (14.3)$$

où $f_{xy} = \langle a^*, x|a, y \rangle$. Cette formule est très sensible à un changement de jauge intempestif se produisant au point x sans se produire aux autres points. L'effet qui en résulte sur le champ est :

$$F'_{[xyzt]} = (gf_{xy} - 1) + (f_{yz} - 1) + (f_{zt} - 1) + (f_{tx}g^{-1} - 1) \neq F_{[xyzt]} \quad (14.4)$$

Un champ orthoradial apparaît donc et induit une ligne de changement de carte sur la représentation graphique des champs. Pour résoudre ce problème, nous avons utilisé une formule insensible au changement de phase (resp. de norme) :

$$F_{[xyzt]} = f_{xy}f_{yz}f_{zt}f_{tx} - 1 \quad (14.5)$$

$$F'_{[xyzt]} = gf_{xy}f_{yz}f_{zt}f_{tx}g^{-1} - 1 = f_{xy}f_{yz}f_{zt}f_{tx} - 1 = F_{[xyzt]} \quad (14.6)$$

En utilisant cette formule, les lignes de changement de cartes dues aux changements arbitraires de phase ou de norme disparaissent, comme le montre la figure 14.4

Cette amélioration persiste pour les champs non-abéliens si un seul état à la fois est touché par un changement de phase (resp. de norme), dans ce cas le changement de jauge apparaît comme un élément de $U(1)$ (resp. \mathbb{C}^*), c'est à dire un élément du centre de $U(M)$ (resp. $GL(M, \mathbb{C})$). Mais

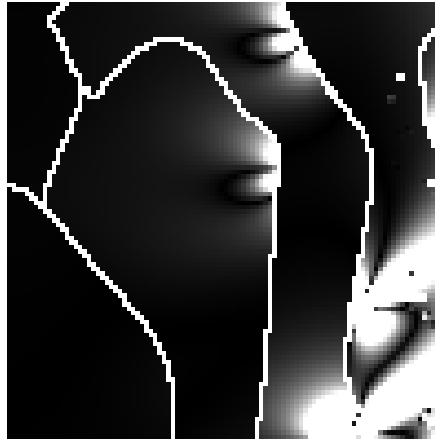


FIG. 14.4 – *Même figure que 14.3 mais avec un calcul des champs par une formule insensible aux changements arbitraires de phase ou de norme*

si plusieurs états sont touchés, le changement de jauge apparaît alors comme un élément du tore maximal auquel le calcul du champ adiabatique est sensible.

Les cartes dans champs adiabatiques restent tout de même très difficiles à lire, du fait des permutations intempestives des états propres, produites par le programme de diagonalisation. On constate en effet figure 14.4, que les permutations inutiles des états propres, “mélangent” beaucoup les cartes des champs, les rendant pratiquement impossible à décrypter. La figure 14.4 est en effet constituée de petites cartes locales associées à des états différents et assemblées pour couvrir \mathcal{M} . Pour interpréter correctement les champs, il faudrait comparer les 10 cartes des champs adiabatiques abéliens, et recombinaison toutes les petites cartes locales, afin de construire les 10 cartes homogènes des champs adiabatiques. Ceci revient à résoudre 10 puzzles dont les pièces ont été mélangées. Pour remédier à ce problème, on a introduit dans le programme de diagonalisation, une procédure forçant à maintenir les états dans un ordre particulier. Au départ du calcul les 5 états issus des états liés sont rangés dans l’ordre croissant de leurs parties réelles suivis des 5 états issus du continuum dans l’ordre croissant de leurs parties réelles. Par la suite le rangement des états en un point se fait en utilisant le point précédent à partir d’un critère de proximité spectrale. Ce choix est très arbitraire, mais permet une meilleure lisibilité des cartes des champs adiabatiques et facilite leurs interprétations.

14.2.3 Les continua et l’hypothèse adiabatique

Le traitement des continua dans les simulations numériques est un problème récurrent en mécanique quantique. C’est aussi le cas dans notre étude. Chapitre 2 section 2.5, nous avons remarqué que l’utilisation d’une représentation adiabatique du système dynamique quantique était rendue possible par la discrétisation des continua associée à l’utilisation de potentiels optiques. Mais cette méthode ne règle pas tous les problèmes. Le sens de l’hypothèse adiabatique n’est pas clair pour les valeurs propres complexes représentant les continua. Pour un problème comme celui traité dans ce chapitre, on ne fait que postuler l’adiabaticité, à notre connaissance aucun théorème adiabatique ne s’y applique rigoureusement. Comme nous l’avons vu au chapitre 5 section 5.2, de possibles difficultés dans l’interprétation des champs adiabatiques existent. On peut en effet se poser la question de savoir si c’est le croisement des valeurs propres dans le plan complexe ou seulement la coïncidence des parties réelles qui engendre de forts couplages non-adiabatiques.

Enfin le continuum est un ensemble connexe, le petit morceau de continuum que l’on fait entrer dans l’espace actif, n’est pas isolé du reste du continuum (cf. fig. 14.1). L’espace actif n’est donc pas

rigoureusement isolé. Ceci est très clair si on considère le champ non-abélien $F_{cont} = \delta_G f_{6 \rightarrow 10}$ où $f_{6 \rightarrow 10}$ est la matrice extraite de la connexion discrète pour les états de l'espace actif issus du continuum. Comme nous l'avons vu chapitre 4 section 4.4, ce champ mesure l'intensité des couplages non-adiabatiques entre le sous-espace engendré par les états de l'espace actif issus du continuum avec les autres états, et donc mesure le degré d'isolement de ce sous-espace. Ce champ est représenté figure 14.5.

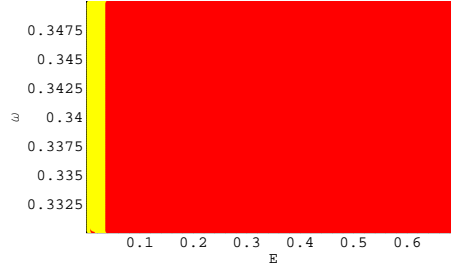


FIG. 14.5 – Norme du champ non-abélien du sous-espace engendré par les états de l'espace actif issus du continuum : $\|F_{cont}\|_\infty$. Champ nul : jaune, champ fort : rouge (unités arbitraires).

Le champ adiabatique F_{cont} est uniformément important sur toute la variété \mathcal{M} . On retrouve bien le fait que le morceau de continuum n'est pas du tout isolé. Le sens de l'hypothèse adiabatique n'est donc pas très clair dans ces conditions. Une étude plus poussée, portant sur l'application de l'hypothèse adiabatique à des continua, est un point qu'il faudrait considérer dans de futurs travaux.

Considérons $f_{1 \rightarrow 5}$ la matrice extraite de la connexion discrète pour les états de l'espace actif issus des états liés. Le champ non-abélien $F_{bd} = \delta_G f_{1 \rightarrow 5}$ mesure l'isolement du sous-espace engendré par les états issus des états liés. Ce champ est représenté figure 14.6.

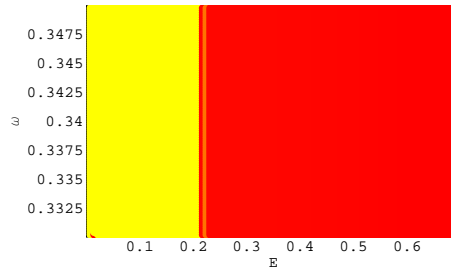


FIG. 14.6 – Norme du champ non-abélien du sous-espace engendré par les états de l'espace actif issus des états liés : $\|F_{bd}\|_\infty$. Champ nul : jaune, champ fort : rouge (unité arbitraires).

On constate, que $\|F_{bd}\|_\infty$ nul pour les faibles intensité du laser, devient brutalement fort pour $E > 0.2$. Les états liés deviennent des résonances avec la montée en intensité du laser, en effet comme nous l'avons dit en introduction de cette partie, la surface adiabatique du bas a son puits de potentiel plus haut que sa limite en $r \rightarrow \infty$ (fig. 12.7 à droite). Les états liés sont alors des résonances de forme, dont la durée de vie correspond à la durée de l'effet tunnel. La valeur absolue de la partie imaginaire de ces résonances augmente avec l'intensité du laser, les valeurs propres migrent donc dans le plan complexe inférieur en direction du continuum. On peut penser que la brutale augmentation de $\|F_{bd}\|_\infty$ pour $E = 0.2$ correspond, soit à la rencontre entre le spectre discret et le continuum, soit à la coïncidence des parties réelles entre les résonances et le continuum. On constate toutefois figure 14.7, que la rencontre entre les résonances et le continuum ne se produit

qu'au delà de $E = 0.6$, et n'explique donc pas la brutale augmentation du champ adiabatique.

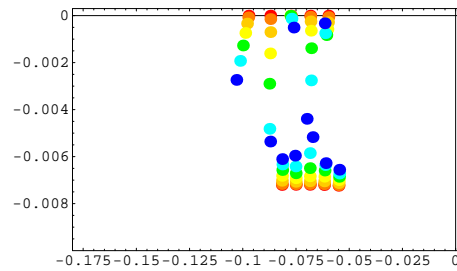


FIG. 14.7 – Spectre actif de H_2^+ dans le plan complexe pour $\omega_{eff} = 0.33$ et pour $E = 0$ (rouge), $E = 0.1$ (orange), $E = 0.2$ (jaune-orange), $E = 0.3$ (jaune), $E = 0.4$ (vert), $E = 0.5$ (cyan) et $E = 0.6$ (bleu)

En revanche au delà de $E = 0.2$, une des valeurs propres commence à avoir une partie imaginaire importante (état issu de $|^2\Sigma_g^+, k = 2\rangle$), de plus cette résonance se trouve à la verticale du spectre continu. On pourrait donc penser, que tant que le spectre discret correspond à des états liés, ce sont les croisements vrais sur la droite réelle qui fixent les couplages non-adiabatiques (faible champ adiabatique de $E = 0$ à $E = 0.2$), par contre dès que le spectre est associé à des états de résonance, c'est la coïncidence des parties réelles qui fixe l'intensité des champs adiabatiques.

14.3 Couplages non-adiabatiques, piégeage et contrôle

Nous cherchons à contrôler la photodissociation, les transitions vers les états liés, et le piégeage de la molécule H_2^+ . Pour cela nous allons considérer le potentiel adiabatique spatio-temporel, $A_+ = A + i\hbar^{-1}Edt \in \Omega^1(\mathcal{M}, \mathfrak{u}(10))$, qui comme nous l'avons explicité dans la partie I de ce travail, contient les informations nécessaires pour une analyse prédictive du contrôle. Pour un état a donné, le champ adiabatique abélien $F_a = dA_{aa}$ (calculé en fait par la formule $F_a = \delta_G f_{aa} - 1$), est caractéristique de l'amplitude des couplages non-adiabatiques de a avec les autres états. Les cartes des intensités des différents champs adiabatiques, permettent de déterminer l'existence et la position des différents monopôles-trous de ver, et par la même, d'imaginer les trajectoires dans \mathcal{M} induisant des transferts de population d'un état à l'autre (passage d'un espace parallèle à un autre).

Le piégeage est toutefois un effet bien différent d'un transfert entre états. Lorsque l'intensité du laser est grande, du fait de l'effet tunnel induit par la forme de la surface adiabatique basse, les états liés de $^2\Sigma_g^+$ deviennent des résonances caractérisées par leurs durées de vie (vitesses de l'effet tunnel) inversement proportionnelles aux parties imaginaires des valeurs propres de résonance. Le piégeage consiste en l'apparition sur la surface adiabatique du haut, d'un véritable état lié (de durée de vie pratiquement infinie **à champ constant**), caractéristique d'une résonance qui "retombe" brutalement sur l'axe réel. Bien qu'il se produise à champ constant, ce phénomène est profondément dynamique car caractérisé uniquement par les durées de vie des états. C'est donc le potentiel dynamique $i\hbar Edt$ plutôt que le potentiel géométrique A , qui va contenir les informations sur le piégeage. E étant la matrice des valeurs propres, ce sont naturellement les cartes des parties imaginaires (et donc des durées de vies à champ constant), qui vont nous intéresser.

L'analyse de ces différentes cartes pourraient nous permettre de contrôler à la fois le piégeage et les transitions afin d'obtenir des schémas où l'on contrôle à la fois la dissociation et les probabilités de transitions inélastiques. De plus, en considérant une superposition d'états, nous pourrions profiter des interférences entre les espaces parallèles, pour enrichir les possibilités de contrôle.

Nous avons représenté figure 14.8 les champs adiabatiques abéliens pour les 10 états de l'espace actif.

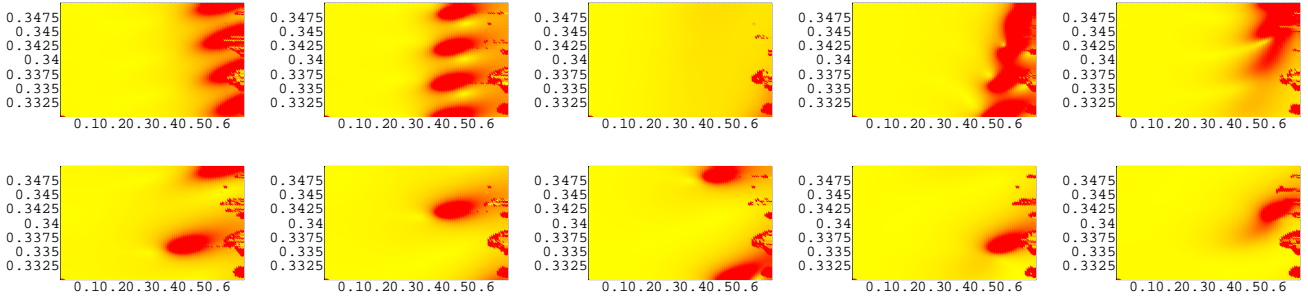


FIG. 14.8 – Champs magnétiques adiabatiques sur la variété de contrôle \mathcal{M} pour les états de l'espace actif, en haut les états issus de ${}^2\Sigma_g^+$ pour (de gauche à droite) $k = 1, 2, 3, 4$ et 5 , en bas les états représentant la bande de continuum issue de ${}^2\Sigma_u^+$ pour (de gauche à droite) $k = 61, 62, 63, 64$ et 65 . Une densité de champ magnétique nulle est représentée en jaune, un champ fort en rouge (unités arbitraires).

Ces cartes font apparaître un grand nombre de monopôles magnétiques, en les combinant entre elles, on obtient la carte des trous de ver entre les espaces parallèles associés aux états de l'espace actif, figure 14.9.

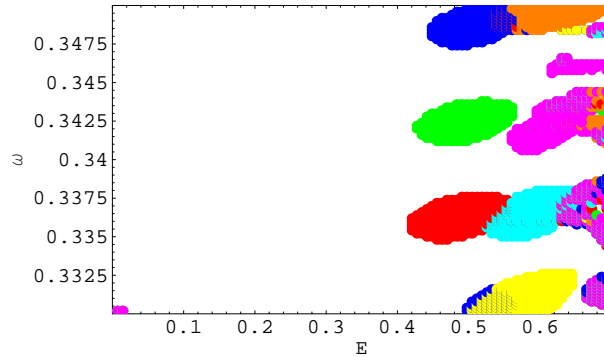


FIG. 14.9 – Champ de couleur des monopôles $u(10)$ associés à l'espace actif dans la variété de contrôle \mathcal{M} , avec pour convention, un trou de ver orange entre $({}^2\Sigma_g^+, 1)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 61)$, un trou de ver rouge entre $({}^2\Sigma_g^+, 2)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 61)$, vert entre $({}^2\Sigma_g^+, 2)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 62)$, bleu entre $({}^2\Sigma_g^+, 2)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 63)$, jaune entre $({}^2\Sigma_g^+, 4)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 63)$, cyan entre $({}^2\Sigma_g^+, 4)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 64)$, et magenta entre $({}^2\Sigma_g^+, 4)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 65)$, (S, k) étant l'espace parallèle associé à l'état instantané issu de la surface S et de l'état k . Il n'y a pas d'autres trous de ver entre les 10 espaces parallèles issus de l'espace actif. Les trous noirs-monopôles, associés à des couplages entre des états de l'espace actif et des états intrus, n'ont pas été représentés. Ceux-ci sont visibles sur 14.8 par élimination avec les monopôles représentés ici. Des aberrations numériques sont visibles sur cette figure au-delà de $E = 0.6$, celles-ci sont dues aux non-convergences du programme de diagonalisation, elles se superposent parfaitement avec les points tracés figure 14.2.

Les différentes connexions entre espaces parallèles par des trous de ver sont représentées figure

14.10

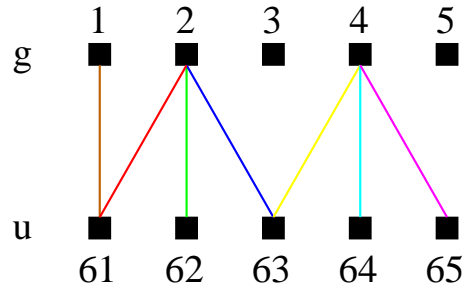


FIG. 14.10 – Représentation schématique des connexions par trou de ver entre les différents états de l'espace actif. Les couleurs se réfèrent à celles utilisées figure 14.9.

Il est intéressant de noter que les états 3 et 5 sont isolés dans l'espace actif. En ce qui concerne l'état 5, la figure 14.8 montre qu'il possède des couplages mais avec l'extérieur de l'espace actif, alors que l'état 3, ne présente aucun couplage. Il est également intéressant de constater que pour une fréquence fixe, ces états correspondent à des résonances qui restent très proches de l'axe réel, et sont donc isolées du reste du spectre actif, comme le montre la figure 14.7. Enfin, il n'existe aucun couplage direct entre les états liés, en accord avec le fait que le moment dipolaire électrique ne couple les états qu'entre les deux surfaces. C'est donc aussi le cas de l'opérateur moment dipolaire déformé avec l'espace actif : $\mu(\vec{R}) = T^{-1}(\vec{R})\mu T(\vec{R}) \in \Gamma(\mathcal{M}, V)$, où $T(\vec{R}) \in \mathcal{M}_{10 \times 800}(\mathbb{C})$ est la matrice des vecteurs propres de l'espace actif au point $\vec{R} \in \mathcal{M}$, et $(V, \mathcal{M}, u(10), \pi_V)$ est le fibré vectoriel associé au fibré adiabatique représentant les observables se déformant.

Pour identifier les piègeages électromagnétiques, nous avons tracé les cartes des parties imaginaires des états de l'espace actif, figure 14.11.

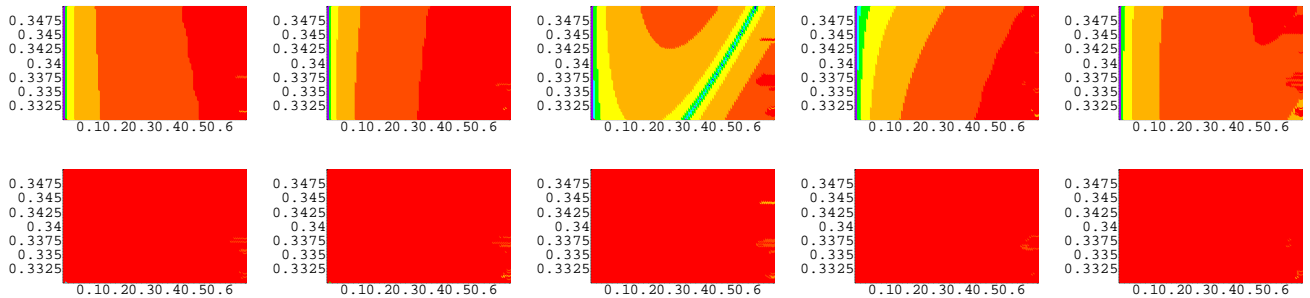


FIG. 14.11 – Gradient des valeurs absolues des parties imaginaires des valeurs propres des états de l'espace actif en fonction de M , en haut les états issus de ${}^2\Sigma_g^+$ pour (de gauche à droite) $k = 1, 2, 3, 4$ et 5, en bas les états représentant la bande de continuum issue de ${}^2\Sigma_u^+$ pour (de gauche à droite) $k = 61, 62, 63, 64$ et 65. Violet : $[0, 10^{-10}[$, Bleu : $[10^{-10}, 10^{-9}[$, Turquoise : $[10^{-9}, 10^{-8}[$, Cyan : $[10^{-8}, 10^{-7}[$, Vert : $[10^{-7}, 10^{-6}[$, Jaune : $[10^{-6}, 10^{-5}[$, Jaune-orange : $[10^{-5}, 10^{-4}[$, Orange : $[10^{-4}, 10^{-3}[$, et Rouge : $\geq 10^{-3}$.

Le piègeage apparaît clairement sur l'état 3, comme une fine ligne au-delà de $E = 0.3$, où la durée de vie de l'état à champ constant devient très grande.

Malheureusement l'état 3 est aussi un état qui ne présente aucun couplage non-adiabatique dans la gamme d'amplitudes et de fréquences considérée. Si l'état initial de la dynamique se projette complètement sur cet état, la fonction d'onde se projettera toujours entièrement sur celui-ci à la fin de la dynamique. On ne peut donc pas espérer obtenir (dans cette gamme de fréquences et d'amplitudes), à la fois un contrôle du piégeage et des transferts de population à partir uniquement de l'état 3.

14.4 Autre fenêtre de fréquences

Nous avons réitéré les calculs effectués dans les sections précédentes, mais pour $\omega_{eff} \in [0.35, 0.37]$. L'espace actif est cette fois engendré par les états issus de $({}^2\Sigma_g^+, 1)$, $({}^2\Sigma_g^+, 2)$, $({}^2\Sigma_g^+, 3)$, $({}^2\Sigma_g^+, 4)$, $({}^2\Sigma_u^+, 63)$, $({}^2\Sigma_u^+, 64)$, $({}^2\Sigma_u^+, 65)$, $({}^2\Sigma_u^+, 66)$, $({}^2\Sigma_u^+, 67)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 68)$, soit 4 états issus des états liés et une bande de continuum plus large que dans le cas précédent. Comme dans le cas précédent, l'algorithme itératif n'a pas convergé pour certains points, cf. fig. 14.12

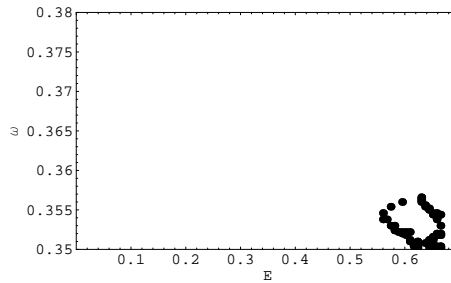


FIG. 14.12 – Points où l'algorithme de calcul des vecteurs propres n'a pas convergé dans \mathcal{M} .

Les champs magnétiques adiabatiques pour la nouvelle fenêtre de fréquences sont donnés figure 14.13.

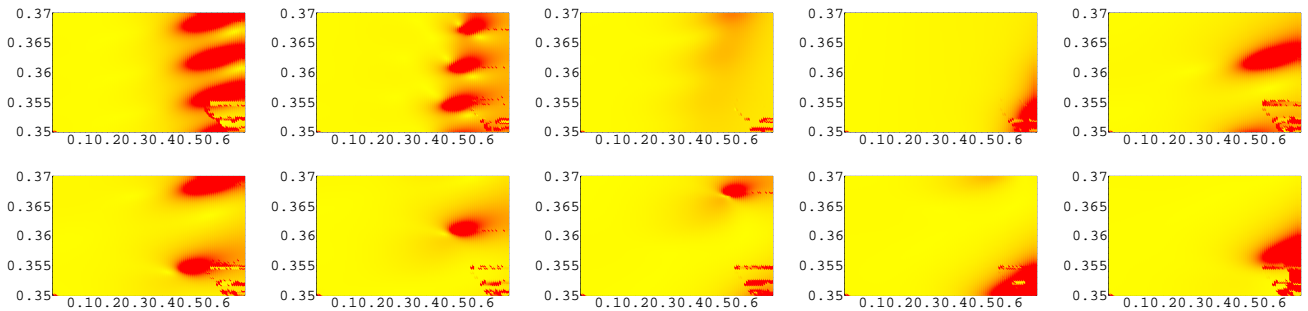


FIG. 14.13 – Champs magnétiques adiabatiques sur la variété de contrôle \mathcal{M} pour les états de l'espace actif, en haut les états issus de ${}^2\Sigma_g^+$ pour (de gauche à droite) $k = 1, 2, 3, 4$ et l'état issu de ${}^2\Sigma_u^+$ pour $k = 63$, en bas les états issus de ${}^2\Sigma_u^+$ pour (de gauche à droite) $k = 64, 65, 66, 67$ et 68. Une densité de champ magnétique nulle est représentée en jaune, un champ fort en rouge (unités arbitraires).

Les trous de ver associés au nouvel espace actif sont donnés figure 14.14 et figure 14.15.

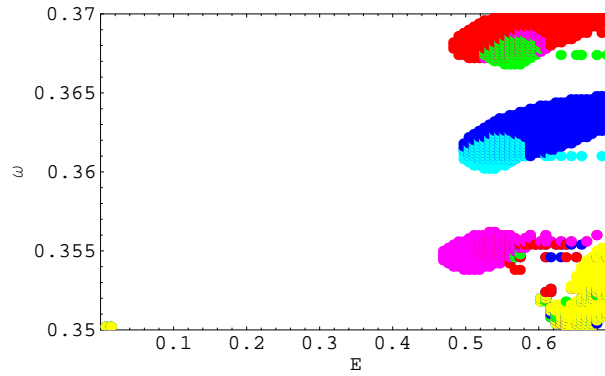


FIG. 14.14 – Champ de couleur des monopôles $u(10)$ associés à l'espace actif dans la variété de contrôle \mathcal{M} , avec pour convention, un trou de ver bleu entre $({}^2\Sigma_g^+, 1)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 63)$, un trou de ver rouge entre $({}^2\Sigma_g^+, 1)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 64)$, vert entre $({}^2\Sigma_g^+, 2)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 66)$, jaune entre $({}^2\Sigma_g^+, 4)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 67)$, cyan entre $({}^2\Sigma_g^+, 2)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 65)$, et magenta entre $({}^2\Sigma_g^+, 2)$ et $({}^2\Sigma_u^+, 64)$, (S, k) étant l'espace parallèle associé à l'état instantané issu de la surface S et de l'état k . Il n'y a pas d'autres trous de ver entre les 10 espaces parallèles issus de l'espace actif. Les trous noirs-monopôles, associés à des couplages entre des états de l'espace actif et des états intrus, n'ont pas été représentés. Ceux-ci sont visibles sur 14.13 par élimination avec les monopôles représentés ici. Des aberrations numériques sont visibles sur cette figure au-delà de $E = 0.6$, celles-ci sont dues aux non-convergences du programme de diagonalisation, elles se superposent parfaitement avec les points tracés figure 14.12.

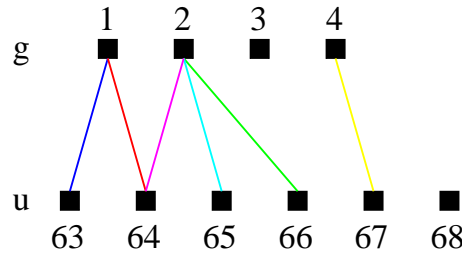


FIG. 14.15 – Représentation schématique des connexions par trou de ver entre les différents états de l'espace actif. Les couleurs se réfèrent à celles utilisées figure 14.14.

Les parties imaginaires des valeurs propres de l'espace actif en fonction de \mathcal{M} pour la nouvelle fenêtre de fréquences sont données figure 14.16.

L'état issu de $({}^2\Sigma_g^+, 4)$ présente à son tour un piégeage. Dans la gamme de fréquences considérée, il n'est pas couplé à d'autres états, par contre il l'est dans la gamme de la section précédente.

En résumant et en extrapolant les résultats pour les deux gammes de fréquences, la situation peut être synthétisée par la figure 14.17.

En conclusion

Le figure 14.17 montre qu'il est difficile d'utiliser les lignes de piégeage afin de contrôler les transitions à 2 photons entre deux états liés de ${}^2\Sigma_g^+$ sans avoir une dissociation importante. En effet ces lignes de piégeage (comme celle associée à l'état 4, en magenta figure 14.17), sont très éloignées des lignes de monopôles magnétiques associées aux couplages non-adiabatiques forts entre l'état en question et le continuum (en vert sur la figure 14.17 pour l'état 3). De plus les transitions entre états liés ne peuvent se faire que via un état du continuum (et donc un état très dissociatif).

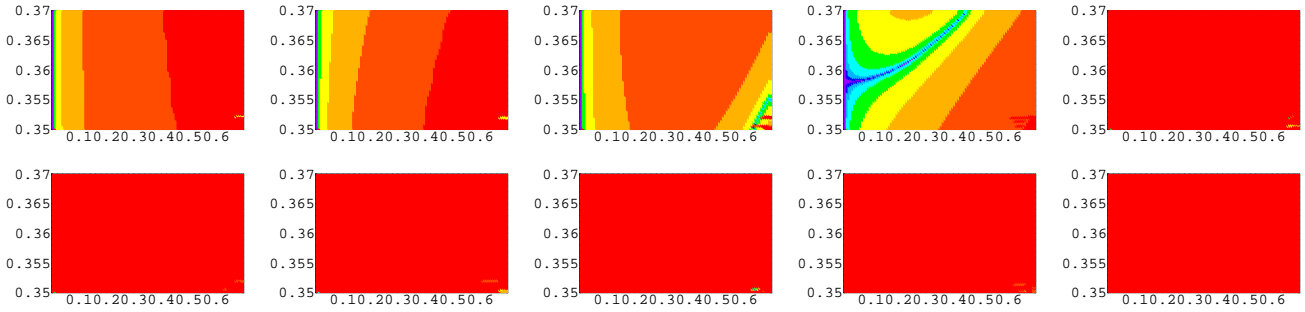


FIG. 14.16 – Gradient des valeurs absolues des parties imaginaires des valeurs propres des états de l'espace actif en fonction de \mathcal{M} , en haut les états issus de ${}^2\Sigma_g^+$ pour (de gauche à droite) $k = 1, 2, 3, 4$ et l'état issu de ${}^2\Sigma_u^+$ pour $k = 63$, en bas les états issus de ${}^2\Sigma_u^+$ pour (de gauche à droite) $k = 64, 65, 66, 67$ et 68 . Violet : $[0, 10^{-10}[$, Bleu : $[10^{-10}, 10^{-9}[$, Turquoise : $[10^{-9}, 10^{-8}[$, Cyan : $[10^{-8}, 10^{-7}[$, Vert : $[10^{-7}, 10^{-6}[$, Jaune : $[10^{-6}, 10^{-5}[$, Jaune-orange : $[10^{-5}, 10^{-4}[$, Orange : $[10^{-4}, 10^{-3}[$, et Rouge : $\geq 10^{-3}$.

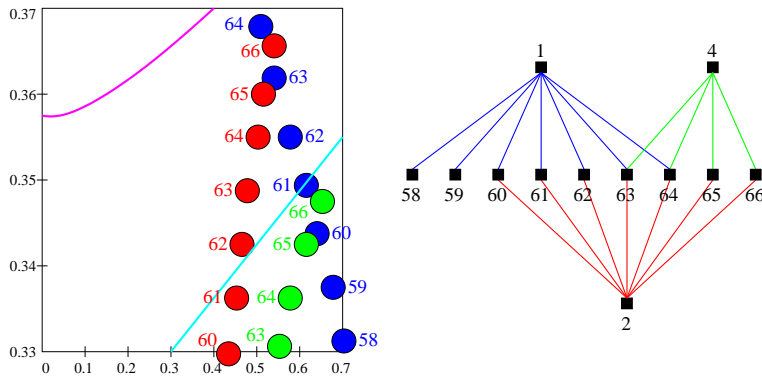


FIG. 14.17 – Schéma des positions des monopôles magnétiques associés aux états issus de $({}^2\Sigma_g^+, 1)$ (en bleu), de $({}^2\Sigma_g^+, 2)$ (en rouge), et de $({}^2\Sigma_g^+, 4)$ (en vert). Sont également indiqués les lignes de piégeage des états issus de $({}^2\Sigma_g^+, 3)$ (en cyan) et de $({}^2\Sigma_g^+, 4)$ (en magenta). Les numéros indiquent les états issus du continuum qui sont croisés.

On voit par ailleurs sur la figure 14.17, que la transition entre deux états issus des états liés via un état du continuum, nécessite de parcourir une grande distance dans \mathcal{M} alors que la molécule dissocie par l'état du continuum en question. Par exemple une transition de l'état 1 vers le 2, nécessite le passage de l'état 1 vers l'état du continuum 63 à la position $(0.55, 0.36)$ puis la translation du système à la position $(0.45, 0.35)$ pour passer sur l'état 2. Ces considérations illustrent le caractère très dissociatif de H_2^+ , caractère qui rend très difficile tout contrôle portant sur des probabilités non-négligeables.

Une étude plus poussée serait nécessaire pour comprendre le comportement des continua dans les modèles adiabatiques. En particulier en ce qui concerne l'influence de la discrétisation du continuum. Il est clair en effet sur la figure 14.17 que cette discrétisation induit une discrétisation de vortexes magnétiques sous la forme de séries de monopôles magnétiques alignés. On peut en particulier se

demander si des passages adiabatiques entre états “proches” du continuum vrai sont possibles, bien que les couplages non-adiabatiques entre les états du continuum discrétisé soient nuls.

Il semble de plus que le système H_2^+ est peut être encore trop simple pour illustrer des effets d’interférences entre espaces parallèles. Enfin une analyse plus fine du contrôle, en particulier du point de vue des effets spectroscopiques, nécessiterait d’étudier les relations entre le modèle des phases géométriques et la spectroscopie.

Conclusion et perspectives

La compréhension des systèmes photodynamiques quantiques est très importante pour la physique moderne, tant pour des problèmes de molécules en interaction avec le rayonnement dans les milieux dilués astronomiques ou atmosphériques, que pour des problèmes de nanotechnologie, où le contrôle par lasers de molécules, est une voie vers des systèmes informatiques quantiques. Il est nécessaire de développer des modèles et des méthodes adaptés à ces systèmes, pour lesquels une analyse ab-initio est possible, à des fins de prévision des trajectoires de contrôle. Nous avons proposé au cours de ce travail, un modèle et des méthodes qui s'inscrivent dans cette logique. Nous avons modélisé le rayonnement par la théorie de Floquet (t, θ) (chapitre 8), ce qui nous a permis de rejeter les oscillations rapides de la porteuse dans l'espace de configuration quantique, par l'utilisation de la phase temporelle θ . L'Hamiltonien ainsi transformé, ne dépend du temps qu'à travers des paramètres lents comparés au temps propre quantique. Ces paramètres (fréquence du laser, amplitude, polarisation,...), constituent la variété de contrôle \mathcal{M} , qui représente toutes les configurations possibles de l'environnement, et donc les paramètres sur lequel peut jouer l'expérimentateur. La vitesse des paramètres étant lente, on peut faire appel dans la modélisation du système dynamique, à un théorème adiabatique (chapitre 1). On dispose alors, d'un sous-espace spectral de dimension finie qui se déforme avec \mathcal{M} , et qui modélise parfaitement le système. Si l'usage d'un théorème adiabatique n'est pas tout à fait justifié, on peut à défaut utiliser un espace actif se déformant associé à la théorie des opérateurs d'onde temporels (chapitre 9), qui va se substituer à l'espace spectral de la théorie adiabatique. L'usage d'espaces actifs (adiabatiques ou non) de petite dimension, règle la difficulté de représentation numérique du système, pour laquelle on devrait a priori utiliser un espace vectoriel de très grande dimension représentant l'espace de Hilbert total. L'utilisation d'espaces actifs se déformant, met d'autre part en évidence un phénomène de phase de Berry (chapitre 2). La fonction d'onde apparaît alors comme un transport parallèle associé à un fibré principal. Ce fibré est le composite du fibré de la dynamique avec un fibré décrivant la phase géométrique (chapitre 6). Celui-ci est soit le fibré adiabatique $(P, \mathcal{M}, G, \pi_P)$, soit le fibré des espaces actifs $(V_M^{(U)}(\mathbb{C}^n), G_M(\mathbb{C}^n), G, \pi_U)$ (chapitre 3). La méthode des opérateurs d'onde apparaît également comme un transport parallèle lié à la phase de Berry non-adiabatique induite par l'espace actif se déformant (chapitre 11). La courbure du fibré adiabatique est similaire à un champ de Yang-Mills, associé à une interaction virtuelle dans \mathcal{M} , entre des monopôles magnétiques et une particule modélisant le système (chapitre 4). Nous avons vu d'ailleurs comment adapter ce modèle en une méthode numérique. Il existe une discrétisation naturelle du modèle géométrique (chapitre 7), où en utilisant un réseau uniforme dans la métrique quantique mesurant la distance entre espaces actifs (chapitre 3), on dispose d'une méthode de simulation numérique de la dynamique quantique, optimale par rapport au temps de calcul et à la mémoire. La théorie des opérateurs d'onde, nous apporte par ailleurs les méthodes permettant de calculer les vecteurs propres et de sélectionner l'espace actif (chapitre 9), de mesurer l'adiabaticité du système (chapitre 10), et de corriger les défauts à l'adiabaticité forte et utilisant des espaces actifs non-adiabatiques dans les zones de \mathcal{M} où apparaissent des états intrus (chapitre 11). Enfin, il est possible de forcer l'adiabaticité par la méthode CATM (chapitre 12).

Il reste cependant un certain nombre de questions concernant le modèle, qui n'ont pas été abordées

ou qui n'ont pu être tranchées, au cours de ce travail. La topologie du fibré adiabatique, liée aux monopôles magnétiques virtuels, est caractéristique des propriétés physiques du système dynamique quantique. Mais les classes caractéristiques que nous avons considérées, ne sont liées qu'aux aspects "abéliens" de la dynamique. Or les aspects non-abéliens sont d'une importance capitale (interférence entre trajectoires sur plusieurs espaces parallèles). La recherche d'une classe caractéristique matricielle et d'invariants topologiques matriciels associés aux monopôles non-abéliens (dont ils définiraient la charge), donnerait un équivalent de la structure construite sur les fibrés linéaires qui sans aucun doute serait très utile. Ceci pourrait permettre une méthode de classification topologique des chemins sur \mathcal{M} , en fonction de leurs effets, méthode qui serait plus quantitative que la simple analyse de la carte des champs adiabatiques. La structure géométrique de la théorie de Floquet (t, θ) semble plus subtile que la construction composite usuelle, du fait du passage de la phase temporelle dans l'espace de configuration quantique. Il semble que la variété du double temps, le cylindre engendré par (t, θ) , joue un rôle qui compte-tenu de sa topologie est plus important que l'espace temporel usuel \mathbb{R} , en particulier par rapport à la classe de Chern. Ces points demandent une étude plus approfondie que ce qui a été fait dans ce texte. Une analyse plus fine de la méthode CATM semble également nécessaire, du point de vue spectral en particulier. Enfin, dans ce travail, la discrétisation du continuum a été utilisée comme artifice pour appliquer la méthode adiabatique (qui n'est utilisable qu'avec du spectre discret). Mais la signification de l'approximation adiabatique sur les continua et les systèmes dissipatifs, reste quelque peu obscure. Une étude détaillée du lien entre approximation adiabatique, méthode des potentiels optiques, et traitement des continua est indispensable.

Les différents points abordés au cours de ce travail, ouvrent la voie vers des prolongements des modèles qui y ont été développés. On a évoqué le fait que la méthode CATM pourrait être utilisée dans une version multipas, pour générer un espace actif évolutif artificiel (à la manière de la succession des opérateurs d'onde qui génère un espace actif évolutif naturel). Le concept de potentiel optique comme frontière absorbante, pourrait lui aussi être généralisé en introduisant des potentiels optiques non-locaux (au sens Bohmien du terme, c'est à dire dépendant de deux points de l'espace), qui seraient mieux adaptés à la mécanique quantique (qui est profondément une théorie non-locale). Ces potentiels pourraient être dérivés à partir d'un potentiel local défini dans $L^2([0, r_1], dr)$, transformé en un potentiel non-local par l'action d'un opérateur d'onde associé à l'espace actif $L^2([0, r_2], dr)$ avec $r_2 < r_1$. Enfin la théorie géométrique des espaces actifs, avec la variété universelle et l'espace universel généralisé, semble induire des liens entre la théorie des matrices densités, les espaces actifs se déformant, les opérateurs d'onde et les systèmes dynamiques classiques. Ceci laisse la porte ouverte à des extensions du modèle vers la mécanique quantique statistique et les problèmes de chaos quantique. Enfin comme nous l'avons vu, le modèle géométrique des systèmes dynamiques quantiques contrôlés par un système classique (le rayonnement), est basé sur l'espace-temps du contrôle $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathbb{C})$, qui n'est autre que l'espace des observables classiques du système de contrôle. On pourrait imaginer un système dynamique quantique contrôlé par un système quantique, en remplaçant la C^* -algèbre commutative $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M} \times \mathbb{R}, \mathbb{C})$ par une C^* -algèbre non-commutative des observables quantiques du système de contrôle, induisant une variété de contrôle non-commutative. Avec un atome ou une molécule contrôlé par un champ électromagnétique quantifié en cavité, la variété en question pourrait être le plan non-commutatif engendré par les opérateurs créations et annihilation de photons, comme semble l'indiquer un récent article [46].

L'application principale de ces développements reste le contrôle. Les problèmes de contrôle dynamique se présentent comme suit : connaissant l'état initial du système dynamique et l'état final vers lequel on souhaite se diriger, quel est le chemin \mathcal{C} dans l'espace des paramètres de contrôle pour lequel le système va évoluer vers l'état cible ? Le stockage du réseau X discrétisant \mathcal{M} , sur lequel la part importante de la dynamique (la connexion) est précalculée, permet, après son calcul

initial, de pouvoir tester un très grand nombre de trajectoires différentes avec beaucoup de facilité et en un temps très court. De plus la théorie des champs de Yang-Mills adiabatiques, permet dans une certaine mesure, une prévision sur les trajectoires qui pourraient être efficaces pour résoudre le problème de contrôle. L'intensité du champ de Yang-Mills (coloré en fonction des états impliqués), permet de déterminer les zones de forts couplages entre les états de l'espace actif. Il permet de plus d'estimer l'intensité du couplage entre l'espace actif et l'extérieur (les états intrus) en fonction de \mathcal{M} , ce qui donne une idée de la vitesse maximale autorisée aux paramètres de contrôle. Enfin le système de cartes locales (visible par les lignes de changement de carte), qui est lié à la topologie du fibré, permet de prévoir des effets du type chirping direct.

L'adiabaticité, les champs adiabatiques, les phases géométriques et le contrôle, ont été étudiés sur différents systèmes modèles, des atomes à deux ou trois niveaux (chapitre 5), l'ion moléculaire H_2^+ et une molécule modèle (chapitres 13 et 14). Nous sommes toutefois dans une phase préliminaire de ces applications aux processus photoréactifs comme le prouve la simplicité de ces systèmes.

Des applications futures à d'autres systèmes sont également envisageables. En particulier, dans des problèmes de contrôle pour l'informatique quantique, où la géométrie des espaces actifs (et des sous-espaces actifs) pourrait être utile, un qubit n'étant rien d'autre qu'un sous-espace actif de dimension 2, une porte logique à une entrée étant une déformation de ce sous-espace actif, et une porte logique à deux entrées une interaction entre deux sous-espaces actifs par un champ adiabatique. Enfin des applications à des systèmes d'intérêts astrophysique apparaissent possibles. Le domaine interstellaire met en jeu de nombreux processus inélastiques et photoréactifs (photodissociation, photoionisation). La construction, dans le cadre de CATM, de propagateurs performants de paquets d'onde, pourrait nous permettre d'appréhender le calcul de sections inélastiques rotationnelles pour des collisions H_2O-H_2 à des températures intermédiaires où les approches quantiques Close Coupling ressentent de sérieuses difficultés dues à la dimension des bases moléculaires. Par ailleurs le milieu interstellaire met en scène des grains dont les surfaces sont des terrains favorables à des processus photoréactifs. Nos formulations pourraient rendre compte de l'effet de catalyse de ces grains en considérant une variété de contrôle attachée aux interactions entre la surface du grain et la molécule déposée qui photolyse. Enfin la spectroscopie est un outil privilégié de l'astrophysique dans ce même milieu interstellaire. Nous souhaitons aborder dans un proche avenir la spectroscopie des milieux dissipatifs en adaptant nos développements à cette thématique sur un modèle qui serait similaire à celui utilisé par Philippe Durand [121] dans l'étude des profils de Fano.

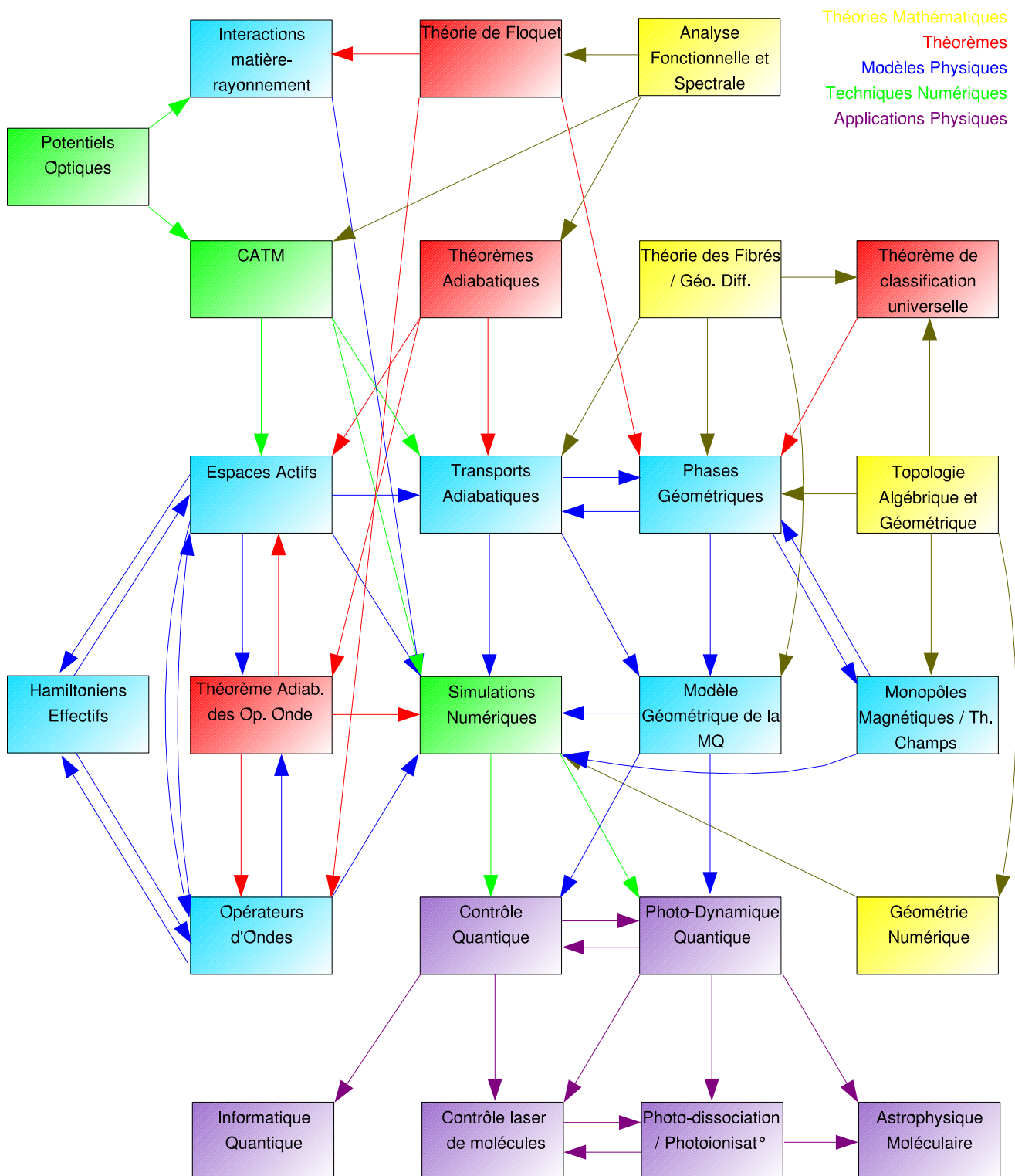


FIG. 14.18 – Schéma général de cette thèse.

Annexe A

Quelques mots sur les opérateurs d'ordre

Dans ce paragraphe E désigne soit l'espace des opérateurs d'un espace de Hilbert \mathcal{H} , soit une algèbre de Lie \mathfrak{g} . \mathcal{U} désigne alors, soit l'espace des opérateurs unitaires (ou contractifs) de \mathcal{H} , soit un groupe de Lie G associé à \mathfrak{g} .

Définition 10 (Opérateur d'ordre temporel). *On appelle opérateur d'ordre temporel \mathbb{T} (ou T -produit, ou encore produit chronologique), l'opérateur tel que pour tout couple d'applications $\mathbb{R} \ni t \mapsto A(t) \in E$, $\mathbb{R} \ni t \mapsto B(t) \in E$, on a*

$$\mathbb{T}(A(t_1)B(t_2)) = \begin{cases} A(t_1)B(t_2) & \text{si } t_1 \geq t_2 \\ B(t_2)A(t_1) & \text{si } t_1 < t_2 \end{cases}$$

Définition 11 (Opérateur d'ordre sur un chemin). *Soit M une variété différentiable et \mathcal{C} un chemin orienté sur M paramétré par une application $t \mapsto \gamma(t)$. Soient $A : \mathcal{C} \rightarrow E$ et $B : \mathcal{C} \rightarrow E$. Soient $x_1 = \gamma(t_1) \in \mathcal{C}$ et $x_2 = \gamma(t_2) \in \mathcal{C}$. L'opérateur d'ordre sur \mathcal{C} est défini par*

$$\mathbb{P}(A(x_1)B(x_2)) = \mathbb{T}(A(\gamma(t_1))B(\gamma(t_2)))$$

Théorème 15. *Soit $H : \mathbb{R} \rightarrow E$. Soit $U(t, s) \in \mathcal{U}$ solution de*

$${}_t \frac{dU(t, s)}{dt} = H(t)U(t, s)$$

$$U(s, s) = 1$$

$U(t, s)$ est donné par la série de Dyson

$$U(t, s) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_s^t \int_s^{t_1} \dots \int_s^{t_{n-1}} H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n) dt_n \dots dt_2 dt_1$$

Il est d'usage d'écrire

$$U(t, s) = \mathbb{T} e^{-i \int_s^t H(t') dt'} = \mathbb{T} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \left(\int_s^t H(t') dt' \right)^n \right)$$

Te est appelée T -exponentielle ou exponentielle ordonnée chronologiquement.

Preuve : cf. [123] ■

Remarque : dans le cas où $E = \mathfrak{g}$, le produit dans la série de Dyson est le produit de l'algèbre enveloppante $Env(\mathfrak{g})$.

Propriété 18.

$$U(t, s)U(s, r) = U(t, r)$$

$$\iff \mathbb{T}e^{-\int_s^t H(t')dt'} \mathbb{T}e^{-\int_r^s H(t')dt'} = \mathbb{T}e^{-\int_r^t H(t')dt'}$$

Preuve : cf. [123] ■

Définition 12 (Exponentielle ordonnée sur un chemin). *Soit \mathcal{C} un chemin orienté paramétré par γ dans une variété M . On note $\mathcal{C}_t = \{\gamma(t'), t' \in [0, t]\}$. Soit $A \in \Omega^1(M, E)$. L'exponentielle ordonnée sur le chemin \mathcal{C} est définie par*

$$\mathbb{P}e^{-\int_{\mathcal{C}_t} A} = \mathbb{T}e^{-\int_0^t A_\mu(\gamma(t')) \frac{d\gamma^\mu(t')}{dt'} dt'}$$

Théorème 16 (Théorème de la représentation intermédiaire). *Soient $A(t), B(t) \in E$.*

$$\mathbb{T}e^{\int_0^t (A(t') + B(t')) dt'} = \mathbb{T}e^{\int_0^t A(t') dt'} \mathbb{T}e^{\int_0^t \mathbb{T}e^{-\int_0^{t'} A(t'') dt''} B(t') \mathbb{T}e^{\int_0^{t'} A(t'') dt''} dt'}$$

Preuve :

On note $U(A) = \mathbb{T}e^{\int_0^t A}$. Par définition on a :

$$\frac{d}{dt} U(A + B) = (A + B)U(A + B)$$

$$\frac{d}{dt} U(A) = AU(A)$$

Or

$$\frac{d}{dt} U(A)^{-1} = -\dot{U}(A)U^{-2}(A) = -AU(A)^{-1}$$

donc

$$A = -\frac{dU(A)^{-1}}{dt} U(A) = -U(A) \frac{dU(A)^{-1}}{dt}$$

d'où

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} U(A + B) &= -U(A) \frac{dU(A)^{-1}}{dt} U(A + B) + BU(A + B) \\ U(A)^{-1} \frac{dU(A + B)}{dt} &= -\frac{dU(A)^{-1}}{dt} U(A + B) + U(A)^{-1} BU(A + B) \\ U(A)^{-1} \frac{dU(A + B)}{dt} + \frac{dU(A)^{-1}}{dt} U(A + B) &= U(A)^{-1} BU(A + B) \\ \frac{d}{dt} (U(A)^{-1} U(A + B)) &= U(A)^{-1} BU(A) U(A)^{-1} U(A + B) \end{aligned}$$

cette dernière équation étant la définition d'une T-exponentielle, on a

$$U(A)^{-1} U(A + B) = U(U(A)^{-1} BU(A))$$

■

Propriété 19. *Soit $g : t \mapsto g(t) \in G$ et $A(t) \in \mathfrak{g}$.*

$$\mathbb{T}e^{-\int_0^t (g^{-1}(t')A(t')g(t') + g^{-1}(t')\partial_{t'}g(t')) dt'} = g^{-1}(t) \mathbb{T}e^{-\int_0^t A(t') dt'} g(0)$$

Preuve :

On pose $U(A) = \mathbb{T}e^{-\int A}$ et $\tilde{A} = g^{-1}Ag + g^{-1}\partial_t g$.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}U(\tilde{A}) &= -(g^{-1}Ag + g^{-1}\frac{d}{dt}g)U(\tilde{A}) \\ g\frac{d}{dt}U(\tilde{A}) + \frac{dg}{dt}U(\tilde{A}) &= -AgU(\tilde{A}) \\ \frac{d}{dt}(gU(\tilde{A})) &= -AgU(\tilde{A})\end{aligned}$$

d'où

$$g(t)U(\tilde{A}) = U(A)f$$

où $f \in G$ est une constante.

$$\mathbb{T}e^{-\int_0^t \tilde{A}(t')dt'} = g(t)^{-1}\mathbb{T}e^{-\int_0^t A(t')dt'} f$$

Comme $\mathbb{T}e^{-\int_0^0 \tilde{A}(t')dt'} = 1$ on a $f = g(0)$. ■

Théorème 17 (Théorème de Stokes non-abélien). *Soit M une variété différentiable, $A \in \Omega^1(M, \mathfrak{g})$ et $F \in \Omega^2(M, \mathfrak{g})$ définis par l'équation de structure de Cartan :*

$$F = dA + A \wedge A$$

avec d différentielle extérieure de M . Soit \mathcal{C} un chemin orienté fermé dans M et soit \mathcal{S} une surface de M telle que $\partial\mathcal{S} = \mathcal{C}$. Soit (τ, σ) un système de coordonnées locales de \mathcal{S} , tel que $\{(\sigma(x), \tau(x)), x \in \mathcal{S}\} = [\sigma_0, \sigma_*] \times [\tau_0, \tau_*]$. On suppose de plus que $(\sigma_0, \tau_0) \in \mathcal{C}$. On pose :

$$A_{1\mathcal{S}} = A_0(\sigma, \tau)d\tau + A_1(\sigma, \tau)d\sigma$$

$$F_{1\mathcal{S}} = F_{01}(\sigma, \tau)d\tau \wedge d\sigma$$

Soit

$$T(\sigma, \tau) = \mathbb{P}e^{\int_{\sigma_0}^{\sigma} A_1(\sigma', \tau_0)d\sigma'} \mathbb{P}e^{\int_{\tau_0}^{\tau} A_0(\sigma_0, \tau')d\tau'}$$

Alors on a

$$\begin{aligned}\mathbb{P}e^{\oint_{\mathcal{C}} A} &= \mathbb{P}_{\tau}e^{\frac{1}{2}\int_{\mathcal{S}} T^{-1}(\sigma, \tau)F_{01}(\sigma, \tau)T(\sigma, \tau)d\sigma d\tau} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n} \int_{\sigma_0}^{\sigma_*} \int_{\sigma_0}^{\sigma_*} \cdots \int_{\sigma_0}^{\sigma_*} \int_{\tau_0}^{\tau_*} \int_{\tau_0}^{\tau_*} \cdots \int_{\tau_0}^{\tau_{n-1}} T^{-1}(\sigma_1, \tau_1)F_{01}(\sigma_1, \tau_1)T(\sigma_1, \tau_1) \cdots \\ &\quad \cdots T^{-1}(\sigma_n, \tau_n)F_{01}(\sigma_n, \tau_n)T(\sigma_n, \tau_n)d\tau_n \cdots d\tau_1 d\sigma_n \cdots d\sigma_1\end{aligned}$$

Preuve : cf. [82] ■

Propriété 20. *Dans les hypothèses du théorème précédent. Soit $\mathcal{S} \ni (\sigma, \tau) \mapsto g(\sigma, \tau) \in G$. On pose*

$$\tilde{A}(\sigma, \tau) = g(\sigma, \tau)^{-1}A(\sigma, \tau)g(\sigma, \tau) + g(\sigma, \tau)^{-1}d_{\mathcal{S}}g(\sigma, \tau)$$

Alors

$$\mathbb{P}e^{-\oint_{\mathcal{C}} \tilde{A}} = g(\sigma_0, \tau_0)^{-1}\mathbb{P}_{\tau}e^{-\frac{1}{2}\int_{\mathcal{S}} T^{-1}(\sigma, \tau)F_{01}(\sigma, \tau)T(\sigma, \tau)d\sigma d\tau} g(\sigma_0, \tau_0)$$

Preuve : cf. [82] ■

Théorème 18 (Intégrale de Riemann non-abélienne). *Soit $t \mapsto U(t, 0) = \mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t H(t') dt'}$ le semi-groupe d'évolution associé à une famille d'opérateurs auto-adjoints $t \mapsto H(t)$ d'un espace de Hilbert \mathcal{H} . On suppose $t \mapsto H(t)$ fortement Riemann-intégrable. On définit une partition de $[0, t]$ par $\mathcal{P}_N : t_0 = 0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{N-1} < t_N = t$, et $\delta(\mathcal{P}_N) = \max_{i=0, \dots, N-1} (t_{i+1} - t_i)$ le pas de la discrétisation. Alors, pour toute partition telle que $\lim_{N \rightarrow +\infty} \delta(\mathcal{P}_N) = 0$ on a :*

$$U(t, 0) = s\text{-}\lim_{N \rightarrow +\infty} \mathbb{T} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-i\hbar^{-1} H(t_i)(t_{i+1} - t_i)}$$

Preuve :

Dans tout ce qui suit on se place dans la topologie forte. Toutes les séries, intégrales et limites d'opérateurs sont supposées implicitement converger fortement.

• On considère la série de Dyson $U(t, 0)$:

$$\mathbb{T}e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t H(t') dt'} = \sum_{n=0}^{\infty} (-i\hbar^{-1})^n \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} H(t_1) \dots H(t_n) dt_n \dots dt_1$$

Comme $H(t)$ est Riemann-intégrable, on a

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \sum_{n=0}^{N-1} (t_{n+1} - t_n) H(t_n) = \int_0^t H(t') dt'$$

la limite étant indépendante de la partition \mathcal{P}_N choisie. Soit \mathcal{P}_N une partition de $[0, t]$ et $\mathcal{P}'_{N'}(n)$ une partition $[0, t_n]$ avec $t_n \in \mathcal{P}_N$. On a :

$$\begin{aligned} \int_0^t \int_0^{t_1} H(t_1) H(t_2) dt_2 dt_1 &= \lim_{\delta(\mathcal{P}_N) \rightarrow 0} \sum_{t_{n_1} \in \mathcal{P}_N} (t_{n_1+1} - t_{n_1}) H(t_{n_1}) \int_0^{t_{n_1}} H(t_2) dt_2 \\ &= \lim_{\delta(\mathcal{P}_N) \rightarrow 0} \sum_{t_{n_1} \in \mathcal{P}_N} \lim_{\delta(\mathcal{P}'_{N'}(n_1)) \rightarrow 0} \sum_{t_{n_2} \in \mathcal{P}'_{N'}(n_1)} (t_{n_1+1} - t_{n_1})(t_{n_2+1} - t_{n_2}) H(t_{n_1}) H(t_{n_2}) \end{aligned}$$

La formule précédente est vraie pour toute partition \mathcal{P}_N et $\mathcal{P}'_{N'}(n_1)$, et en particulier, elle est vraie pour $\mathcal{P}'_{N'}(n_1) \leq \mathcal{P}_N$ (i.e. $\forall t_p \in \mathcal{P}'_{N'}, t_p \in \mathcal{P}_N$ et $t_{N'} = t_{n_1}$). Avec ce choix particulier on a

$$\int_0^t \int_0^{t_1} H(t_1) H(t_2) dt_2 dt_1 = \lim_{\delta(\mathcal{P}_N) \rightarrow 0} \sum_{n_1=0}^{N-1} \sum_{n_2=0}^{n_1-1} (t_{n_1+1} - t_{n_1})(t_{n_2+1} - t_{n_2}) H(t_{n_1}) H(t_{n_2})$$

On introduit $\forall \mathcal{P}_N$ et $\forall n \in \mathbb{N}$

$$D_n^{N-1} = (-i\hbar^{-1})^n \sum_{p_1=0}^{N-1} \sum_{p_2=0}^{p_1-1} \dots \sum_{p_n=0}^{p_{n-1}-1} (t_{p_1+1} - t_{p_1}) \dots (t_{p_n+1} - t_{p_n}) H(t_{p_1}) \dots H(t_{p_n})$$

on a

$$(-i\hbar^{-1})^n \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n) dt_n \dots dt_1 = \lim_{N \rightarrow +\infty} D_n^{N-1}$$

• D'après le théorème de Stone ([126]) on a pour tout opérateur auto-adjoint A :

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{e^{itA} - 1}{t} = iA$$

donc

$$(1 - iAt) \underset{t \in \mathcal{V}(0)}{\sim} e^{-iAt}$$

et finalement :

$$\underbrace{(1 - i\hbar^{-1}H(t_{N-1})(t_N - t_{N-1})) \dots (1 - i\hbar^{-1}H(0)t_1)}_{D^{N-1}} \underset{N \in \mathcal{V}(+\infty)}{\sim} e^{-i\hbar^{-1}H(t_{N-1})(t_N - t_{N-1})} \dots e^{-i\hbar^{-1}H(0)t_1}$$

• en développant l'expression précédente on trouve

$$D^{N-1} = \sum_{n=0}^{N-1} (-i\hbar^{-1})^n \sum_{p_1=0}^{N-1} \sum_{p_2=p_1+1}^{N-1} \dots \sum_{p_n=p_{n-1}+1}^{N-1} H(t_{p_n}) \dots H(t_{p_1})(t_{p_{n+1}} - t_{p_n}) \dots (t_{p_1+1} - t_{p_1})$$

$$\begin{cases} 0 \leq p_1 \leq N-1 \\ p_1 < p_2 \leq N-1 \\ \vdots \\ p_{n-1} < p_n \leq N-1 \end{cases} \iff 0 \leq p_1 < p_2 < \dots < p_n \leq N-1$$

$$\iff \begin{cases} 0 \leq p_n \leq N-1 \\ 0 \leq p_{n-1} < p_n \\ \vdots \\ 0 \leq p_1 < p_2 \end{cases}$$

on voit que

$$D^{N-1} = \sum_{n=0}^{N-1} (-i\hbar^{-1})^n \sum_{p_n=0}^{N-1} \sum_{p_{n-1}=0}^{p_n-1} \dots \sum_{p_1=0}^{p_2-1} H(t_{p_n}) \dots H(t_{p_1})(t_{p_{n+1}} - t_{p_n}) \dots (t_{p_1+1} - t_{p_1})$$

par un changement des indices de sommation on a

$$\begin{aligned} D^{N-1} &= \sum_{n=0}^{N-1} (-i\hbar^{-1})^n \sum_{p_1=0}^{N-1} \sum_{p_2=0}^{p_1-1} \dots \sum_{p_n=0}^{p_{n-1}-1} (t_{p_1+1} - t_{p_1}) \dots (t_{p_{n+1}} - t_{p_n}) H(t_{p_1}) \dots H(t_{p_n}) \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} D_n^{N-1} \end{aligned}$$

• Soit :

$$T_n^{N-1} = \sum_{m=0}^n D_m^{N-1}$$

Si la série converge

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} T_n^{N-1} = \sum_{n=0}^{\infty} D_n^{N-1} = \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \sum_{p=0}^{N-1} (t_{p+1} - t_p) H(t_p)}$$

En effet on a

$$\mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \sum_{p=0}^{N-1} (t_{p+1} - t_p) H(t_p)} = \mathbb{T} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\hbar^{-1})^n}{n!} \left(\sum_{p=0}^{N-1} (t_{p+1} - t_p) H(t_p) \right)^n \right\}$$

On veut prouver que pour tout opérateur $A(t) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ on a :

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad \mathbb{T} \left\{ \left(\sum_{p=0}^{N-1} A(t_p) \right)^n \right\} = n! \sum_{p_1=0}^{N-1} \sum_{p_2=0}^{p_1-1} \dots \sum_{p_n=0}^{p_{n-1}-1} A(t_{p_1}) \dots A(t_{p_n})$$

On rappelle que

$$\mathbb{T} \{A(t_1)A(t_2)\} = \begin{cases} A(t_1)A(t_2) & \text{si } t_2 < t_1 \\ A(t_2)A(t_1) & \text{si } t_2 \geq t_1 \end{cases}$$

On suppose la formule vraie au rang n , alors au rang $n + 1$ on a :

$$\begin{aligned}
& \mathbb{T} \left\{ \left(\sum_{p_1=0}^{N-1} A(t_{p_1}) \right) \left(\sum_{p_2=0}^{N-1} A(t_{p_2}) \right) \dots \left(\sum_{p_{n+1}=0}^{N-1} A(t_{p_{n+1}}) \right) \right\} \\
&= \mathbb{T} \left\{ \left(\sum_{p_1=0}^{N-1} A(t_{p_1}) \right) \left(n! \sum_{p_2=0}^{N-1} \sum_{p_3=0}^{p_2-1} \dots \sum_{p_{n+1}=0}^{p_n-1} A(t_{p_2}) \dots A(t_{p_{n+1}}) \right) \right\} \\
&= n! \sum_{p_1=0}^{N-1} \sum_{p_2=0}^{p_1-1} \sum_{p_3=0}^{p_2-1} \dots \sum_{p_{n+1}=0}^{p_n-1} A(t_{p_1}) A(t_{p_2}) \dots A(t_{p_{n+1}}) \\
&\quad + n! \sum_{p_1=0}^{N-1} \sum_{p_2=p_1}^{N-1} \sum_{p_3=0}^{p_2-1} \dots \sum_{p_{n+1}=0}^{p_n-1} A(t_{p_2}) \mathbb{T} \{ A(t_{p_1}) \dots A(t_{p_{n+1}}) \} \\
&= n! \sum_{p_1=0}^{N-1} \sum_{p_2=0}^{p_1-1} \sum_{p_3=0}^{p_2-1} \dots \sum_{p_{n+1}=0}^{p_n-1} A(t_{p_1}) A(t_{p_2}) \dots A(t_{p_{n+1}}) \\
&\quad + n! \sum_{p_2=0}^{N-1} \sum_{p_1=0}^{p_2-1} \sum_{p_3=0}^{p_2-1} \dots \sum_{p_{n+1}=0}^{p_n-1} A(t_{p_2}) \mathbb{T} \{ A(t_{p_1}) A(t_{p_3}) \dots A(t_{p_{n+1}}) \} \\
&= n! \sum_{p_1=0}^{N-1} \sum_{p_2=0}^{p_1-1} \sum_{p_3=0}^{p_2-1} \dots \sum_{p_{n+1}=0}^{p_n-1} A(t_{p_1}) A(t_{p_2}) \dots A(t_{p_{n+1}}) \\
&\quad + n! \sum_{p_2=0}^{N-1} \sum_{p_1=0}^{p_2-1} \sum_{p_3=0}^{p_1-1} \sum_{p_4=0}^{p_3-1} \dots \sum_{p_{n+1}=0}^{p_n-1} A(t_{p_2}) A(t_{p_1}) A(t_{p_3}) \dots A(t_{p_{n+1}}) \\
&\quad + n! \sum_{p_2=0}^{N-1} \sum_{p_1=0}^{p_2-1} \sum_{p_3=p_1}^{p_2-1} \sum_{p_4=0}^{p_3-1} \dots \sum_{p_{n+1}=0}^{p_n-1} A(t_{p_2}) A(t_{p_3}) A(t_{p_1}) \mathbb{T} \{ A(t_{p_4}) \dots A(t_{p_{n+1}}) \}
\end{aligned}$$

∴ un changement d'indices de sommation donne

$$= (n+1)n! \sum_{p_1=0}^{N-1} \sum_{p_2=0}^{p_1-1} \dots \sum_{p_{n+1}=0}^{p_n} A(t_{p_1}) \dots A(t_{p_{n+1}})$$

Donc, si la formule est vraie au rang n , alors elle l'est au rang $n + 1$. Comme elle est vraie au rang 1, on en conclut par récurrence qu'elle l'est quelque soit n . En utilisant cette formule, on trouve

$$\sum_{n=0}^{\infty} D_n^{N-1} = \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \sum_{p=0}^{N-1} (t_{p+1} - t_p) H(t_p)}$$

si la série converge.

• Pour prouver la convergence de la série, on remarque que

$$\begin{aligned}
& \left\| (-i\hbar^{-1})^n \sum_{p_1=0}^{N-1} \sum_{p_2=0}^{p_1-1} \dots \sum_{p_n=0}^{p_{n-1}-1} H(t_{p_1}) \dots H(t_{p_n}) (t_{p_{n+1}} - t_{p_n}) \dots (t_{p_1+1} - t_{p_1}) \right\| \\
&= \left\| \frac{(-i\hbar^{-1})^n}{n!} \mathbb{T} \left\{ \left(\sum_{p=0}^{N-1} (t_{p+1} - t_p) H(t_p) \right)^n \right\} \right\| \\
&\leq \frac{1}{\hbar^n n!} \left(\sum_{q=0}^{N-1} (t_{q+1} - t_q) \sup_p \|H(t_p)\| \right)^n \\
&\leq \frac{1}{\hbar^n n!} \left(\sum_{q=0}^{N-1} (t_{q+1} - t_q) \right)^n \sup_p \|H(t_p)\|^n
\end{aligned}$$

De plus $\sum_{q=0}^{N-1} (t_{q+1} - t_q) = t_N - t_0 = t$. Donc on a :

$$\|D_n^{N-1}\| \leq \frac{(\hbar^{-1} t \sup_p \|H(t_p)\|)^n}{n!}$$

On a majoré la norme du terme général des séries par une suite indépendante de N et telle que la série associée converge pour $m \rightarrow \infty$ (la limite est $e^{\hbar^{-1}t \sup_p \|H(t_p)\|}$), donc la série $\sum_n D_n^{N-1}$ converge pour $n \rightarrow +\infty$, de plus la convergence est normale et donc uniforme par rapport à N .

• Comme la convergence est uniforme, on a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} T_n^{N-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} T_n^{N-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} T_{N-1}^{N-1}$$

Il est clair que

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} T_n^{N-1} &= \mathbb{T} e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t H(t') dt'} \\ \lim_{N \rightarrow \infty} T_{N-1}^{N-1} &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \mathbb{T} \prod_{p=0}^{N-1} e^{-i\hbar^{-1} H(t_p)(t_{p+1}-t_p)} \end{aligned}$$

■

Annexe B

Éléments de la théorie des fibrés principaux et de leurs connexions

Tout au long de ce texte, il est fait usage des notions de fibré principal et de connexion. Cette annexe a pour but de résumer l'ensemble des définitions et des propriétés de cette théorie, utiles pour une bonne compréhension du travail présenté dans cette thèse. Pour plus de précisions sur les notions présentées ici, le lecteur peut se reporter à [32, 100, 113, 127, 128, 36, 98, 43, 51, 52, 53], en particulier pour trouver les démonstrations qui ont été omises ici.

B.1 Notions sur les fibrés

Définition 13 (Espace fibré). *Un espace fibré est la donnée d'un triplet (P, M, π) où P et M sont deux variétés différentiables et π est une application surjective de P dans M . Dans le langage des fibrés, P se nomme espace total, M espace de base, π projection et $\forall x \in M$, $\pi^{-1}(x)$ fibre au dessus de x .*

Définition 14 (Fibré (localement) trivial). *Un fibré (P, M, π) est dit trivial si il existe une variété F tel que $P = M \times F$. Il est dit localement trivial si il existe F tel que pour tout ouvert U de M , $\pi^{-1}(U) \simeq U \times F$. Si (P, M, π) est localement trivial, $\forall x \in M$, $\pi^{-1}(x) \simeq F$, on dit que F est la fibre type du fibré.*

Définition 15 (Trivialisations locales et difféomorphismes de fibre). *Soit (P, M, F, π) un fibré localement trivial et $\mathcal{U} = \{U^i\}_i$ un atlas de M . $\forall x \in U^i$, on appelle difféomorphisme de fibre le difféomorphisme $\phi_x^i : \pi^{-1}(x) \rightarrow F$. On appelle trivialisations locales de P au dessus de U^i le difféomorphisme $\phi^i : \pi^{-1}(U^i) \rightarrow U^i \times F$. La donnée de tous les difféomorphismes de fibre ou de toutes les trivialisations locales pour l'atlas \mathcal{U} , définit complètement le fibré.*

Définition 16 (Fibré principal). *Le fibré localement trivial (P, M, G, π) est appelé fibré principal à droite, si G est un groupe de Lie qui agit transitivement à droite sur P par l'action sur chaque fibre :*

$$\forall g \in G, \forall u \in P, R(g)u = f_{\pi(u)}^{-1}(f_{\pi(u)}(u) \cdot g)$$

où f_x est le difféomorphisme entre la fibre au dessus de $x \in M$ et G , et \cdot est le produit de groupe de G . On dit que G est le groupe structural du fibré.

Définition 17 (Fonctions de transition). *Soit un fibré principal (P, M, G, π) de difféomorphismes de fibre ϕ_x^i pour un atlas $\mathcal{U} = \{U^i\}_i$ de M . On appelle fonctions de transition du fibré, les applications $g^{ij} : U^i \cap U^j \rightarrow G$ telles que $\forall x \in U^i \cap U^j$*

$$g^{ij}(x) = \phi_x^{i-1} \circ \phi_x^j(e)$$

e étant l'élément neutre de G . La donnée de toutes les fonctions de transition pour un atlas donné, définit complètement le fibré.

Propriété 21. Les fonctions de transition d'un fibré satisfont aux propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} g_{ii}(x) &= e \\ g_{ij}(x) &= g_{ji}^{-1}(x) \\ g_{ij}(x)g_{jk}(x)g_{ki}(x) &= e \end{aligned}$$

Définition 18 (Section locale). Une section locale d'un fibré (P, M, π) est une application :

$$\sigma : \begin{array}{ccc} U \subset M & \rightarrow & P \\ x & \mapsto & \sigma(x) \end{array}$$

On note $\Gamma(M, P)$ (ou ΓP) l'ensemble des sections de P

B.2 Connexion

Définition 19 (Connexion). Soit (P, M, G, π) un fibré principal. Soit $u \in P$, on note $T_u P$ l'espace tangent à P au point u . La fibre F de u , possède un espace tangent que l'on appelle espace vertical $V_u P \equiv T_u F$. Comme $F \simeq G$, $V_u P \simeq \mathfrak{g}$ l'algèbre de Lie de G . Le supplémentaire à $V_u P$ dans $T_u P$ n'est pas unique, mais si l'on en choisit un, que l'on nomme espace horizontal $H_u P$, $T_u P = H_u P \oplus V_u P$, alors l'espace horizontal de tout autre point v de la même fibre F est fixé par l'action de G sur les vecteurs tangents, induite par l'action de G sur F :

$$\forall v \in F, \exists g \in G | v = ug \Rightarrow H_v P = H_{ug} P = R_*(g)(H_u P)$$

Une connexion est le choix pour chacune des fibres, d'un espace horizontal. R_* est la représentation induite sur TP par la représentation R de G sur P :

$$R_*(g)X = dR(g)X$$

On pose l'espace tangent total, l'espace vertical total et l'espace horizontal total :

$$TP = \bigoplus_{p \in P} T_p M \quad VP = \bigoplus_{p \in P} V_p M \quad HP = \bigoplus_{p \in P} H_p M$$

la connexion est la donnée de HP .

Définition 20. $\phi \in \Omega^*(P, \mathfrak{g})$ est dite horizontale si :

$$\phi|_{VP} = 0$$

verticale si :

$$\phi|_{HP} = 0$$

Dans les définitions suivantes, la variété M peut désigner tout aussi bien l'espace de base que l'espace total d'un fibré principal.

Définition 21 (Dérivée de Lie). Soit M une variété différentiable. Soient $X, Y \in TM$, on définit le crochet de Lie de deux champs de vecteurs par :

$$[X, Y] = \left(X^i \frac{\partial Y^j}{\partial x^i} - Y^i \frac{\partial X^j}{\partial x^i} \right) \frac{\partial}{\partial x^j}$$

Soit $f \in \mathcal{C}^\infty(M)$, on définit la dérivée de Lie de f par rapport à $X \in TM$ par :

$$L_X f = X(f) = X^i \frac{\partial f}{\partial x^i} = \langle df, X \rangle = \left\langle \frac{\partial f}{\partial x^i} dx^i, X^j \frac{\partial}{\partial x^j} \right\rangle$$

$\langle \cdot, \cdot \rangle$ désigne le crochet de dualité. Soit $Y \in TM$, on définit la dérivée de Y par rapport à X par :

$$L_X Y = [X, Y]$$

Soit $\alpha \in \Omega^1 M$, on définit la dérivée de Lie de α par rapport à X par :

$$L_X \alpha(Y) = X(\alpha(Y)) - \alpha([X, Y])$$

$$\iff \langle L_X \alpha, Y \rangle = X(\langle \alpha, Y \rangle) - \langle \alpha, [X, Y] \rangle$$

L_X est linéaire, distributive par rapport au produit tensoriel et commute avec la contraction.

$$L_X(T \otimes S) = (L_X T) \otimes S + T \otimes (L_X S)$$

Soit $\eta \in \Omega^p M$:

$$(L_X \eta)(X_1, \dots, X_p) = X(\eta(X_1, \dots, X_p)) - \sum_{j=1}^p \eta(X_1, \dots, [X, X_j], \dots, X_p)$$

Définition 22 (Produit intérieur). Soit M une variété. Soit $\phi \in \Omega^r M$, $X \in TM$, on définit le produit intérieur par :

$$i_X : \Omega^r M \rightarrow \Omega^{r-1} M$$

$$i_X \phi(X_1, \dots, X_{r-1}) = \phi(X, X_1, \dots, X_{r-1})$$

$f \in \mathcal{C}^\infty(M)$:

$$i_X f = 0$$

i_X est une anti-dérivation de l'algèbre graduée $\Omega^* M$:

$$i_X(\phi \wedge \eta) = (i_X \phi) \wedge \eta + (-1)^r \phi \wedge (i_X \eta)$$

$$i_X^2 = 0$$

Propriété 22.

$$L_X = i_X d + di_X = \{i_X, d\}$$

$$L_X d = dL_X$$

$$[L_X, i_Y] = i_{[X, Y]}$$

$$L_{[X, Y]} = [L_X, L_Y]$$

$$\eta \in \Omega^1 M : \quad i_X \eta = \langle \eta, X \rangle = \eta(X)$$

$$f \in \mathcal{C}^\infty(M) : \quad i_X df = X(f) = L_X f$$

$$i_X i_Y = -i_Y i_X$$

$$f \in \mathcal{C}^\infty(M) : \quad L_{fX} = fL_X + df \wedge i_X$$

Définition 23 (Champs de vecteurs fondamentaux). Soit M une variété différentiable. G un groupe de Lie d'algèbre \mathfrak{g} , qui agit à droite sur M par R . Soit $X \in \mathfrak{g}$. Le champ de vecteurs fondamental associé à X est :

$$x \in M \mapsto \hat{X}(x) = \frac{d}{dt} (R(e^{-tX})x)_{|t=0}$$

$$\hat{\cdot} : \mathfrak{g} \rightarrow TM$$

$X \mapsto \hat{X}$ est un morphisme d'algèbre :

$$[\widehat{X}, \widehat{Y}] = [\hat{X}, \hat{Y}]$$

On note \mathfrak{g}_M l'ensemble des champs de vecteurs fondamentaux.

Définition 24 (Invariance par rapport à un champ de vecteur). Soit M une variété. $\phi \in \Omega^*M$ est dite invariante par rapport à $X \in TM$ si $L_X\phi = 0$. L'ensemble des invariants est une sous-algèbre de Ω^*M . De plus on note $\Omega_{L=0}^*M = \{\phi \in \Omega^*M | \forall X \in \mathfrak{g}_M, L_X\phi = 0\}$.

Propriété 23. Soit M une variété, G un groupe de Lie agissant à droite sur M par R , $X \in \mathfrak{g}_M$, R^* la représentation induite sur Ω^*M par R (duale de R_*) :

$$(R^*(g)\phi)(X_1, \dots, X_r) = \phi(R_*(g)X_1, \dots, R_*(g)X_r)$$

alors $\forall g \in G$ on a :

$$i_X R^*(g) = R^*(g)i_{Xg}$$

$$L_X R^*(g) = R^*(g)L_{Xg}$$

$$dR^*(g) = R^*(g)d$$

Définition 25 (Invariance sous l'action d'un groupe). Soit G groupe de Lie agissant à droite sur une variété M . On dit que $\phi \in \Omega^*M$ est invariant sous l'action de G si et seulement si :

$$R^*(g)\phi = \phi \quad \forall g \in G$$

On note Ω_I^*M l'ensemble des formes invariantes, qui est une sous-algèbre stable par i_X , L_X et d .

Définition 26 (Forme horizontale). On définit l'ensemble des formes horizontales d'une variété M par :

$$\Omega_{i=0}^*M = \{\phi \in \Omega^*M | \forall X \in \mathfrak{g}_M, i_X\phi = 0\}$$

Dans le cas d'un fibré principale à droite (P, M, G, π) muni d'une connexion HP, $\Omega_{i=0}^*P$ coïncide avec la définition donnée plus haut.

Propriété 24. Soit M une variété sur laquelle agit à droite un groupe de Lie G .

$$\Omega_I^*M \subset \Omega_{L=0}^*M$$

si G est connexe on a égalité.

Théorème 19. Soit M une variété sur laquelle agit à droite un groupe de Lie connexe et compact G . D'après la proposition précédente, on a $\Omega_I^*M \simeq \Omega_{L=0}^*M$. De plus :

$$H(\Omega_{L=0}^*M) \simeq H^*M$$

Définition 27 (Forme basique). Soit M une variété différentiable sur laquelle agit un groupe de Lie G . On appelle formes basiques de M l'ensemble :

$$\Omega_B^* M = \Omega_I^* M \cap \Omega_{i=0}^* M$$

Si G est connexe, d'après le théorème précédent, on a :

$$\Omega_B^* M \simeq \Omega_{i=0, L=0}^* M$$

Propriété 25. Soit (P, M, G, π) un fibré principal à droite. On considère l'application cotangente de la projection : $\pi^* : \Omega^* M \rightarrow \Omega^* P$. On a alors $\text{Im} \pi^* = \Omega_B^* P$, et comme π^* est injectif, on a :

$$\pi^* : \Omega^* M \xrightarrow{\simeq} \Omega_B^* P$$

Propriété 26. Soit (P, M, G, π) un fibré principal à droite, tel que M soit orientée (l'orientation de P découle de celle de M et de G). On pose $r = \dim G$, et ω l'application telle que $\forall w \in \Omega_B^r P$ $\omega(w) = (-1)^r w$. Soit $E \in \Omega_I^r G$ telle que $\int_G E = 1$ (cette forme est unique). On pose $\epsilon \in \mathfrak{g}^{\wedge r}$ (\mathfrak{g} étant l'algèbre de Lie de G), telle que $\langle E(e), \epsilon \rangle = 1$, e étant l'élément neutre de G et le crochet étant le crochet de dualité (on rappelle que par définition $\mathfrak{g} = T_e G$). On considère i le produit intérieur de P . Alors on a le diagramme commutatif suivant :

$$\begin{array}{ccc} \Omega_I^* P & \xrightarrow{\omega} & \Omega^* P \\ \omega \circ i_\epsilon \downarrow & & \downarrow \int_G \\ \Omega_B^* P & \xrightarrow[\pi^*]{\simeq} & \Omega^* M \end{array}$$

Définition 28 (Equivariance). Soit M une variété différentielle sur laquelle agit à droite un groupe de Lie G . Soit W un espace vectoriel et ρ une représentation de G sur W . ρ induit la représentation ρ_* sur $\Omega^*(M, W) : \forall \eta \in \Omega^*(M, W), X_i \in TM, g \in G :$

$$(\rho_*(g)\eta)(X_1, \dots, X_p) = \rho(g)(\eta(X_1, \dots, X_p))$$

On pose L l'action de G sur $\Omega^*(M, W)$ définie par :

$$L(g)\eta = (\rho(g) \cdot R^*(g))\eta = (R^*(g) \otimes \rho(g))\eta$$

la seconde égalité est modulo l'isomorphisme $\Omega^*(M, W) \simeq \Omega^* M \otimes W$. η est dite équivariante si et seulement si, pour tout $g \in G :$

$$L(g)\eta = \eta \iff R^*(g)\eta = \rho^{-1}(g)\eta$$

On note $\Omega_I^*(M, W)$ l'ensemble des formes équivariantes¹. $\Omega_I^*(M, W)$ est stable par d .

Propriété 27. Soit M une variété sur laquelle agit à droite G . ρ une représentation de G sur un espace vectoriel W , et ρ_{Lie} la représentation induite de \mathfrak{g} sur W . Alors :

- Si η est équivariante alors $\forall X \in T(M, \mathfrak{g}), L_X \eta = -\rho_{Lie}(X)\eta$.
- Si G est connexe et $\forall X \in T(M, \mathfrak{g}) L_X \eta = -\rho_{Lie}(X)\eta$ alors η est équivariante.

Exemple : $\rho = \text{Ad}$ sur un fibré principal (P, M, G, π) . $\eta \in \Omega_I^*(M, \mathfrak{g})$ une forme $\text{Ad}(G)$ -équivariante :

$$R^*(g)\eta = \text{Ad}(g^{-1})\eta = g^{-1}\eta g$$

Si G est connexe :

$$L_X \eta = -\text{ad}(X)\eta = [\eta, X]$$

¹il est clair que l'équivariance est la généralisation de l'invariance quand les formes différentielles sont à valeurs dans un espace vectoriel. Ou réciproquement, les formes invariantes sont équivariantes pour la représentation triviale sur l'espace vectoriel \mathbb{R}

Définition 29 (Forme basique à valeurs dans un espace vectoriel). Soit P une variété différentiable, G un groupe de Lie agissant à droite sur P , ρ une représentation de G sur un espace vectoriel W . Les formes basiques de P sont :

$$\Omega_B^*(P, W) = \Omega_I^*(P, W) \cap \Omega_{i=0}^*(P, W)$$

c'est à dire les formes équivariantes horizontales.

Définition 30 (1-forme de connexion). Soit un fibré principal (P, M, G, π) de connexion HP , on définit la 1-forme de connexion de P par :

$$\begin{aligned} TP &\rightarrow \mathfrak{g} \\ \omega : X_\alpha(u) \in V_u P &\mapsto X_\alpha \\ w \in H_u P &\mapsto 0 \end{aligned}$$

$$\omega \in \Omega^1(P, \mathfrak{g})$$

La donnée de ω étant équivalente à HP , on parle simplement de connexion pour ω . ω est par définition verticale.

Propriété 28. Soit (P, M, G, π) un fibré à droite de connexion ω , soit R l'action à droite de G sur P et R^* l'action induite de G sur $\Omega^*(P, \mathfrak{g})$. La 1-forme de connexion vérifie :

$$\begin{aligned} R^*(g)\omega &= \text{Ad}(g^{-1})\omega \\ \iff \omega(\underbrace{R_*(g)X(p)}_{\in V_{R(g)p=p \cdot g}}) &= g^{-1}\omega(\underbrace{X(p)}_{\in V_p P})g \end{aligned}$$

donc $\omega \in \Omega_I^1(P, \mathfrak{g})$, la 1-forme de connexion est $\text{Ad}(G)$ -équivariante. De plus $\forall X \in \mathfrak{g}_M$:

$$i_X \omega = X$$

$$L_X \omega = -\text{ad}(X)\omega = [\omega, X]$$

Définition 31 (Différentielle covariante). Soit (P, M, G, π) un fibré principal à droite muni d'une connexion HP , W un espace vectoriel sur lequel est représenté G . Soit d_P la différentielle extérieure de P . Soit h la projection horizontale. On définit la différentielle covariante par :

$$D : \Omega^r(P, W) \rightarrow \Omega^{r+1}(P, W)$$

$$(D\phi)(X_1, \dots, X_{r+1}) = d_P \phi(h(X_1), \dots, h(X_{r+1}))$$

$$D = d_P \circ h$$

Par définition $D\phi$ est horizontale.

Propriété 29 (Différentielle covariante sur les formes basiques). Soit (P, M, G, π) un fibré principal à droite de connexion $\omega \in \Omega_I^1(M, \mathfrak{g})$. Soit ρ une représentation de G sur un espace vectoriel W et D la différentielle covariante associée, et soit ρ_{Lie} la représentation induite de \mathfrak{g} sur W . On a alors $\forall \psi \in \Omega_B^*(P, W)$:

$$D\psi = d_P \psi + \rho_{Lie}(\omega) \wedge \psi$$

Si de plus $W = \mathfrak{g}$ et $\rho = \text{Ad}$ ($\iff \rho_{Lie} = \text{ad}$), $\forall \psi \in \Omega_B^*(P, \mathfrak{g})$:

$$D\psi = d_P \psi + [\omega, \psi]$$

Définition 32 (Courbure). Soit (P, M, G, π) un fibré principal à droite de connexion $\omega \in \Omega^1_I(P, \mathfrak{g})$, on considère la représentation adjointe de G sur \mathfrak{g} . La courbure est définie par :

$$\Omega = D\omega$$

$\Omega \in \Omega^2_B(P, \mathfrak{g})$ (Ω est $\text{Ad}(G)$ -équivariante). ω n'étant pas basique, l'expression de la dérivée covariante n'est pas donnée par la formule précédente, mais ici par l'équation de structure de Cartan :

$$\begin{aligned} \Omega &= d_P\omega + \omega \wedge \omega = d_P\omega + \frac{1}{2}[\omega, \omega] \\ \iff \Omega(X, Y) &= d_P\omega(X, Y) + [\omega(X), \omega(Y)] \end{aligned}$$

De plus on a l'identité de Bianchi :

$$D\Omega = d_P\Omega + [\omega, \Omega] = 0$$

Propriété 30. Soit (P, M, G, π) un fibré principal à droite de courbure $\Omega \in \Omega^2_B(P, \mathfrak{g})$, ρ une représentation de \mathfrak{g} sur un espace vectoriel W et D la différentielle covariante pour cette représentation. Alors :

$$D^2 = \rho_{\text{Lie}}(\Omega) \wedge \cdot$$

Si de plus $W = \mathfrak{g}$ et $\rho = \text{Ad}$:

$$D^2 = [\Omega, \cdot]$$

Définition 33 (Potentiel de jauge). Soit (P, M, G, π) un fibré principal de connexion ω . Soit σ une section locale de P et σ_* son application tangente (son push forward) :

$$\begin{aligned} TM &\rightarrow TP \\ \sigma_* : \phi^\mu(x) \frac{\partial}{\partial x^\mu} \in T_x M &\mapsto \phi^\mu(x) \frac{\partial \sigma^\alpha(x)}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \in T_{\sigma(x)} P \end{aligned}$$

$\{x^\mu\}$ et $\{y^\alpha\}$ étant respectivement des coordonnées locales de M et de P . On définit le potentiel de jauge associé à la section σ comme :

$${}^{(\sigma)}A = \omega \circ \sigma_*$$

$A \in \Omega^1(M, \mathfrak{g})$. Si on note $\{X_\alpha\}$ les générateurs de \mathfrak{g} on a :

$${}^{(\sigma)}A = {}^{(\sigma)}A^\alpha_\mu dx^\mu X_\alpha$$

A se transforme comme suit sous un changement de section $\tau(x) = \sigma(x)g(x)$:

$${}^{(\tau)}A = g^{-1}{}^{(\sigma)}A g + g^{-1}dg = \text{Ad}(g^{-1}){}^{(\sigma)}A + d \ln g$$

Définition 34 (Courbure locale). Soit (P, M, G, π) un fibré principal de connexion ω , σ une section locale de P , A le potentiel de jauge par rapport à σ , et Ω la courbure du fibré. De manière analogue à A , on définit la courbure locale par :

$$F = \Omega \circ \sigma_*$$

Sous le changement section $\tau(x) = \sigma(x)g(x)$:

$${}^{(\tau)}F = g^{-1}{}^{(\sigma)}F g$$

l'équation de structure de Cartan devient :

$$F = dA + A \wedge A = dA + \frac{1}{2}[A, A]$$

où d est la différentielle extérieure de M ; l'identité de Bianchi devient :

$$dF + [A, F] = 0$$

On peut définir de plus la différentielle covariante locale $D \circ \sigma_*$, qui sur les formes basiques est $D \circ \sigma_* = d_P \circ \sigma_* + \rho_{Lie}(\omega) \wedge \sigma_* = d + \rho_{Lie}(A) \wedge \cdot$, avec $D^2 = \rho_{Lie}(F) \wedge \cdot$.

Propriété 31 (1-forme de connexion de Ehresmann). *Soit (P, M, G, π) un fibré principal, σ une section locale du fibré et $(\sigma)A$ un potentiel de jauge associé à σ . Soit ϕ_σ la trivialisatation locale de $\sigma : \forall u \in P, \phi_\sigma^{-1}(u) = (x, g), u = \sigma(x)g$. On a une 1-forme de connexion ω de potentiel de jauge $(\sigma)A$ par :*

$$\omega = g^{-1}\pi^*(\sigma)Ag + g^{-1}d_Pg$$

Définition 35 (Relèvement horizontal). *Soit (P, M, G, π) un fibré principal muni d'une connexion. Soit \mathcal{C} une courbe de M . Un relèvement horizontal de \mathcal{C} est une courbe \mathcal{C}' de P telle que $\pi(\mathcal{C}') = \mathcal{C}$ et tel que $\forall u \in \mathcal{C}'$, le vecteur tangent à \mathcal{C}' en u appartienne à H_uP . La donnée d'un point initial $u_0 \in P$ par lequel doit passer \mathcal{C}' suffit à fixer un unique relèvement horizontal.*

Définition 36 (Transport parallèle). *Soit (P, M, G, π) un fibré principal muni d'une connexion. Le transport parallèle d'une fibre $F_x = \pi^{-1}(x)$ de $x \in M$ vers $x' \in M$ le long d'un chemin \mathcal{C} est obtenu de la façon suivante : $\forall u \in F_x$ on construit le relèvement horizontal \mathcal{C}'_u de \mathcal{C} passant par u ; le point d'arrivée du transport u' est alors le point de la fibre $\pi^{-1}(x')$ par lequel passe \mathcal{C}'_u .*

Propriété 32. *Soit (P, M, G, π) un fibré principal à droite, muni d'une connexion définie par le potentiel de jauge A , \mathcal{C} une courbe de M paramétrée par une application $[0, 1] \ni t \mapsto \gamma(t) \in \mathcal{C}$. On note \mathcal{C}_t la courbe décrite par $[0, t] \ni t' \mapsto \gamma(t')$. Soit σ une section locale de P définie sur un ouvert englobant \mathcal{C} . Alors le relèvement horizontal de \mathcal{C} passant par $\sigma(\gamma(0))$ est défini par*

$$\forall t \in [0, 1], \quad \gamma'(t) = \sigma(\gamma(t))g(\sigma(t)) \in P$$

où

$$g(\sigma(t)) = \mathbb{T}e^{-\int_0^t (\sigma)A_\mu(\gamma(t')) \frac{d\gamma^\mu(t')}{dt'} dt'} = \mathbb{P}e^{-\int_{\mathcal{C}_t} (\sigma)A} \in G$$

B.3 Notion de fibré associé

Soit (P, M, G, π) un fibré principal à droite et F une variété sur laquelle agit à droite G . Le fibré associé à P par F a pour espace total

$$E = P \times_G F = P \times F / \sim$$

avec la relation d'équivalence :

$$\forall g \in G \quad (p, f) \sim (pg, g^{-1}f)$$

On note $p_E : P \times F \rightarrow E$ la projection associée à \sim . On définit la projection du fibré associé par :

$$\pi_E(p_E(p, f)) = \pi(p)$$

et on a le diagramme commutatif suivant

$$\begin{array}{ccc} P \times F & \xrightarrow{\text{Pr}_1} & P \\ p_E \downarrow & & \downarrow \pi \\ E & \xrightarrow{\pi_E} & M \end{array}$$

Soit l'application

$$\chi_p : \begin{array}{ccc} F & \rightarrow & \pi_E^{-1}(\pi(p)) \subset E \\ f & \mapsto & p_E(p, f) \end{array}$$

χ_p est le difféomorphisme de fibre de E .

$$\forall g \in G \quad \chi_{pg}(f) = \chi_p(g^{-1}f)$$

Soit $\phi^i : U^i \times G \rightarrow P$ une trivialisat on locale de P sur U^i ouvert de M . Et soit $s^i(x) = \phi^i(x, e)$ sa section locale trivialisante (e  l ment neutre de G). Alors la trivialisat on locale de E au dessus de U^i est donn e par :

$$\chi_{s^i} : \begin{array}{ccc} U^i \times F & \rightarrow & \pi_E^{-1}(U^i) \\ (x, f) & \mapsto & p_E(s^i(x), f) = \chi_{s^i(x)}(f) \end{array}$$

Les fonctions de transition de E sont donn es par celles de P par $\rho(g_{ij}(x))$ o  ρ est la repr sentation de G sur F . Si de plus F a une structure d'espace vectoriel, ρ induit une repr sentation ρ_{Lie} de \mathfrak{g} sur F , qui permet   partir d'un potentiel de jauge $A = A_\mu^\alpha X_\alpha dx^\mu$ du fibr  principal (P, M, G, π) , de d finir $\rho_{Lie}(A) = A_\mu^\alpha \rho_{Lie}(X_\alpha) dx^\mu$ potentiel de jauge du fibr  vectoriel (E, M, F, π_E) .

B.4 Th or me de classification universelle

Pour plus de d tails se reporter   [21, 128, 138].

D finition 37 (complexe cellulaire). *Une q -cellule σ^q est un ensemble hom omorphe   D^q (la q -boule ferm e) , $\partial\sigma^q \simeq S^{q-1}$. Un n -complexe cellulaire K est un espace topologique muni d'une collection d'espaces ferm s $\{\sigma_i^q\}_{i=1, \dots, \alpha_q}^{q=0, \dots, n}$ tels que :*

- σ_i^q est une q -cellule.
- soit $K^p = \bigcup_{i, q \leq p} \sigma_i^q$, alors $K = K^n$.
- $\sigma_i^q \cap K^{q-1} = \partial\sigma_i^q$
- $\forall i \neq j, \sigma_i^q \cap \sigma_j^q = \emptyset$

K^p est appel  p -skeleton de K .

D finition 38 (fibr  universel). *Soit $\mathcal{B} = (B, X, G, \pi_B)$ un fibr  principal. \mathcal{B} est n -universel si pour tout n -complexe cellulaire K , pour tout sous-complexe cellulaire $L \subset K$, pour tout fibr  $\mathcal{B}' = (B', K, G, \pi_{B'})$ et pour toute application $h : (\pi_{B'}^{-1}(L), L, G, \pi_{B'}) \rightarrow (B, X, G, \pi_B)$, il existe une extension de h vers $(B', K, G, \pi_{B'}) \rightarrow (B, X, G, \pi_B)$.*

Th or me 20 (classification universelle). *Soit $\mathcal{B} = (B, X, G, \pi_B)$ un $(n + 1)$ -fibr  universel. Soit K un n -complexe cellulaire et soit $f : K \rightarrow X$ une application continue. On a alors le diagramme commutatif suivant :*

$$\begin{array}{ccc} f^*\mathcal{B} & \begin{array}{c} \xleftarrow{f^*} \\ \xrightarrow{f_*} \end{array} & \mathcal{B} \\ \downarrow & & \downarrow \pi_B \\ K & \xrightarrow{f} & X \end{array}$$

$f^*\mathcal{B} = (f^*B, K, G, \pi_{f^*B})$ est le fibr  induit par f . On a alors :

$$\pi(K, X) \simeq H^1(K, \mathcal{O}_G(K))$$

Les classes d' quivalence des fibr s sur K de groupe G sont donn es par les classes d'homotopie des applications de K dans X . L'isomorphisme de groupe est donn  par l'application :

$$ind_{K, f^*B} : (f : K \rightarrow X) \mapsto (f^*B, K, G, \pi_{f^*B})$$

Preuve : cf. [128, 138] ■

On rappelle que le fibré induit est défini par les fonctions de transition de K , $g_{ij}(f(x))$, où g_{ij} sont les fonctions de transition de X . f^*B est le sous-espace de $K \times B$ tel que $\forall(x, p) \in f^*B$, $f(x) = \pi_B(p)$. Soient les projections canoniques :

$$\text{Pr}_1 : K \times B \rightarrow K \quad \text{Pr}_2 : K \times B \rightarrow B$$

$f_* = \text{Pr}_{2|f^*B}$ est un homéomorphisme de fibre entre $\pi_{f^*B}^{-1}(x)$ et $\pi_B^{-1}(f(x))$. Si f est un homéomorphisme alors f_* est un isomorphisme de fibré.

D'autre part on a le diagramme commutatif suivant :

$$\begin{array}{ccc} \pi(B, C) & \xrightarrow{\text{ind}_{B, f^*\xi}} & H^1(B, \mathcal{O}_G(B)) \\ (id_B, f) \searrow & & \nearrow \text{ind}_{B, \xi} \\ & \pi(B, X) & \end{array}$$

ξ est universel si $\text{ind}_{B, \xi}$ est bijective pour tout espace cellulaire B . Ou en d'autres termes :

- $\forall(\zeta, B', G, \pi_{\zeta}), \exists f : B \rightarrow B'$ homéomorphique tel que $f^*\xi \simeq \zeta$.
- Soient $f_1 : B_1 \rightarrow B$ et $f_2 : B_2 \rightarrow B$, si $f_1^*\xi \simeq f_2^*\xi$ alors f_1 et f_2 sont homotopes.

Théorème 21 (Théorème de Narasimhan-Ramanan : connexion universelle). *Soit $(P, M, U(n), \pi)$ un fibré principal muni d'un potentiel de jauge A . Il existe une matrice V de $\mathcal{M}_{p \times n}(\mathbb{C})$ avec $p \geq (m+1)(2m+1)n^3$ où $m = \dim M$, telle que*

$$A = iV^\dagger dV$$

*La connexion dans le fibré universel $(V_n(\mathbb{C}^\infty), G_n(\mathbb{C}^\infty), U(n), \pi_U)$ définie par le potentiel de jauge $Z^\dagger dZ$, $\forall Z \in V_n(\mathbb{C}^\infty)$, est appelée connexion de Stiefel. On notera que $A = f^*Z^\dagger dZ$ où $f : M \rightarrow G_n(\mathbb{C}^\infty)$ est l'application universelle du fibré P .*

Preuve : cf. [114, 115, 99] ■

Annexe C

Cohomologies

On présente ici quelques éléments de la théorie de la cohomologie, utiles pour la compréhension du texte. Pour plus de détails, le lecteur peut se reporter à [24, 54, 49, 3, 68, 50, 26, 37, 51, 52, 53, 33].

C.1 Cohomologies de de Rham et de Čech

Définition 39 (Complexe). *Soit A un anneau à unité. Un complexe de A -modules est une suite :*

$$K : 0 \rightarrow K^0 \xrightarrow{d_0} K^1 \xrightarrow{d_1} K^2 \xrightarrow{d_2} \dots$$

où K^n sont des A -modules, et d_n sont des A -morphisms tels que :

$$d_{n+1}d_n = 0 \iff \text{Im}d_n \subset \ker d_{n+1}$$

Définition 40. *Une application $f : A \rightarrow B$ entre 2 éléments d'un complexe est une application de chaîne si et seulement si $fd_A = d_Bf$.*

Définition 41. *Une suite (ou un complexe) :*

$$\dots \rightarrow V_{i-1} \xrightarrow{f_{i-1}} V_i \xrightarrow{f_i} V_{i+1} \rightarrow \dots$$

est dit exacte si pour tout i , $\text{Im}f_{i-1} = \ker f_i$.

Définition 42 (Groupe de cohomologie d'un complexe). *Soit K un complexe. On note K^k par $C^k(K)$ l'ensemble des cochaînes d'ordre k , $\ker d_k = \mathcal{Z}^k(K)$ l'ensemble des cocycles d'ordre k et $\text{Im}d_{k-1} = \mathcal{B}^k(K)$ l'ensemble des cobords d'ordre k . Le groupe $H^k(K) = \mathcal{Z}^k(K)/\mathcal{B}^k(K)$ est appelé groupe de cohomologie d'ordre k du complexe K .*

On note $H^*(K) = \bigoplus_{k=1}^{\infty} H^k(K)$ l'anneau de cohomologie de K .

Soit M une variété différentiable. Soit $T^*M = \langle dx^1, \dots, dx^{\dim M} \rangle$ l'espace vectoriel modèle des espaces cotangents de M et soit $\Omega^* = \bigoplus_{n=0}^{\dim M} (T^*M)^{\wedge n}$ l'algèbre extérieure de T^*M . On rappelle que l'algèbre des formes différentielles de M est définie par $\Omega^*M = \mathcal{C}^\infty(M) \otimes \Omega^*$ ¹.

¹Remarque : Ω^* est un foncteur contravariant des catégories des variétés différentielles et de leurs C^∞ -morphisms vers les algèbres graduées et leurs homomorphismes.

$$\Omega^* : (M, N, f : M \rightarrow N) \mapsto (\Omega^*M, \Omega^*N, \Omega^*(f) \equiv f^* : \Omega^*N \rightarrow \Omega^*M)$$

$$M \equiv \{x^\alpha\}, N \equiv \{y^\alpha\}, y^\alpha = f^\alpha(x^\mu), \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^\mu} = \frac{\partial f^\alpha}{\partial x^\mu}, \frac{\partial}{\partial x^\mu} \xrightarrow{f_*} \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \text{ et } dy^\alpha \xrightarrow{f^*} \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^\mu} dx^\mu$$

La différentielle extérieure est définie par :

$$\begin{aligned}
d_0(\omega) &= \frac{\partial \omega}{\partial R^\mu} dR^\mu \\
d_1(\omega_\mu dR^\mu) &= \partial_\nu \omega_\mu dR^\nu \wedge dR^\mu = \frac{1}{2}(\partial_\mu \omega_\nu - \partial_\nu \omega_\mu) dR^\mu \wedge dR^\nu \\
&\vdots \\
d_k(\omega_{\mu_1, \dots, \mu_k} dR^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dR^{\mu_k}) &= \partial_{\mu_{k+1}} \omega_{\mu_1, \dots, \mu_k} dR^{\mu_{k+1}} \wedge dR^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dR^{\mu_k} \\
&= \frac{1}{(k+1)!} \sum_{\pi \in S_k} (-1)^\pi \partial_{\mu_{\pi(1)}} \omega_{\mu_{\pi(2)}, \dots, \mu_{\pi(k+1)}} dR^{\mu_1} \wedge \dots \wedge dR^{\mu_{k+1}}
\end{aligned}$$

ou encore pour toute k -forme ω et pour tout $(k+1)$ -uplet de champs de vecteurs, la différentielle est définie par :

$$d\omega(v_1, \dots, v_{k+1}) = \sum_{i=1}^{k+1} (-1)^{i+1} v_i [\omega(v_1, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_{k+1})] + \sum_{i < j} (-1)^{i+j} \omega([v_i, v_j], v_1, \dots, \hat{v}_i, \dots, \hat{v}_j, \dots, v_{k+1})$$

Le symbole \hat{v} signifie “privé de v ”.

On appelle le complexe :

$$\dots \xrightarrow{d} \Omega^{r-1}(M) \xrightarrow{d} \Omega^k(M) \xrightarrow{d} \Omega^{k+1}(M) \xrightarrow{d} \dots$$

complexe de de Rham. On définit les cobords d'ordre k comme :

$$\mathcal{B}^k M = \{d\omega \mid \omega \in \Omega^{k-1} M\} \subset \Omega^k M$$

On définit également les cocycles :

$$\mathcal{Z}^k M = \{\varphi \in \Omega^k M \mid d\varphi = 0\}$$

Comme $d^2 = 0$, on a $\mathcal{B}^k M \subset \mathcal{Z}^k M$. On définit alors la cohomologie de de Rham d'ordre k comme étant le groupe :

$$H^k M = \mathcal{Z}^k M / \mathcal{B}^k M$$

Les éléments de $H^k M$ portent le nom de classes de cohomologie de de Rham, $H^k M = \{\omega' = \omega + d\varphi, \omega \in \mathcal{Z}^k M, \varphi \in \Omega^{k-1} M\}$. L'anneau de cohomologie de de Rham est alors $H^* M = \bigoplus_{k=1}^{\dim M} H^k M$ (la loi multiplicative d'anneau est le produit extérieur).

Théorème 22 (Théorème de Leray-Hirsh). *Soit (E, M, F, π) un fibré vectoriel. Alors $H^* E$ est un module libre de $H^* M$, $H^* E \simeq H^* M \otimes H^* F$.*

Preuve : cf. [54] ■

Définition 43. *Soit M une variété différentiable. Une gerbe \mathcal{F} sur U ouvert de M est un groupe abélien $\mathcal{F}(U)$. Ses éléments sont appelés sections de \mathcal{F} sur U . Pour $U \subset V$ on définit de plus une application appelée restriction $r_{V,U} : \mathcal{F}(V) \rightarrow \mathcal{F}(U)$ telle que :*

- $\forall V, r_{V,V} = 1$.
- si $U \subset V \subset W$ alors $r_{W,U} = r_{V,U} \circ r_{W,V}$, en vertu de cette relation, $\forall \sigma \in \mathcal{F}(V)$, on peut écrire $\sigma|_U$ à la place de $r_{V,U}(\sigma)$.
- si U, V sont deux ouverts de M , $\sigma \in \mathcal{F}(U)$ et $\tau \in \mathcal{F}(V)$ tels que $\sigma|_{U \cap V} = \tau|_{U \cap V}$ alors $\exists \rho \in \mathcal{F}(U \cup V)$, $\rho|_U = \sigma$ et $\rho|_V = \tau$.
- si $\sigma \in \mathcal{F}(U \cup V)$ et $\sigma|_U = \sigma|_V = 0$ alors $\sigma = 0$.

Soit M une variété, \mathcal{F} une gerbe définie sur M et $\mathcal{A} = \{U_\alpha\}_\alpha$ un recouvrement localement fini d'ouverts. Les cochaînes d'ordre p sont définies par :

$$\begin{aligned} C^0(\mathcal{A}, \mathcal{F}) &= \prod_{\alpha} \mathcal{F}(U_\alpha) \\ C^1(\mathcal{A}, \mathcal{F}) &= \prod_{\alpha \neq \beta} \mathcal{F}(U_\alpha \cap U_\beta) \\ &\vdots \\ C^p(\mathcal{A}, \mathcal{F}) &= \prod_{\alpha_0 \neq \alpha_1 \neq \dots \neq \alpha_p} \mathcal{F}(U_{\alpha_0} \cap U_{\alpha_1} \cap \dots \cap U_{\alpha_p}) \end{aligned}$$

L'opérateur de cobord δ est défini par :

$$\begin{aligned} \delta : C^p(\mathcal{A}, \mathcal{F}) &\rightarrow C^{p+1}(\mathcal{A}, \mathcal{F}) \\ (\delta\sigma)_{i_0, \dots, i_{p+1}} &= \sum_{j=0}^{p+1} (-1)^j \sigma_{i_0, \dots, \hat{i}_j, \dots, i_{p+1}} \upharpoonright_{U_{i_0} \cap \dots \cap U_{i_{p+1}}} \end{aligned}$$

On a $\delta^2 = 0$. Les cocycles et les cobords sont définis par $\mathcal{Z}^p(\mathcal{A}, \mathcal{F}) = \ker \delta_p$ et $\mathcal{B}^p(\mathcal{A}, \mathcal{F}) = \text{Im} \delta_{p-1}$. $H^p(\mathcal{A}, \mathcal{F}) = \mathcal{Z}^p(\mathcal{A}, \mathcal{F}) / \mathcal{B}^p(\mathcal{A}, \mathcal{F})$ est appelé groupe de cohomologie des gerbes d'ordre p . Si de plus \mathcal{A} est un atlas de M et si les cochaînes sont totalement antisymétriques, on parle de cohomologie de Čech de \mathcal{F} sur \mathcal{A} .

$$\forall \sigma \in C^p(\mathcal{A}, \mathcal{F}) \quad \sigma_{i_0, \dots, i_k, \dots, i_l, \dots, i_p} = -\sigma_{i_0, \dots, i_l, \dots, i_k, \dots, i_p}$$

On note alors le groupe de cohomologie de Čech par $\check{H}^p(\mathcal{A}, \mathcal{F})$. Par la suite, on s'intéressera aux groupes de cohomologie de Čech $\check{H}^p(\mathcal{A}, \mathbb{Z})$ (où $\forall U \in \mathcal{A}, \mathcal{F}(U) = \mathbb{Z}$), $\check{H}^p(\mathcal{A}, \mathbb{R})$ et $\check{H}^p(\mathcal{A}, \Omega^* M)$.

Théorème 23. *Soit une suite exacte :*

$$0 \rightarrow \mathfrak{E} \xrightarrow{\alpha} \mathfrak{F} \xrightarrow{\beta} \mathfrak{G} \rightarrow 0$$

de gerbes sur une variété M munie d'un atlas \mathcal{A} , telles que α et β soient des applications de chaîne, alors :

$$H^p(\mathcal{A}, \mathfrak{G}) \xrightarrow{\delta} H^{p+1}(\mathcal{A}, \mathfrak{E})$$

ce qui induit la suite exacte :

$$0 \rightarrow H^0(\mathcal{A}, \mathfrak{E}) \xrightarrow{\alpha} H^0(\mathcal{A}, \mathfrak{F}) \xrightarrow{\beta} H^0(\mathcal{A}, \mathfrak{G}) \xrightarrow{\delta} H^1(\mathcal{A}, \mathfrak{E}) \xrightarrow{\alpha} \dots$$

Démonstration :

On définit $\alpha : H^p(\mathcal{A}, \mathfrak{E}) \rightarrow H^p(\mathcal{A}, \mathfrak{F})$ par : pour tout $[\omega] \in H^p(\mathcal{A}, \mathfrak{E})$ de représentant $\omega \in \mathcal{Z}^p(\mathcal{A}, \mathfrak{E})$ ($\alpha(\omega) \in \mathcal{Z}^p(\mathcal{A}, \mathfrak{F})$), on pose $\alpha([\omega]) = [\alpha(\omega)]$. De même avec β .

Soit $[\sigma] \in H^p(\mathcal{A}, \mathfrak{G})$, et $\sigma \in [\sigma]$ un de ses représentants ($\delta\sigma = 0$). Comme la suite est exacte $\text{Im} \beta = \ker 0 = \mathfrak{G}$. Donc :

$$\exists \tau \in C^p(\mathcal{A}, \mathfrak{F}) \mid \sigma = \beta(\tau)$$

$\delta\tau \in C^{p+1}(\mathcal{A}, \mathfrak{F})$. Mais $\beta(\delta\tau) = \delta\beta(\tau)$ car β est une application de chaîne, et comme $\beta(\tau) = \sigma$, on a $\beta(\delta\tau) = \delta\sigma = 0$. Donc $\delta\tau \in \ker \beta = \text{Im} \alpha$ (la suite est exacte). Donc

$$\exists \mu \in C^{p+1}(\mathcal{A}, \mathfrak{E}) \mid \delta\tau = \alpha(\mu)$$

$$\delta\alpha(\mu) = \delta^2\tau = 0$$

$$\delta\alpha(\mu) = \alpha(\delta\mu) = 0$$

Donc $\delta\mu \in \ker \alpha$ or $\ker \alpha = \text{Im} 0$ donc $\delta\mu = 0$, μ caractérise une classe de cohomologie. On pose $\delta[\sigma] = [\mu]$.

De manière symbolique : “ $\delta\beta = \alpha^{-1}\delta$ ” dans les groupes de cohomologie. ■

Définition 44 (Cup-Produit). *On définit dans $C^*(\mathcal{A}, \mathbb{R})$ un produit² appelé cup-produit entre deux cochaînes $\omega \in C^p(\mathcal{A}, \mathbb{R})$ et $\eta \in C^q(\mathcal{A}, \mathbb{R})$ par :*

$$(\omega \cup \eta)_{\alpha_0, \dots, \alpha_{p+q}} = \frac{1}{(p+1)!(q+1)!} \sum_{\sigma \in S_{p+q+1}} \omega_{\alpha_{\sigma(0)}, \dots, \alpha_{\sigma(p)}} \eta_{\alpha_{\sigma(p)}, \dots, \alpha_{\sigma(p+q)}}$$

Définition 45 (Cup-produit de Jacobi). *On considère $C^*(\mathcal{A}, \mathfrak{g})$ les cochaînes de Čech à valeurs dans une algèbre de Lie \mathfrak{g} (le groupe des gerbes $\mathcal{F}(U)$ étant le groupe abélien $(\mathfrak{g}, +)$). On définit dans $C^*(\mathcal{A}, \mathfrak{g})$ le cup-produit par : $\forall \omega \in C^p(\mathcal{A}, \mathfrak{g})$ et $\eta \in C^q(\mathcal{A}, \mathfrak{g})$*

$$(\omega \cup \eta)_{\alpha_0, \dots, \alpha_{p+q}} = \frac{1}{(p+1)!(q+1)!} \sum_{\sigma \in S_{p+q+1}} \left[\omega_{\alpha_{\sigma(0)}, \dots, \alpha_{\sigma(p)}}, \eta_{\alpha_{\sigma(p)}, \dots, \alpha_{\sigma(p+q)}} \right]$$

De plus on pose

$$[\omega, \eta] = \omega \cup \eta - (-1)^{pq} \eta \cup \omega$$

C.2 Théorie de Mayer-Vietoris

Dans ce qui suit, on va construire une nouvelle cohomologie, à partir de la cohomologie de de Rham sur les formes d'une variété M et de la cohomologie de Čech associée à un atlas \mathcal{A} de M .

La géométrie d'une variété M est caractérisée par deux aspects :

- la géométrie locale décrite par le complexe de de Rham Ω^*M .
- la géométrie globale décrite par le combinatoire des cartes locales, avec le complexe de Čech $C^*(\mathcal{A}, \mathbb{R})$

La géométrie générale est décrite par la suite exacte suivante

$$\Omega^*M \xrightarrow{r} \prod_{\alpha_0} \Omega^*(U_{\alpha_0}) \xrightarrow{\delta} \prod_{\alpha_0 \neq \alpha_1} \Omega^*(U_{\alpha_0} \cap U_{\alpha_1}) \xrightarrow{\delta} \dots$$

où l'opérateur de cobord est défini par :

$$\delta : \prod_{\alpha_0 \neq \dots \neq \alpha_k} \Omega^*(U_{\alpha_0} \cap \dots \cap U_{\alpha_k}) \rightarrow \prod_{\alpha_0 \neq \dots \neq \alpha_{k+1}} \Omega^*(U_{\alpha_0} \cap \dots \cap U_{\alpha_{k+1}})$$

$$\omega_{\alpha_0, \dots, \alpha_k} \mapsto (\delta\omega)_{\alpha_0, \dots, \alpha_{k+1}} = \sum_{i=0}^{k+1} (-1)^i \omega_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_{k+1}}$$

et r est l'application restriction. Le produit est ici antisymétrique par rapport aux indices de cartes. Cette suite porte le nom de suite Mayer-Vietoris.

On lui associe l'algèbre de Čech-de Rham de la variété M :

$$C^*(M, \mathcal{A}, \Omega^*) = \bigoplus_{p=0, q=0}^{p=\text{card}\mathcal{A}, q=\dim M} \prod_{\alpha_0 \neq \dots \neq \alpha_p} \Omega^q(U_{\alpha_0} \cap \dots \cap U_{\alpha_p})$$

On peut voir cette suite comme un double complexe :

Définition 46 (double complexe de Mayer-Vietoris). *On pose $K_q^p = C^p(\mathcal{A}, \Omega^q) = \prod_{\alpha_0 \neq \dots \neq \alpha_p} \Omega^q(U_{\alpha_0} \cap \dots \cap U_{\alpha_p})$, et $C^p(\mathcal{A}, \mathbb{R})$ l'ensemble des fonctions localement constantes sur des ouverts du type*

²en quelque sorte l'équivalent pour la cohomologie de Čech du produit extérieur de la cohomologie de de Rham.

$U_{\alpha_0} \cap \dots \cap U_{\alpha_p}$. La géométrie des formes et des cartes locales d'une variété M est décrite par le double complexe de Mayer-Vietoris :

$$\begin{array}{ccccccccccc}
 & & & 0 & & 0 & & 0 & & & \\
 & & & \uparrow & & \uparrow & & \uparrow & & & \\
 0 & \longrightarrow & \Omega^{\dim M} M & \xrightarrow{r} & K_{\dim M}^0 & \xrightarrow{\delta} & K_{\dim M}^1 & \xrightarrow{\delta} & \dots & \xrightarrow{\delta} & K_{\dim M}^{\text{card } \mathcal{A}} & \longrightarrow & 0 \\
 & & d \uparrow & & d \uparrow & & d \uparrow & & & & d \uparrow & & \\
 & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & & & \vdots & & \\
 & & d \uparrow & & d \uparrow & & d \uparrow & & & & d \uparrow & & \\
 0 & \longrightarrow & \Omega^2 M & \xrightarrow{r} & K_2^0 & \xrightarrow{\delta} & K_2^1 & \xrightarrow{\delta} & \dots & \xrightarrow{\delta} & K_2^{\text{card } \mathcal{A}} & \longrightarrow & 0 \\
 & & d \uparrow & & d \uparrow & & d \uparrow & & & & d \uparrow & & \\
 0 & \longrightarrow & \Omega^1 M & \xrightarrow{r} & K_1^0 & \xrightarrow{\delta} & K_1^1 & \xrightarrow{\delta} & \dots & \xrightarrow{\delta} & K_1^{\text{card } \mathcal{A}} & \longrightarrow & 0 \\
 & & d \uparrow & & d \uparrow & & d \uparrow & & & & d \uparrow & & \\
 0 & \longrightarrow & \Omega^0 M & \xrightarrow{r} & K_0^0 & \xrightarrow{\delta} & K_0^1 & \xrightarrow{\delta} & \dots & \xrightarrow{\delta} & K_0^{\text{card } \mathcal{A}} & \longrightarrow & 0 \\
 & & & & i \uparrow & & i \uparrow & & & & i \uparrow & & \\
 & & & & C^0(\mathcal{A}, \mathbb{R}) & \xrightarrow{\delta} & C^1(\mathcal{A}, \mathbb{R}) & \xrightarrow{\delta} & \dots & \xrightarrow{\delta} & C^{\text{card } \mathcal{A}}(\mathcal{A}, \mathbb{R}) & & \\
 & & & & \uparrow & & \uparrow & & & & \uparrow & & \\
 & & & & 0 & & 0 & & & & 0 & &
 \end{array}$$

Les lignes du double complexe décrivent la géométrie des formes différentielles de M , alors que les colonnes décrivent la géométrie combinatoire des cartes locales.

On passe du double complexe de Mayer-Vietoris à un simple complexe (complexe de Čech-de Rham) de la manière suivante :

$$D = \delta + (-1)^p d$$

$$\bigoplus_{p+q=n} K_p^q \xrightarrow{D} \bigoplus_{p+q=n+1} K_p^q$$

La première colonne non-nulle du complexe correspond à la cohomologie de de Rham H^*M , le complexe de la première ligne non-nulle :

$$C^0(\mathcal{A}, \mathbb{R}) \rightarrow C^1(\mathcal{A}, \mathbb{R}) \rightarrow \dots$$

correspond à la cohomologie de Čech $\check{H}^*(M, \mathbb{R})$. Le complexe de Čech-de Rham induit également un anneau de cohomologie $H_D(C^*(\mathcal{A}, \Omega^*))$.

Théorème 24. La suite de Mayer-Vietoris :

$$0 \rightarrow \Omega^* M \xrightarrow{r} C^0(\mathcal{A}, \Omega^* M) \xrightarrow{\delta} C^1(\mathcal{A}, \Omega^* M) \rightarrow \dots$$

est exacte.

Preuve :

Comme $\Omega^* M$ est l'ensemble des formes globales, c'est le noyau du premier δ . Soit $\{\rho_\alpha\}$ une partition de l'unité subordonnée à \mathcal{A} : le support de ρ_α est U_α et on a

$$\sum_{\alpha} \rho_\alpha = 1$$

Soit ω un p -cocycle. On définit une $(p-1)$ -cochaîne τ par

$$\tau_{\alpha_0, \dots, \alpha_{p-1}} = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \omega_{\alpha, \alpha_0, \dots, \alpha_{p-1}}$$

alors

$$(\delta\tau)_{\alpha_0, \dots, \alpha_p} = \sum_{\alpha, i} (-1)^i \omega_{\alpha, \alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_p}$$

Comme ω est un cocycle, on a

$$(\delta\omega)_{\alpha, \alpha_0, \dots, \alpha_p} = \omega_{\alpha_0, \dots, \alpha_p} + \sum_i (-1)^{i+1} \omega_{\alpha, \alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_p} = 0$$

d'où

$$(\delta\tau)_{\alpha_0, \dots, \alpha_p} = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \omega_{\alpha_0, \dots, \alpha_p} = \omega_{\alpha_0, \dots, \alpha_p}$$

Ce qui prouve que tout cocycle est un cobord. L'exactitude suit alors de $\delta^2 = 0$. ■

Propriété 33 (Principe du zig-zag). *Le n -ième groupe de cohomologie de Čech-de Rham est calculé par les 0-cocycles de Čech :*

$$H_D^n(\mathcal{A}, M) = H_D \left(\bigoplus_{p+q=n} K_p^q \right) = H_D(\check{Z}^0(\mathcal{A}, \Omega^{p+q}))$$

Preuve :

Soit $\omega \in \mathcal{Z}_D^n(\mathcal{A}, M)$, alors on a

$$D\omega = 0$$

On considère la décomposition

$$\omega = \bigoplus_{p+q=n} \omega_p^q$$

avec $\omega_p^q \in K_p^q$. Alors

$$D\omega = 0 \iff \bigoplus_{p+q=n} d\omega_p^q = \bigoplus_{p+q=n} (-1)^{q+1} \delta\omega_p^q$$

On a donc

$$\forall q \neq 0, n \quad d\omega_p^q = (-1)^q \delta\omega_{p+1}^{q-1}$$

$$d\omega_n^0 = \delta\omega_0^n = 0$$

Comme la suite de Mayer-Vietoris est exacte, $\exists \varphi_0^n \in K_0^{n-1}$ tel que $\omega_0^n = \delta\varphi_0^n$.

$$\omega - D\varphi_0^n = \bigoplus_{i=0}^{n-1} \omega_{n-i}^i + (-1)^n d\varphi_0^n$$

$$\delta(\omega_1^{n-1} + (-1)^n d\varphi_0^n) = (-1)^{n+1} d\omega_0^n + (-1)^n d \underbrace{\delta\varphi_0^n}_{\omega_0^n} = 0$$

Alors $\exists \varphi_1^{n-1}$ tel que $\delta\varphi_1^{n-1} = \omega_1^{n-1} + (-1)^n d\varphi_0^n$. Par récurrences on a

$$\omega - D \left(\bigoplus_{i=0}^{n-1} \varphi_i^{n-i} \right) = \omega_n^0 - d\varphi_{n-1}^1$$

$$\delta(\omega_n^0 - d\varphi_{n-1}^1) = d\omega_{n-1}^1 - d\omega_{n-1}^1 + (-1)^n d^2\varphi_n^0 = 0$$

alors

$$[\omega]_D = [\omega_n^0]_D$$

■

Théorème 25 (Principe de Mayer-Vietoris). *L'application restriction $r : \Omega^*M \rightarrow C^0(\mathcal{A}, \Omega^*)$ induit un isomorphisme en cohomologie*

$$r : H_d^n M \rightarrow H_D^n(\mathcal{A}, M)$$

Démonstration :

$Dr = \delta r + dr = dr = rd$, alors r est une application de chaîne, elle induit donc une application en cohomologie.

Soit ω un D -cocycle. Par le principe du zig-zag, $\exists \omega' \in [\omega]_D$ tel que $d\omega' = 0$ et $\delta\omega' = 0$. ω' est une d -forme globale fermée, donc c'est une image par r d'un élément de Z^*M . On en conclut que r est surjective en cohomologie.

Soit $\omega \in Z^*M$ tel que $[r(\omega)]_D = 0 \iff \exists \varphi \in \bigoplus_{p+q=n-1} K_p^q, r(\omega) = D\varphi$. $D\varphi$ est D -exacte, alors par le principe du zig-zag, $\exists D\varphi' \in C^0(\mathcal{A}, \Omega^*)$ tel que $r(\omega) = D\varphi'$. Mais, si $D\varphi' \in C^0(\mathcal{A}, \Omega^*)$ alors $\varphi' \in C^0(\mathcal{A}, \Omega^{*-1})$ et donc $D\varphi' = d\varphi'$ et $\delta\varphi' = 0$. φ' est δ -fermée, donc $\varphi' = r(\varphi'')$ avec $\varphi'' \in \Omega^{*-1}M$, et donc $\omega = d\varphi''$. On en conclut que $[r(\omega)]_D = 0 \Rightarrow [\omega]_d = 0$, donc r est injective en cohomologie. ■

Définition 47 (Cup-produit de de Rham). *On définit dans $C^*(M, \Omega^*M)$ le produit entre deux cochaînes $\omega \in C^p(M, \Omega^*M)$ et $\eta \in C^q(M, \Omega^*M)$:*

$$(\omega \cup \eta)_{\alpha_0, \dots, \alpha_{p+q}} = \frac{1}{(p+1)!(q+1)!} \sum_{\sigma \in S_{p+q+1}} \omega_{\alpha_{\sigma(0)}, \dots, \alpha_{\sigma(p)}} \wedge \eta_{\alpha_{\sigma(p)}, \dots, \alpha_{\sigma(p+q)}}$$

C.3 Anneau de cohomologie de de Rham et polynômes invariants

Soit $\mathcal{S}^r(\mathcal{M}_{k \times k}(\mathbb{C}))$ l'ensemble des applications de $\mathcal{M}_{k \times k}(\mathbb{C})^{\otimes r}$ symétrisé par rapport aux indices tensoriels à valeurs dans \mathbb{C} et

$$\mathcal{S}^*(\mathcal{M}_{k \times k}(\mathbb{C})) = \bigoplus_{r=0}^{\infty} \mathcal{S}^r(\mathcal{M}_{k \times k}(\mathbb{C}))$$

avec le produit : $\forall \tilde{P} \in \mathcal{S}^p$ et $\forall \tilde{Q} \in \mathcal{S}^q$:

$$\tilde{P}\tilde{Q}(X_1, \dots, X_{p+q}) = \frac{1}{(p+q)!} \sum_{\pi \in S_{p+q}} \tilde{P}(X_{\pi(1)}, \dots, X_{\pi(p)}) \tilde{Q}(X_{\pi(p+1)}, \dots, X_{\pi(p+q)})$$

muni de ce produit, \mathcal{S}^* est une algèbre. Soit G et \mathfrak{g} un groupe de Lie et son algèbre de Lie.

Définition 48. $\tilde{P} \in \mathcal{S}^r(\mathfrak{g})$ est dit invariant si $\forall g \in G$ et $\forall A_i \in \mathfrak{g}$:

$$\tilde{P}(\text{Ad}(g)A_1, \dots, \text{Ad}(g)A_r) = \tilde{P}(A_1, \dots, A_r)$$

avec $\text{Ad}(g)X = g^{-1}Xg$. On note $I^r(G)$ l'ensemble des G -invariants de $\mathcal{S}^r(\mathfrak{g})$.

Soit $\tilde{P} \in I^r(G)$, $P(X) = \tilde{P}(X, X, \dots, X)$ est un polynôme G -invariant de degré r ($P(\text{Ad}(g)X) = P(X)$). \tilde{P} est appelé polarisation de P . Soit (P, M, G, π) un fibré principal. On étend le domaine des polynômes invariants de \mathfrak{g} à des formes différentielles de M à valeurs dans \mathfrak{g} ($\Omega^*(M, \mathfrak{g}) = C^\infty(M) \otimes \Omega^* \otimes \mathfrak{g}$). $\forall A_i \in \mathfrak{g}, \eta_i \in \Omega^{p_i}M$:

$$\tilde{P}(A_1\eta_1, \dots, A_r\eta_r) = \eta_1 \wedge \dots \wedge \eta_r \tilde{P}(A_1, \dots, A_r)$$

Théorème 26 (Théorème de Chern-Weil). *Soit $P \in I^*(G)$, F et F' deux courbures de (P, M, G, π) correspondantes à deux connexions A et A' . Alors :*

$$- dP(F) = 0$$

- $P(F') - P(F) \in \mathcal{B}^k M$
- La classe de cohomologie $[P(F)] \in H^{2 \dim P} M$ est indépendante de la connexion.

P est fermé et définit donc une classe de cohomologie appelée classe caractéristique et notée $\chi_E(P)$.

Preuve : cf. [113] ■

Définition 49 (Homomorphisme de Weil). *L'application* :

$$\chi_E : \begin{array}{ccc} I^*(G) & \rightarrow & H^* M \\ P & \mapsto & \chi_E(P) \end{array}$$

est un homomorphisme appelé homomorphisme de Weil.

C.4 Principe de de Rham

Soit $\mathcal{A}' = \{V_\alpha\}_{\alpha \in J}$ un recouvrement d'ouverts localement fini de M plus fin que $\mathcal{A} = \{U_\alpha\}_{\alpha \in I}$. Plus fin signifiant que $\exists f : J \rightarrow I$ telle que $\forall j \in J, V_j \subseteq U_{f(j)}$. On peut définir $f_* : C^p(\mathcal{A}, \mathcal{F}) \rightarrow C^p(\mathcal{A}', \mathcal{F})$ par $f_*(\omega)_{j_0, \dots, j_p} = \omega_{f(j_0), \dots, f(j_p)} \upharpoonright_{V_{j_0} \cap \dots \cap V_{j_p}}$. f_* induit un homomorphisme de groupe $\check{H}^*(\mathcal{A}, \mathcal{F}) \rightarrow \check{H}^*(\mathcal{A}', \mathcal{F})$ qui est indépendant du raffinement particulier f entre \mathcal{A} et \mathcal{A}' . On considère la limite inductive des raffinements des atlas \mathcal{A} . On définit le groupe cohomologie de Čech de M , par la limite inductive

$$\check{H}^*(M, \mathcal{F}) = \lim_{\mathcal{A} \downarrow} \check{H}^*(\mathcal{A}, \mathcal{F})$$

Théorème 27 (Principe de de Rham). *Soit M une variété différentiable. Soit $H^* M$ l'anneau de cohomologie de de Rham de M et $\check{H}^*(M, \mathbb{R})$ le groupe de cohomologie de Čech de M pour le groupe $(\mathbb{R}, +)$. Il existe un isomorphisme de groupe entre ces deux groupes :*

$$H^* M \simeq \check{H}^*(M, \mathbb{R})$$

Preuve : cf. [54, 24, 89] ■

Propriété 34. *Soit M une variété connexe, compacte et orientable de dimension k . Alors on a*

$$H^k M \simeq \check{H}^k(M, \mathbb{R}) \simeq \mathbb{R}$$

Preuve : cf. [89, 24, 54] ■

C.5 Cohomologie de Čech non-abélienne

Soit M une variété différentiable et G un groupe de Lie non-abélien. On note $\mathcal{O}_G(M)$ l'ensemble des fonctions \mathcal{C}^∞ de M à valeurs dans G . Soit $\{U_\alpha\}_\alpha$ un atlas de M . On introduit l'opérateur suivant

$$\delta_G : \prod_{\alpha_0 \neq \dots \neq \alpha_k} \mathcal{O}_G(U_{\alpha_0} \cap \dots \cap U_{\alpha_k}) \rightarrow \prod_{\alpha_0 \neq \dots \neq \alpha_{k+1}} \mathcal{O}_G(U_{\alpha_0} \cap \dots \cap U_{\alpha_{k+1}})$$

Ici \prod est le produit cartésien antisymétrique, l'antisymétrisation étant au sens de l'inversion de groupe : $\forall \omega \in \prod_{\alpha_0 \neq \dots \neq \alpha_k} \mathcal{O}_G(U_{\alpha_0} \cap \dots \cap U_{\alpha_k})$

$$\omega_{\alpha_0, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_j, \dots, \alpha_k} = \omega_{\alpha_0, \dots, \alpha_j, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_k}^{-1}$$

$$(\delta_G \omega)_{\alpha_0, \dots, \alpha_{k+1}} = \prod_{i=0}^{k+1} \omega_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_{k+1}}^{(-1)^i}$$

Dans cette dernière équation, $\hat{\alpha}_i$ signifie l'absence de α_i , ω^{-1} est l'inversion de groupe et \prod est la loi de groupe. On note désormais $\prod_{\alpha_0 \neq \dots \neq \alpha_k} \mathcal{O}_G(U_{\alpha_0} \cap \dots \cap U_{\alpha_k})$ par $C^k(\mathcal{A}, G)$ que l'on appelle ensemble des k -cochaînes de groupe. On définit l'ensemble des k -cocycles de groupe par $\mathcal{Z}^k(\mathcal{A}, G) = \{\omega \in C^k(\mathcal{A}, G) \mid \delta_G \omega = e\}$, e étant l'élément neutre de G . On introduit la relation d'équivalence suivante, entre deux éléments g et g' de $C^1(\mathcal{A}, G)$

$$g \sim g' \iff \exists h \in C^0(\mathcal{A}, G), \quad g'_{\alpha\beta} = h_\alpha g_{\alpha\beta} h_\beta^{-1}$$

On reconnaît là, la formule de changement des fonctions de transition d'un fibré principal. On définit le premier groupe de cohomologie par

$$H^1(\mathcal{A}, G) = \mathcal{Z}^1(\mathcal{A}, G) / \sim$$

Remarque : la définition des groupes de cohomologie d'ordre supérieur n'est pas claire.

C.6 Cohomologie simplicielle

Définition 50 (Simplexe). *On définit le q -simplexe standard comme étant l'ensemble*

$$\Delta_q = \left\{ \sum_{j=0}^q t_j e_j \mid t_j \geq 0, \sum_{j=0}^q t_j = 1 \right\}$$

où $\{e_j\}_{j=1, \dots, q}$ est la base canonique de \mathbb{R}^q et $e_0 = 0$. En d'autres termes

$$\Delta_q = \{(t_0; t_1, \dots, t_q), t_0 + t_1 + \dots + t_q = 1\}$$

Soit M une variété de dimension n . Un q -simplexe de M ($q \leq n$) est une application continue

$$\sigma : \begin{array}{ccc} \Delta_q & \rightarrow & M \\ (t_0, \dots, t_q) & \mapsto & \langle x_0, \dots, x_q \rangle \end{array}$$

$\langle x_0, \dots, x_q \rangle$ est la sous-variété orientée de M de dimension q qui est le polytope formé par les points $x_i \in M$. Les 0-simplexes sont appelés vertexes. On note $\Delta_q M$ l'ensemble des q -simplexes de M .

Dans le cas où $M = \mathbb{R}^n$, la notion de simplexes est très simple : les vertexes sont des points, les 1-simplexes des segments, les 2-simplexes des triangles, les 3-simplexes des tétraèdres, etc... Pour une variété M quelconque, les simplexes sont la généralisation de ces notions en géométrie non-euclidienne. On appelle face d'un q -simplexe $\langle x_0, \dots, x_q \rangle$ un $(q-1)$ -simplexe σ tel que $\exists i = 0, \dots, q$ tel que $\sigma = \langle x_0, \dots, \hat{x}_i, \dots, x_q \rangle$.

Définition 51 (Complexe simpliciel). *On appelle complexe simpliciel, une collection X de simplexes telle que si $\sigma \in X$ alors les faces de σ sont dans X , et $\forall \sigma, \tau \in X$, $\sigma \cap \tau$ est une face de σ et de τ ou $\sigma \cap \tau = \emptyset$. On note $\Delta_q X$ l'ensemble des q -simplexes appartenant à X .*

Il est possible de considérer la cohomologie de Čech comme une cohomologie simplicielle. En effet, considérons pour chaque carte U_α de l'atlas \mathcal{A} , un point arbitraire $p_\alpha \in U_\alpha$ tel que si $U_\alpha \neq U_\beta$ alors $p_\alpha \neq p_\beta$. p_α est appelé point de base de U_α . L'ensemble de tous les points de base associés à \mathcal{A} forment l'ensemble de vertexes d'un complexe simpliciel $X_{\mathcal{A}}$. On peut alors considérer une q -cochaîne de Čech, $\omega \in C^q(\mathcal{A}, \mathcal{F})$, comme une application $\omega : \Delta_q X_{\mathcal{A}} \rightarrow \mathcal{F}$ par la relation

$$\omega(\langle p_{\alpha_0}, \dots, p_{\alpha_q} \rangle) = \omega_{\alpha_0, \dots, \alpha_q}$$

À la limite inductive des raffinements de l'atlas de M , on a

$$C^q(M, \mathcal{F}) \ni \omega : \begin{array}{ccc} \Delta_q M & \rightarrow & \mathcal{F} \\ \langle p_1, \dots, p_q \rangle & \mapsto & \omega_{p_1, \dots, p_q} \end{array}$$

Afin de simplifier les notations, on notera $\Delta_q \mathcal{A}$ pour $\Delta_q X_{\mathcal{A}}$.

On note $C_q(X, \mathbb{R})$ (resp. $C_q(\mathcal{A}, \mathbb{R})$, $C_q(M, \mathbb{R})$) l'enveloppe linéaire formelle de $\Delta_q X$ (resp. $\Delta_q \mathcal{A}$, $\Delta_q M$). Les éléments de $C_q(X, \mathbb{R})$ sont appelés des q -chaînes. On introduit alors l'opérateur de bord $\partial : C_q(X, \mathbb{R}) \rightarrow C_{q-1}(X, \mathbb{R})$ tel que

$$\partial \langle x_0, \dots, x_q \rangle = \sum_{i=0}^q (-1)^i \langle x_0, \dots, \hat{x}_i, \dots, x_q \rangle$$

$C_q(\mathcal{A}, \mathbb{R})$ est l'espace vectoriel dual de $C^q(\mathcal{A}, \mathbb{R})$ avec le produit de dualité

$$\langle \langle p_{i_1}, \dots, p_{i_q} \rangle^*, \langle p_{j_1}, \dots, p_{j_q} \rangle \rangle = \sum_{\sigma \in S_{q+1}} (-1)^\sigma \delta_{i_1, j_{\sigma(1)}} \dots \delta_{i_q, j_{\sigma(q)}}$$

Définition 52 (Étoile). Soit X un complexe simpliciel. On appelle étoile de $x \in X$, que l'on note $st(x)$, l'ensemble de tous les simplexes qui ont x comme l'un de leur vertexe. On désigne de plus par $st_0(x)$ l'ensemble des vertexes de tous les simplexes de $st(x)$, $st_1(x)$ l'ensemble de tous les 1-simplexes de tous les simplexes de $st(x)$, etc...

Théorème 28. L'isomorphisme entre $H^* M$ et $\check{H}^*(M, \mathbb{R})$ du principe de de Rham est l'application

$$\begin{array}{ccc} H^* M & \rightarrow & \check{H}^*(M, \mathbb{R}) \\ [\varphi] & \mapsto & \omega_{[\varphi]} : \begin{array}{ccc} \Delta_{\sharp\varphi} M & \rightarrow & \mathbb{R} \\ \sigma & \mapsto & \int_\sigma \varphi \end{array} \end{array}$$

$\sharp\varphi$ est le degré de la forme différentielle φ , et $[\varphi]$ est la classe de de Rham de φ .

Preuve : cf. [24, 54] ■

Afin de simplifier la notation, on notera $\check{\varphi}$ à la place de ω_φ .

Proposition 12. Soit $\sigma \in \Delta_q \mathcal{A}$ un q -simplexe. $\forall x \in \sigma$ on pose $(\mu_0(x), \dots, \mu_q(x))$ les coordonnées barycentriques de x par rapport à σ , i.e.

$$x = \sum_{i=0}^q \mu_i(x) p_i \quad \sum_{i=0}^q \mu_i(x) = 0$$

où $\{p_i\}$ est l'ensemble des vertexes constituant σ . Soit $W_{\mathcal{A}}^* : \Delta_q \mathcal{A} \rightarrow \Omega^q M$ l'application définie par

$$W_{\mathcal{A}}^*(\sigma)(x) = q! \sum_{i=0}^q (-1)^i \mu_i(x) d\mu_0 \wedge \dots \wedge \widehat{d\mu_i} \wedge \dots \wedge d\mu_q$$

Soit $W_{\mathcal{A}} : C^q(\mathcal{A}, \mathbb{R}) \rightarrow \Omega^q M$ le morphisme dual de l'extension linéaire de $W_{\mathcal{A}}^*$. L'application induite par la limite inductive des raffinements $W = \lim_{\mathcal{A}_1} W_{\mathcal{A}}$ induit en cohomologie l'application inverse de l'isomorphisme de de Rham, i.e. $W : \check{H}^*(M, \mathbb{R}) \rightarrow H^* M$ est un isomorphisme d'algèbre graduée. On appelle W , application de Whitney.

Preuve : cf. [6] ■

Si on note $R_{\mathcal{A}}$ l'application de de Rham restreinte à $C^*(\mathcal{A}, \mathbb{R})$, alors

$$R_{\mathcal{A}} \circ W_{\mathcal{A}} = 1$$

$$\lim_{\downarrow \mathcal{A}} W_{\mathcal{A}} \circ R_{\mathcal{A}} = 1$$

Proposition 13. *Soit l'application qui engendre l'isomorphisme de de Rham :*

$$\begin{array}{ccc} \Omega^* M & \rightarrow & C^*(\mathcal{A}, \mathbb{R}) \\ \omega & \mapsto & \check{\omega} : \Delta_{\# \omega} \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R} \\ & & \sigma \mapsto \int_{\sigma} \omega \end{array}$$

On a alors

$$\forall \omega \in \Omega^q M \quad (\delta \check{\omega})_{\alpha_0, \dots, \alpha_{q+1}} = \int_{\langle p_{\alpha_0}, \dots, p_{\alpha_{q+1}} \rangle} d\omega$$

Preuve :

En utilisant le théorème de Stokes

$$\begin{aligned} \int_{\langle p_{\alpha_0}, \dots, p_{\alpha_{q+1}} \rangle} d\omega &= \int_{\partial \langle p_{\alpha_0}, \dots, p_{\alpha_{q+1}} \rangle} \omega \\ &= \int_{\sum_{i=0}^{q+1} \langle p_{\alpha_0}, \dots, \hat{p}_{\alpha_i}, \dots, p_{\alpha_{q+1}} \rangle} \omega \\ &= \sum_{i=0}^{q+1} (-1)^i \int_{\langle p_{\alpha_0}, \dots, \hat{p}_{\alpha_i}, \dots, p_{\alpha_{q+1}} \rangle} \omega \\ &= \sum_{i=0}^{q+1} (-1)^i \check{\omega}_{\alpha_0, \dots, \hat{\alpha}_i, \dots, \alpha_{q+1}} \\ &= (\delta \check{\omega})_{\alpha_0, \dots, \alpha_{q+1}} \end{aligned}$$

■

Proposition 14. $\forall \phi \in \Omega^p M$ et $\forall \omega \in \Omega^q M$

$$\lim_{\mathcal{A} \downarrow} W_{\mathcal{A}}(R_{\mathcal{A}}(\phi) \cup R_{\mathcal{A}}(\omega)) = \phi \wedge \omega$$

la limite étant définie dans la topologie de la norme L^2 .

Preuve : cf. [5] ■

Bibliographie

- [1] A. ACHUCARRO. Magnetic monopoles and vortices in the standard model of electroweak interactions. *arXiv*, hep-ph/0008096, 2000.
- [2] A. ACHÚCARRO and T. VACHASPETI. Semilocal and electroweak strings. *arXiv*, hep-th/9904229, 1999.
- [3] Marcelo AGUILAR, Samuel GITLER, and Carlos PRIETO. *Algebraic topology from a homotopical viewpoint*. Springer, 2002.
- [4] Y. AHARONOV and J. ANANDAN. Phase change during a cyclic quantum evolution. *Physical Review Letters*, 58(16) :1593, 1987.
- [5] Sergio ALBEVERIO and Jörg SCHÄFER. Abelian chern-simons theory and linking numbers via oscillatory intergals. *J. Math. Phys.*, 36(5), 1995.
- [6] Sergio ALBEVERIO and Boguslav ZEGARLINSKI. Construction of convergent simplicial approximations of quantum fields on riemannian manifolds. *Commun. Math. Phys.*, 132 :39, 1990.
- [7] J. ANANDAN and Y. AHARONOV. Geometric quantum phase and angles. *Phys. Rev. D*, 38(6) :1863, 1988.
- [8] J. ANANDAN and Y. AHARONOV. Geometry of quantum evolution. *Phys. Rev. Lett.*, 65(14), 1990.
- [9] J. ANANDAN and L. STODOLSKY. Some geometrical considerations of berry's phase. *Phys. Rev. D*, 35(8) :2597, 1987.
- [10] M. ASOREY, J.F. CARIÑENA, and M. PARAMINO. Quantum evolution as a parallel transport. *J. Math. Phys.*, 28(8) :1451, 1982.
- [11] O. ATABEK, H. ABOU-RACHID, and T.T. NGUYEN DANG. Reactivity control using laser induced dissociation quenching and alignment. *Annales de chimie sciences des matériaux*, 25 :513, 2000.
- [12] O. ATABEK, M. CHRYSOS, and R. LEFEBVRE. Isotope separation using intense laser field. *Phys. Rev. A*, 49 :R8, 1994.
- [13] O. ATABEK, C.M. DION, and A. BEN HAJ-YEDDER. Evolutionary algorithms for the optimal laser control of molecular orientation. *J. Phys. B : Atomic Molecular and Optical Physics*, 36 :4682, 2003.
- [14] Romain ATTAL. Combinatorics of non-abelian gerbes with connection and curvature. *arXiv*, math-ph/0203056, 2002.
- [15] A. AUGER, A.B. YEDDER, E. CANCES, C. LE BRIS, C.M. DION, A. KELLER, and O. ATABEK. Optimal laser control of molecular systems : methodology and results. *Mathematical models & methods in applied sciences*, 12 :1281, 2002.
- [16] J.E. AVRON and A. ELGART. Adiabatic theorem without a gap condition : two-level system coupled to quantized radiation field. *Phys. Rev. A*, 58(6) :4300, 1998.

- [17] Joseph E. AVRON and Alexander ELGART. Adiabatic theorem without a gap condition. *Comm. Math. Phys.*, 203 :445, 1999.
- [18] H. BACRY. *Leçons sur la théorie des groupes et les symétries des particules élémentaires*. Dunod, 1967.
- [19] Marcel BERGER and Bernard GOSTIAUX. *Géométrie différentielle : variétés, courbes et surfaces*. Presses Universitaires de France, 1987.
- [20] M.V. BERRY. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 392 :45, 1984.
- [21] A. BOHM and A. MOSTAFAZADEH. The relation between the berry and the anandan-aharonov connections for $u(n)$ bundles. *J. Math. Phys.*, 35(4) :1463, 1994.
- [22] A. BOHM, A. MOSTAFAZADEH, H. KOIZUMI, Q. NIU, and Z. ZWANZIGER. *The geometric phase in quantum systems*. Springer, 2004.
- [23] M. BORN and V. FOCK. Beweis des adiabatsatzes. *Z. Phys.*, 51 :165, 1928.
- [24] Raoul BOTT and Loring W. TU. *Differential forms in algebraic topology*. Springer-Verlag, 1982.
- [25] Dorje C. BRODY and Lane P. HUGHSTON. Geometric quantum mechanics. *Journal of geometry and physics*, 38 :19, 2001.
- [26] Jean-Luc BRYLINSKI. *Loop spaces, characteristic classes and geometric quantization*. Birkhäuser, 1993.
- [27] P. BUSCH. The time-energy uncertainty relation. *arXiv*, quant-ph/0105049, 2001.
- [28] M.N. CHERNODUN, F.V. GUBAREV, M.I. POLIKARPOV, and V.I. ZAKHAROV. Magnetic monopoles, alive. *arXiv*, hep-th/0007135, 2000.
- [29] Y.M. CHO. Colored monopoles. *Phys. Rev. Lett.*, 44(17) :1115, 1980.
- [30] Shih-I CHU and Dmitry A. TELNOV. Beyond the floquet theorem : generalized floquet formalisms and quasienergy methods for atomic and molecular multiphoton processes in intense laser fields. *Physics Reports*, 390 :1, 2004.
- [31] Claude COHEN-TANNOUJJI, Jacques DUPONT-ROC, and Gilbert GRYNBERG. *Processus d'interaction entre photons et atomes*. EDP Sciences, 2001.
- [32] Robert COQUEREAUX. Espaces fibrés et connexions. Polycopiés du cours de DEA physique des particules, physique mathématique et modélisation (Marseille).
- [33] Vivien DE BEAUCÉ and Siddhartha SEN. Discretising geometry and preserving topology i : a discrete exterior calculus. *arXiv*, hep-th/0403206, 2004.
- [34] C.M. DION, A. BEN HAJ-YEDDER, E. CANCES, C. LE BRIS, A. KELLER, and O. ATABEK. Optimal laser control of orientation : the kicked molecule. *Phys. Rev. A*, 65 :063408, 2002.
- [35] B. DOUBROVINE, S. NOVIKOV, and A. FOMENKO. *Géométrie contemporaine 1 : géométrie des surfaces, des groupes de transformations et des champs*. Mir, Moscow edition, 1979.
- [36] B. DOUBROVINE, S. NOVIKOV, and A. FOMENKO. *Géométrie contemporaine 2 : géométrie et topologie des variétés*. Mir, Moscow edition, 1979.
- [37] B. DOUBROVINE, S. NOVIKOV, and A. FOMENKO. *Géométrie contemporaine 3 : méthodes de la théorie de l'homologie*. Mir, Moscow edition, 1984.
- [38] K. DRESE and M. HOLTHAUS. Floquet theory for short laser pulses. *Eur. Phys. J. D*, 5 :119, 1999.
- [39] Philippe DURAND and Ivana PAIDAROVÁ. Direct determination of effective hamiltonians by wave operator methods : I general formalism. *Phys. Rev. A*, 28(6) :3184, 1983.

- [40] Philippe DURAND and Ivana PAIDAROVÁ. Wave operator theory of quantum dynamics. *Phys. Rev. A*, 58(3) :1867, 1998.
- [41] J.N. ELGIN. Semiclassical formalism for treatment of three-level systems. *Phys. Lett. A*, 80 :140, 1980.
- [42] Z.F. EZAWA and H.C. TZE. Theory of dirac monopoles with a non-abelian symmetry. *Phys. Rev. D*, 15(6) :1647, 1977.
- [43] Theodore FRANKEL. *The geometry of physics*. Cambridge University Press, 1997.
- [44] Luc FRAPPAT, Antonino SCIARRINO, and Paul SORBA. *Dictionary on Lie algebras and superalgebras*. Academic Press, 2000.
- [45] James N. FRY. 't hooft-polyakov magnetic monopoles.
- [46] Kazuyuki FUJI. From quantum optics to non-commutative geometry : a non-commutative version of the hopf bundle, vernose mapping and spin representation. *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics (à paraître)*, *arXiv*, quant-ph/0502174, 2005.
- [47] H. GAUSTERER and M. SAMMER. Classical u(1) lattice gauge theory in $d = 2$. *arXiv*, hep-lat/9609032, 1996.
- [48] G. GIACHETTA, L. MANGIAROTTI, and G. SARDANASHVILY. Geometric quantization of mechanical systems with time-dependent parameters. *J. Math. Phys.*, 43(6) :2882, 2002.
- [49] Roger GODEMENT. *Théorie des Faisceaux*. Hermann, 1958.
- [50] Marvin J. GREEBBER and John R. HARPER. *Algebraic topology*. Benjamin / Cummings publishing, 1981.
- [51] Werner GREUB, Stephen HALPERIN, and Ray VANSTONE. *Connections, curvature and cohomology : volume I - de Rham cohomology of manifolds and vector bundles*. Academic Press, 1972.
- [52] Werner GREUB, Stephen HALPERIN, and Ray VANSTONE. *Connections, curvature and cohomology : volume II - Lie groups, principal bundles and characteristic classes*. Academic Press, 1973.
- [53] Werner GREUB, Stephen HALPERIN, and Ray VANSTONE. *Connections, curvature and cohomology : volume III - cohomology of principal bundles and homogeneous spaces*. Academic Press, 1976.
- [54] Phillip GRIFFITHS and Joseph HARRIS. *Principles of algebraic geometry*. Wiley-interscience publication, 1978.
- [55] F.V. GUBAREV and V.I. ZAKHAROV. The berry phase and monopoles in non-abelian gauge theories. *arXiv*, hep-th/0004012, 2000.
- [56] S. GUÉRIN and H.R. JAUSLIN. Control of quantum dynamics by laser pulses : adiabatic floquet theory. *Adv. Chem. Phys.*, 125, 2003.
- [57] S. GUÉRIN, F. MONTI, J.M. DUPONT, and H.R. JAUSLIN. On the relation between cavity-dressed states, floquet states, rwa and semiclassical models. *J. Phys. A*, 30 :7193, 1997.
- [58] S. GUÉRIN, S. THOMAS, and H.R. JAUSLIN. Optimization of population transfer by adiabatic passage. *Phys. Rev. A*, 65 :023409, 2002.
- [59] S. GUÉRIN, R.G. UNANYAN, L.P. YATSENKO, and H.R. JAUSLIN. Adiabatic creation of entangled states by a bichromatic field designed from the topology of the dressed eigenenergies. *Phys. Rev. A*, 66 :032311, 2002.
- [60] S. GUÉRIN, L.P. YATSENKO, and H.R. JAUSLIN. Dynamical resonances and the topology of the multiphoton adiabatic passage. *Phys. Rev. A*, 63 :031403, 2001.

- [61] S. GUÉRIN, L.P. YATSENKO, H.R. JAUSLIN, O. FAUCHER, and B. LAVOREL. Orientation of polar molecules by laser induced adiabatic passage. *Phys. Rev. Lett.*, 88(24) :233601, 2002.
- [62] Stéphane GUÉRIN. *Contrôle de processus moléculaires par impulsions laser intenses - Théorie adiabatique de Floquet*. PhD thesis, Laboratoire de Physique de l'Université de Bourgogne (LPUB), 1996.
- [63] Stéphane GUÉRIN. Complete dissociation by chirped laser pulses designed by adiabatic floquet analysis. *Phys. Rev. A*, 56(2) :1458, 1997.
- [64] M. GÖCKELER and T. SCHÜCKER. *Differential geometry, gauge theories, and gravity*. Cambridge, 1987.
- [65] Brian C. HALL. An elementary introduction to groups and representations. *arXiv*, math-ph/0005032, 2000.
- [66] E. HARIKUMAR, I. MITRA, and H.S. SHARATCHANDRA. Half-monopoles and half-vortices in the yang-mills theory. *arXiv*, hep-th/0301045, 2003.
- [67] F.T. HIOE and J.H. EBERLY. N-level coherent vector and higher conservation laws in quantum optics and quantum mechanics. *Phys. Rev. Lett.*, 47 :838, 1981.
- [68] Friedrich HIRZEBRUCH. *Topological methods in algebraic geometry*. Springer, 1978.
- [69] P.D. HISLOP and I.M. SIGAL. *Introduction to spectral theory with applications to Schrödinger operators*. Spinger, 1996.
- [70] Tak-San HO and Shih-I CHU. Semiclassical many-mode floquet theory iii. $su(3)$ dynamical evolution of three-level systems in intense bichromatic fields. *Phys. Rev. A*, 31(2) :659, 1985.
- [71] Tak-San HO and Shih-I CHU. Semiclassical many-mode floquet theory iv. coherent population trapping and $su(3)$ dynamical evolution of dissipative three-level systems in intense bichromatic fields. *Phys. Rev. A*, 32(1) :377, 1985.
- [72] H.M. HULBURT and J.O. HIRSCHFELDER. *J. Chem. Phys.*, 9 :61, 1941.
- [73] Bozhidar Z. ILIEV. Fibre bundle formulation of nonrelativistic quantum mechanics. *arXiv*, quant-ph/0004040, 2000.
- [74] R. JACKIW. Dirac's magnetic monopoles (again). *arXiv*, hep-th/0212058, 2002.
- [75] G. JOLICARD, O. ATABECK, M.L. DUBERNET-TUCKEY, and N. BALAKRISHNAN. Nonadiabatic molecular response to short, intense laser pulses : A wave operator generalized floquet approach. *J. Phys. B*, 36 :2777, 2003.
- [76] Georges JOLICARD. Effective hamiltonian theory and molecular dynamics. *Ann. Rev. Phys. Chem.*, page 83, 1995.
- [77] Georges JOLICARD and John P. KILLINGBECK. Computation of interior eigenstates of large matrices using quasiadiabatic evolution of instantaneous eigenvectors. *J. Chem. Phys.*, 103 :1846, 1995.
- [78] Georges JOLICARD and John P. KILLINGBECK. Wave operators and active subspaces. In *Domain-based parallelism and problem decomposition methods in computational science and engineering*, chapter 16, page 279. Siam, 1995.
- [79] Georges JOLICARD and John P. KILLINGBECK. The bloch wave operator : generalizations and applications : Part 2 - the time-dependant case. *J. Phys. A*, 36 :R411, 2003.
- [80] Georges JOLICARD, David VIENNOT, John P. KILLINGBECK, and Jean-Marc ZUCCONI. Iterative eigenvalue method using the bloch wave operator formalism with padé approximants and absorbing boundaries. *Phys. Rev. E*, 70 :046703, 2004.
- [81] A. JOYE, F. MONTI, S. GUÉRIN, and H.R. JAUSLIN. Adiabatic evolution for systems with infinitely many eigenvalue crossings. *J. Math. Phys.*, 40(11) :5456, 1999.

- [82] Robert L. KARP, Freydoon MANSOURI, and Jung S. RNO. Product integral formalism and non-abelian stokes theorem. *J. Math. Phys.*, 40(11) :6033, 1999.
- [83] T. KATO. On the adiabatic theorem of quantum mechanics. *J. Phys. Soc. Japan*, 5 :435, 1950.
- [84] John P. KILLINGBECK. *Microcomputer algorithms, action from algebra*. Adam Hilger, Bristol, 1991.
- [85] John P. KILLINGBECK and Georges JOLICARD. The bloch wave operator : generalizations and applications : Part 1 - the time-independant case. *J. Phys. A*, 36 :R105, 2003.
- [86] Pavel KRTOUŠ. Covariant derivative on non-linear fiber bundles. *Czechoslovak Journal of Physics*, 54(3) :273, 2004.
- [87] Rainer W. KÜHNE. A model of magnetic monopoles. *arXiv*, hep-th/9708394, 1998.
- [88] V.I. KUKULIN, V.M. KRASNOPOL'SKY, and J.HORÁČEK. *Theory of resonances*. Kluwer Academic Publishers, 1989.
- [89] Jacques LAFONTAINE. *Introduction aux variétés différentielles*. EDP Sciences, 1996.
- [90] T.A. LARSSON. Gerbes, covariant derivatives, p -form lattice gauge theory, and the yang-baxter equation. *arXiv*, math-ph/0205017, 2002.
- [91] P. LEBOEUF and A. MOUCHET. Large geometric phases and non-elementary monopoles. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 36 :2847, 2003.
- [92] C. LEFORESTIER et al. A comparison of different propagation schemes for time dependent schrödinger equation. *Journal of Computational Physics*, 94(1) :59, 1991.
- [93] Daniel LEHMANN and Carlos SACRÉ. *Géométrie et topologie des surfaces*. Presses Universitaire de France, 1982.
- [94] J. LELONG-FERRAND. *Géométrie différentielle*. Masson, 1963.
- [95] Hua-Zhong LI. Induced gauge fields in a nongauged quantum system. *Physical Review Letters*, 58(6) :539, 1987.
- [96] Angelo LOINGER. On dirac's magnetic monopole. *arXiv*, physics/0309091, 2003.
- [97] Maroc MACKAAY. A note on the holonomy of connections in twisted bundles. *arXiv*, math.DG/0106019, 2002.
- [98] L. MANGIAROTTI and G. SARDANASHVILY. *Connections in classical and quantum field theory*. World Scientific, 2000.
- [99] Fortuné MASSAMBA and George THOMPSON. The universal connection and metrics on moduli spaces. *arXiv*, math.DG/0311198, 2003.
- [100] Thierry MASSON. *Géométrie différentielle, groupes et algèbres de lie, fibrés et connexions*.
- [101] Albert MESSIAH. *Mécanique Quantique*, volume 2. Dunod, 1959.
- [102] Nimrod MOISEYEV. Derivations of universal exact complex absorption potentials by the generalized complex coordinate method. *J. Phys. B*, 31 :1431, 1998.
- [103] A. MONDRAGÓN and E. HERNÁNDEZ. Berry phase of a resonant states. *arXiv*, hep-th/9603193, 1996.
- [104] A. MONDRAGÓN and E. HERNÁNDEZ. Accidental degeneracy and berry phase of resonant states. *arXiv*, quant-ph/9710018, 1997.
- [105] D.B. MONTEOLIVA, H.J. KORSCH, and J.A. NUÑEZ. On geometric phases and dynamical invariants. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 27 :6897, 1994.
- [106] John MOODY, A. SHAPER, and Frank WILCZEK. Realizations of magnetic-monopole gauge fields : diatoms and spin precession. *Physical Review Letters*, 56(9) :893, 1986.

- [107] D.J. MOORE. Berry phases and hamiltonian time dependence. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 23 :5523, 1990.
- [108] D.J. MOORE. Floquet theory and non-adiabatic berry phase. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 23 :L665, 1990.
- [109] D.J. MOORE and G.E. STEDMAN. Non-adiabatic berry phase for periodic hamiltonians. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 23 :2049, 1990.
- [110] Ali MOSTAFAZADEH. Topological aspects of the non-adiabatique berry phase. *arXiv*, hep-th/930960, 1993.
- [111] Ali MOSTAFAZADEH. Geometric phase, bundle classification and group representation. *J. Math. Phys.*, 37(3) :1218, 1996.
- [112] Ali MOSTAFAZADEH. Non-abelian geometric phase, floquet theory and periodic dynamical invariants. *arXiv*, quant-ph/9810064, 1998.
- [113] Mikio NAKAHARA. *Geometry, topology and physics*. IoP, 1990.
- [114] M.S. NARASIMHAN and S. RAMAMAN. Existence of universal connections. *American Journal of Mathematics*, 83(3) :563, 1961.
- [115] M.S. NARASIMHAN and S. RAMAMAN. Existence of universal connections ii. *American Journal of Mathematics*, 85(2) :223, 1963.
- [116] H. NARNHOFER and W. THIRRING. Adiabatic theorem in quantum statistical mechanics. *Phys. Rev. A*, 26(6) :3646, 1982.
- [117] Charles NASH. Topology and physics, a historical essay. *arXiv*, hep-th/9709135, 1997.
- [118] G. NENCIU. On the adiabatic theorem of quantum mechanics. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 13 :L15, 1980.
- [119] G. NENCIU and G. RASCHE. On the adiabatic theorem for non-self-adjoint hamiltonians. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 25 :5741, 1992.
- [120] Don N. PAGE. Geometrical description of berry's phase. *Phys. Rev. A*, 36(7) :3479, 1987.
- [121] Ivana PAIDAROVÁ and Philippe DURAND. Effective couplings bewteen quantum resonances. *Czechoslovak Journal of Physics*, 51 :1, 2001.
- [122] Ravinder R. PURI. *Mathematical methods of quantum optics*. Springer, 2001.
- [123] Michael REED and Barry SIMON. *Methods of modern mathematical physics - vol 2 : Fourier analysis, selfadjointness*. Academic Press, 1975.
- [124] Michael REED and Barry SIMON. *Methods of modern mathematical physics - vol 4 : Analysis of operators*. Academic Press, 1978.
- [125] Michael REED and Barry SIMON. *Methods of modern mathematical physics - vol 3 : Scattering theory*. Academic Press, 1979.
- [126] Michael REED and Barry SIMON. *Methods of modern mathematical physics - vol 1 : Functional analysis*. Academic Press, 1980.
- [127] V. RIVASSEAU. Géométrie et physique. Polycopiés du cours de DEA de physique théorique (Paris).
- [128] V. ROHLIN and D. FUCHS. *Premier cours de topologie : chapitres géométriques*. Mir, Moscow edition, 1977.
- [129] L.H. RYDER. Dirac monopoles and the hopf map $s^3 \rightarrow s^2$. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 13 :437, 1980.
- [130] Joseph SAMUEL and Rajendra BHANDARI. General setting for berry's phase. *Physical Review Letters*, 60(23) :2339, 1988.

- [131] G. SARDANASHVILY. Classical and quantum mechanics with time-dependent parameters. *J. Math. Phys.*, 41(8) :5245, 2000.
- [132] A.P. SEYRANIAN, O.N. KIRILLOV, and A.A. MAILYBAEV. Coupling of eigenvalues of complex matrices at diabolic and exceptional points. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 38 :1723, 2005.
- [133] Alfred SHAPER and Frank WILCZEK. *Geometric phases in physics*. World Scientific, 1989.
- [134] Bernard SHUTZ. *Geometrical methods of mathematical physics*. Cambridge University Press, 1980.
- [135] Barry SIMON. Holonomy, the quantum adiabatic theorem and berry's phase. *Physical Review Letters*, 51(24) :2167, 1983.
- [136] A. SINHA. $su(3)$ magnetic monopoles. *Phys. Rev. D*, 14(8) :2016, 1976.
- [137] Pablo SPALLANZANI. Groups of loops and hoops. *Commun. Math. Phys.*, 216 :243, 2001.
- [138] Norman STEENROD. *The topology of fibre bundles*. Princeton University Press, 1951.
- [139] D. SUGNY, A. KELLER, O. ATABEK, D. DAEMS, C.M. DION, S. GUÉRIN, and H.R. JAUSLIN. Reaching optimally oriented molecular states by laser kicks. *Phys. Rev. A*, 69 :033402, 2004.
- [140] D. SUGNY, A. KELLER, D. DAEMS, S. GUÉRIN, H.R. JAUSLIN, and O. ATABEK. Time-dependent unitary perturbation theory for intense laser driven molecular orientation. *Phys. Rev. A*, 69 :043407, 2004.
- [141] Stefan TEUFEL. A note on the adiabatic theorem without gap condition. *Lett. Math. Phys.*, 58 :261, 2001.
- [142] R. TICCIATI. *Quantum field theory for mathematicians*. Cambridge University Press, 1999.
- [143] H.C. TZE and Z.F. EZAWA. Global signature of gauge invariance : vortices and monopoles. *Phys. Rev. D*, 14(4) :1006, 1976.
- [144] J.M VELHINHO. Invariance properties of induced fock measures for $u(1)$ holonomies. *Comm. Math. Phys.*, 227 :541, 2002.
- [145] Frank WILCZEK and A. ZEE. Appearance of gauge structure in simple dynamical systems. *Physical Review Letters*, 52(24) :2111, 1984.
- [146] Peter WOIT. Lie groups and representations.
- [147] R.E. WYATT and C. IUNG. *Quantum mechanical studies of molecular spectra and dynamics ; Dynamics of molecules and chemical reactions*. Dekker, New York, 1996.
- [148] L.P. YATSENKO, S. GUÉRIN, and H.R. JAUSLIN. Topology of adiabatic passage. *Phys. Rev. A*, 65 :043407, 2002.

Résumé

Les simulations des systèmes atomiques ou moléculaires en interaction avec un champ électromagnétique se heurtent à un problème majeur. Pour décrire le système photodynamique, il est nécessaire d'utiliser une très grande base, ce qui est coûteux en temps de calculs et en mémoire. Pour résoudre ce problème, nous sommes amenés à chercher des modélisations ne faisant intervenir que des sous-espaces vectoriels de faible dimension, appelés espaces actifs. Comme la dépendance temporelle d'un système photodynamique se fait à travers des paramètres à évolution lente, c'est une théorie adiabatique qui définit cet espace. L'application d'un théorème adiabatique nous apprend que le système ne peut pas sortir d'un sous-espace spectral associé à des valeurs propres isolées. La fonction d'onde est alors décrite par un relèvement horizontal qui prend place dans le fibré principal de la phase de Berry. Celle-ci ne commute en général pas avec la phase dynamique, nous proposons une description fondée sur un fibré composite, modélisant simultanément phases géométrique et dynamique. Nous proposons une méthode de simulation de la photodynamique associée à la description géométrique et nous utilisons la notion de monopôles magnétiques virtuels pour obtenir des outils d'analyse de la dynamique. Nous étudions ensuite la théorie des opérateurs d'onde temporels, théorie fournissant une méthode d'Hamiltonien effectif. Pour coupler cette théorie avec le modèle adiabatique, nous étudions la compatibilité des deux méthodes en démontrant un théorème adiabatique pour les opérateurs d'onde. Nous nous sommes intéressés à des systèmes dynamiques simples, atomes à 2 ou 3 niveaux et molécule H_2^+ .

The numerical treatment of the interaction of an electromagnetic field with an atom or a molecule presents some severe computational problems. The description of the photodynamical system by traditional methods requires the use of a very large set of basis functions; this in turn leads to the need for a large computer memory store and to long computational times. In our modelling we use only a relatively small vector space, the active space, and adopt an approach which relies heavily on adiabatic time evolutions, since the parameters describing the system are taken to change slowly. Adiabatic theorems then lead to the result that the system remains confined to a spectral subspace associated with an isolated group of eigenvalues. In mathematical terms the wave function can be described by means of a horizontal lift in the principal bundle associated with the Berry phase. Since this phase does not commute with the dynamical phase we propose a description based on the use of a composite bundle, which can simultaneously describe both geometric and dynamical phases. Our geometrical viewpoint leads to a new way of modelling a photodynamical system; the concept of the virtual magnetic monopole is found to be useful in the construction of the appropriate computational tools to treat dynamical systems. We investigate our geometrical approach in the context of the time-dependent wave operator formalism, in which the effective Hamiltonian plays a major role. We establish the value of our approach in that context by deriving a wave operator adiabatic theorem. We present numerical applications to simple two and three level model atoms and to the H_2^+ molecular ion.