

Des cages de lumière pour les atomes : la physique des pièges et des réseaux optiques

Le refroidissement et le piégeage de particules par laser figurent sans conteste parmi les avancées majeures de la physique atomique et de l'optique quantique au cours des trois dernières décennies. Grâce à la lumière issue de faisceaux lasers, il est en particulier possible de créer des « paysages de potentiel » qui permettent de contrôler le mouvement d'atomes préalablement refroidis. Les atomes peuvent rester confinés dans ces cages de lumière pendant de longues durées et leur dynamique y prend des formes très variées, en fonction de la nature du paysage réalisé.

Un type de confinement particulièrement intéressant est celui obtenu grâce à une onde lumineuse stationnaire, qui permet de réaliser un potentiel périodique appelé « réseau optique ». Le mouvement des atomes dans un réseau optique présente une analogie profonde avec celui des électrons dans un cristal, ce qui en fait un outil important pour le programme de simulation quantique de phénomènes de la matière condensée à l'aide d'atomes froids.

Le cours de cette année est consacré à la présentation des principes de base qui régissent le mouvement des atomes dans ces réseaux optiques. Nous y décrirons également un certain nombre d'expériences récentes exploitant cette dynamique très particulière. Nous rencontrerons aussi bien des aspects liés à la métrologie que des illustrations de phénomènes de matière condensée. Le cours sera composé des six chapitres suivants :

Cours 1. Le potentiel dipolaire. Nous y montrerons comment décrire la force $F(\mathbf{r})$ créée par un faisceau lumineux monochromatique, quand ce

faisceau présente un gradient d'intensité $I(\mathbf{r})$. Nous évaluerons cette *force dipolaire* d'abord pour un modèle simple « d'atome à deux niveaux », puis pour un modèle plus réaliste de transition atomique. Nous montrerons que cette force dérive d'un potentiel $V(\mathbf{r})$, appelé *potentiel dipolaire* et proportionnel à $I(\mathbf{r})$ dans la limite des faibles intensités. Nous terminerons en évaluant le rôle des processus d'émission spontanée, qui peuvent créer un chauffage indésirable sur les atomes piégés.

Cours 2. Réseaux optiques : les principes de base. Nous centrerons notre exposé sur le cas du potentiel dipolaire périodique créé par une onde stationnaire, $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$ où k est le nombre d'onde du faisceau lumineux créant l'onde stationnaire. Nous verrons comment appliquer à ce problème les outils et concepts issus de la physique du solide pour traiter le mouvement d'électrons dans le potentiel périodique d'un réseau cristallin. Nous verrons que l'échelle d'énergie naturelle est donnée par l'*énergie de recul* $E_r = \hbar^2 k^2 / (2m)$ où m est la masse de l'atome. Nous présenterons le théorème de Bloch, la notion de zone de Brillouin et nous décrirons la limite des liaisons faibles $V_0 \ll E_r$, utilisée en particulier dans les nombreuses expériences de diffraction de Bragg.

Cours 3. Réseaux optiques dans le régime des liaisons fortes. Nous continuerons dans ce cours à importer les concepts de physique des solides aux réseaux optiques, en nous intéressant cette fois-ci au cas des liaisons fortes $V_0 \gg E_r$ et en introduisant le concept de fonction de Wannier. Dans cette limite des liaisons fortes, le passage par effet tunnel d'un atome de

basse énergie d'un site à un autre n'est possible que si ces deux sites sont contigus. On peut alors décrire la dynamique des particules dans le réseau par un hamiltonien très simplifié, *l'hamiltonien de Hubbard*, dont nous décrirons les principales propriétés. Nous aborderons le rôle joué par les interactions dans un réseau en nous intéressant à la stabilisation de dimères occupant un même site, même si les atomes composant ce dimère se repoussent.

Cours 4. Réseaux dépendant du temps. La possibilité de varier dans le temps les paramètres du laser créant l'onde stationnaire ouvre de nombreuses perspectives. On peut par exemple réaliser des réseaux en mouvement $V(x, t) = V_0 \sin^2[k(x - x_0(t))]$, où $x_0(t)$ est une fonction contrôlée du temps. Dans ce cours, nous établirons l'équivalence de plusieurs hamiltoniens pour ce problème en utilisant des transformations unitaires, chaque hamiltonien pouvant se révéler utile pour aborder un phénomène donné. Nous nous intéresserons plus précisément au phénomène de localisation dynamique, obtenu en modulant périodiquement la position $x_0(t)$. Nous verrons que cette modulation peut avoir des conséquences spectaculaires, comme la suppression quasi-totale de l'effet tunnel. Nous décrirons la mise en évidence et l'exploitation de cet effet pour des réseaux à une ou à deux dimensions.

Cours 5. Les oscillations de Bloch dans un réseau optique. Quand on superpose une force constante à la force périodique créée par un réseau, un phénomène quantique étonnant apparaît : les particules se mettent à osciller. Les atomes froids confinés dans des réseaux optiques ont permis d'étudier en grand détail ce phénomène et nous en présenterons plusieurs mises en évidence expérimentales. Nous discuterons également l'intérêt métrologique de ces oscillations de Bloch, à la fois pour déterminer des constantes fondamentales comme le rapport \hbar/m et pour mesurer très précisément des forces comme la gravité.

Cours 6. Topologie dans un réseau : l'exemple des points de Dirac. Les réseaux optiques permettent de réaliser des potentiels plus complexes que les potentiels sinusoïdaux en $\sin^2(kx)$. En particulier, on peut produire des réseaux bi-dimensionnels analogues à celui du graphène, pour lesquels

certains points singuliers de la zone de Brillouin, appelés *points de Dirac*, apparaissent. Au voisinage de ces points, le comportement des particules est similaire à celui de particules ultra-relativistes, avec une relation de dispersion quasi-linéaire. Nous verrons comment le contrôle des paramètres du réseau permet de faire bouger les points de Dirac à l'intérieur de la zone de Brillouin, voire même de les faire disparaître. Nous décrirons une expérience récente qui permis de mettre ces points en évidence et d'exploiter le contrôle disponible sur la topologie de la zone de Brillouin.

En raison de la limite de temps disponible, ce programme de cours ne recouvre que très partiellement l'activité de recherche actuelle, extrêmement intense, sur les réseaux optiques. Ainsi, nous n'aborderons que ponctuellement les effets d'interactions entre particules, gardant pour un cours d'une année ultérieure des phénomènes importants comme la transition entre l'état superfluide et l'isolant de Mott. Nous n'aborderons pas non plus cette année le magnétisme artificiel dans les réseaux : il fera lui aussi l'objet d'une prochaine série de cours. Nous espérons malgré tout que les outils mis en place dans les chapitres qui vont suivre et la description des expériences qui y est faite permettront à l'auditeur/lecteur intéressé de pouvoir aborder plus aisément les multiples thèmes de recherche liés à ces « cristaux de lumière ».

Chapitre 1

Le potentiel dipolaire

Sommaire

1	Atome « à deux niveaux » et approche semi-classique : équations de Bloch optiques	2
1-1	L'approximation d'un atome à deux niveaux . . .	2
1-2	L'approche semi-classique	2
1-3	Force et potentiel dipolaires	3
1-4	Approximation du champ tournant.	4
2	Le point de vue de l'atome habillé	5
3	Le cas des atomes alcalins	6
3-1	Lumière de polarisation linéaire	7
3-2	Lumière de polarisation quelconque	7
4	Approche quantique	9
4-1	Variables lentes et variables rapides	9
4-2	Hamiltonien effectif pour le centre de masse atomique	9
5	Réseau rouge ou réseau bleu ?	10
5-1	Le « paradoxe » de Gordon & Ashkin (1980) . . .	10
5-2	Transitions Raman dans un réseau très profond .	10
5-3	Les taux de transition $n \rightarrow n'$	11
6	Références	13
7	Complément	14

Le point de départ du cours de cette année réside dans le fait que la lumière peut créer un potentiel $V(\mathbf{r})$ sur des atomes. Nous nous limiterons ici à une lumière monochromatique de pulsation ω et nous allons montrer que, dans une limite perturbative à définir, ce potentiel est proportionnel à l'intensité lumineuse. La maîtrise du profil d'intensité lumineuse $I(\mathbf{r})$ permet donc de réaliser un « paysage » de potentiel entièrement contrôlable.

Le but de ce premier cours est d'établir la relation entre $V(\mathbf{r})$ et $I(\mathbf{r})$. Nous allons commencer notre étude par une approche semi-classique simple avant de passer à un traitement quantique. Pour une revue sur la force dipolaire et les pièges, on pourra consulter l'article très détaillé de Grimm et al. (2000).

Pour décrire l'action de la lumière sur un atome, nous allons commencer par considérer une hypothétique espèce atomique qui n'aurait qu'un seul électron de valence (comme les alcalins), cet électron n'ayant pas de spin (donc pas de structure fine atomique), le noyau atomique étant lui-même de spin nul. Nous considérerons de plus pour commencer le cas où seule une transition atomique entre en jeu, depuis l'état fondamental de moment cinétique nul vers un état excité de moment cinétique 1. Nous enrichirons ensuite peu à peu cette description de l'atome pour aboutir au cas où le niveau fondamental possède un spin (électronique et/ou nucléaire) non nul, et où le potentiel $V(\mathbf{r})$ dépend du spin du niveau occupé.

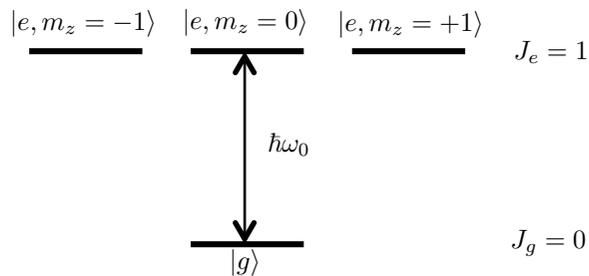


FIGURE 1.1. Transition modélisant un atome à deux niveaux : le niveau fondamental de moment cinétique nul est couplé à un niveau excité de moment cinétique unité. Le champ électromagnétique est supposé polarisé linéairement et on choisit l'axe de quantification du moment cinétique parallèle à cette polarisation. Le couplage atome-champ porte alors sur la transition $|g\rangle \leftrightarrow |e, m_z = 0\rangle$.

1 Atome « à deux niveaux » et approche semi-classique : équations de Bloch optiques

1-1 L'approximation d'un atome à deux niveaux

Notre point de départ dans ce paragraphe est comme indiqué en introduction

- Une onde laser de polarisation linéaire ϵ , dont le champ électrique s'écrit

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \epsilon \mathcal{E}(\mathbf{r}) \cos[\omega t - \varphi(\mathbf{r})]. \quad (1.1)$$

L'amplitude \mathcal{E} du champ et sa phase φ dépendent *a priori* toutes deux de la position.

- Une transition atomique qu'on modélise par un état fondamental de moment cinétique nul $|g\rangle$, et un niveau excité de moment cinétique unité, de base $\{|e, m_z\rangle, m_z = -1, 0, +1\}$ où on a pris l'axe de quantification pour la base du moment cinétique parallèle à ϵ . On note $\hbar\omega_0$ la différence d'énergie entre $|g\rangle$ et $|e\rangle$.

L'interaction entre l'atome et l'onde électromagnétique est traitée à l'approximation dipolaire électrique, ce qui entraîne que l'état $|g\rangle$ est couplé à

l'état $|e, m = 0\rangle$, que l'on notera plus simplement $|e\rangle$ dans la suite. Ce couplage dipolaire électrique est de la forme

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\text{d.e.}}(\hat{\mathbf{r}}, t) &= -\hat{\mathbf{D}} \cdot \mathcal{E}(\hat{\mathbf{r}}, t) \\ &= -d_0 \mathcal{E}(\hat{\mathbf{r}}) (\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-) \cos[\omega t - \varphi(\hat{\mathbf{r}})] \end{aligned} \quad (1.2)$$

où d_0 est le dipôle atomique réduit, caractéristique de la transition atomique considérée, où $\hat{\mathbf{r}}$ représente ici l'opérateur associé à la position du centre de masse de l'atome et où l'on a introduit les opérateurs montant et descendant :

$$\hat{\sigma}_+ = |e\rangle\langle g|, \quad \hat{\sigma}_- = |g\rangle\langle e|. \quad (1.3)$$

Notons que cette possibilité de restreindre le problème à une transition à deux niveaux reste vraie si la polarisation de l'onde lumineuse est arbitraire. Il suffit de prendre pour $|e\rangle$ la combinaison linéaire des trois états $|e, m\rangle$ couplé à $|g\rangle$. Par exemple, si l'onde est polarisée circulairement, on prendra pour $|e\rangle$ un des deux états $|e, m = \pm 1\rangle$.

On définit également l'opérateur force

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{F}} &= -\nabla_{\mathbf{r}} \hat{V}_{\text{d.e.}}(\hat{\mathbf{r}}, t) \\ &= d_0 (\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-) \nabla_{\mathbf{r}} \{\mathcal{E}(\hat{\mathbf{r}}) \cos[\omega t - \varphi(\hat{\mathbf{r}})]\} \end{aligned} \quad (1.4)$$

qui fait intervenir à la fois les gradients de l'amplitude \mathcal{E} et de la phase φ du champ électromagnétique.

1-2 L'approche semi-classique

L'approche semi-classique consiste à décrire classiquement le mouvement du centre de masse de l'atome, tout en prenant en compte le caractère quantique de sa dynamique interne. Pour un atome immobile au point \mathbf{r} , on peut alors évaluer la force moyenne agissant sur l'atome à partir de la valeur stationnaire des éléments de matrice de l'opérateur densité de l'atome $\hat{\rho}$:

$$\rho_{eg} = \text{Tr}(\hat{\sigma}_- \hat{\rho}), \quad \rho_{ge} = \text{Tr}(\hat{\sigma}_+ \hat{\rho}). \quad (1.5)$$

Cette valeur stationnaire se calcule elle-même grâce aux équations de Bloch optiques, qui sont la superposition de l'évolution hamiltonienne semi-classique de l'opérateur densité

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{\text{s.c.}}, \hat{\rho}] \quad (1.6)$$

et de l'évolution irréversible liée aux processus d'émission spontanée, notamment

$$\left. \frac{d\rho_{eg}}{dt} \right|_{\text{sp.}} = -\frac{u}{2}\rho_{eg}, \quad \left. \frac{d\rho_{ge}}{dt} \right|_{\text{sp.}} = -\frac{u}{2}\rho_{ge}. \quad (1.7)$$

Dans (1.6), l'hamiltonien semi-classique $\hat{H}_{\text{s.c.}}$ est la somme du couplage dipolaire électrique et de l'hamiltonien pour les variables internes d'un atome isolé :

$$\hat{H}_{\text{s.c.}} = \hat{V}_{\text{d.e.}} + \hbar\omega_0|e\rangle\langle e|. \quad (1.8)$$

Dans (1.7), le coefficient u représente la largeur naturelle de l'état excité $|e\rangle$, qui a donc pour durée de vie u^{-1} . Dans le cadre de ce modèle à deux niveaux, le coefficient u s'exprime lui-même en fonction du dipôle réduit d_0

$$u = \frac{d_0^2\omega_0^3}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3}. \quad (1.9)$$

1-3 Force et potentiel dipolaires

L'équation d'évolution pour ρ_{eg} peut s'écrire explicitement à partir des équations de Bloch optiques (Cohen-Tannoudji et al. 1992):

$$\frac{d\rho_{eg}}{dt} = -(i\omega_0 + \frac{u}{2})\rho_{eg} - i\Omega \cos(\omega t - \varphi) (\rho_{gg} - \rho_{ee}), \quad (1.10)$$

où on a introduit la *pulsation de Rabi* Ω :

$$\hbar\Omega(\mathbf{r}) = -d_0\mathcal{E}(\mathbf{r}). \quad (1.11)$$

Dans la plupart des expériences de piégeage d'atomes par laser, on choisit une combinaison entre intensité du laser et désaccord vis à vis de la résonance atomique $\omega - \omega_0$ de sorte que la population stationnaire de l'état excité soit très petite devant 1, l'atome occupant essentiellement son état fondamental. On peut alors poser $\rho_{gg} \approx 1$, $\rho_{ee} \approx 0$ dans (1.10), ce qui permet de trouver le régime stationnaire forcé

$$\rho_{eg}(t) = \frac{\Omega}{2} \left[\frac{e^{-i(\omega t - \varphi)}}{\omega - \omega_0 + iu/2} - \frac{e^{i(\omega t - \varphi)}}{\omega + \omega_0 - iu/2} \right], \quad (1.12)$$

la valeur pour ρ_{ge} s'en déduisant par conjugaison complexe. Dans toutes les applications que nous allons considérer dans la suite, le désaccord

$$\Delta = \omega - \omega_0 \quad (1.13)$$

est très grand (en valeur absolue) devant la largeur naturelle u (et *a fortiori* $\omega + \omega_0 \gg u$). On peut donc prendre à l'ordre le plus bas du calcul

$$\rho_{eg}(t) = \frac{\Omega}{2} \left[\frac{e^{-i(\omega t - \varphi)}}{\omega - \omega_0} - \frac{e^{i(\omega t - \varphi)}}{\omega + \omega_0} \right]. \quad (1.14)$$

On en déduit le dipôle atomique moyen en régime stationnaire

$$\mathbf{d}(t) = \text{Tr} \left[\hat{\mathbf{D}} \hat{\rho}(t) \right] = \epsilon d_0 \frac{\Omega}{\Delta} \cos(\omega t - \varphi) = -\frac{d_0^2}{\hbar\Delta} \mathcal{E}(\mathbf{r}, t), \quad (1.15)$$

où on a posé

$$\frac{1}{\bar{\Delta}} = \frac{1}{\omega - \omega_0} - \frac{1}{\omega + \omega_0}. \quad (1.16)$$

Selon le signe de $\bar{\Delta}$, lui-même donné par le signe du désaccord Δ , le dipôle est en phase (si $\Delta < 0$) ou en opposition de phase (si $\Delta > 0$) avec le champ électrique.

Il est alors simple de calculer la valeur moyenne \mathbf{f} de l'opérateur force $\hat{\mathbf{F}}$ défini en (1.4) :

$$\mathbf{f} = (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{d}) \boldsymbol{\nabla} [\mathcal{E} \cos(\omega t - \varphi)]. \quad (1.17)$$

En utilisant l'expression (1.15) pour le dipôle moyen, on voit immédiatement qu'il va apparaître deux types de termes : des termes indépendants du temps et des termes oscillant en $e^{\pm 2i\omega t}$. La pulsation ω étant très grande (fréquence optique), le micromouvement du centre de masse atomique induit par ces termes oscillants est négligeable et on peut se limiter aux termes indépendants du temps. On constate alors que le terme lié au gradient de la phase $\boldsymbol{\nabla}\varphi$ a une contribution nulle, et il ne reste que le terme en $\boldsymbol{\nabla}\mathcal{E}$, lié au gradient d'intensité de l'onde lumineuse.

On trouve ainsi l'expression de la force dipolaire f_{dip} , dérivant du potentiel V :

$$\mathbf{f}_{\text{dip}} = -\boldsymbol{\nabla}V \quad \text{avec} \quad V(\mathbf{r}) = \frac{\hbar\Omega^2(\mathbf{r})}{4\bar{\Delta}} = \frac{d_0^2\mathcal{E}^2(\mathbf{r})}{4\hbar\bar{\Delta}}. \quad (1.18)$$

L'interprétation physique de ce potentiel est très simple dans le point de vue adopté ici. Le faisceau lumineux éclairant l'atome induit un dipôle $\mathbf{d} = \alpha(\omega) \mathcal{E}$, où la polarisabilité $\alpha(\omega)$ se déduit de (1.15) :

$$\alpha(\omega) = -\frac{d_0^2}{\hbar\Delta}. \quad (1.19)$$

Le dipôle induit interagit alors avec le champ incident et l'énergie d'interaction correspondante s'écrit $-(1/2)\mathbf{d}\cdot\mathcal{E}$, dont la moyenne sur le temps redonne (1.18). Notons que notre traitement perturbait conduisant à la forme

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha(\omega)}{4}\mathcal{E}^2(\mathbf{r}) \quad (1.20)$$

pour le potentiel dipolaire se généralise sans difficulté au cas où plusieurs niveaux excités e_1, e_2, \dots ont une contribution non négligeable. La polarisabilité totale est obtenue en faisant la somme sur ces niveaux des différents termes en d_i^2 , $i = 1, 2, \dots$, avec les dénominateurs d'énergie en $\omega \pm \omega_i$.

Le point essentiel qui se lit sur (1.18) ou (1.20) est le suivant : la lumière crée sur les atomes un potentiel $V(\mathbf{r})$ proportionnel à l'intensité lumineuse locale $I(\mathbf{r}) \propto \mathcal{E}^2(\mathbf{r})$. Selon le signe du désaccord $\omega - \omega_0$, ce potentiel attire ($\omega < \omega_0$, désaccord rouge) ou repousse ($\omega > \omega_0$, désaccord bleu) les atomes des régions de haute intensité lumineuse. Dans le cas d'un réseau optique, qui nous intéressera lors des cours suivants, nous choisirons une variation périodique pour la fréquence de Rabi en prenant par exemple à une dimension

$$\Omega(x) = \Omega_0 \sin(kx). \quad (1.21)$$

Cette variation est obtenue en prenant une onde lumineuse stationnaire. Les atomes vont alors s'accumuler au voisinage de nœuds ($\Delta > 0$) ou des ventres ($\Delta < 0$) de l'onde.

Et la force de pression de radiation ? Nous ne voyons pas apparaître de force liée au gradient de la phase à l'ordre auquel nous avons fait notre calcul. Ainsi, si l'onde laser est une onde plane progressive, $\mathcal{E}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_0$, $\varphi(\mathbf{r}) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$, nous trouvons qu'il n'y a pas de force agissant sur l'atome alors qu'on s'attendrait à trouver une pression de radiation non nulle. Ceci est lié à l'approximation qui a fait passer de (1.12) à (1.14) et qui impose que

1. ne pas oublier le facteur 1/2 lié au fait que ce dipôle est induit !

le dipôle forcé est exactement en phase ou en opposition de phase avec le champ électrique. Dans ce cas, le terme lié au gradient de la phase dans l'expression (1.17) de la force moyenne

$$\text{Pression de radiation : } \mathbf{f}_{\text{p.r.}} = -(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{d}) \mathcal{E} \nabla \varphi \sin(\omega t - \varphi) \quad (1.22)$$

à une moyenne temporelle nulle. Pour trouver une valeur moyenne non nulle pour ce terme, il faut (au minimum) pousser le calcul un cran plus loin à l'ordre u/Δ et prendre dans (1.12) :

$$\frac{1}{\omega - \omega_0 + iu/2} \approx \frac{1}{\omega - \omega_0} - i\frac{u/2}{(\omega - \omega_0)^2}. \quad (1.23)$$

Le dipôle moyen acquiert alors une partie en quadrature $[\sin(\omega t - \varphi)]$ avec le champ incident, qui conduit à une moyenne temporelle non nulle de (1.22). En pratique, nous n'aurons pas besoin de regarder ces termes correctifs dans ce cours.

1-4 Approximation du champ tournant.

On notera que notre traitement ne nécessite pas l'approximation du champ tournant (RWA). Cette approximation requiert l'hypothèse supplémentaire (Cohen-Tannoudji et al. 1992)

$$\text{approximation du champ tournant : } |\Delta| \ll \omega_0, \quad \bar{\Delta} \approx \Delta. \quad (1.24)$$

Le gros intérêt de cette approximation est de permettre des calculs analytiques avec les équations de Bloch même si l'excitation laser est non perturbative, c'est-à-dire même si on ne peut pas faire l'approximation $\rho_{gg} \approx 1$, $\rho_{ee} \approx 0$ dans (1.10). Elle permet de simplifier les calculs dès le départ en remplaçant le couplage dipolaire électrique par

$$\hat{V}_{\text{d.e.}}^{\text{rwa}} = \frac{\hbar\Omega}{2} \left[\hat{\sigma}_+ e^{-i(\omega t - \varphi)} + \hat{\sigma}_- e^{+i(\omega t - \varphi)} \right]. \quad (1.25)$$

Toutefois cette approximation peut être « marginale » dans certaines expériences de piégeage d'atomes froids. Par exemple, si on manipule des atomes de rubidium, $\lambda_0 = 780 \text{ nm}$, par un laser à $\lambda = 1064 \text{ nm}$, le terme non résonnant augmente le potentiel dipolaire de 15%. Au contraire, pour un laser désaccordé sur le bleu de la résonance à la valeur typique de $\lambda = 532 \text{ nm}$, le terme non résonnant réduit le potentiel RWA de 19%.

2 Le point de vue de l'atome habillé

Le point de vue de l'atome habillé est une alternative très commode au calcul du potentiel dipolaire par les équations de Bloch optiques que nous venons de voir (Dalibard & Cohen-Tannoudji 1985). Il est particulièrement simple dans le cas où l'approximation du champ tournant est valable. Ce point de vue consiste à étudier les niveaux d'énergie du système *atome + mode du laser*. On part d'une base de ce système en absence de couplage $\{|g, N\rangle, |e, N\rangle, N \in \mathbb{N}\}$, où N représente le nombre de photons dans le mode du laser. On constate immédiatement que si $|\Delta| \ll \omega_0$, ces niveaux se regroupent par multiplicités de dimension 2 (cf. figure 1.2) :

$$|g, N\rangle : \text{énergie } N\hbar\omega, \quad |e, N-1\rangle : \text{énergie } (N-1)\hbar\omega + \hbar\omega_0, \quad (1.26)$$

l'écart entre ces deux niveaux étant $\hbar|\Delta|$. A l'approximation RWA, l'interaction atome-laser (1.25) s'écrit dans ce point de vue

$$\hat{V}_{\text{d.e.}}^{\text{rwa}} = \frac{\hbar\Omega_1(\mathbf{r})}{2} [\hat{\sigma}_+ \hat{a} + \hat{\sigma}_- \hat{a}^\dagger] \quad (1.27)$$

où \hat{a} et \hat{a}^\dagger détruisent et créent un photon dans le mode du laser, dont le profil est décrit par $\Omega_1(\mathbf{r})$. Cette quantité Ω_1 peut être comprise comme la pulsation de Rabi au point \mathbf{r} quand un seul photon est présent dans le mode considéré pour exciter l'atome.

L'interaction (1.27) ne couple que les deux niveaux d'une même multiplicité de l'atome habillé :

$$\langle e, N-1 | \hat{V}_{\text{d.e.}}^{\text{rwa}} | g, N \rangle = \frac{\hbar\Omega_1(\mathbf{r})}{2} \sqrt{N}. \quad (1.28)$$

À ce stade, la valeur de Ω_1 et le nombre de photons N sont indéterminés. Quand on est en présence d'un problème d'électrodynamique en cavité, la valeur de Ω_1 est imposée par le volume de la cavité elle-même. Pour un atome dans l'espace libre, seule importe la valeur du produit $\Omega_1 \sqrt{N}$ qu'on prend égal à la fréquence de Rabi Ω . Pour simplifier les notations, nous allons supposer que la phase $\varphi(\mathbf{r})$ du laser est nulle. Cette phase n'intervient de toute façon pas dans l'expression de l'énergie des états habillés [voir par exemple (1.34)] et nous la réinsérerons de manière naturelle dans l'expression des états habillés (1.38).

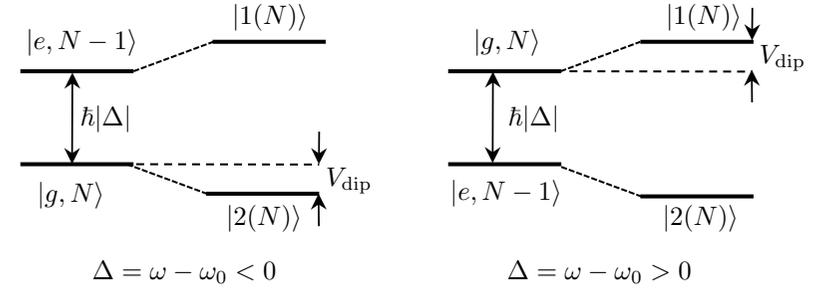


FIGURE 1.2. Niveaux de l'atome habillé, en absence et en présence de couplage entre l'atome et le champ électromagnétique, et pour les deux signes possibles du désaccord Δ . Le potentiel dipolaire V_{dip} s'interprète comme le déplacement lumineux du niveau fondamental $|g\rangle$. Ce déplacement se fait vers le bas ou vers le haut, selon que le désaccord Δ est négatif ou positif.

Il est alors très simple de trouver les énergies propres pour un atome localisé au point \mathbf{r} . L'hamiltonien pour la multiplicité $\{|g, N\rangle, |e, N-1\rangle\}$ s'écrit

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Delta & \Omega \\ \Omega & -\Delta \end{pmatrix} + \epsilon_N \quad (1.29)$$

où on a posé

$$\epsilon_N = (N - \frac{1}{2})\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega_0. \quad (1.30)$$

Il est utile d'introduire l'angle de mélange θ défini par

$$\cos[2\theta(\mathbf{r})] = \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2(\mathbf{r})}}, \quad \sin[2\theta(\mathbf{r})] = \frac{\Omega(\mathbf{r})}{\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2(\mathbf{r})}}, \quad (1.31)$$

pour écrire l'hamiltonien sous la forme :

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2} \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix} + \epsilon_N. \quad (1.32)$$

Les vecteurs propres s'écrivent

$$\begin{aligned} |1(N)\rangle &= \cos \theta |g, N\rangle + \sin \theta |e, N-1\rangle \\ |2(N)\rangle &= \sin \theta |g, N\rangle - \cos \theta |e, N-1\rangle \end{aligned} \quad (1.33)$$

et les énergies associées sont

$$E_{N,\pm} = \epsilon_N \pm \frac{\hbar}{2} \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}, \quad (1.34)$$

avec le signe + pour $|1(N)\rangle$ et – pour $|2(N)\rangle$.

Dans la limite perturbative qui nous intéresse ici, $|\Omega| \ll |\Delta|$, et on obtient l'expression approchée des niveaux d'énergie qui se « repoussent » sous l'effet du couplage

$$N\hbar\omega + \frac{\hbar\Omega^2}{4\Delta}, \quad (N-1)\hbar\omega + \hbar\omega_0 - \frac{\hbar\Omega^2}{4\Delta}. \quad (1.35)$$

La première valeur est le niveau issu de $|g, N\rangle$, qui est le niveau peuplé qui nous intéresse ici. La seconde correspond au niveau issu de $|e, N-1\rangle$ dont la population est négligeable. Le potentiel dipolaire $\hbar\Omega^2/4\Delta$ [cf. (1.18)] s'interprète donc très simplement comme un déplacement de l'énergie de l'état $|g, n\rangle$ sous l'effet du couplage avec le laser. Ce déplacement peut se faire vers le bas ou vers le haut, selon que le niveau « repoussant » $|e, N-1\rangle$ est au dessus ou au dessous de $|g, N\rangle$ (cf. figure 1.2).

Pour $\Delta > 0$, l'angle 2θ défini en (1.31) peut être choisi proche de 0, et l'état propre connecté à g s'écrit

$$\Delta > 0 : \quad \overline{|g, N\rangle} = |1(N)\rangle \approx |g, N\rangle + \frac{\Omega}{2\Delta} |e, N-1\rangle \quad (1.36)$$

Pour $\Delta < 0$, l'angle 2θ peut être choisi voisin de π , de sorte que

$$\Delta < 0 : \quad \overline{|g, N\rangle} = |2(N)\rangle \approx |g, N\rangle - \frac{\Omega}{2|\Delta|} |e, N-1\rangle. \quad (1.37)$$

On peut donc poser dans les deux cas, en remettant la dépendance explicite en position et en réinsérant l'éventuelle phase $\varphi(\mathbf{r})$ du laser [cf. (1.25)]

$$\overline{|g, N\rangle}(\mathbf{r}) \approx |g, N\rangle + \frac{\Omega(\mathbf{r})}{2\Delta} e^{i\varphi(\mathbf{r})} |e, N-1\rangle. \quad (1.38)$$

L'expression (1.38) est très commode car elle permet de calculer les valeurs stationnaires des éléments de matrice de l'opérateur densité à l'ordre deux en Ω . En effet à cet ordre, on peut montrer que la population stationnaire de l'autre état habillé de (1.33) est nulle (elle est au moins d'ordre 4

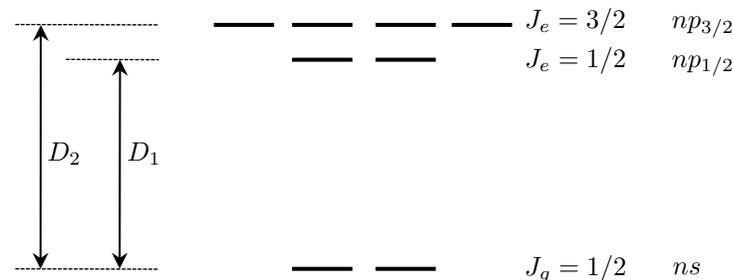


FIGURE 1.3. Modélisation de la transition de résonance d'un atome alcalin. On a négligé l'effet de l'interaction hyperfine avec le spin nucléaire, et la dégénérescence liée à ce spin.

en Ω/Δ , voir par exemple Dalibard & Cohen-Tannoudji (1985)). On peut donc déduire de (1.38) l'élément de matrice ρ_{eg} déjà donné en (1.14)

$$\rho_{eg} = \langle e, N-1 | \left(\overline{|g, N\rangle} \overline{\langle g, N|} \right) |g, N\rangle = \frac{\Omega e^{i\varphi}}{2\Delta}, \quad (1.39)$$

la différence avec (1.14) étant qu'on a fait ici l'approximation RWA et que l'évolution temporelle explicite en $e^{-i\omega t}$ de (1.14) est ici implicitement contenue dans la différence entre les nombres de photons à gauche et à droite. On déduit également de (1.38) la population Π_e de l'état excité à cet ordre du calcul

$$\Pi_e = \langle e, N-1 | \left(\overline{|g, N\rangle} \overline{\langle g, N|} \right) |e, N-1\rangle = \frac{\Omega^2}{4\Delta^2}, \quad (1.40)$$

expression très utile pour estimer le taux d'émission spontanée $\gamma = u\Pi_e$.

3 Le cas des atomes alcalins

Le modèle d'une transition $J_g = 0 \leftrightarrow J_e = 1$ s'applique bien aux atomes alcalino-terreux (au moins si leur spin nucléaire est nul), mais il ne peut pas être utilisé tel quel pour les atomes alcalins. Compte tenu de l'importance pratique de ces derniers, nous allons donner quelques indications sur la manière dont les résultats précédents sont transformés. Pour simplifier les notations, nous nous plaçons ici dans l'approximation du champ tournant.

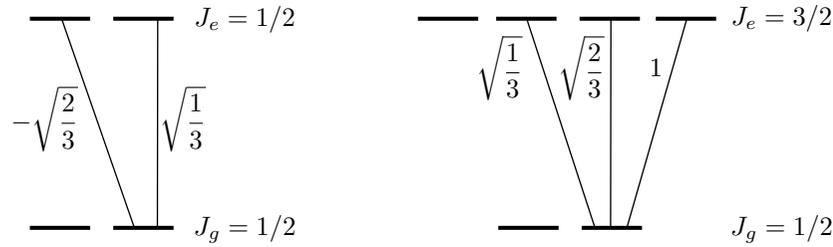


FIGURE 1.4. Amplitude des couplages pour les deux transitions D_1 et D_2 de la raie de résonance d'un atome alcalin, à partir du niveau fondamental $m_z = +1/2$. Le spin du noyau est supposé nul. Les amplitudes des couplages à partir du niveau fondamental $m_z = -1/2$ prennent des valeurs symétriques par rapport à celles indiquées ici.

Nous envisagerons pour commencer le cas d'un atome alcalin simplifié pour lequel le spin nucléaire serait nul (figure 1.3). L'état fondamental, un état ns , est alors doublement dégénéré du fait du spin de l'électron de valence et son moment cinétique vaut $J_g = 1/2$. La transition de résonance se fait vers l'état np qui, du fait de l'interaction de structure fine, est clivé en deux sous-niveaux de moment cinétique $1/2$ et $3/2$ notés $np_{1/2}$ et $np_{3/2}$. Les deux résonances $ns \leftrightarrow np_{1/2}$ et $ns \leftrightarrow np_{3/2}$ correspondent aux raies D_1 et D_2 , de pulsation ω_1 et ω_2 .

3-1 Lumière de polarisation linéaire

Si le faisceau lumineux est polarisé linéairement, la symétrie du problème entraîne que le déplacement lumineux des deux sous-niveaux $|g, m_z = \pm 1/2\rangle$ sont identiques². Dans ce cas, l'opérateur déplacement lumineux est proportionnel à l'identité dans le sous-espace $|g, m = \pm 1/2\rangle$. En utilisant l'algèbre des moments cinétiques et les coefficients de Clebsch-Gordan indiqués sur la figure 1.4, on montre que ce déplacement lumineux vaut

$$\hat{V} = \frac{\hbar\Omega^2}{4\Delta} \hat{1} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{\Delta} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{\Delta_1} + \frac{2}{\Delta_2} \right), \quad (1.41)$$

2. On a intérêt à choisir comme précédemment l'axe de quantification selon la direction de cette polarisation pour s'en convaincre.

où $\Delta_1 = \omega - \omega_1$ et $\Delta_2 = \omega - \omega_2$ sont les désaccords du laser par rapport aux transitions de résonance D_1 et D_2 . Il suffit donc de prendre une moyenne pondérée des deux désaccords pour retrouver le résultat de la transition $0 \leftrightarrow 1$. Ce résultat reste valable quand on prend en compte la structure hyperfine de l'atome, pourvu que les désaccords Δ_1 et Δ_2 soient grands devant la structure hyperfine des niveaux excités $np_{1/2}$ et $np_{3/2}$, ce qui sera toujours le cas en pratique dans la suite de ce cours.

Quand $\Delta_{1,2}$ est grand devant l'écart de structure fine $\omega_2 - \omega_1$, alors $\Delta_1 \approx \Delta_2$ et l'effet de la structure fine ne se fait pas sentir. En revanche, quand le désaccord est comparable à l'écart de structure fine, le résultat est notablement modifié. En particulier, on voit qu'il existe une valeur particulière de Δ , telle que $\Delta_2 = -2\Delta_1$ pour laquelle \hat{V} s'annule. Pour l'atome de rubidium, les longueurs d'onde des raies D_1 et D_2 sont $\lambda_1 = 795$ nm et $\lambda_2 = 780$ nm ; ce désaccord particulier est donc obtenu en choisissant un laser de longueur d'onde $\lambda = 790$ nm. Pour cette valeur de λ , le potentiel dipolaire ressenti par les atomes est nul ; les atomes continuent à « voir » le faisceau lumineux et à diffuser des photons (ce n'est pas un état noir), mais ils ne ressentent pas de force dipolaire.

3-2 Lumière de polarisation quelconque

La situation se complique si la polarisation du laser n'est pas choisie linéaire, mais elliptique ou circulaire. Dans ce cas, l'opérateur déplacement lumineux n'est plus proportionnel à l'identité dans le sous-espace $|g, m = \pm 1/2\rangle$, ce qui permet de générer des potentiels dépendant du spin S associé à ce niveau. Ecrivons le champ laser sous la forme

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon} \mathcal{E}(\mathbf{r}) e^{i(\omega t - \varphi)} + \text{c.c.} \quad (1.42)$$

où le vecteur polarisation $\boldsymbol{\epsilon}$ est désormais complexe. Introduisons le « vecteur fréquence de Rabi » $\boldsymbol{\Omega}$ dont les trois composantes complexes Ω_α , $\alpha = x, y, z$ caractérisent le couplage atome-laser

$$\hbar\Omega_\alpha = -d_0 \mathcal{E}(\mathbf{r}) (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{u}_\alpha) \quad (1.43)$$

dans la base cartésienne \mathbf{u}_α . On peut aussi introduire les coordonnées du vecteur $\boldsymbol{\Omega}$ dans la base standard

$$\Omega_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mp\Omega_x + i\Omega_y), \quad \Omega_0 = \Omega_z. \quad (1.44)$$

À partir ce vecteur $\boldsymbol{\Omega}$, on peut assez facilement mettre l'opérateur déplacement lumineux sous la forme

$$\hat{V} = \frac{\hbar|\boldsymbol{\Omega}|^2}{4\Delta} \hat{1} + \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \quad (1.45)$$

où le champ magnétique effectif vaut

$$\mathbf{B} = \frac{i}{6} \left(\frac{1}{\Delta_2} - \frac{1}{\Delta_1} \right) \boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{\Omega}^*. \quad (1.46)$$

L'origine de ce résultat est claire ; prenons par exemple une polarisation lumineuse circulaire σ_- proche de la transition D_1 (on oublie alors la transition D_2). On voit immédiatement sur la figure 1.4 (gauche) que le niveau fondamental $|g, m_z = -1/2\rangle$ n'est pas couplé à la lumière, alors que le niveau $|g, m_z = +1/2\rangle$ l'est avec un coefficient de Clebsch–Gordan égal à $-\sqrt{2/3}$. Le différentiel de déplacement lumineux entre ces deux niveaux est décrit par ce champ magnétique effectif \mathbf{B} . Plus précisément, la combinaison du terme scalaire et du terme vectoriel de (1.45) rend compte du fait que $|g, m_z = -1/2\rangle$ ne ressent aucun potentiel alors que $|g, m_z = +1/2\rangle$ est déplacé deux fois plus que si la lumière avait une polarisation linéaire de même intensité.

On voit que la partie vectorielle du déplacement lumineux (Cohen-Tannoudji & Dupont-Roc 1972; Deutsch & Jessen 1998) proportionnelle à \mathbf{B} , est comparable, voire plus grande que la partie scalaire si le désaccord est choisi du même ordre que la structure fine. En particulier, cette partie vectorielle n'est pas nulle si on choisit le désaccord $\Delta_2 = -2\Delta_1$ annulant la partie scalaire. En revanche, cette partie vectorielle décroît comme $1/\Delta^2$ si on choisit un désaccord grand devant la structure fine. Elle devient donc rapidement négligeable devant la partie scalaire, qui ne décroît que comme $1/\Delta$. Ce dernier point est logique : si le désaccord est très grand devant la structure fine, cette dernière est négligeable pendant le temps caractéristique Δ^{-1} associée à l'interaction atome-lumière. Si on peut négliger la

structure fine, on se ramène à la transition $J_g = 0 \leftrightarrow J_e = 1$ étudiée en première partie, puisque le spin de l'électron est « spectateur » dans l'hamiltonien de couplage entre l'atome et la lumière. La dégénérescence entre les deux sous-niveaux de spin $\pm 1/2$ ne peut donc pas être levée en absence de structure fine.

Examinons deux cas particulier de l'expression générale (1.46) :

- Pour une polarisation linéaire, par exemple $\boldsymbol{\Omega} = \Omega \mathbf{u}_z$, alors le produit vectoriel $\mathbf{u}_z \times \mathbf{u}_z$ est nul, ainsi que le champ magnétique effectif. Nous avons déjà mentionné ce résultat plus haut.
- Pour une polarisation circulaire, par exemple un faisceau lumineux se propageant le long de l'axe Oz tel que $\boldsymbol{\Omega} = \Omega(\mathbf{u}_x + i\mathbf{u}_y)/\sqrt{2}$, alors le produit vectoriel $(\mathbf{u}_x + i\mathbf{u}_y) \times (\mathbf{u}_x - i\mathbf{u}_y) = -2i\mathbf{u}_z$ et le champ magnétique effectif est aligné selon Oz :

$$\mathbf{B} = \frac{|\Omega|^2}{6} \left(\frac{1}{\Delta_2} - \frac{1}{\Delta_1} \right) \mathbf{u}_z. \quad (1.47)$$

Notons qu'à la différence d'un champ magnétique usuel, appliqué de l'extérieur avec des bobines, ce champ magnétique fictif peut avoir des variations spatiales sur des échelles de l'ordre de la longueur d'onde optique : c'est par exemple le cas quand on forme une onde stationnaire en superposant deux ondes de même fréquence, de directions opposées et de polarisations linéaires non parallèles.

Il reste à prendre en compte la structure hyperfine du niveau fondamental. Si le noyau a un spin I , ce niveau est clivé en deux sous-niveaux de moment cinétique $F = I \pm 1/2$. Le théorème de Wigner-Eckart indique que l'opérateur déplacement lumineux s'écrit dans ce cas

$$\hat{V} = \frac{\hbar|\boldsymbol{\Omega}|^2}{4\Delta} \hat{1} + \mathbf{B}' \cdot \hat{\mathbf{F}}, \quad (1.48)$$

avec pour le niveau $F = I \pm 1/2$:

$$\mathbf{B}' = \pm \frac{\mathbf{B}}{2I + 1}. \quad (1.49)$$

Les champs magnétiques effectifs sont donc opposés pour les deux niveaux hyperfins. Les conclusions énoncées précédemment sur les valeurs relatives des composantes scalaires et vectorielles de cet opérateur déplacement lumineux sont inchangées.

4 Approche quantique

L'approche semi-classique nous a fourni la valeur du potentiel dipolaire, mais il faut valider ce résultat par une approche qui traite quantiquement le mouvement de l'atome. La plus grande classe d'applications des réseaux optiques porte en effet sur des aspects directement liés à la nature quantique de ce mouvement : bandes d'énergie, états minimaux, phases géométriques... Fort heureusement, la structure du traitement semi-classique qui nous a permis de calculer le potentiel dipolaire peut être transposée presque mot à mot ; nous n'aurons que peu d'éléments à ajouter pour obtenir l'hamiltonien complètement quantique décrivant le mouvement du centre de masse. Pour minimiser les aspects techniques de cette étude, nous allons nous restreindre au cas d'un atome à deux niveaux, comme considéré en § 1-1. Le cas d'un atome multi-niveaux est traité en détail par Gerbier & Castin (2010).

4-1 Variables lentes et variables rapides

Le problème auquel nous sommes confrontés est celui de l'élimination de variables rapides au profit de variables lentes. Les variables rapides sont celles qui concernent la dynamique interne de l'atome, les variables lentes sont liées au mouvement du centre de masse. L'évolution de l'ensemble de ces variables est décrite par l'hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}_{\text{d.e.}} + \hbar\omega_0|e\rangle\langle e|, \quad (1.50)$$

où le couplage atome-lumière à l'approximation dipolaire électrique a été donné en (1.2). À l'évolution réversible décrite par cet hamiltonien, il faut ajouter l'évolution irréversible due aux processus d'émission spontanée. Cette évolution a été donnée en (1.7) pour les éléments de matrice de l'opérateur densité entre $|g\rangle$ et $|e\rangle$. Nous n'aurons pas besoin ici de l'expression explicite des termes décrivant l'évolution de $\hat{\rho}_{ee}$ et $\hat{\rho}_{gg}$; ils sont donnés dans Gerbier & Castin (2010).

Considérons l'évolution de l'opérateur densité total $\hat{\rho}$ de l'atome, qui porte à la fois sur les degrés de liberté internes et externes. Intéressons-nous pour commencer à l'évolution de $\hat{\rho}_{eg} = \langle e|\hat{\rho}|g\rangle$ qui est un opérateur

vis-à-vis des variables externes seulement. Cette évolution se déduit de celle écrite en point de vue semi classique (1.10) :

$$\frac{d\hat{\rho}_{eg}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{\rho}_{eg} \right] - (i\omega_0 + \frac{u}{2})\hat{\rho}_{eg} - i\Omega \cos(\omega t - \varphi) (\hat{\rho}_{gg} - \hat{\rho}_{ee}). \quad (1.51)$$

Nous allons procéder à deux approximations à ce stade, similaires à ce qui a été fait dans le cas semi-classique. D'une part nous allons négliger la fraction d'atomes dans l'état excité, et donc omettre le terme $\hat{\rho}_{ee}$ dans l'équation qui précède. D'autre part nous allons supposer que l'évolution de $\hat{\rho}_{eg}$ due aux variables internes, avec les fréquences caractéristiques Δ et u , est beaucoup plus rapide que celle due aux variables externes, provenant par exemple de l'hamiltonien d'énergie cinétique $\hat{p}^2/2m$. Dans ces conditions, on peut (i) omettre le premier commutateur du membre de droite de (1.51), (ii) négliger la variation de $\hat{\rho}_{gg}$ sur une durée $\sim u^{-1}$, (iii) intégrer formellement (1.51) dans la limite $|\Delta| \gg u$ pour obtenir finalement, de manière très similaire à (1.14) :

$$\hat{\rho}_{eg}(t) = \frac{\Omega}{2} \left[\frac{e^{-i(\omega t - \varphi)}}{\omega - \omega_0} - \frac{e^{i(\omega t - \varphi)}}{\omega + \omega_0} \right] \hat{\rho}_{gg}(t). \quad (1.52)$$

Ce résultat signifie que les opérateurs densité correspondant aux « cohérences optiques » ρ_{eg} et ρ_{ge} suivent adiabatiquement l'évolution beaucoup plus lente de l'opérateur densité restreint au niveau fondamental $|g\rangle$.

4-2 Hamiltonien effectif pour le centre de masse atomique

On reporte ensuite le résultat (1.52) dans l'équation d'évolution de $\hat{\rho}_{gg}$ pour obtenir :

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}_{gg}}{dt} &= \left. \frac{d\hat{\rho}_{gg}}{dt} \right|_{\text{sp.}} + \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{\rho}_{gg} \right] \pm i\Omega \cos(\omega t - \varphi) (\hat{\rho}_{eg} - \hat{\rho}_{ge}), \\ &\approx \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}), \hat{\rho}_{gg} \right]. \end{aligned} \quad (1.53)$$

Notons qu'on s'est limité ici à l'ordre le plus bas non nul en $1/\Delta$ et qu'on a lissé les termes en $e^{\pm 2i\omega t}$, comme on l'avait fait dans le cadre de l'approximation semi-classique. Notons également que le terme décrivant l'évolution par émission spontanée de ρ_{gg} est $\propto u\rho_{ee}$; il ne contribue pas à cet

ordre du calcul et n'aura une influence qu'à un ordre supérieur en u/Δ [voir par exemple Gerbier & Castin (2010)].

Le résultat (1.53) correspond exactement à ce qu'on recherchait. Cette équation d'évolution purement hamiltonienne décrit le mouvement d'une particule de masse m , sans structure interne, dans le potentiel dipolaire $V(\mathbf{r})$ donné en (1.18). C'est cet hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.54)$$

qui va servir de point de départ à la suite du cours, en ajoutant éventuellement les modifications liées au spins électronique et nucléaire étudiées en § 3.

5 Réseau rouge ou réseau bleu ?

5-1 Le « paradoxe » de Gordon & Ashkin (1980)

Dans toute la suite de ce cours, nous utiliserons les pièges lumineux, en particulier les réseaux optiques périodiques, dans un régime où les phénomènes d'émission spontanée sont négligeables. L'émission spontanée apparaît en effet comme une nuisance³ : son caractère aléatoire constitue un chauffage des atomes, qu'il s'agit de réduire au maximum. Ce régime non dissipatif est obtenu en rendant la population de l'état excité trouvée en (1.40) :

$$\Pi_e = \frac{\Omega^2}{4\Delta^2} \quad (1.55)$$

la plus petite possible, pour une valeur donnée du potentiel optique

$$V = \frac{\hbar\Omega^2}{4\Delta}. \quad (1.56)$$

Ceci conduit à choisir des désaccords et des intensités les plus grand possibles : en gardant Ω^2/Δ constant, la quantité $\Omega^2/\Delta^2 \rightarrow 0$ si Ω, Δ deviennent très grands.

3. La situation est très différente pour l'utilisation initiale des réseaux optiques, où on cherchait les moyens optimaux pour refroidir une assemblée d'atomes.

Considérons plus précisément un réseau optique généré par une onde stationnaire à une dimension, $\Omega(x) = \Omega_0 \sin(kx)$ conduisant au potentiel

$$V(x) = V_0 \sin^2 kx, \quad V_0 = \frac{\hbar\Omega_0^2}{4\Delta} \quad (1.57)$$

Un paramètre disponible pour minimiser l'effet de l'émission spontanée est le choix du signe du désaccord, pour une profondeur de réseau V_0 donnée. Pour un désaccord $\Delta > 0$ (bleu), les atomes sont piégés au voisinage des noeuds de l'onde stationnaire composant le réseau. Au contraire, pour $\Delta < 0$ (rouge), le potentiel est minimal aux ventres de l'onde stationnaire. On pourrait naïvement penser que, concernant les phénomènes d'émission spontanée, la situation est plus favorable pour un désaccord bleu que pour un désaccord rouge, car l'intensité est plus faible à l'endroit où se trouvent les atomes.

Ce raisonnement naïf a été invalidé par Gordon & Ashkin (1980), qui ont calculé le coefficient de diffusion en impulsion pour un atome dans une onde stationnaire. Ils ont montré que à V_0 donné, ce coefficient de diffusion est le même en tout point de l'onde stationnaire et ne dépend pas du signe de Δ . Toutefois, ils n'ont pas interprété physiquement ce résultat qui est donc resté quelque peu « mystérieux ». Il a été analysé par Cohen-Tannoudji (1992), puis repris récemment dans un cadre plus général par Gerbier & Castin (2010). La transposition de ce problème au cas d'atomes en cavité a été étudiée par Murr et al. (2006).

Dans le complément donné à la fin de ce chapitre, nous résumons l'argument initial de Gordon & Ashkin (1980) et sa transposition dans le formalisme développé dans le paragraphe 4, en reprenant notamment la démarche de Gerbier & Castin (2010). Dans ce qui suit, nous allons expliquer le résultat *a priori* surprenant de Gordon & Ashkin (1980) en utilisant le formalisme de l'atome habillé, que nous avons présenté précédemment.

5-2 Transitions Raman dans un réseau très profond

Pour expliquer le résultat paradoxal de Gordon & Ashkin (1980), nous allons considérer un réseau de grande profondeur V_0 de sorte que le mouvement d'un atome est confiné au fond d'un puits de potentiel ; l'effet tunnel vers les puits adjacents est supposé négligeable.

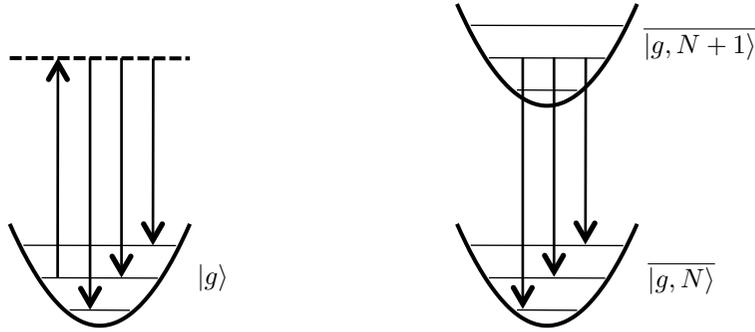


FIGURE 1.5. Gauche : transition Raman pouvant causer un changement de l'état de vibration n de l'atome. Droite : ces mêmes transitions dans le point de vue de l'atome habillé correspondent à une « cascade » radiative.

Dans le cas d'un réseau désaccordé sur le bleu, nous prenons comme en (1.57) un réseau 1D avec une fréquence de Rabi $\Omega(x) = \Omega_0 \sin(kx)$ et nous faisons l'hypothèse que l'extension du mouvement spatial de l'atome est petite devant $k^{-1} = \lambda/(2\pi)$ de sorte qu'on peut faire l'approximation $\sin(kx) \approx kx$. Le mouvement de l'atome est alors un mouvement de vibration harmonique dans le potentiel

$$V(x) \approx \frac{\hbar\Omega_0^2 k^2}{4\Delta} x^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad \text{avec} \quad \omega = \sqrt{\frac{\hbar\Omega_0^2 k^2}{2m\Delta}}. \quad (1.58)$$

Les états propres du mouvement dans ce potentiel sont les fonctions de Hermite $H_n(x/a_{\text{oh}})$, où la taille caractéristique de l'état fondamental est

$$a_{\text{oh}} = \sqrt{\hbar/m\omega}, \quad (1.59)$$

les énergies correspondantes étant $(n + 1/2)\hbar\omega$.

Dans le cas d'un réseau désaccordé sur le rouge, nous prendrons $\Omega = \Omega_0 \cos(kx)$ pour conserver un puits centré en $x = 0$. Les expressions pour la pulsation ω au fond du puits, la taille de l'état fondamental a_{oh} et le spectre en énergie $(n + 1/2)\hbar\omega$ sont inchangées (au changement $\Delta \rightarrow -\Delta$ près).

Les phénomènes d'émission spontanée vont causer des transitions entre les niveaux d'énergie de ce puits en induisant des transitions Raman

(figure 1.5) : l'atome, initialement dans l'état fondamental électronique g et un état de vibration n pour son centre de masse, peut passer dans un état électronique excité e en absorbant un photon du faisceau laser créant l'onde stationnaire, puis retomber dans l'état fondamental électronique en émettant un photon de fluorescence. Lors de cette retombée, l'atome peut atteindre un autre état de vibration n' : La diffusion Raman crée donc une marche au hasard de l'état du centre de masse, ce qui correspond à un chauffage.

Le formalisme de l'atome habillé est très commode pour visualiser cette marche au hasard. La transition Raman que nous venons de décrire correspond à une transition de la multiplicité $\{|g, N + 1\rangle, |e, N\rangle\}$ vers la multiplicité immédiatement inférieure $\{|g, N\rangle, |e, N - 1\rangle\}$ (figure 1.5). Plus précisément, à l'ordre le plus bas non nul en Ω , c'est la transition

$$\overline{|g, N + 1\rangle} \longrightarrow \overline{|g, N\rangle} \quad (1.60)$$

qui a une contribution significative. L'état $\overline{|g, N + 1\rangle}$ a un recouvrement non nul (faible) avec $|e, N\rangle$ et il est donc instable du point de vue de l'émission spontanée. En se désexcitant, il émet un photon (le photon Raman dans l'image ci-dessus) et il peut tomber dans l'état $\overline{|g, N\rangle}$, qui a lui-même un recouvrement non nul (fort) avec $|g, N\rangle$.

5-3 Les taux de transition $n \rightarrow n'$

Nous allons maintenant évaluer les taux de transitions $n \rightarrow n'$ en utilisant la règle d'or de Fermi (ROF). Le couplage \hat{W} entre l'atome et les modes vides du rayonnement responsable de l'émission spontanée s'écrit

$$\hat{V}_{\text{vac}} = \sum_{k'} \mathcal{V}_{k'} e^{ik'x} \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{\sigma}_- + \text{h.c.} \quad (1.61)$$

où $\hat{a}_{k'}^\dagger$ crée un photon de vecteur d'onde k' le long de l'axe x . La largeur naturelle de l'état atomique excité $|e\rangle$ vaut dans ce modèle

$$\text{u} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle g; k' | \hat{V}_{\text{vac}} | e; \text{vac} \rangle \right|^2 \rho(\hbar ck' = \hbar\omega_A), \quad (1.62)$$

où $\rho(E)$ représente la densité d'états pour une énergie finale $\hbar c |k'|$ égale à l'énergie initiale d'un atome excité $\hbar\omega_A$ (soit $k' = \pm\omega_A/c$).

L'état initial correspond au vide de rayonnement et à l'atome dans l'état $|\Psi_n^{(N+1)}\rangle$, correspondant au niveau vibrationnel n et l'état interne habillé $|g, N+1\rangle$:

$$\langle x | \Psi_n^{(N+1)} \rangle = H_n(x) \{ \cos[\theta(x)] |g, N+1\rangle + \sin[\theta(x)] |e, N\rangle \}. \quad (1.63)$$

L'état final correspond à un photon k' émis et à l'état atomique $|\Psi_{n'}^{(N)}\rangle$. Le taux recherché $\gamma_{n \rightarrow n'}$ s'écrit alors en utilisant la ROF

$$\begin{aligned} \gamma_{n \rightarrow n'}(k') &\propto |\langle \Psi_{n'}^{(N)} ; k' | e^{ik'x} \hat{a}_k^\dagger \hat{\sigma}_- | \Psi_n^{(N+1)} ; \text{vac} \rangle|^2 \\ &\propto |\langle \Psi_{n'}^{(N)} | e^{ik'x} \hat{\sigma}_- | \Psi_n^{(N+1)} \rangle|^2 \end{aligned} \quad (1.64)$$

En reportant l'expression (1.63) dans l'élément de matrice à calculer, on arrive à

$$\begin{aligned} \gamma_{n \rightarrow n'}(k') &\propto \left| \int H_{n'}(x) H_n(x) e^{ik'x} \sin[\theta(x)] \cos[\theta(x)] dx \right|^2 \\ &\propto \left| \frac{1}{2\Delta} \int H_{n'}(x) H_n(x) e^{ik'x} \Omega(x) dx \right|^2, \end{aligned} \quad (1.65)$$

où on a utilisé l'approximation $\sin(2\theta) \approx \Omega/\Delta$ [cf. (1.31)]. Munis de ce résultat, nous sommes désormais en mesure de comparer ce qui se passe quand l'atome est confiné au voisinage d'un nœud (réseau bleu) ou d'un ventre (réseau rouge) de l'onde stationnaire.

Réseau bleu. Nous avons déjà indiqué que nous nous limitons ici au cas où l'extension spatiale de la distribution de probabilité de l'atome est petite devant $1/k$. On peut donc faire dans l'intégrale (1.65) l'approximation $\Omega(x) \approx \Omega_0 kx$, $e^{ik'x} \approx 1$, et cette intégrale se ramène simplement à

$$\gamma_{n \rightarrow n'} \propto \frac{\Omega_0^2}{4\Delta^2} |\langle H_{n'} | k\hat{x} | H_n \rangle|^2, \quad (1.66)$$

soit, en rétablissant les coefficients de proportionnalité omis jusqu'ici :

$$\gamma_{n \rightarrow n'} = \frac{\gamma_0}{2} (ka_{\text{oh}})^2 [(n+1) \delta_{n',n+1} + n \delta_{n',n-1}], \quad (1.67)$$

où on a introduit le taux de diffusion γ_0 « typique » pour une fréquence de Rabi Ω_0 :

$$\gamma_0 = u \frac{\Omega_0^2}{4\Delta^2}. \quad (1.68)$$

L'expression (1.67) appelle deux remarques importantes.

- La localisation de l'atome au voisinage d'un nœud de l'onde stationnaire conduit à une forte réduction du taux d'émission de photons par rapport au taux typique γ_0 , par un facteur $(ka_{\text{oh}})^2 = \hbar k^2 / (m\omega) \ll 1$ pour le niveau de vibration fondamental $n=0$. C'est un effet qui découle logiquement du fait que l'atome ressent une intensité lumineuse très réduite sur l'extension de sa fonction d'onde, de l'ordre de a_{oh} .
- On constate sur (1.67) que l'émission d'un photon s'accompagne forcément d'un changement de niveau d'une unité, avec un taux $\propto (n+1)$ pour la transition $n \rightarrow n+1$, correspondant au gain d'énergie $\hbar\omega$, et un taux $\propto n$ pour la transition $n \rightarrow n-1$, correspondant à la perte d'énergie $\hbar\omega$ (figure 1.6). Le gain d'énergie par unité de temps pour une atome préparé dans la bande n vaut donc :

$$\frac{d\bar{E}}{dt} = \frac{\gamma_0}{2} (ka_{\text{oh}})^2 [(n+1)\hbar\omega - n\hbar\omega] = \gamma_0 E_r \quad (1.69)$$

où on a introduit l'énergie de recul

$$E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.70)$$

Réseau rouge. Dans ce cas, pour évaluer l'intégrale (1.65), on peut faire l'approximation que la fréquence de Rabi est constante sur l'extension de la fonction d'onde atomique : $\Omega(x) = \Omega_0 \cos(kx) \approx \Omega_0$. On développe l'exponentielle $e^{ik'x}$ au premier ordre en x et on obtient

$$\gamma_{n \rightarrow n'}(k') \propto \frac{\Omega_0^2}{4\Delta^2} |\langle H_{n'} | 1 + ik'\hat{x} | H_n \rangle|^2 \quad (1.71)$$

ou encore

$$\gamma_{n \rightarrow n'} = \gamma_0 \left\{ \delta_{n,n'} + \frac{(ka_{\text{oh}})^2}{2} [(n+1) \delta_{n',n+1} + n \delta_{n',n-1}] \right\} \quad (1.72)$$

où on a pris $k' \approx k$. Le terme dominant est cette fois-ci $\gamma_0 \delta_{n,n'}$, c'est-à-dire une émission spontanée de photons sans changement de niveau de vibration (figure 1.6). Le taux correspondant est élevé, comme on l'attend aux ventres d'une onde stationnaire, mais ce processus ne correspond pas à

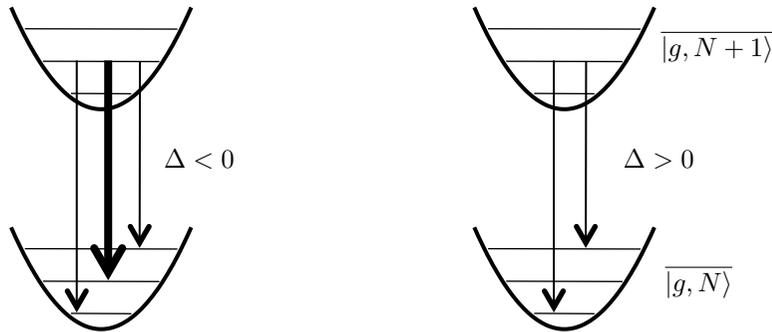


FIGURE 1.6. Les transitions principales dans le point de vue de l'atome habillé (régime de Lamb-Dicke). Pour un laser désaccordé sur le rouge de la transition atomique ($\Delta < 0$), le taux de fluorescence est élevé : la plus grande partie des photons sont émis sur la raie sans recul $n \rightarrow n$, le restant correspondant aux transitions $n \rightarrow n \pm 1$. Pour un faisceau désaccordé sur le bleu ($\Delta > 0$), les photons sont uniquement émis sur les raies $n \rightarrow n \pm 1$. Le taux de chauffage est le même dans les deux cas, à Ω_0 et $|\Delta|$ donnés.

une variation de l'énergie de l'atome : cette émission de photon sans recul est l'équivalent de l'effet Mossbauer en physique nucléaire, et il est rencontré fréquemment en physique des ions piégés (effet Lamb-Dicke). Le changement d'énergie provient du second terme de (1.72) qui fait intervenir des sauts d'un état de vibration n vers un état voisin $n \pm 1$. Ces sauts sont beaucoup plus rares que les précédents, et ils conduisent à un gain d'énergie par unité de temps identique à celui trouvé pour un réseau bleu [équation (1.69)].

Pour conclure, on retrouve avec cette analyse simple le résultat de Gordon & Ashkin (1980) : le taux de chauffage est effectivement le même aux nœuds et aux ventres d'une onde stationnaire. Toutefois, les mécanismes conduisant à ce taux sont très différents. Pour un réseau bleu et des atomes localisés aux nœuds, le taux de diffusion de photons est très réduit mais chaque émission de photon s'accompagne d'un changement d'énergie ($\hbar\omega$). Pour un réseau rouge et des atomes localisés aux ventres, le taux d'émission spontanée est beaucoup plus élevé, mais l'énergie moyenne gagnée lors d'une émission donnée est beaucoup plus faible car la plupart des

émissions se font sans recul.

Nous nous sommes limités ici au cas où l'effet tunnel entre les différents puits du réseau est négligeable. Quand cet effet tunnel devient significatif, les niveaux de vibration discrets n deviennent des bandes d'énergie et une différence notable entre réseau bleu et réseau rouge apparaît. La « raie sans recul » trouvée plus haut dans le cas rouge devient une raie où il n'y a pas de changement de bande. Si les bandes sont étroites, l'énergie apportée par ces transitions reste faible. Néanmoins, il y a une décohérence associée à ces multiples transitions : on peut en effet considérer que chaque émission spontanée « localise » l'atome avec une résolution de λ . Un paquet d'ondes s'étendant sur plusieurs sites perdra donc beaucoup plus vite sa cohérence dans le cas d'un réseau rouge que dans celui d'un réseau bleu, même si les taux de chauffage $d\bar{E}/dt$ sont similaires. Cette différence est étudiée en détail par Gerbier & Castin (2010).

6 Références

- Cohen-Tannoudji, C. (1992), « Atomic motion in laser light », in *Fundamental Systems in Quantum Optics*, ed. by J. Dalibard, J.-M. Raimond & J. Zinn-Justin, North-Holland Amsterdam, , pp. 1–164.
- Cohen-Tannoudji, C. & J. Dupont-Roc (1972), « Experimental Study of Zeeman Light Shifts in Weak Magnetic Fields », in *Phys. Rev. A* 5.2, pp. 968–984.
- Cohen-Tannoudji, C., J. Dupont-Roc & G. Grynberg (1992), *Atom-Photon Interactions*, New York: Wiley.
- Dalibard, J & C Cohen-Tannoudji (1985), « Dressed atom approach to atomic motion in laser light – the dipole force revisited », in *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics* 2.11, 1707–1720.
- Deutsch, Ivan H. & Poul S. Jessen (1998), « Quantum-state control in optical lattices », in *Phys. Rev. A* 57 (3), pp. 1972–1986.
- Gerbier, Fabrice & Yvan Castin (2010), « Heating rates for an atom in a far-detuned optical lattice », in *Phys. Rev. A* 82 (1), p. 013615.
- Gordon, J. P. & A. Ashkin (1980), « Motion of atoms in a radiation trap », in *Phys. Rev. A* 21 (5), pp. 1606–1617.

Grimm, R, M Weidemuller & YB Ovchinnikov (2000), « Optical dipole traps for neutral atoms », in *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics*, vol. 42, , 95–170.

Murr, K., P. Maunz, P. W. H. Pinkse, T. Puppe, I. Schuster, D. Vitali & G. Rempe (2006), « Momentum diffusion for coupled atom-cavity oscillators », in *Phys. Rev. A* 74 (4), p. 043412.

7 Complément

L'argument initial de Gordon & Ashkin (1980)

Partons de l'hamiltonien d'un « atome à deux niveaux » notés $\{|g\rangle, |e\rangle\}$, de fréquence de résonance $\omega_A = (E_e - E_g)/\hbar$, éclairé par un champ laser monochromatique de fréquence ω_L , l'intensité du couplage étant caractérisée par la fréquence de Rabi (éventuellement complexe) $\Omega(x)$. Dans le cadre de l'approximation du champ tournant, cet hamiltonien s'écrit

$$\hat{H}_{AL} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \hbar\Delta\hat{P}_e + \frac{\hbar\Omega(\hat{x})}{2}\hat{\sigma}_+ + \frac{\hbar\Omega^*(\hat{x})}{2}\hat{\sigma}_- \quad (1.73)$$

où \hat{P}_α désigne le projecteur sur l'état $|\alpha\rangle$ ($\alpha = |g\rangle, |e\rangle$) et où $\hat{\sigma}_\pm$ sont les opérateurs montant et descendant définis en (1.3).

À la dynamique hamiltonienne décrite par \hat{H} s'ajoute l'évolution irréversible due aux phénomènes d'émission spontanée, caractérisés par la largeur naturelle Γ de l'état excité $|e\rangle$.

Le raisonnement de Gordon & Ashkin (1980) part de la limite d'une masse m infinie, de sorte que l'atome a une vitesse nulle et reste immobile en un point x . L'impulsion peut en revanche être non nulle, et on définit la force moyenne $f(x)$

$$f(x) = \langle \hat{F}(x) \rangle \quad (1.74)$$

et le coefficient de diffusion en impulsion $D_p(x)$

$$D_p(x) = \int_0^\infty \left[\frac{1}{2} \langle \hat{F}(x, 0)\hat{F}(x, t) + \hat{F}(x, t)\hat{F}(x, 0) \rangle - \left(\langle \hat{F}(x) \rangle \right)^2 \right] dt, \quad (1.75)$$

On a introduit ici l'opérateur force :

$$\hat{F}(x) = -\frac{d\hat{H}}{dx} = -\frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar\Omega(x)}{2} \right) \hat{\sigma}_+ + \text{c.c.} \quad (1.76)$$

Les valeurs moyennes de (1.74-1.75) sont prises sur l'état stationnaire atomique pour les variables internes, compte tenu de la dissipation produite par les phénomènes d'émission spontanée. Dans la définition (1.75), la quantité $F(\hat{x}, t)$ désigne l'opérateur force en représentation de Heisenberg.

Le calcul explicite du coefficient de diffusion est relativement technique, et passe par l'utilisation du théorème de régression quantique. Nous nous contenterons de donner ici le résultat de Gordon & Ashkin (1980), que nous retrouverons au paragraphe suivant par une méthode un peu plus légère. Concentrons-nous sur le cas d'une onde stationnaire

$$\Omega(x) = \Omega_0 \sin(kx), \quad \Omega_0 \text{ réelle positive,} \quad (1.77)$$

et sur la limite des grands désaccords

$$\Omega_0 \ll |\Delta|. \quad (1.78)$$

La force moyenne est naturellement égale à la force dipolaire

$$f(x) = -\frac{dV(x)}{dx}, \quad V(x) = \frac{\Omega_0^2}{4\Delta} \sin^2(kx). \quad (1.79)$$

Le coefficient de diffusion en impulsion vaut quant à lui⁴

$$D_p = \hbar^2 k^2 \Gamma \frac{\Omega_0^2}{8\Delta^2}. \quad (1.80)$$

Ce coefficient de diffusion est indépendant du point x considéré : que l'atome soit placé en un nœud de l'onde stationnaire ($x = 0, \text{ mod } \pi$) ou en un ventre ($x = \pi/2, \text{ mod } \pi$), la diffusion en impulsion et donc le chauffage lié aux processus d'émission spontanée sont les mêmes !

4. Nous avons légèrement adapté le résultat de Gordon & Ashkin (1980) au cas où les photons émis spontanément par l'atome se propagent le long de l'axe x .

Le résultat de Gordon & Ashkin (1980) dans le formalisme de § 4

Nous revenons désormais à une description quantique du mouvement du centre de masse de l'atome et nous décrivons l'approche proposée par Gerbier & Castin (2010) pour retrouver le résultat de Gordon & Ashkin (1980).

Nous avons vu au paragraphe 4 que lorsqu'on peut négliger le chauffage lié au caractère aléatoire des phénomènes d'émission spontanée, la dynamique de l'atome est décrite par l'hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad V(x) = V_0 \sin^2(kx), \quad V_0 = \frac{\Omega_0^2}{4\Delta}. \quad (1.81)$$

Nous allons maintenant calculer la variation dans le temps de l'énergie moyenne

$$\bar{E}(t) = \langle \hat{H} \rangle_t = \text{Tr}(\hat{H}\hat{\rho}(t)), \quad (1.82)$$

où $\hat{\rho}(t)$ représente l'opérateur densité de l'atome, opérateur agissant à la fois dans l'espace des variables internes et celui des variables externes. En l'absence de phénomènes d'émission spontanée, cette valeur moyenne serait constante, mais ce n'est pas le cas si ces phénomènes sont pris en compte et on s'attend à trouver un chauffage qu'il s'agit de comparer au résultat de Gordon & Ashkin (1980).

Partons de l'équation du mouvement pour $\hat{\rho}$:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \left. \frac{d\hat{\rho}}{dt} \right|_{\text{sp.}} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{\text{AL}}, \hat{\rho}], \quad (1.83)$$

où le premier terme de cette *équation pilote* décrit l'évolution due à l'émission spontanée. On en déduit

$$\frac{d\bar{E}(t)}{dt} = \text{Tr} \left(\hat{H} \left. \frac{d\hat{\rho}}{dt} \right|_{\text{sp.}} \right) + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{H}_{\text{AL}}] \rangle_t. \quad (1.84)$$

Évolution due à l'émission spontanée. Dans (1.83) le terme d'évolution lié à l'émission spontanée s'écrit

$$\left. \frac{d\hat{\rho}}{dt} \right|_{\text{sp.}} = -\frac{u}{2} \left(\hat{\mathcal{P}}_e \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{\mathcal{P}}_e \right) + u \int \mathcal{N}(k') \hat{\sigma}_- e^{ik'\hat{x}} \hat{\rho} e^{-ik'\hat{x}} \hat{\sigma}_+ dk'. \quad (1.85)$$

La première ligne de cette équation donne la décroissance des éléments de matrice de $\hat{\rho}$ faisant intervenir l'état excité :

$$\left. \frac{d\hat{\rho}_{ee}}{dt} \right|_{\text{sp.}} = -u\hat{\rho}_{ee}, \quad \left. \frac{d\hat{\rho}_{eg}}{dt} \right|_{\text{sp.}} = -\frac{u}{2}\hat{\rho}_{eg}, \quad \left. \frac{d\hat{\rho}_{ge}}{dt} \right|_{\text{sp.}} = -\frac{u}{2}\hat{\rho}_{ge}, \quad (1.86)$$

et la deuxième ligne décrit l'alimentation de la population de l'état fondamental $\hat{\rho}_{gg}$ par décroissance de l'état excité. Notons que ces éléments de matrice $\hat{\rho}_{\alpha\beta}$ (avec $\alpha, \beta = e, g$) restent des opérateurs vis-à-vis des variables externes x et p décrivant le mouvement du centre de masse de l'atome. La fonction $\mathcal{N}(k')$ décrit la distribution de la projection sur l'axe x du vecteur d'onde du photon émis spontanément. Puisqu'on prend ici un modèle 1D, on supposera que ces photons se propagent le long de l'axe x , avec une probabilité égale d'être émis dans le sens positif et dans le sens négatif, ce qui revient à prendre

$$\mathcal{N}(k') = \frac{1}{2} (\delta(k - k') + \delta(k + k')). \quad (1.87)$$

Évaluons maintenant la contribution du premier terme de (1.84). L'hamiltonien \hat{H} qui intervient dans ce terme a lui-même deux contributions, $\hat{p}^2/2m$ et $V(\hat{x})$. Commençons par $\hat{p}^2/2m$ et écrivons

$$\text{Tr} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \left. \frac{d\hat{\rho}}{dt} \right|_{\text{sp.}} \right) = \int \frac{p^2}{2m} \left(\langle p | \left. \frac{d\hat{\rho}_{ee}}{dt} \right|_{\text{sp.}} | p \rangle + \langle p | \left. \frac{d\hat{\rho}_{gg}}{dt} \right|_{\text{sp.}} | p \rangle \right) dp. \quad (1.88)$$

En utilisant (1.85-1.87), on obtient

$$\langle p | \left. \frac{d\hat{\rho}_{gg}}{dt} \right|_{\text{sp.}} | p \rangle = \frac{u}{2} (\langle p + \hbar k | \hat{\rho}_{ee} | p + \hbar k \rangle + \langle p - \hbar k | \hat{\rho}_{ee} | p - \hbar k \rangle). \quad (1.89)$$

En reportant ce résultat dans (1.88), on arrive à

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \frac{d\hat{\rho}}{dt} \Big|_{\text{sp.}} \right) &= -\frac{u}{2m} \int p^2 \langle p | \hat{\rho}_{ee} | p \rangle dp \\ &\quad + \frac{u}{4m} \int [(p + \hbar k)^2 + (p - \hbar k)^2] \langle p | \hat{\rho}_{ee} | p \rangle dp \\ &= u \Pi_e \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \end{aligned} \quad (1.90)$$

où Π_e représente la population totale de l'état excité :

$$\Pi_e = \int \langle p | \hat{\rho}_{ee} | p \rangle dp. \quad (1.91)$$

On vérifiera par un calcul similaire que la contribution de $V(x)$ (via \hat{H}) au premier terme de (1.84) est nulle. On arrive donc à

$$\text{Tr} \left(\hat{H} \frac{d\hat{\rho}}{dt} \Big|_{\text{sp.}} \right) = u \Pi_e E_r, \quad (1.92)$$

expression qui s'interprète simplement : $u \Pi_e$ correspond au taux de diffusion de photon par l'atome. Chaque photon émis spontanément donne un choc aléatoire de $\pm \hbar k$ à l'atome, donc une augmentation moyenne d'énergie $E_r = \hbar^2 k^2 / 2m$. À l'ordre deux en fréquence de Rabi, la valeur de Π_e est [cf. (1.40)]

$$\Pi_e \approx \frac{\langle \Omega^*(\hat{x}) \Omega(\hat{x}) \rangle}{4\Delta^2}, \quad (1.93)$$

ce qui donne pour l'onde stationnaire

$$\text{Tr} \left(\hat{H} \frac{d\hat{\rho}}{dt} \Big|_{\text{sp.}} \right) = u E_r \frac{\Omega_0^2}{4\Delta^2} \langle \sin^2(kx) \rangle. \quad (1.94)$$

Pour un atome localisé au voisinage d'un nœud de l'onde stationnaire, $\sin^2(kx)$ tend vers 0, le taux de diffusion de photons tend également vers 0, ainsi que l'augmentation d'énergie correspondante. C'est le terme « intuitif » de (1.84).

Deuxième terme de (1.84). Le commutateur $[\hat{H}, \hat{H}_{\text{AL}}]$ se calcule aisément :

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{H}_{\text{AL}}] &= -\frac{\hbar k \Omega_0}{4m} (\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-) (\hat{p} \cos(k\hat{x}) + \cos(k\hat{x}) \hat{p}) \\ &\quad + \frac{\hbar k \Omega_0^2}{8m\Delta} (\hat{p} \sin(2k\hat{x}) + \sin(2k\hat{x}) \hat{p}). \end{aligned} \quad (1.95)$$

Nous cherchons un résultat à l'ordre 2 en Ω_0/Δ . Commençons donc par évaluer les éléments de matrice de $\hat{\sigma}_\pm \hat{\rho}$ à l'ordre désiré pour obtenir la valeur moyenne de la première ligne de (1.95). L'équation pilote (1.83) donne

$$\frac{d\hat{\rho}_{eg}}{dt} \approx \left(i\Delta - \frac{u}{2} \right) \hat{\rho}_{eg} - i \frac{\Omega(\hat{x})}{2} \hat{\rho}_{gg}, \quad (1.96)$$

où on a négligé la contribution de $\hat{\rho}_{ee}$. Dans l'hypothèse (réaliste) où le temps caractéristique d'évolution des variables externes est long devant u^{-1} , on peut considérer que la dynamique interne de l'atome suit adiabatiquement la dynamique externe et résoudre (1.10) en⁵

$$\hat{\rho}_{eg} = \frac{\Omega(\hat{x})}{2\Delta + iu} \hat{\rho}_{gg}, \quad \text{et de même } \hat{\rho}_{ge} = \hat{\rho}_{gg} \frac{\Omega^*(\hat{x})}{2\Delta - iu}. \quad (1.99)$$

Pour évaluer la première ligne de (1.95), on commence par prendre la trace sur les variables internes. À l'ordre désiré en Ω_0/Δ , on trouve :

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\text{int}} [(\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-) \hat{\rho}] &= \frac{\Omega_0}{2\Delta} [\sin(k\hat{x}) \hat{\rho}_{gg} + \hat{\rho}_{gg} \sin(k\hat{x})] \\ &\quad + i \frac{u\Omega_0}{4\Delta^2} [\hat{\rho}_{gg} \sin(k\hat{x}) - \sin(k\hat{x}) \hat{\rho}_{gg}]. \end{aligned} \quad (1.100)$$

Reportons finalement ce résultat dans la trace de (1.95). On constate que la contribution de la deuxième ligne de (1.95) annule exactement celle is-

5. On peut ensuite pousser le calcul un cran plus loin pour obtenir l'expression de $\hat{\rho}_{ee}$ à l'ordre le plus bas. En partant de

$$\frac{d\rho_{ee}}{dt} = -\Gamma \hat{\rho}_{ee} + \frac{i}{2} \hat{\rho}_{eg} \Omega^*(\hat{x}) - \frac{i}{2} \Omega(\hat{x}) \hat{\rho}_{ge}, \quad (1.97)$$

et en utilisant (1.99) on obtient la valeur « stationnaire » pour les variables internes

$$\hat{\rho}_{ee} = \frac{1}{4\Delta^2} \Omega(\hat{x}) \hat{\rho}_{gg} \Omega^*(\hat{x}), \quad (1.98)$$

ce qui permet en particulier de retrouver (1.93).

sue de la première ligne de (1.100). Il ne reste finalement que la contribution provenant de la deuxième ligne de (1.100) qui après un calcul simple donne

$$\frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{H}_{AL}] \rangle_t = u E_r \frac{\Omega_0^2}{4\Delta^2} \langle \cos^2(kx) \rangle. \quad (1.101)$$

C'est le terme « contre-intuitif » de (1.84), qui est d'autant plus important que l'atome est localisé au voisinage des nœuds de l'onde stationnaire.

Au total, quand on somme les deux contributions (1.94) et (1.101), on arrive au résultat

$$\frac{d\bar{E}}{dt} = u E_r \frac{\Omega_0^2}{4\Delta^2}, \quad (1.102)$$

qui est indépendant de l'état spatial de l'atome dans l'onde stationnaire et également indépendant du signe du désaccord de cette onde : c'est le résultat trouvé initialement par Gordon & Ashkin (1980).

Chapitre 2

Réseaux optiques : les principes de base

Sommaire

1	Comment générer un réseau optique	1
1-1	Les réseaux à une dimension	1
1-2	Les réseaux multi-dimensionnels	2
1-3	Retour à 1D : l'équation de Mathieu	3
2	Le théorème de Bloch	3
2-1	Énoncé du théorème	4
2-2	Recherche des états propres et bandes d'énergie .	5
2-3	Rôle des symétries de l'hamiltonien	5
3	Bandes d'énergie pour le potentiel sinusoidal	6
3-1	Le cas du potentiel nul, $V_0 = 0$	6
3-2	L'équation centrale	7
3-3	Le cas du réseau faible	9
4	Branchement et débranchement d'un réseau	10
4-1	Extension de théorème de Bloch	10
4-2	Branchement et débranchement adiabatiques . .	11
4-3	La diffraction de Bragg	13
4-4	Comment observer la structure de bande?	15
5	Propagation de paquets d'ondes	15
5-1	La vitesse de groupe dans un réseau optique . . .	16
5-2	La notion de masse effective	16
5-3	Les interactions dans le réseau, un premier aperçu	17
6	Références	18

Le but de ce chapitre est de présenter les concepts de base de la physique des réseaux optiques. Nous commençons par rappeler le théorème de Bloch, qui est l'outil central pour aborder le mouvement de particules individuelles dans un potentiel périodique $V(\mathbf{r})$. Nous expliquons comment émergent les concepts essentiels de fonctions de Bloch et de bandes d'énergie, et nous présentons une série de résultats explicites pour ces fonctions et ces bandes dans le cas d'un réseau 1D sinusoidal, $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$. Nous nous intéressons ensuite aux quantités accessibles quand on branche et débranche le potentiel $V(\mathbf{r})$, une opération impossible dans un cristal réel, mais facile avec les réseaux optiques. Nous terminons ce chapitre par une première approche de la propagation de paquets d'ondes dans le réseau, avec la notion de masse effective et de vitesse de groupe.

1 Comment générer un réseau optique

1-1 Les réseaux à une dimension

Dans sa version la plus simple, un réseau optique est constitué d'une onde lumineuse stationnaire à une dimension le long d'un axe Ox (Figure 2.1). Cette onde est formée par deux ondes progressives de même amplitude \mathcal{E}_0 se propageant en sens opposé (on néglige ici l'influence de la pola-

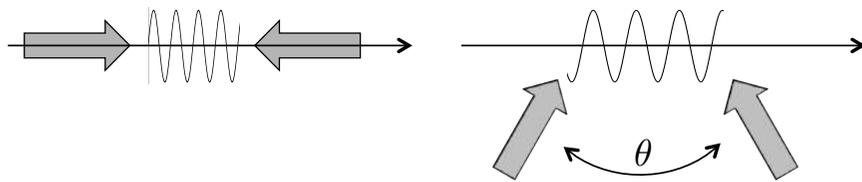


FIGURE 2.1. Réseau optique 1D formé par une onde laser stationnaire. Gauche : période $\lambda/2$; droite : période $\lambda/[2 \sin(\theta/2)]$.

risation) :

$$\mathcal{E}_0 \sin(kx - \omega t + \phi_1), \quad \mathcal{E}_0 \sin(kx + \omega t - \phi_2). \quad (2.1)$$

Le champ résultant s'écrit $\mathcal{E}(x, t) = \mathcal{E}(x) \cos(\omega t - \varphi)$ avec $\varphi = (\phi_1 + \phi_2)/2$ et

$$\mathcal{E}(x) = 2\mathcal{E}_0 \sin(kx - \Phi), \quad \Phi = (\phi_2 - \phi_1)/2. \quad (2.2)$$

Dans ce chapitre, on choisira l'origine des coordonnées $x = 0$ telle que $\Phi = 0$, ce qui correspond à choisir cette origine en un nœud de l'onde stationnaire. Les atomes sont alors soumis au potentiel périodique

$$V(x) = V_0 \sin^2(kx), \quad V_0 = \frac{d_0^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar \Delta}, \quad (2.3)$$

où le signe de V_0 peut être ajusté en changeant le désaccord du laser par rapport à la transition de résonance de l'atome.

Si l'onde stationnaire est obtenue en superposant deux ondes lumineuses planes de directions opposées, k est égal au vecteur d'onde k_L de la lumière et la période spatiale du réseau est $a = \lambda/2 = \pi/k_L$, où $\lambda = 2\pi/k_L$ est la longueur d'onde lumineuse. Si les ondes font chacune un angle $\theta/2$ par rapport à la normale à Ox , $k = k_L \sin(\theta/2)$; la période spatiale est alors augmentée : $a = \lambda/[2 \sin(\theta/2)]$. Nous verrons plus tard qu'on peut également choisir dans (2.1) une phase relative $\Phi = \phi_2 - \phi_1$ qui dépend du temps, ce qui permet de faire défiler le potentiel périodique dans le référentiel du laboratoire à la vitesse $\dot{\Phi}/(2k)$.

1-2 Les réseaux multi-dimensionnels

Pour créer un potentiel périodique selon plusieurs directions de l'espace, la technique la plus simple et la plus robuste consiste à superposer des ondes stationnaires de fréquences différentes selon les directions désirées. Par exemple, pour faire un réseau carré dans le plan xy , on peut superposer

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}) = 2\mathcal{E}_1 \sin(k_1 x) \cos(\omega_1 t - \varphi_1) + 2\mathcal{E}_2 \sin(k_2 y) \cos(\omega_2 t - \varphi_2). \quad (2.4)$$

Si la différence de fréquence $\omega_1 - \omega_2$ entre les ondes est grande devant les autres fréquences intervenant dans le mouvement du centre de masse atomique, on peut négliger l'interférence entre ces deux ondes stationnaires et considérer que l'atome est soumis au potentiel dipolaire

$$V(\mathbf{r}) = V_1 \sin^2(k_1 x) + V_2 \sin^2(k_2 y). \quad (2.5)$$

En pratique, il suffit de prendre $(\omega_1 - \omega_2)/2\pi$ de l'ordre de quelques MHz (soit une différence relative de 10^{-8}) pour que cette approximation soit valable.

On peut également choisir toutes les ondes à la même fréquence. Dans ce cas, si on veut utiliser la superposition de deux ondes stationnaires dans le plan xy comme en (2.4), il faut contrôler la phase temporelle relative $\varphi_1 - \varphi_2$ de ces ondes car le profil d'interférence en dépend fortement (Hemmerich & Hänsch 1993). Ce contrôle de la phase peut être mis à profit pour faire varier la topologie du réseau, comme nous le verrons ultérieurement pour la mise en évidence de points de Dirac dans un réseau hexagonal (Tarruell et al. 2012).

Notons une exception importante à cette nécessité de contrôler la phase : Grynberg et al. (1993) ont montré que si on restreint le nombre de faisceaux à sa valeur minimale (2 faisceaux pour un réseau 1D, 3 faisceaux à 2D, 4 faisceaux à 3D), alors le motif d'interférence donnant naissance au potentiel $V(\mathbf{r})$ est indépendant des phases des faisceaux. Une variation de ces phases n'a pour effet que de translater le motif d'interférence, sans changer sa forme¹. On pourra consulter l'article de revue de Grynberg & Robilliard (2001) pour avoir un panorama complet des formes de réseaux accessibles dans ce cas strictement monochromatique. Signalons

1. Ce résultat apparaît clairement à 1D sur l'expression (2.2).

également que l'on peut dans ce cas dépasser le cadre de réseaux périodiques et construire des potentiels quasi-périodiques analogues à ceux qui apparaissent dans les quasi-cristaux (Guidoni et al. 1997).

1-3 Retour à 1D : l'équation de Mathieu

L'étude du mouvement quantique d'un atome de masse m dans ce potentiel périodique passe par la recherche des états propres $|\psi\rangle$ (ou $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$) de l'hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0 \sin^2(k\hat{x}). \quad (2.6)$$

Le nombre d'onde k introduit naturellement une échelle d'énergie, qu'on appellera *énergie de recul*

$$E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.7)$$

qui permet d'écrire l'équation aux valeurs propres $\hat{H}\psi = E\psi$ sous une forme sans dimension

$$-\psi''(\tilde{x}) + \frac{\tilde{V}_0}{2} [1 - \cos(2\tilde{x})] \psi(\tilde{x}) = \tilde{E} \psi(\tilde{x}), \quad (2.8)$$

où on a posé $\tilde{x} = kx$, $\tilde{V}_0 = V_0/E_r$ et $\tilde{E} = E/E_r$. Notons que l'appellation *énergie de recul* pour E_r est un peu abusive; on définit habituellement l'énergie de recul (2.7) comme une quantité liée à l'atome, k étant le nombre d'onde associée à la transition de résonance. Ici, le laser peut avoir un nombre d'onde k_L différent de la valeur résonante, et k peut en plus différer de k_L si on choisit une configuration avec un angle $\theta \neq \pi$.

L'équation (2.8) porte le nom d'*équation de Mathieu*² et se rencontre dans de nombreux problèmes physiques, comme le mouvement d'une particule classique soumise à une force oscillante (\tilde{x} étant alors le temps), un piège de Paul pour des particules chargées par exemple. Pour une condition initiale donnée en $\tilde{x} = 0$ et selon la valeur du couple (\tilde{V}_0, \tilde{E}) , les solutions restent bornées ou au contraire divergent en $\tilde{x} = \pm\infty$. Dans le cas d'une

2. Émile Léonard Mathieu (1835-1890), mathématicien français, a écrit cette équation en 1865 en étudiant les vibrations d'une membrane elliptique.

particule dans un piège de Paul, les solutions bornées et divergentes correspondent respectivement aux zones de stabilité et d'instabilité du piège; pour le mouvement quantique d'un atome dans un réseau optique, ces solutions correspondent à une énergie E située dans une zone « permise » ou « interdite » (gap).

Dans la mesure où l'existence de ces zones permises ou interdites n'est pas restreinte au cas d'un potentiel sinusoidal, mais apparaît pour tout potentiel périodique, nous allons momentanément laisser l'équation de Mathieu pour aborder le problème général du mouvement d'une particule dans un potentiel spatial périodique. Toutefois, nous utiliserons plus tard certains résultats spécifiques liés à cette équation de Mathieu, comme la valeur asymptotique de la largeur des bandes dans la limite $V_0 \gg E_r$.

2 Le théorème de Bloch

On considère dans ce qui suit le mouvement d'une particule ponctuelle, sans spin, dans un potentiel périodique $V(\mathbf{r})$ en l'absence de toute autre force (en particulier pas de champ magnétique). Plus précisément, on suppose que ce potentiel est invariant quand on fait la substitution $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{r}_j$, où \mathbf{r}_j est un des nœuds du réseau

$$\mathcal{B} = \{\mathbf{r}_j = j_1 \mathbf{a}_1 + j_2 \mathbf{a}_2 + j_3 \mathbf{a}_3, j_1, j_2, j_3 \in \mathbb{Z}\}. \quad (2.9)$$

Un tel réseau, qui est stable par addition et soustraction, est appelé *réseau de Bravais*. Nous avons écrit ici la version 3D du réseau, les vecteurs \mathbf{a}_i étant indépendants. À une dimension, nous noterons plus simplement la période spatiale $a_1 \equiv a$. Nous nous intéressons ici au problème général de la recherche des états propres de l'hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.10)$$

décrivant le mouvement de la particule. Le théorème de Bloch³ tire parti de la symétrie de translation discrète du problème pour rechercher une base de fonctions propres sous une forme particulièrement commode.

3. Félix Bloch a prouvé ce théorème dans son étude d'un électron en mouvement dans un potentiel périodique (Bloch 1929). Le même résultat mathématique avait été obtenu auparavant dans d'autres contextes, notamment par Floquet (1883).

2-1 Énoncé du théorème

Partons des deux points suivants :

- les opérateurs de translation $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ définis par

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}) \quad \text{ou encore} \quad \hat{T}_{\mathbf{a}} = e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar} \quad (2.11)$$

commutent entre eux,

- la symétrie de translation de $V(\mathbf{r})$ entraîne que les opérateurs de translation $\hat{T}_{\mathbf{a}_i}$ commutent avec l'hamiltonien.

On peut donc chercher une base de fonctions propres communes à \hat{H} et aux $\hat{T}_{\mathbf{a}_i}$. Or la diagonalisation d'un opérateur $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ est aisée; en particulier, puisque $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ est un opérateur unitaire ($\hat{T}_{\mathbf{a}}^{-1} = \hat{T}_{-\mathbf{a}} = \hat{T}_{\mathbf{a}}^\dagger$), ses valeurs propres λ sont des nombres de module 1 que l'on peut toujours écrire sous la forme $\lambda = e^{-i\theta}$.

Considérons maintenant une fonction propre $\psi_{\theta_1, \theta_2, \theta_3}$ de l'hamiltonien \hat{H} et de chacun des opérateurs de translation $\hat{T}_{\mathbf{a}_j}$, avec la valeurs propre $e^{-i\theta_j}$ pour $\hat{T}_{\mathbf{a}_j}$. Pour exprimer de manière compacte le triplet des θ_j , il est commode d'introduire le réseau réciproque (un autre réseau de Bravais) défini par :

$$\mathcal{B}' = \{\mathbf{Q}_j = j_1 \mathbf{b}_1 + j_2 \mathbf{b}_2 + j_3 \mathbf{b}_3, j_1, j_2, j_3 \in \mathbb{Z}\} \quad (2.12)$$

où les vecteurs \mathbf{b}_i sont définis par la propriété⁴

$$\mathbf{a}_{i'} \cdot \mathbf{b}_i = 2\pi \delta_{i,i'}. \quad (2.13)$$

Posons maintenant

$$\mathbf{q} = \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1,2,3} \theta_j \mathbf{b}_j, \quad (2.14)$$

ce qui entraîne que $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{q} = \theta_i$. La fonction propre $\psi_{\theta_1, \theta_2, \theta_3}$, qui peut être notée de manière plus compacte $\psi_{\mathbf{q}}$, vérifie donc

$$\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r} - \mathbf{a}_j) = e^{-i\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{q}} \psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}), \quad j = 1, 2, 3. \quad (2.15)$$

4. De manière explicite, on a

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

et les deux autres relations déduites par permutation circulaire.

Posons finalement

$$\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}). \quad (2.16)$$

En reportant cette relation dans (2.15), il est immédiat de vérifier que la fonction $u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ est périodique sur le réseau de Bravais \mathcal{B} :

$$u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r} - \mathbf{a}_j) = u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}), \quad j = 1, 2, 3. \quad (2.17)$$

Le théorème de Bloch s'énonce donc de la manière suivante (Ashcroft & Mermin 1976; Kittel 1987): on peut chercher les états propres d'un hamiltonien correspondant à un potentiel $V(\mathbf{r})$ spatialement périodique sur le réseau \mathcal{B} sous la forme d'ondes de Bloch $\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$, qui sont des produits d'une onde plane $[e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}}]$ par une fonction périodique sur \mathcal{B} $[u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})]$.

Dans tout ce qui suit, on supposera le potentiel périodique $V(\mathbf{r})$ suffisamment régulier pour que la fonction $u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ puisse être développée en série de Fourier. Ainsi nous prendrons à 1D :

$$u_{\mathbf{q}}(x) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} C_j(q) e^{2i\pi j x/a}, \quad (2.18)$$

$$\text{soit } \psi_{\mathbf{q}}(x) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} C_j(q) e^{ix(q+2\pi j/a)}. \quad (2.19)$$

La forme (2.19) montre que les ondes de Bloch sont des peignes d'ondes planes d'impulsion $p = \hbar(q + 2\pi j/a)$, avec j entier.

Notons que dans la suite, on se livrera vis-à-vis de la variable \mathbf{q} à toutes les opérations habituelles sur les variables continues : dérivation (ou gradient) par rapport à q , intégration sur q , etc. L'écriture de cette variable \mathbf{q} en indice de $\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ ou $u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ est une convention habituelle, mais il aurait été tout aussi judicieux de noter ces fonctions $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{q})$ ou $u(\mathbf{r}, \mathbf{q})$.

Notons également qu'il est clair que les angles θ_j caractérisant les valeurs propres $e^{-i\theta_j}$ des opérateurs de translation $\hat{T}_{\mathbf{a}_j}$ sont définis modulo 2π . Quand on reporte cet arbitraire de phase dans la définition (2.14), on voit que le quasi-moment \mathbf{q} et le quasi-moment $\mathbf{q} + \mathbf{Q}$, où \mathbf{Q} est un vecteur du réseau réciproque \mathcal{B}' , conduisent au même triplet de valeurs propres pour les $\hat{T}_{\mathbf{a}_j}$; on obtient dans ce cas le même problème aux valeurs propres pour l'hamiltonien \hat{H} et la partie périodique $u_{\mathbf{q}}$. Pour lever cet arbitraire de phase, on posera dans tout ce qui suit

$$\psi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{Q} \in \mathcal{B}'. \quad (2.20)$$

2-2 Recherche des états propres et bandes d'énergie

Dans ce paragraphe, nous nous plaçons à une dimension pour simplifier les notations. La recherche explicite des états propres ψ_q de \hat{H} se fait en injectant (2.16) dans l'équation aux valeurs propres, pour en déduire une équation portant sur la partie périodique u_q de la fonction de Bloch :

$$\hat{H}_{\text{per.}}(q)u_q(x) = E(q)u_q(x) \quad (2.21)$$

où $\hat{H}_{\text{per.}}(q)$ est un hamiltonien dépendant du paramètre q

$$\hat{H}_{\text{per.}}(q) = \frac{(\hat{p} + \hbar q)^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (2.22)$$

La fonction $u_q(x)$ satisfait les conditions aux limites

$$u_q(0) = u_q(a), \quad u'_q(0) = u'_q(a). \quad (2.23)$$

Pour une valeur de q donnée, les solutions de (2.21-2.23) sont repérables par un indice $n = 0, 1, 2, \dots$, les valeurs propres $E_n(q)$ étant rangées par valeurs croissantes. À l'énergie $E_n(q)$ correspond la solution $u_{n,q}(x)$, associée à l'onde de Bloch $\psi_{n,q}(x)$:

$$\hat{H}\psi_{n,q}(x) = E_n(q)\psi_{n,q}(x), \quad \psi_{n,q}(x) = e^{iqx}u_{n,q}(x). \quad (2.24)$$

On a déjà mentionné en (2.20) l'invariance de la définition des fonctions propres $\psi_{n,q}(x)$ dans la substitution $q \rightarrow q + 2\pi/a$. Il en va de même pour les valeurs propres⁵

$$E_n(q + 2\pi/a) = E_n(q). \quad (2.26)$$

Grâce au théorème spectral, on sait que l'on peut former une base avec les états propres de l'hamiltonien. Pour choisir cette base, il importe de ne pas effectuer de double comptage, c'est-à-dire de prendre une fois et une seule chaque fonction propre. Compte tenu de la relation (2.20), on

5. On déduit également de (2.16-2.20) que

$$u_{q+2\pi/a}(x) = e^{-2i\pi x/a}u_q(x), \quad (2.25)$$

ce qui revient à prendre $C_j(q + 2\pi/a) = C_{j+1}(q)$ dans le développement (2.18). La relation (2.25) joue un rôle important dans l'étude de la topologie des bandes d'énergie associées à un potentiel donné (Zak 1989).

voit qu'il faut restreindre le domaine de variation de q à un intervalle de longueur $2\pi/a$, en choisissant par exemple la

$$1^{\text{ère}} \text{ zone de Brillouin : } -\pi/a < q \leq \pi/a. \quad (2.27)$$

Notons qu'il est souvent utile de traiter q comme une variable prenant des valeurs quelconques entre $-\infty$ et $+\infty$. Il n'y a aucun problème à cela, tant qu'on se rappelle la périodicité des états et des énergies associés (2.20-2.26).

Quand q varie continûment dans un intervalle de longueur $2\pi/a$, par exemple (2.27), chaque énergie $E_n(q)$ prend bien évidemment une valeur contenue dans l'intervalle $I_n = [\min_q E_n(q), \max_q E_n(q)]$, qu'on appelle *bande d'énergie permise*. Pour le réseau 1D de base que nous considérerons la plupart du temps, $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$, $V_0 \neq 0$, les intervalles I_n sont disjoints $[\max_q E_n(q) < \min_q E_{n+1}(q)]$.

Dans le cas multi-dimensionnel, la détermination de la zone de Brillouin n'est pas toujours aussi simple qu'à une dimension. Nous en verrons un exemple pour le réseau hexagonal du graphène plus loin. Pour les réseaux carrés ou cubiques que nous allons rencontrer d'ici là, la première zone de Brillouin se déduit immédiatement de (2.27) :

$$1^{\text{ère}} \text{ zone de Brillouin : } \mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3) \text{ avec } -\pi/a_j < q_j \leq \pi/a_j. \quad (2.28)$$

2-3 Rôle des symétries de l'hamiltonien

Symétrie par renversement du temps. Pour une particule sans spin, la transformation « renversement du temps » est décrite par l'opérateur anti-unitaire \hat{K}_0 défini par (Messiah 2003)

$$\hat{K}_0\psi(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r}). \quad (2.29)$$

Cet opérateur laisse \mathbf{r} invariant et change \mathbf{p} en $-\mathbf{p}$. L'hamiltonien que nous considérons ici est quadratique en \mathbf{p} , puisqu'il n'y a pas de champ magnétique et donc pas de terme linéaire en impulsion de type $-\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$. Cet hamiltonien est invariant par renversement du temps et commute avec \hat{K}_0 .

Ceci entraîne que si $\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ est état propre de \hat{H} pour la valeur propre E , alors $\hat{K}_0\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}^*(\mathbf{r})$ est également état propre de \hat{H} pour la même valeur propre E . Or la fonction $e^{-i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}^*(\mathbf{r})$ vérifie toutes

les propriétés d'une fonction de Bloch associée au quasi-moment $-q$. On en déduit que si on a su résoudre le problème aux valeurs propres pour l'hamiltonien pour un quasi-moment q , on connaît également les solutions pour le quasi-moment $-q$ en posant :

$$\psi_{-q}(\mathbf{r}) \propto \psi_q^*(\mathbf{r}), \quad E(q) = E(-q). \quad (2.30)$$

Même à une dimension, chaque valeur propre en énergie est donc (au moins) doublement dégénérée, puisque les fonctions $\psi_{n,q}$ et $\psi_{n,-q}$ sont indépendantes. Ce résultat généralise celui de la particule libre, où $e^{ipx/\hbar}$ et $e^{-ipx/\hbar}$ sont deux états propres associées à la même énergie $E_p = p^2/2m$. Il y a deux exceptions à cette double dégénérescence⁶, les cas $q = 0$ et $q = \pi/a$, pour lesquels $\psi_{n,q}$ et $\psi_{n,-q}$ sont identiques [cf. (2.20)].

Parité du potentiel $V(\mathbf{r})$. Pour une particule sans spin, l'opérateur parité (hermitien) \hat{P} est défini par

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \quad (2.31)$$

Si $V(\mathbf{r})$ est symétrique par rapport à $\mathbf{r} = 0$, alors l'hamiltonien commute avec \hat{P} . On en déduit que si $\psi_q(\mathbf{r})$ est état propre de \hat{H} avec la valeur propre $E(q)$, alors $\hat{P}\psi_q(\mathbf{r})$ est également état propre de \hat{H} avec la même valeur propre. Mais $\hat{P}\psi_q(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{r}\cdot\mathbf{q}}u_q(-\mathbf{r})$ vérifie toutes les propriétés d'une fonction de Bloch associée au quasi-moment $-q$. Si on a su résoudre le problème aux valeurs propres pour l'hamiltonien pour le quasi-moment q , on en déduit là aussi la solution pour le quasi-moment $-q$:

$$\psi_{-q}(\mathbf{r}) \propto \psi_q(-\mathbf{r}), \quad E(-q) = E(q), \quad (2.32)$$

L'égalité entre $E(q)$ et $E(-q)$ avait déjà obtenue à partir de l'invariance par renversement du temps en (2.30), sans supposer la parité du potentiel. En revanche, la relation entre $\psi_{-q}(\mathbf{r})$ et $\psi_q(-\mathbf{r})$, valable seulement pour un potentiel pair, vient enrichir le résultat (2.30).

6. Dans le cas particulier $V = 0$, il y a encore dégénérescence pour $q = \pi/a$, car deux bandes consécutives se touchent en ce point (voir §3-1).

3 Bandes d'énergie pour le potentiel sinusoidal

Revenons maintenant au cas 1D du potentiel $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$, pour lequel l'équation aux valeurs propres est l'équation de Mathieu (2.8). Nous considérons d'abord le cas $V_0 = 0$ pour lequel on connaît les états propres, $\phi_p(x) = e^{ipx/\hbar}$ et les énergies associées $E_p = p^2/2m$. L'utilisation du théorème de Bloch pour traiter ce problème est évidemment une manière compliquée pour traiter un cas connu, mais a le mérite de donner de manière explicite les énergies $E_n(q)$ et les fonctions $u_{n,q}(x)$ associées. Le résultat nous servira ensuite de guide pour traiter le cas des potentiels non nuls.

3-1 Le cas du potentiel nul, $V_0 = 0$

Pour le potentiel nul, n'importe quelle période a fait l'affaire. Prenons $a = \pi/k$ pour faire le lien avec le cas $V_0 \neq 0$. Un état « onde plane » $\phi_p(x) = e^{ipx/\hbar}$ peut s'écrire sous la forme d'une onde de Bloch

$$\phi_p(x) = e^{iqx} e^{2ijkx} \quad \text{avec} \quad \frac{p}{\hbar} = 2jk + q, \quad (2.33)$$

où j est l'entier le plus proche de $p/(2\hbar k)$, et où q appartient à la première zone de Brillouin $]-k, k]$. On a pour la bande fondamentale $n = 0$:

$$E_0(q) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}, \quad u_{0,q}(x) = 1, \quad (2.34)$$

et pour la première bande excitée $n = 1$:

$$E_1(q) = \frac{\hbar^2}{2m} (q \pm 2k)^2, \quad u_{1,q}(x) = e^{\pm 2ikx}, \quad (2.35)$$

avec le signe $-$ (resp. $+$) quand $q \geq 0$ (resp. < 0). Dans ce cas très particulier, les fonctions $u_{n,q}(x)$ sont donc indépendantes de q , mis à part le changement de signe de l'exposant dans (2.35) en $q = 0$. Le tracé des fonctions $E_n(q)$ en fonction de q est donné en figure 2.2 ; il redonne simplement la parabole $E(p) = p^2/2m$ repliée sur elle-même puisque l'abscisse q , reliée linéairement à p par (2.33), doit rester dans la première zone de Brillouin.

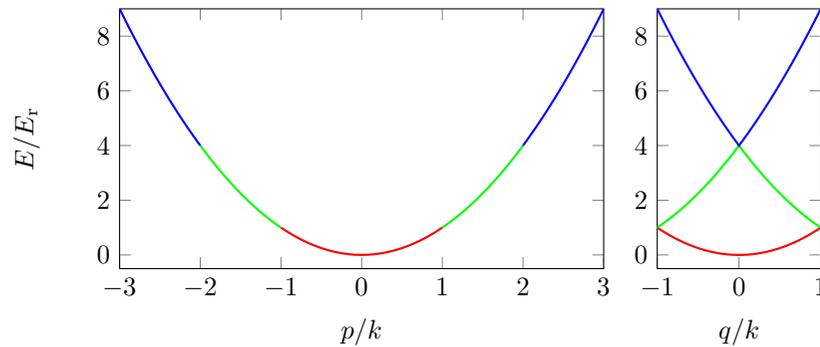


FIGURE 2.2. Gauche : relation de dispersion pour une particule libre $E = p^2/2m$. Droite : parabole repliée, donnant les bandes d'énergie pour la même particule libre dans le formalisme des ondes de Bloch.

3-2 L'équation centrale

On considère maintenant le potentiel $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$, avec $V_0 > 0$. Ce potentiel est de période $a = \pi/k$ et on cherche les fonctions propres (ondes de Bloch) sous la forme [cf. (2.16)-(2.18)]

$$\psi_q(x) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} C_j(q) e^{i(2jk+q)x}, \quad -k < q \leq k. \quad (2.36)$$

On se ramène à l'équation aux valeurs propres pour une matrice tri-diagonale symétrique réelle (infinie), souvent appelée *équation centrale* :

$$\left[\left(2j + \frac{q}{k} \right)^2 + \frac{V_0}{2E_r} \right] C_j - \frac{V_0}{4E_r} (C_{j-1} + C_{j+1}) = \frac{E}{E_r} C_j, \quad (2.37)$$

qui se résout numériquement à l'aide d'algorithmes standards pour un couple $(q/k, V_0/E_r)$ donné. En pratique, pour déterminer par exemple la largeur de la bande fondamentale avec une précision relative de 10^{-6} , on peut limiter la somme (2.36) à $|j| \leq 20$ si l'amplitude du potentiel ne dépasse pas elle-même $V_0/E_r = 50$. Les coefficients C_j sont représentés sur la figure 2.3 pour trois valeurs de V_0 et pour les premières bandes d'énergie. On voit que ces coefficients ne prennent des valeurs significatives que pour des valeurs relativement faibles de j , ce qui justifie de tronquer le système (2.37) à $|j| \leq 20$.

Coefficients de Fourier $C_j(n, q)$ des ondes de Bloch $\psi_{n,q}(x)$

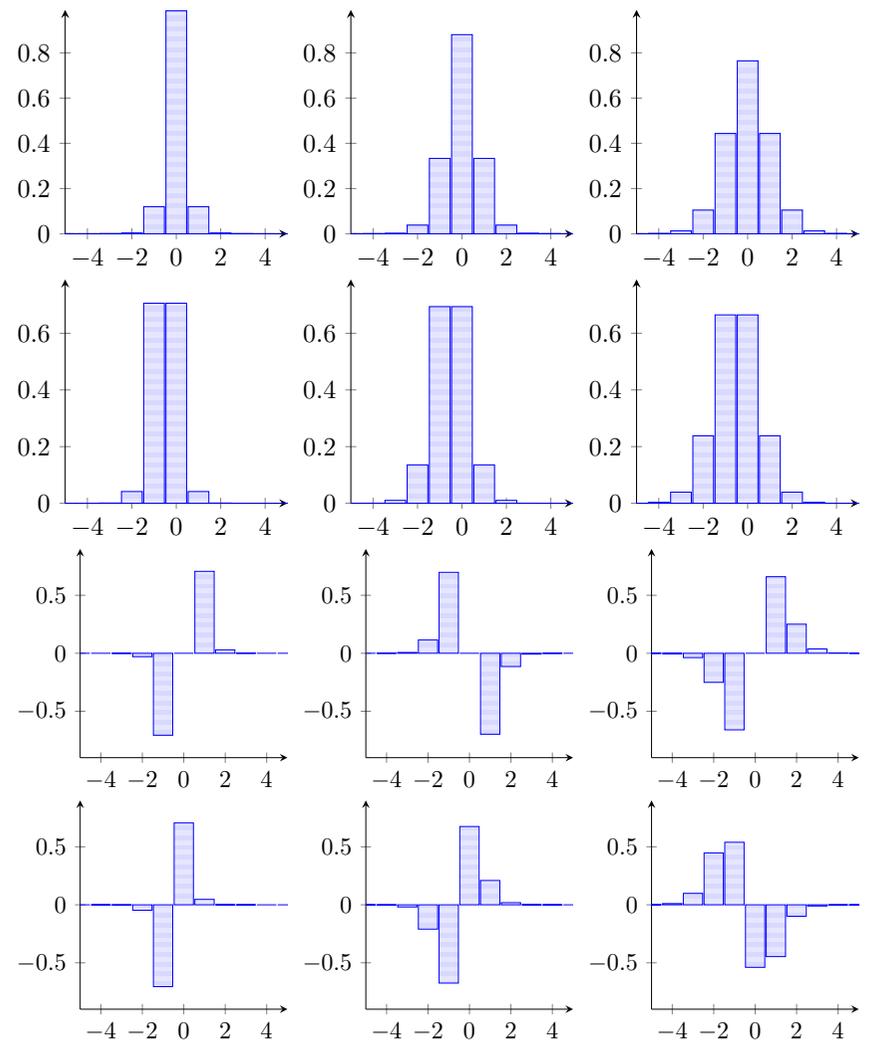


FIGURE 2.3. Coefficients de Fourier $C_j(n, q)$ en fonction de leur indice j . Ces coefficients sont solutions de l'équation centrale (2.37) pour $V_0/E_r = 2$ (colonne de gauche), $V_0/E_r = 8$ (colonne du milieu), $V_0/E_r = 20$ (colonne de droite). Les lignes correspondent de haut en bas à $(n = 0, q = 0)$, $(n = 0, q = \pi/a)$, $(n = 1, q = 0)$, $(n = 1, q = \pi/a)$.

Bandes d'énergie $E_n(q)$

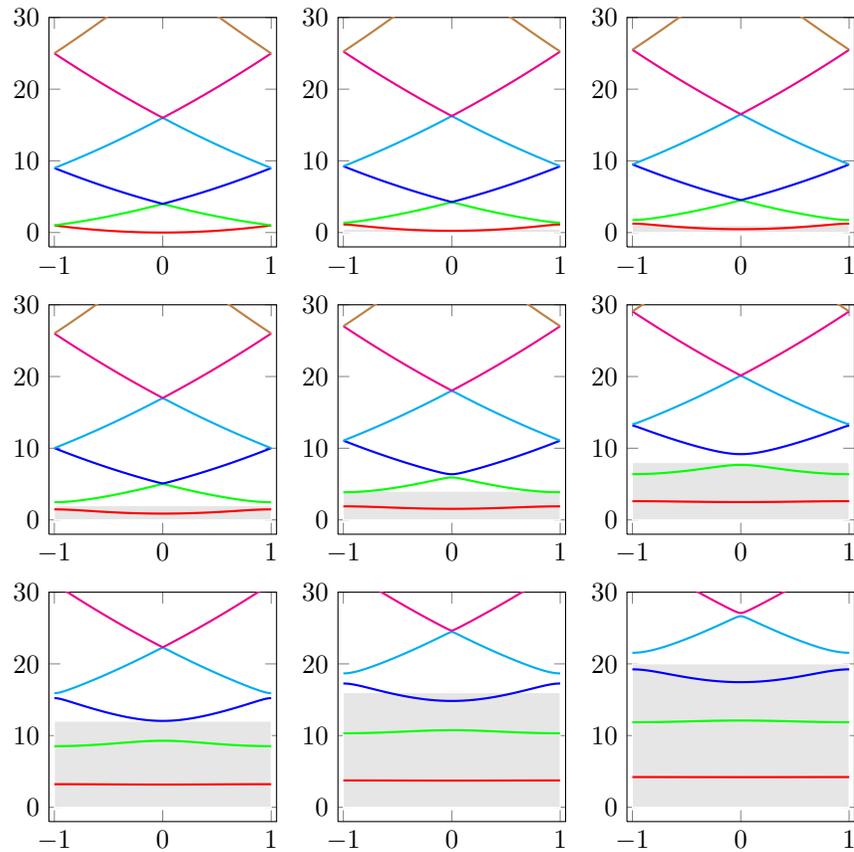


FIGURE 2.4. Premières bandes d'énergie $E_n(q)$ (unité $E_r = \hbar^2 k^2 / 2m$), en fonction de q/k pour un potentiel $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$. De gauche à droite, et de haut en bas : $V_0/E_r = (0, 0.5, 1)$; $(2, 4, 8)$; $(12, 16, 20)$. Le rectangle grisé représente la zone d'énergie inférieure à la hauteur du potentiel V_0 .

Différentes représentations de la même structure de bande

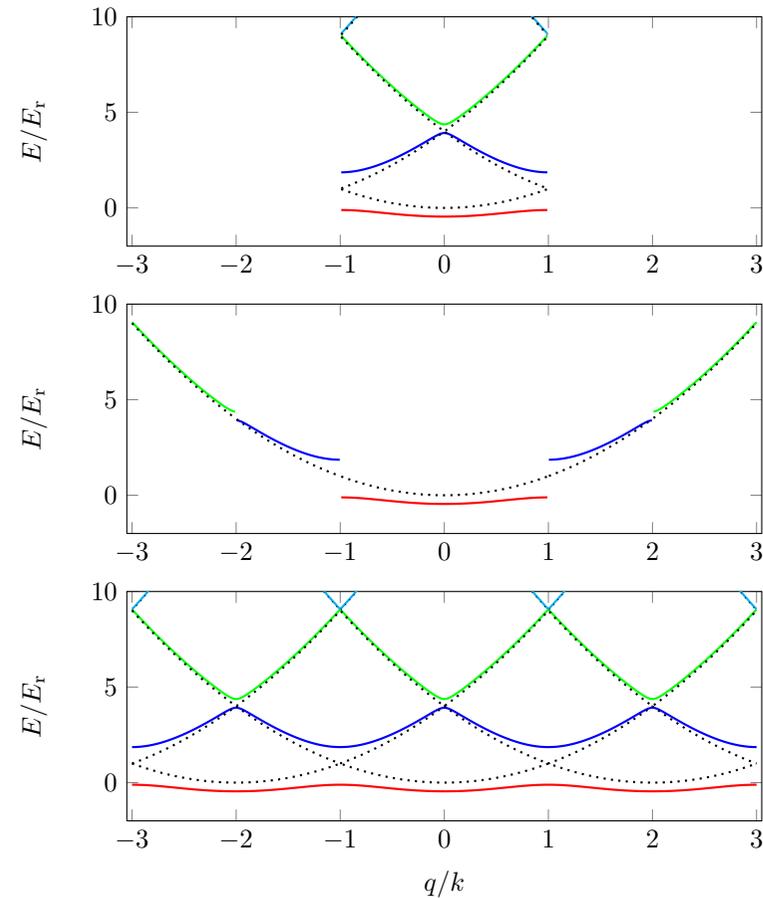


FIGURE 2.5. Trois représentations possibles de la structure de bande. En haut le schéma usuel (bande repliée). Au milieu, le schéma de bande dépliée, qui permet de bien faire le lien avec le cas d'une particule libre. En bas, le schéma de zone répétée, où chaque état propre $\psi_{n,q}$ est représenté plusieurs fois; cette dernière représentation est utile pour l'étude de phénomènes de type oscillations de Bloch. Les tracés sont faits pour $V_0 = 4 E_r$, et on a soustrait ici la valeur moyenne $V_0/2$ du potentiel pour faciliter la comparaison avec le cas $V_0 = 0$. Ce dernier est représenté en pointillés noirs sur chaque figure.

Fonctions de Bloch $\psi_{n,q}(x)$

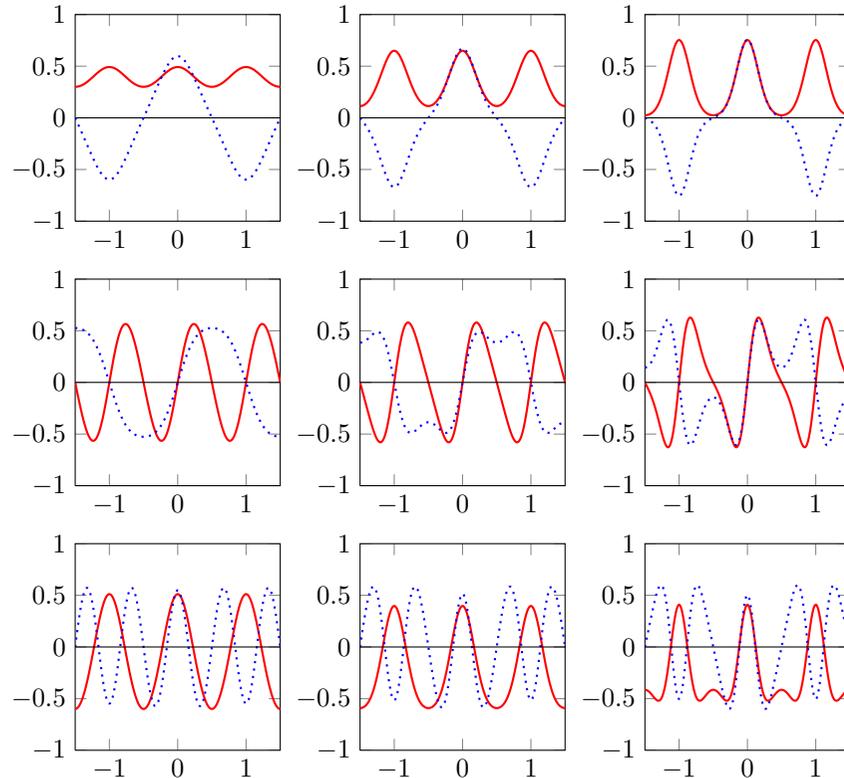


FIGURE 2.6. Fonctions de Bloch $\psi_{n,q}(x)$ en fonction de x/a pour $V_0/E_r = 2$ (colonne de gauche), $V_0/E_r = 8$ (colonne médiane) et $V_0/E_r = 20$ (colonne de droite). Les lignes correspondent à la bande $n = 0$ (haut), $n = 1$ (milieu), $n = 2$ (bas). Sur chaque graphe, on a représenté les quasi-moments $q = 0$ (trait continu rouge) et $q = \pi/a$ (trait pointillé bleu).

On classe comme indiqué plus haut les solutions de (2.37) par énergie croissante et on les repère par l'indice $n = 0, 1, 2, \dots$. Les premières bandes d'énergie $E_n(q)$ sont tracées sur la figure 2.4 pour une série de valeurs de V_0/E_r . Ce tracé montre la transition de la parabole repliée obtenue pour $V_0 = 0$ vers des bandes de plus en plus plates pour des potentiels $V_0 \gg E_r$. Cet aplatissement correspond à la situation où l'amplitude de l'effet tunnel d'un minimum de potentiel vers le minimum adjacent devient négligeable, les niveaux d'énergie devenant alors proches de ceux d'une particule au fond d'un puits de potentiel individuel, $V(x) \approx V_0 k^2 x^2$ pour le puits central par exemple. Nous reviendrons sur cette *limite des liaisons fortes* dans le prochain cours.

Notons que le tracé sous forme repliée de la figure 2.4 n'est pas le seul possible. Nous avons représenté sur la figure 2.5 deux autres représentations qui peuvent être utiles, la représentation dépliée et la représentation répétée.

Nous avons représenté sur la figure 2.6 quelques fonctions de Bloch $\psi_{n,q}(x)$ pour trois valeurs de V_0/E_r . Ces tracés ont été faits en fixant la phase (arbitraire) de la fonction de Bloch de la manière suivante :

- Pour les bandes paires ($n = 0, 2, \dots$), $\psi_{n,q}(x = 0)$ est réel positif.
- Pour les bandes impaires ($n = 1, 3, \dots$), $\frac{d\psi_{n,q}}{dx}(x = 0)$ est réel positif.

Avec cette convention, les fonctions de Bloch pour les quasi-moments $q = 0$ et $q = \pi/a$ (ceux qui sont utilisés pour les tracés de la figure 2.6) sont réelles.

3-3 Le cas du réseau faible

Pour terminer ce paragraphe, donnons quelques éléments sur le cas $V_0 \lesssim E_r$ qui nous servira de base un peu plus loin pour décrire la diffraction de Bragg. Dans ce cas, on peut traiter perturbativement l'effet du potentiel $V(x) = V_0 \sin^2(kx) = (V_0/2) - (V_0/4)(e^{2ikx} + e^{-2ikx})$, le terme dominant de l'hamiltonien étant l'énergie cinétique $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$. Nous avons déjà donné l'expression des états propres de \hat{H}_0 sous forme d'ondes de Bloch [cf. (2.33)], et nous avons tracé les énergies propres $E_n(q)$ sous la forme de la parabole repliée de la figure 2.4a. Regardons maintenant les éléments de matrice de $V(x)$ entre les états propres de \hat{H}_0 . Le terme constant $V_0/2$ du potentiel ne joue aucun rôle, si ce n'est une translation

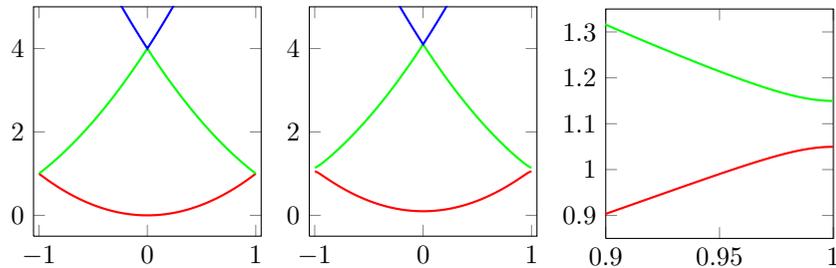


FIGURE 2.7. Bandes d'énergies $E_n(q)$ (unité de E_r) en fonction de q/k , pour un potentiel $V_0 \ll E_r$: (a) : $V_0 = 0$ (même chose qu'à la figure 2.4); (b) : $V_0 = 0.2 E_r$; (c) : zoom sur le bord de bande $q \approx k$ pour le cas $V_0 = 0.2 E_r$. On voit qu'un gap de largeur $\approx V_0/2$ s'ouvre.

globale des énergies. Les termes en $(V_0/4)e^{\pm 2ikx}$ couplent l'onde plane d'impulsion p aux ondes planes $p \pm 2\hbar k$:

$$\hat{V}(x) \phi_p(x) = \frac{V_0}{2} \phi_p(x) - \frac{V_0}{4} \phi_{p-2\hbar k}(x) - \frac{V_0}{4} \phi_{p+2\hbar k}(x), \quad (2.38)$$

soit $\langle \phi_{p \pm 2\hbar k} | \hat{V} | \phi_p \rangle = -V_0/4$. Ce couplage n'est important en pratique que si l'énergie associée à l'onde ϕ_p pour l'hamiltonien H_0 est proche de l'énergie de $\phi_{p-2\hbar k}$ ou $\phi_{p+2\hbar k}$:

$$\frac{p^2}{2m} \approx \frac{(p \pm 2\hbar k)^2}{2m} \Rightarrow p \approx \mp \hbar k. \quad (2.39)$$

Ceci ne se produit que pour les deux bandes d'énergie les plus basses, aux bord de la première zone de Brillouin, c'est-à-dire là où les bandes se touchent.

Considérons donc la base composée par les deux états « ondes planes » $\{|p = -\hbar k\rangle, |p = +\hbar k\rangle\}$ d'énergie cinétique E_r . Ces deux états sont couplés par $V(x)$ et l'énergie des deux états propres de \hat{H} , à l'ordre 1 en V_0 , est obtenue par diagonalisation de la restriction de l'hamiltonien à cette base :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_r + V_0/2 & -V_0/4 \\ -V_0/4 & E_r + V_0/2 \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

Les valeurs propres de cette matrice sont (pour $V_0 > 0$)

$$E = E_r + \frac{V_0}{2} \pm \frac{V_0}{4} \Rightarrow E_0(k) = E_r + \frac{V_0}{4}, \quad E_1(k) = E_r + \frac{3V_0}{4}, \quad (2.41)$$

et les états propres correspondants sont

$$\psi_{0,k}(x) \propto \cos(kx), \quad \psi_{1,k}(x) \propto \sin(kx). \quad (2.42)$$

Ce résultat se comprend aisément : l'état de basse énergie $\psi_{0,k}$ est modulé de sorte que la densité de probabilité $\propto \cos^2(kx)$ est minimale dans les zones de fort potentiel [$V(x) = V_0 \sin^2(kx)$]. Au contraire l'état de haute énergie correspond à une densité de probabilité « en phase » avec la modulation du potentiel. À cet ordre du calcul, l'effet du potentiel $V(x)$ est donc d'ouvrir un gap de largeur $V_0/2$ entre les deux premières bandes. L'ouverture des gaps entre les bandes supérieures fait intervenir des ordres plus élevés de V_0 .

4 Branchement et débranchement d'un réseau

4-1 Extension de théorème de Bloch

Nous aurons fréquemment l'occasion de rencontrer dans les cours qui vont suivre des problèmes gardant leur périodicité spatiale, mais dépendant explicitement du temps. Dans ce paragraphe, nous considérons l'hamiltonien

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + f_t V(\hat{r}), \quad (2.43)$$

où V est spatialement périodique sur un réseau \mathcal{B} et où la fonction f_t décrit le branchement ou le débranchement du réseau. On peut également prendre pour f_t une fonction du type $f_0 + f_1 \cos(\Omega t)$ où la partie modulée, proportionnelle à f_1 ($\ll f_0$), permet de faire une spectroscopie des états dans le réseau [voir par exemple les articles de Denschlag et al. (2002) et Kollath et al. (2006)].

Supposons qu'à l'instant initial la fonction d'onde de la particule a la forme d'une onde de Bloch

$$\phi(\mathbf{r}, t = 0) = e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}} u(\mathbf{r}, t = 0), \quad (2.44)$$

où $u(\mathbf{r}, 0)$ est périodique sur \mathcal{B} . On peut alors montrer qu'à un instant t ultérieur, cette forme d'onde de Bloch est préservée, avec le même quasi-moment \mathbf{q} :

$$\phi(\mathbf{r}, t) = e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{q}} u(\mathbf{r}, t), \quad (2.45)$$

où $u(\mathbf{r}, t)$ est également périodique. La démonstration est simple : la fonction $\phi(\mathbf{r}, t)$ s'obtient en faisant agir l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t)$ sur l'état initial $\phi(\mathbf{r}, 0)$. Puisque $[\hat{H}(t), \hat{T}_{\mathbf{a}_j}] = 0$ à tout temps t , on en déduit que $[\hat{U}(t), \hat{T}_{\mathbf{a}_j}] = 0$ et donc

$$\hat{T}_{\mathbf{a}_j} \hat{U} \phi(\mathbf{r}, 0) = \hat{U} \hat{T}_{\mathbf{a}_j} \phi(\mathbf{r}, 0) \Rightarrow \hat{T}_{\mathbf{a}_j} [\hat{U} \phi(\mathbf{r}, 0)] = e^{i\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{q}} [\hat{U} \phi(\mathbf{r}, 0)]. \quad (2.46)$$

Ceci entraîne que $\phi(\mathbf{r}, t) = \hat{U} \phi(\mathbf{r}, 0)$ est état propre de $\hat{T}_{\mathbf{a}_j}$ avec la même valeur propre $e^{i\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{q}}$ que $\phi(\mathbf{r}, 0)$, d'où l'écriture sous forme d'onde de Bloch (2.45) : le quasi-moment \mathbf{q} est conservé lors de l'évolution.

Dans le cadre des réseaux optiques, cette conservation du quasi-moment q quand on varie dans le temps l'intensité d'un réseau optique a une interprétation simple : l'interaction de l'atome avec la lumière se fait par des processus « absorption d'un photon dans une onde – émission stimulée d'un photon dans l'autre onde ». Ce processus change l'impulsion de l'atome par $\pm 2\hbar k$: un atome isolé préparé initialement dans un état d'impulsion p sera ultérieurement dans une superposition d'états $p + 2n\hbar k$, où n est un entier relatif. Tous ces états correspondent au même quasi-moment q de la zone de Brillouin, q étant défini par $q = p/\hbar$ modulo $2\pi/a$. Deux éléments peuvent venir limiter la portée de ce raisonnement :

- Si le faisceau n'est pas une onde plane, mais présente un gradient d'intensité le long de l'axe x , alors l'impulsion associée à un faisceau lumineux n'est pas exactement égale à $\hbar k$. Ceci revient à dire que le gradient d'intensité cause une force dipolaire sur une échelle *a priori* plus grande que la période $\lambda/2$ du réseau, force qui peut modifier l'impulsion atomique d'une quantité différente de $2\hbar k$.
- Si on met un réseau en mouvement en changeant la fréquence d'une onde progressive par rapport à l'autre, les deux nombres d'onde k_{\pm} associés aux deux ondes progressives ne sont pas strictement égaux et le changement d'impulsion $\hbar(k_+ + k_-)$ n'est pas strictement égal à $2\hbar k$. En d'autres termes, la période spatiale du réseau change avec le temps, ce qui invalide le théorème de Bloch. En pratique, pour les vitesses des réseaux utilisées, ces déviations sont très faibles.

4-2 Branchement et débranchement adiabatiques

Plaçons-nous à 1D pour simplifier les notations. Dans le paragraphe précédent, nous avons déduit de l'invariance par translation la conservation du quasi-moment q . Nous allons maintenant nous placer dans la situation où l'état initial correspond à un des états propres de l'hamiltonien pour la valeur initiale du potentiel $f_0 V(x)$, c'est-à-dire $u(x, 0) = u_{n,q}(x)$. Nous allons chercher ce qu'il est possible de dire sur la partie périodique $u(x, t)$ à un instant ultérieur quand le coefficient f_t varie « doucement ».

La fonction spatialement périodique $u(x, t)$ se détermine en résolvant l'équation différentielle déduite de l'équation de Schrödinger dépendante du temps :

$$i\hbar \frac{\partial |u(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}_{\text{per.}}[q, f_t] |u(t)\rangle \quad (2.47)$$

où $\hat{H}_{\text{per.}}[q, f]$ est défini par (cf. 2.22)

$$\hat{H}_{\text{per.}}[q, f] = \frac{(\hat{p} + \hbar q)^2}{2m} + fV(\hat{x}). \quad (2.48)$$

Pour chaque valeur de q et de f , on connaît les états propres $|u_{n,q}^{(f)}\rangle$ de cet hamiltonien. L'état initial $|u(0)\rangle$ est supposé être un de ces états propres ($|u(0)\rangle = |u_{n,q}^{(f_0)}\rangle$) et il s'agit de déterminer la condition pour qu'à l'instant t l'état $|u(t)\rangle$ soit voisin de $|u_{n,q}^{(f_t)}\rangle$.

Commençons par rappeler le critère général caractérisant l'approximation adiabatique (Messiah 2003). On considère un hamiltonien $\hat{H}(\lambda)$ dépendant d'un paramètre λ , pour lequel on a su résoudre le problème aux valeurs propres. On suppose pour simplifier que les énergies $\epsilon_n(\lambda)$ sont non-dégénérées et forment un ensemble discret. Les vecteurs propres associés sont notés $|\phi_n(\lambda)\rangle$. On s'intéresse à un problème où le paramètre λ dépend du temps. On suppose que le système est préparé à l'instant $t = 0$ dans un état propre $|\phi_n[\lambda(0)]\rangle$ et on cherche à quelle condition le système sera à l'instant t dans l'état $|\phi_n[\lambda(t)]\rangle$ avec probabilité voisine de 1. On peut montrer que ceci sera le cas si l'inégalité

$$\hbar \left| \langle \phi_{n'} | \frac{d}{dt} | \phi_n \rangle \right| \ll |E_{n'} - E_n|, \quad \forall n' \neq n, \quad (2.49)$$

est satisfaite à chaque instant.

Pour appliquer concrètement ce critère à notre problème de branchement et de débranchement de réseau, supposons que les atomes sont initialement préparés dans l'état d'impulsion nulle $|p = 0\rangle$, le réseau étant éteint. Cet état s'identifie avec $|\psi_{n=0,q=0}\rangle$. Quand on branche le réseau, on sait que le quasi-moment va rester $q = 0$ et le problème est de savoir si on quitte ou non dans la bande fondamentale $n = 0$. Limitons-nous au cas de réseaux relativement faibles, $f_t V_0 \lesssim E_r$, pour lesquels on peut déterminer perturbativement les états propres $|\psi_{n,q=0}\rangle$ (Dahan 1997). À l'ordre 1 en V_0 , l'état fondamental $|\psi_{n=0,q=0}\rangle$ s'obtient en mélangeant l'état d'impulsion nulle $|p = 0\rangle$ et les deux états $|p = \pm 2\hbar k\rangle$. L'écart entre les niveaux non perturbés vaut $4E_r$ et la perturbation $fV_0 \sin^2(kx) = -(fV_0/4)(e^{2ikx} + e^{-2ikx}) + fV_0/2$ a pour élément de matrice $-fV_0/4$, ce qui donne

$$|\psi_{n=0,q=0}\rangle \approx |p = 0\rangle + \frac{fV_0}{16E_r} (|p = 2\hbar k\rangle + |p = -2\hbar k\rangle). \quad (2.50)$$

Le couplage non-adiabatique va essentiellement induire une transition vers l'état

$$|\psi_{n',q=0}\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}} (|p = 2\hbar k\rangle + |p = -2\hbar k\rangle). \quad (2.51)$$

L'élément de matrice intervenant dans le membre de gauche de (2.49) s'écrit alors

$$\langle \psi_{n',q=0} | \frac{d}{dt} | \phi_{n=0,q=0} \rangle = \frac{\dot{f}V_0}{16E_r} \sqrt{2} \quad (2.52)$$

et l'écart d'énergie du membre de droite vaut $4E_r$. Le critère d'adiabaticité s'écrit dans ce cas :

$$\dot{f} \ll 32\sqrt{2} \frac{E_r^2}{\hbar V_0}. \quad (2.53)$$

Prenons le cas où l'on branche un potentiel montant à la valeur $V_0 = E_r$ linéairement en temps, pendant une durée τ . Le critère ci-dessus devient

$$\tau \gg \frac{1}{32\sqrt{2}} \frac{\hbar}{E_r}. \quad (2.54)$$

Pour des atomes de sodium éclairés au voisinage de leur longueur d'onde de résonance (589 nm), le temps $\hbar/E_r \approx 6 \mu s$, de sorte que la condition ci-dessus s'écrit $\tau \gg 0.15 \mu s$. Nous avons indiqué sur la figure 2.8 un résultat obtenu par le groupe du NIST pour tester ce chargement et déchargement adiabatique. Notons que la valeur maximale atteinte, $V_0 = 14 E_r$, est en dehors du domaine d'application de notre théorie perturbative.

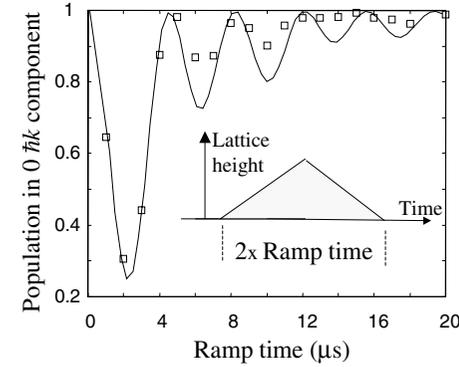


FIGURE 2.8. Test de l'adiabaticité du chargement dans un réseau. Des atomes de sodium sont préparés initialement à impulsion quasi-nulle. On branche, puis on débranche un réseau, la profondeur maximale atteinte étant $V_0 = 14 E_r$. On mesure la fraction d'atomes dans l'état d'impulsion nulle à la fin du processus. La courbe continue est obtenue par intégration directe de l'équation de Schrödinger. Cette figure est extraite de l'article de Denschlag et al. (2002).

Remarque 1. Nous avons considéré ici la bande fondamentale en $q = 0$, ce qui est un cas favorable pour le branchement d'un réseau. Il y a d'autres situations où il est impossible de garantir l'adiabaticité. C'est par exemple le cas si on part de $|\psi_{n=1,q=0}\rangle$ qui a la même énergie que $|\psi_{n=2,q=0}\rangle$ quand le réseau est éteint. C'est également le cas si on part du bord de bande $q = \pm k$. Ce dernier cas est intéressant car il donne naissance à la diffraction de Bragg, très utilisée en pratique comme séparateur de faisceaux atomiques (voir paragraphe ci-dessous).

Remarque 2. Nous nous sommes intéressés ici au critère d'adiabaticité pour une particule unique. Dans le cas où on part d'un état présentant des corrélations entre particules, les échelles de temps nécessaires pour maintenir l'adiabaticité peuvent être très différentes, car les écarts d'énergie entre les différents états à N corps accessibles peuvent être beaucoup plus faibles.

4-3 La diffraction de Bragg

La diffraction de Bragg consiste à tirer parti de la périodicité du réseau pour diffracter de manière efficace une onde dans une direction donnée. Dans le cas d'un atome interagissant avec un réseau optique, on cherche à créer de manière sélective en impulsion des transitions cohérentes

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{p} + 2n\hbar\mathbf{k} \quad (2.55)$$

où n est un entier. Dans ce qui suit, nous nous restreindrons au cas d'un potentiel faible ($V_0 \lesssim E_r$), ce qui garantit qu'on ne peuple significativement qu'une seule classe d'impulsion $\mathbf{p} + 2n\hbar\mathbf{k}$ et non pas un peigne avec de nombreuses composantes.

Considérons ici un réseau à une dimension et des atomes préparés dans un état d'impulsion p déterminée, qui vont interagir pendant une durée t_{int} avec le réseau. Comme $V_0 \lesssim E_r$, seuls seront affectés par le potentiel les atomes avec un quasi-moment q tel que deux bandes d'énergie $E_n(q)$ et $E_{n'}(q)$ sont proches l'une de l'autre et peuvent être efficacement couplées :

- Comme nous l'avons vu en §3-3, ce couplage se produit à l'ordre 1 en V_0 pour $q \approx \pm k$ entre les bandes $n = 0$ et $n = 1$: un atome d'impulsion initiale $p = +\hbar k$ peut être transféré de manière résonante vers l'état d'impulsion $-\hbar k$, dans un processus où un photon est absorbé dans une des deux ondes progressives formant l'onde stationnaire, et un photon est émis de manière stimulée dans l'autre onde (figure 2.9).
- Plus généralement, on voit directement sur la figure 2.7 qu'on peut également observer de la diffraction de Bragg à des ordres plus élevés : (i) en $q \approx \pm k$ entre une bande $2n$ et une bande $2n + 1$ (couplage en V_0^{2n+1}); (ii) en $q \approx 0$ entre une bande $2n + 1$ et une bande $2n + 2$ (couplage en V_0^{2n+2}).

Dans ce qui suit, nous nous concentrerons sur le couplage à l'ordre 1 entre les bandes $n = 0$ et $n = 1$, en utilisant le formalisme des états de Bloch développé précédemment. L'utilisation de ce formalisme pour traiter la diffraction de Bragg a été initié par Champenois et al. (2001) [pour des approches développées antérieurement, on pourra consulter Keller et al. (1999) et Horne et al. (1999)].

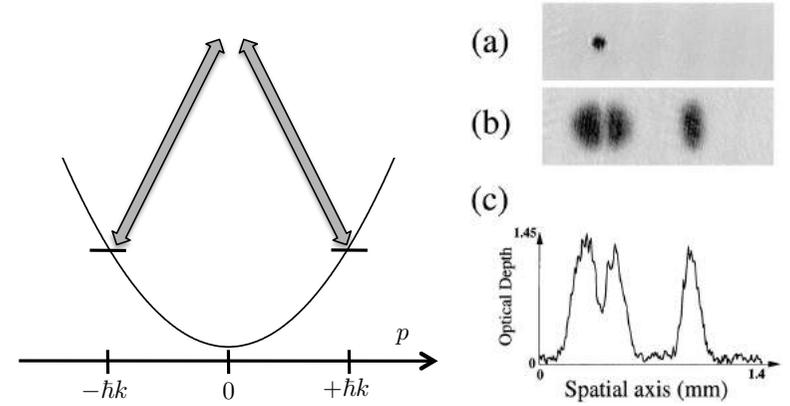


FIGURE 2.9. Gauche : la diffraction de Bragg vue en terme de transition à deux photons. Les deux états $p = \pm\hbar k$ sont couplés de manière résonante par un processus absorption dans une onde progressive – émission stimulée dans l'autre onde progressive. Droite : Observation d'une transition de Bragg avec des atomes d'un condensat de sodium (figure extraite de (Kozuma et al. 1999)). (a) Image in situ avant l'impulsion de Bragg. (b) Image après impulsion de Bragg et temps de vol de 10 ms; seul un pic étroit de la distribution en vitesse a subi le phénomène de diffraction et a gagné l'impulsion $2\hbar k$. (c) Profil de densité associé à l'image (b).

Considérons la situation simple où la fonction f_t est un créneau, égale à 1 pour t entre 0 et t_{int} et nulle ailleurs. Avant le branchement du réseau, l'atome est dans l'état $|p\rangle$. Au moment du branchement du potentiel à l'instant $t = 0$, nous supposons que l'état de l'atome reste $|p\rangle$: c'est l'approximation soudaine, valable si le temps réel de branchement est court devant l'inverse de toutes les fréquences caractéristiques du problème. Décomposons cet état sur les états propres de l'hamiltonien en présence de réseau. Comme $V_0 \lesssim E_r$, seuls les deux états propres des bandes inférieures $|\psi_{n=0,q}\rangle$ et $|\psi_{n=1,q}\rangle$ avec $q = p/\hbar$ sont peuplés de manière significative :

$$|\Psi(t=0)\rangle = |p\rangle = \cos(\theta/2) |\psi_{n=0,q}\rangle - \sin(\theta/2) |\psi_{n=1,q}\rangle. \quad (2.56)$$

Nous avons déjà déterminé en (2.42) la relation entre $|p\rangle$ et les états propres $|\psi_{n=0/1,q}\rangle$ dans le cas particulier $p = \hbar k$. Dans le cas plus général où p n'est pas strictement égal à $\hbar k$, le calcul est un peu plus long. Il faut prendre en compte dans l'hamiltonien (2.40) la différence d'énergie cinétique entre

les deux états de base, $p^2/2m$ pour l'un, $(p - 2\hbar k)^2/2m$ pour l'autre. Après quelques lignes de calcul, on trouve la valeur de l'angle de mélange θ intervenant dans (2.56) :

$$\cotan \theta = [1 - p/(\hbar k)] \frac{8E_r}{V_0}. \quad (2.57)$$

L'évolution ultérieure en présence du réseau est une simple oscillation de Rabi et la probabilité de trouver l'atome dans l'état d'impulsion $p - 2\hbar k$ au moment de l'extinction du réseau s'écrit

$$\mathcal{P}_{p \rightarrow p-2\hbar k}(t) = \sin^2 \theta \sin^2(\Omega t/2). \quad (2.58)$$

Cette oscillation est parfois appelée *Pendellösung*, terme introduit initialement pour décrire la diffraction des rayons X par un cristal. Elle se fait à la pulsation $\Omega \approx V_0/(2\hbar)$ puisque l'écart d'énergie entre les deux niveaux est $\approx V_0/2$ [cf. (2.41)]. Le préfacteur

$$\sin^2 \theta = \frac{(V_0/8E_r)^2}{[p/(\hbar k) - 1]^2 + (V_0/8E_r)^2} \quad (2.59)$$

conditionne la sélectivité en impulsion du phénomène de diffraction de Bragg. Pour $p = \hbar k$, l'oscillation se fait avec une amplitude de 100% : en choisissant $\Omega t_{\text{int}} = \pi/2$, on réalise un séparateur de faisceau 50%-50%, et on obtient un miroir de Bragg parfait pour $\Omega t_{\text{int}} = \pi$. Pour $V_0 \ll E_r$, l'amplitude de modulation chute rapidement quand on s'écarte de la condition $p = \hbar k$, la largeur totale à mi-hauteur de la courbe de résonance étant

$$\frac{\Delta p_{1/2}}{\hbar k} = \frac{V_0}{4E_r}. \quad (2.60)$$

On trouvera dans Champenois et al. (2001) une comparaison entre la prédiction de ce modèle à deux niveaux et celle obtenue par résolution numérique complète prenant en compte un grand nombre d'états propres de l'hamiltonien. Les écarts entre les résultats des deux traitements sont négligeables pour $V_0 \lesssim E_r$.

La diffraction de Bragg a été observée pour la première fois dans le groupe de D. Pritchard (Martin et al. 1988). Au cours des dernières années, elle est devenue un outil essentiel en interférométrie à ondes de matière et en physique des atomes froids :

- En imposant successivement trois diffractions de Bragg correspondant à $\Omega t = \pi/2, \pi, \pi/2$, on réalise un interféromètre à deux voies de type Mach-Zender (voir par exemple Lepoutre et al. (2012)). On utilise fréquemment une variante de cette diffraction de Bragg où le transfert d'impulsion de $2\hbar k$ s'accompagne d'un changement d'état interne [transitions Raman entre niveaux hyperfins (Kasevich & Chu 1991)]. Les interféromètres utilisant des transitions Raman peuvent eux aussi fonctionner dans le mode $\pi/2-\pi-\pi/2$ ou dans le schéma de Ramsey-Bordé, à quatre zones d'interaction (voir par exemple Durfee et al. (2006); Gauguier et al. (2009)). Il est également possible de balayer dans le temps la fréquence d'une des deux ondes progressives formant l'onde stationnaire, de manière à empiler les diffractions de Bragg successives pour augmenter l'impulsion transférée. On se rapproche alors du problème des oscillations de Bloch, sur lequel nous reviendrons longuement dans la suite. On trouvera dans Kovachy et al. (2012) un exemple d'interféromètre $\pi/2-\pi-\pi/2$ fonctionnant avec des séparateurs de $10 \hbar k$ grâce à une fonction f_t optimisée.
- On peut tirer parti de la sélectivité en vitesse (2.60) pour mesurer la distribution en impulsion d'un gaz d'atomes libres (Kozuma et al. 1999; Stenger et al. 1999). En pratique, pour sonder la population d'une classe de vitesse v , on utilise un réseau optique « en mouvement », formé par deux ondes progressives de pulsation $\omega_L \pm k(v - v_r)$ où $v_r = \hbar k/m$ est la vitesse de recul. On choisit par exemple $\Omega t = \pi$ et on mesure la population transférée dans la classe de vitesse $v - 2v_r$ (voir par exemple la figure 2.9 extraite de Kozuma et al. (1999)). De manière plus générale, la diffraction de Bragg est également utilisée pour sonder des systèmes de particules en interaction. On envoie deux faisceaux laser de pulsations ω_j et de vecteurs d'onde \mathbf{k}_j , $j = 1, 2$, et on étudie la probabilité que le système effectue une transition absorption-émission, qui lui transfère l'énergie $\hbar\omega = \hbar(\omega_1 - \omega_2)$ et l'impulsion $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$. En variant la fréquence des lasers et leur angle, on peut alors reconstruire le facteur de structure dynamique $S(\mathbf{k}, \omega)$ de ce système. Cette méthode a par exemple été utilisée par Steinhauer et al. (2002) pour mesurer la relation de dispersion des excitations de Bogoliubov dans un condensat en interaction.

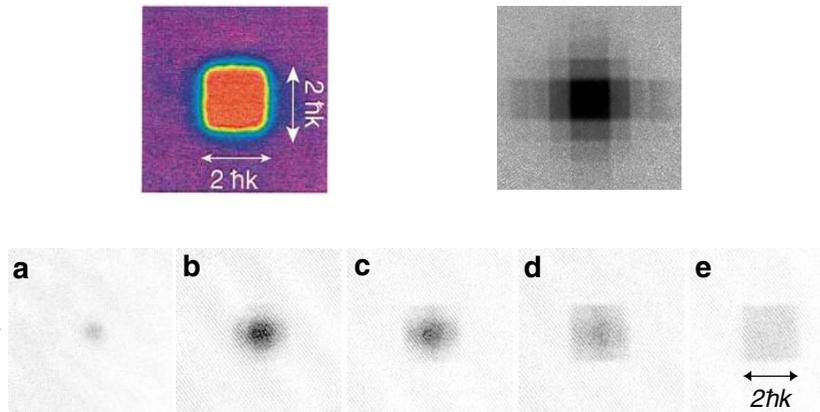


FIGURE 2.10. Ligne supérieure : figure extraite de Greiner et al. (2001), obtenue avec des atomes bosoniques de ^{87}Rb placés dans un réseau carré à deux dimensions. Ligne inférieure : figure extraite de Köhl et al. (2005), obtenue avec des atomes fermioniques de ^{40}K (sans interaction) placés dans un réseau cubique 3D.

4-4 Comment observer la structure de bande ?

La notion de branchement et de débranchement adiabatique d'un réseau trouve également une application importante dans la technique de *band mapping*, où l'on transfère le contenu des différentes bandes d'énergie en présence du réseau vers des états d'impulsion bien définie en absence du réseau. Il faut pour cela éteindre adiabatiquement le réseau pour qu'un atome initialement dans un état de la bande n avec le quasi-moment q finisse dans l'état d'impulsion $p = \hbar(q \pm 2n\hbar k)$. Le moyen le plus simple, au moins à 1D, pour relier sans ambiguïté l'état initial $\psi_{n,q}$ à l'impulsion finale p est d'utiliser le schéma de bande dépliée représenté sur la figure 2.5 (ligne du milieu).

Les photos montrées en figure 2.10, obtenues par le groupe de Munich, constituent une des premières démonstrations de la visualisation de la zone de Brillouin permise par cette technique. Pour la photo de gauche, on part d'un réseau 2D profond ($12 E_r$) pour lequel la largeur de la bande fondamentale ($W_0 \sim E_r/20$) est très petite devant le gap entre la bande $n = 0$ et la première bande excitée $n = 1$ ($\Delta_0 \sim 5 E_r$). On place dans le réseau

un gaz de bosons (^{87}Rb) dont la température est intermédiaire entre ces deux échelles d'énergie : $W_0 \ll k_B T \ll \Delta_0$. Le gaz remplit donc les états $\psi_{0,q}$ de la première bande de manière uniforme, mais la population des bandes excitées est négligeable. Après extinction adiabatique du potentiel, les atomes sont libres et leur distribution d'impulsion est une fonction créneau non nulle seulement entre $-\hbar k$ et $\hbar k$. Pour observer cette distribution d'impulsion, il suffit de faire un temps de vol de durée t_{vol} suffisamment longue pour que le nuage s'étale d'une quantité grande devant sa taille initiale : on obtient un segment d'atomes (un carré à deux dimensions, un cube à trois dimensions) de longueur $2\hbar k t_{\text{vol}}/m$.

Dans la photo de droite de la figure 2.10, on a délibérément peuplé les bandes supérieures en appliquant une paire de faisceaux laser additionnels qui créent une transition Raman entre la bande n et la bande $n+1$. Le temps de vol révèle alors la population transférée dans ces bandes supérieures, avec une répartition quasi-uniforme à l'intérieur de chaque bande.

Nous montrons sur la ligne inférieure de la figure 2.10 un résultat obtenu pour des fermions sans interaction (^{40}K) dans un réseau cubique 3D par le groupe de T. Esslinger (Köhl et al. 2005). Du fait du principe de Pauli, ces fermions (polarisés) remplissent peu à peu tous les états de la première bande quand on augmente leur nombre (de droite à gauche). Sur l'image "e", la bande est pleine (on a réalisé un isolant de bande) et la structure carrée de la zone de Brillouin est parfaitement visible.

5 Propagation de paquets d'ondes

Une caractéristique essentielle d'un réseau optique est la relation de dispersion $E_n(q)$ associée à chaque bande. Dans ce paragraphe, nous montrons comment extraire deux quantités physiques importantes liées à cette relation : la vitesse de groupe d'un paquet d'ondes et la masse effective. Nous terminons ce paragraphe en donnant quelques indications sur la modification de l'interaction entre atomes due à leur localisation dans le réseau.

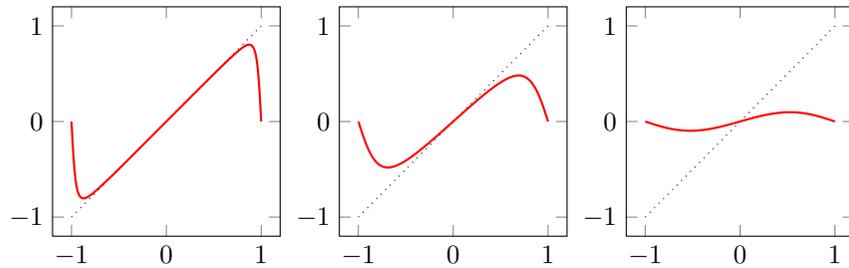


FIGURE 2.11. Vitesse de groupe $v_g(q)$ (en unité de vitesse de recul $v_r = \hbar k/m$) pour le réseau $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$ pour $V_0/E_r = 0.4, 2, 8$, en fonction de q/k . La ligne pointillée correspond au résultat en l'absence de réseau : $mv_g = \hbar q$.

5-1 La vitesse de groupe dans un réseau optique

Supposons que l'on a su préparer une particule dans un état initial $\psi(x, 0)$ superposition d'états de Bloch $\psi_{n,q}(x)$ appartenant tous à la même bande n :

$$\psi(x, 0) = \int c(q) \psi_{n,q}(x) dq. \quad (2.61)$$

Notons q_0 le centre de la distribution $c(q)$ et supposons également que sa dispersion Δq autour de q_0 est beaucoup plus faible que la largeur $2k$ de la zone de Brillouin. Cette hypothèse autorise le développement

$$E_n(q) = E_n(q_0) + (q - q_0) \left. \frac{dE_n}{dq} \right|_{q=q_0}. \quad (2.62)$$

Remarquons que l'hypothèse $\Delta q \ll k$ entraîne que le paquet d'ondes s'étend sur plusieurs sites, typiquement $k/\Delta q$. Nous poserons dans la suite

$$v_{g,n}(q_0) = \frac{1}{\hbar} \left. \frac{dE_n}{dq} \right|_{q=q_0}, \quad (2.63)$$

quantité qui a la dimension d'une vitesse et dont nous allons montrer qu'elle peut s'interpréter comme la vitesse de groupe pour la bande n autour du quasi-moment q_0 .

À l'instant t , la fonction d'onde de la particule est

$$\psi(x, t) = \int c(q) \psi_{n,q}(x) e^{-iE_n(q)t/\hbar} dq, \quad (2.64)$$

ce qui s'écrit encore en utilisant le développement (2.62)

$$\psi(x, t) \approx e^{-i\omega_0 t} \int c(q) \psi_{n,q}(x) e^{-iqv_{g,n}t} dq, \quad (2.65)$$

où on a introduit la pulsation

$$\omega_0 = E_n(q_0)/\hbar - q_0 v_{g,n}. \quad (2.66)$$

Choisissons l'instant t tel que $v_{g,n}t = a$. En utilisant le fait que $\psi_{n,q}(x-a) = e^{-iqa} \psi_{n,q}(x)$, on en déduit que

$$\begin{aligned} \psi(x, t = a/v_{g,n}) &\approx e^{-i\omega_0 t} \int c(q) \psi_{n,q}(x-a) dq \\ &= e^{-i\omega_0 t} \psi(x-a, 0). \end{aligned} \quad (2.67)$$

On voit que le paquet d'ondes se reforme périodiquement sans déformation (à cet ordre du calcul) avec des décalages successifs de a à tous les instants séparés de $a/v_{g,n}$, ce qui correspond bien à une propagation avec la vitesse de groupe $v_{g,n}$.

5-2 La notion de masse effective

Dans l'étude que nous avons faite pour le potentiel sinusoïdal, nous avons trouvé que les bandes $E_n(q)$ sont extrémales aux points $q = 0$ et $q = \pm k$. En ces points, la vitesse de groupe s'annule et la bande est caractérisée par sa courbure, à partir de laquelle on définit la masse effective m^* par

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E_n}{dq^2}, \quad (2.68)$$

quantité qui peut être positive ou négative. Cette masse effective est tracée pour le fond de la bande fondamentale sur la figure 2.12. Sa valeur est $m^* \approx m$ pour des réseaux peu profonds et elle augmente indéfiniment quand V_0 augmente.

Considérons une particule préparée dans la bande fondamentale, avec une distribution de quasi-moments centrée sur \bar{q} et de dispersion Δq , telle que $|\bar{q}|, \Delta q \ll k$. On peut alors écrire l'énergie de chaque état de Bloch sous la forme

$$E(q) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} + \text{constante}. \quad (2.69)$$

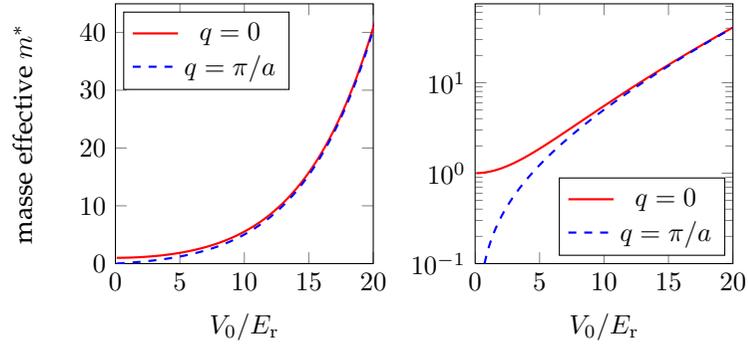


FIGURE 2.12. Masse effective m^*/m [cf. (2.68)] en fonction de V_0/E_r pour la bande fondamentale $n = 0$ et pour les deux valeurs $q = 0$ et $q = \pi/a$ du quasi-moment. Noter que le signe de m^* est négatif pour $q = \pi/a$ et que l'on a donc tracé $|m^*|/m$ dans ce cas (gauche : coordonnées linéaires, droite : coordonnées logarithmiques).

On a déterminé ci-dessus la vitesse $d\bar{x}/dt$ du centre d'un paquet d'ondes que l'on construit en superposant des états de ce type :

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \left. \frac{dE_n}{dq} \right|_{q=\bar{q}} = \frac{\hbar\bar{q}}{m^*}. \quad (2.70)$$

Complétons ce résultat par un autre point que nous prouverons plus tard dans ce cours : si on soumet une particule placée dans un potentiel périodique à une force F uniforme (à l'échelle du paquet d'ondes), alors l'évolution du quasi-moment est donnée par

$$\hbar \frac{d\bar{q}}{dt} = F. \quad (2.71)$$

La réunion des deux équations (2.70-2.71) correspond au mouvement d'une particule fictive de masse m^* dans le champ de force provenant de F . Le seul effet du réseau sur cette particule isolée est la renormalisation de la masse $m \rightarrow m^*$.

5-3 Les interactions dans le réseau, un premier aperçu

L'étude des interactions dans un réseau optique est un sujet très vaste que nous n'allons qu'effleurer ici. Le point que nous voulons montrer est qu'un réseau fournit un moyen assez simple pour augmenter les effets des interactions entre particules, en localisant leur fonction d'onde au voisinage des minima de potentiel.

Nous considérons dans ce paragraphe des particules bosoniques mobiles selon l'axe x . Pour simplifier les notations, nous prenons un système de taille L , avec des conditions aux limites périodiques (L est un multiple de la période a du réseau : $L = Na$). Dans ces conditions, le quasi-moment est quantifié :

$$q = \frac{2\pi}{L} j = k \frac{2j}{N}, \quad j \text{ entier} \in \left\{ -\frac{N}{2} + 1, \dots, 0, \dots, \frac{N}{2} \right\}. \quad (2.72)$$

Nous supposons que ces particules interagissent par une interaction de contact $g \delta(x)$. En absence de potentiel de réseau, l'hamiltonien en seconde quantification s'écrit

$$\hat{H} = \sum_p \frac{p^2}{2m} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p + \frac{g}{2L} \sum_{p_1, p_2, p_3} \hat{a}_{p_1 - p_3}^\dagger \hat{a}_{p_2 + p_3}^\dagger \hat{a}_{p_2} \hat{a}_{p_1} \quad (2.73)$$

où \hat{a}_p^\dagger crée un atome dans l'onde plane d'impulsion p , $\psi_p = e^{ipx/\hbar} / \sqrt{L}$.

Supposons maintenant le réseau présent et écrivons l'hamiltonien en seconde quantification dans la base des ondes de Bloch. Pour simplifier les notations, limitons-nous au cas où seule la bande fondamentale $n = 0$ est peuplée et notons \hat{b}_q^\dagger l'opérateur créant un atome dans l'état $\psi_{0,q}$. On trouve

$$\hat{H} = \sum_q E_0(q) \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q + \frac{g}{2} \sum_{q_1, q_2, q'_1, q'_2} C(q_1, q_2, q'_1, q'_2) \hat{b}_{q'_1}^\dagger \hat{b}_{q'_2}^\dagger \hat{b}_{q_2} \hat{b}_{q_1} \quad (2.74)$$

avec

$$C(q_1, q_2, q'_1, q'_2) = \int_0^L \psi_{0,q'_1}^*(x) \psi_{0,q'_2}^*(x) \psi_{0,q_1}(x) \psi_{0,q_2}(x) dx. \quad (2.75)$$

Dans la version discrétisée que nous avons choisie ici pour la zone de Brillouin, une écriture commode pour les ondes de Bloch est

$$\psi_{0,q}(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{iqx} u_{0,q}(x), \quad (2.76)$$

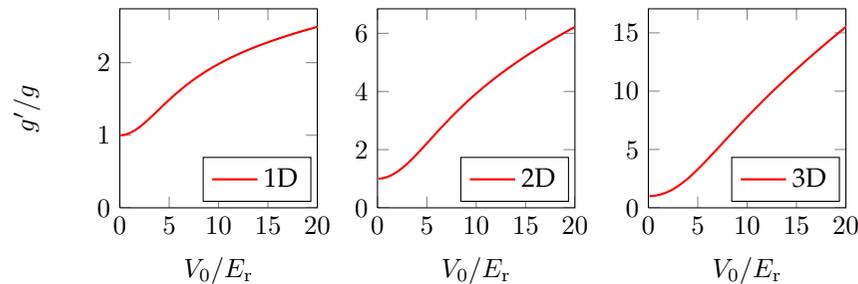


FIGURE 2.13. Facteur g'/g d'augmentation des interactions de contact en fonction de V_0/E_r [cf. (2.80)]. Cette augmentation est due à la localisation des fonctions de Bloch au voisinage des minima du potentiel V . Les valeurs à 2D et 3D sont simplement le carré et le cube de la valeur à 1D.

où $\psi_{n,q}$ est normalisée sur le segment de longueur L et où la partie périodique $u_{n,q}$ est normalisée sur la cellule unité de longueur a :

$$\int_0^L |\psi_{n,q}(x)|^2 dx = 1, \quad \int_0^a |u_{n,q}(x)|^2 dx = 1. \quad (2.77)$$

La forme de Bloch impose immédiatement la relation (conservation de l'impulsion) :

$$q'_1 + q'_2 = q_1 + q_2 \quad (\text{modulo } 2\pi/a). \quad (2.78)$$

Supposons pour simplifier que seuls les états du bas de la bande $n = 0$ sont peuplés ($|q| \ll k$). On peut alors approcher l'hamiltonien (2.74) par

$$\hat{H} \approx \sum_q \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q + \frac{g'}{2L} \sum_{q_1, q_2, q_3} \hat{b}_{q_1 - q_3}^\dagger \hat{b}_{q_2 + q_3}^\dagger \hat{b}_{q_2} \hat{b}_{q_1} \quad (2.79)$$

où le coefficient d'interaction « renormalisé » g' est donné par

$$\frac{g'}{g} = a \int_0^a |u_{0,0}(x)|^4 dx. \quad (2.80)$$

En l'absence de réseau, la partie périodique de la fonction de Bloch $u_{0,0}(x)$ est constante et est égale à $1/\sqrt{a}$, de sorte que $g'/g = 1$. En présence d'un réseau, la fonction $u_{0,0}$ devient modulée tout en restant normalisée

($\int_0^a |u_{0,0}(x)|^2 dx = 1$), ce qui entraîne $g' > g$: le fait de localiser les atomes en des zones restreintes de l'espace augmente leurs interactions. Le rapport g'/g est tracé en fonction de la profondeur du réseau sur la figure 2.13. Si on passe à 2D ou 3D avec un réseau carré ou cubique simple (potentiel en $V(x) + V(y) + V(z)$), il faut prendre le carré ou le cube de ce rapport pour évaluer le changement du couplage g (voir figure 2.13).

En résumé, l'addition du réseau a deux conséquences vis-à-vis de la dynamique en bas de la bande $n = 0$:

- Il augmente la masse effective et vient donc *diminuer* la contribution de l'énergie cinétique.
- Il augmente le coefficient g et vient donc *augmenter* la contribution de l'énergie d'interaction.

Ces deux effets vont dans le même sens en favorisant l'apparition d'états fortement corrélés au détriment d'états de champ moyen, comme un condensat de Bose-Einstein. Le point culminant de cet effet est la transition superfluide-isolant de Mott. Toutefois, avant d'en arriver à ce point, on passe par une étape, pour des réseaux relativement forts, où tous les états de la bande fondamentale acquièrent une population significative. L'hamiltonien (2.79) n'est alors plus pertinent et il faut revenir à (2.74) pour décrire la dynamique du problème. Nous verrons au cours prochain une version plus facile à manipuler dans ce cas des réseaux forts, utilisant la base des fonctions de Wannier.

6 Références

- Ashcroft, N. W. & N. D. Mermin (1976), *Solid State Physics*, New York: Holt, Rinehardt and Winston.
- Bloch, F. (July 1929), « Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern », in *Zeitschrift für Physik* 52, pp. 555–600.
- Champenois, C, M Buchner, R Dehuille, R Mathevet, C Robilliard, C Rizzo & J Vigue (2001), « Atomic diffraction by a laser standing wave : Analysis using Bloch states », in *European Physical Journal D* 13.2, 271–278.
- Dahan, Maxime (1997), « Transport et relaxation d'atomes de césium : oscillations de Bloch et résonance de diffusion », PhD thesis, Université Paris 6.

- Denschlag, J Hecker, J E Simsarian, H Häffner, C McKenzie, A Browaeys, D Cho, K Helmerson, S L Rolston & W D Phillips (2002), « A Bose-Einstein condensate in an optical lattice », in *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* 35.14, p. 3095.
- Durfee, D. S., Y. K. Shaham & M. A. Kasevich (2006), « Long-Term Stability of an Area-Reversible Atom-Interferometer Sagnac Gyroscope », in *Phys. Rev. Lett.* 97 (24), p. 240801.
- Floquet, Gaston (1883), « Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques », in *Annales de l'École Normale Supérieure*, pp. 47–88.
- Gauguet, A., B. Canuel, T. Lévèque, W. Chaibi & A. Landragin (2009), « Characterization and limits of a cold-atom Sagnac interferometer », in *Phys. Rev. A* 80 (6), p. 063604.
- Greiner, Markus, Immanuel Bloch, Olaf Mandel, Theodor W. Hänsch & Tilman Esslinger (2001), « Exploring Phase Coherence in a 2D Lattice of Bose-Einstein Condensates », in *Phys. Rev. Lett.* 87 (16), p. 160405.
- Grynberg, G & C Robilliard (2001), « Cold atoms in dissipative optical lattices », in *Physics Reports* 355.5-6, 335–451.
- Grynberg, G., B. Lounis, P. Verkerk, J.-Y. Courtois & C. Salomon (1993), « Quantized motion of cold cesium atoms in two- and three-dimensional optical potentials », in *Phys. Rev. Lett.* 70 (15), pp. 2249–2252.
- Guidoni, L., C. Triché, P. Verkerk & G. Grynberg (1997), « Quasiperiodic Optical Lattices », in *Phys. Rev. Lett.* 79 (18), pp. 3363–3366.
- Hemmerich, A. & T. W. Hänsch (1993), « Two-dimensional atomic crystal bound by light », in *Phys. Rev. Lett.* 70 (4), pp. 410–413.
- Horne, M., I. Jex & A. Zeilinger (1999), « Schrödinger wave functions in strong periodic potentials with applications to atom optics », in *Phys. Rev. A* 59 (3), pp. 2190–2202.
- Kasevich, Mark & Steven Chu (1991), « Atomic interferometry using stimulated Raman transitions », in *Phys. Rev. Lett.* 67 (2), pp. 181–184.
- Keller, C, J Schmiedmayer, A Zeilinger, T Nonn, S Durr & G Rempe (1999), « Adiabatic following in standing-wave diffraction of atoms », in *Applied Physics B - Lasers and Optics* 69.4, 303–309.
- Kittel, Charles (1987), *Quantum Theory of Solids*, John Wiley & Sons Inc..
- Köhl, Michael, Henning Moritz, Thilo Stöferle, Kenneth Günter & Tilman Esslinger (2005), « Fermionic Atoms in a Three Dimensional Optical Lattice : Observing Fermi Surfaces, Dynamics, and Interactions », in *Phys. Rev. Lett.* 94 (8), p. 080403.
- Kollath, C., A. Iucci, T. Giamarchi, W. Hofstetter & U. Schollwöck (2006), « Spectroscopy of Ultracold Atoms by Periodic Lattice Modulations », in *Phys. Rev. Lett.* 97 (5), p. 050402.
- Kovachy, Tim, Sheng-wei Chiow & Mark A. Kasevich (2012), « Adiabatic-rapid-passage multiphoton Bragg atom optics », in *Phys. Rev. A* 86 (1), p. 011606.
- Kozuma, M., L. Deng, E. W. Hagley, J. Wen, R. Lutwak, K. Helmerson, S. L. Rolston & W. D. Phillips (1999), « Coherent Splitting of Bose-Einstein Condensed Atoms with Optically Induced Bragg Diffraction », in *Phys. Rev. Lett.* 82 (5), pp. 871–875.
- Lepoutre, S., A. Gauguet, G. Tréneç, M. Büchner & J. Vigué (2012), « He-McKellar-Wilkens Topological Phase in Atom Interferometry », in *Phys. Rev. Lett.* 109 (12), p. 120404.
- Martin, Peter J., Bruce G. Oldaker, Andrew H. Miklich & David E. Pritchard (1988), « Bragg scattering of atoms from a standing light wave », in *Phys. Rev. Lett.* 60 (6), pp. 515–518.
- Messiah, A. (2003), *Mécanique quantique*, vol. II, Paris: Dunod.
- Steinhauer, J., R. Ozeri, N. Katz & N. Davidson (2002), « Excitation spectrum of a Bose-Einstein condensate », in *Phys. Phys. Lett.* 88.12, p. 120407.
- Stenger, J., S. Inouye, A. P. Chikkatur, D. M. Stamper-Kurn, D. E. Pritchard & W. Ketterle (1999), « Bragg Spectroscopy of a Bose-Einstein Condensate », in *Phys. Rev. Lett.* 82 (23), pp. 4569–4573.
- Tarruell, Leticia, Daniel Greif, Thomas Uehlinger, Gregor Jotzu & Tilman Esslinger (2012), « Creating, moving and merging Dirac points with a Fermi gas in a tunable honeycomb lattice », in *Nature* 483.7389, 302–U91.
- Zak, J. (1989), « Berry's phase for energy bands in solids », in *Phys. Rev. Lett.* 62 (23), pp. 2747–2750.

Chapitre 3

Réseaux optiques dans le régime des liaisons fortes

Sommaire

1	Les fonctions de Wannier	2
1-1	Une nouvelle base	2
1-2	Fonctions de Wannier dans l'espace réciproque	3
1-3	L'hamiltonien en termes de fonctions de Wannier	3
1-4	Le cas multi-dimensionnel	4
2	Potentiel sinusoïdal fortement modulé	5
2-1	Largeur des bandes permises	5
2-2	Éléments de matrice des sauts entre voisins	5
2-3	Spectre de liaisons fortes	6
3	Hamiltonien de Hubbard	7
3-1	L'hamiltonien à une particule (pas d'interaction)	7
3-2	Le signe du coefficient tunnel	8
3-3	Les interactions dans le modèle de Hubbard	8
3-4	Illustration : les paires répulsives liées	10
4	Le cas d'un super-réseau	12
4-1	L'arbitraire de phase	12
4-2	Le mélange de différentes bandes	12
4-3	L'hamiltonien de Hubbard pour le super-réseau	13
4-4	Bandes plates	14
5	Références	17

Les ondes de Bloch décrites au cours précédent sont au mouvement dans un potentiel périodique ce que les ondes planes sont au mouvement d'une particule libre. États propres de l'hamiltonien et de l'opérateur translation, elles sont délocalisées dans tout l'espace. Elles forment une base orthogonale de l'espace des états, qu'on peut normaliser au sens habituel des bases continues en imposant

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n,q}^*(x) \psi_{n',q'}(x) dx = \delta_{n,n'} \delta(q - q'), \quad (3.1)$$

où le premier δ , portant sur l'indice de bande n , est un symbole de Kronecker et le second δ , portant sur le quasi-moment q , une distribution de Dirac. On s'est placé ici à une dimension pour simplifier les notations, mais l'extension à plusieurs dimensions est immédiate.

Pour de nombreux problèmes, il est utile d'introduire une deuxième base de l'espace de Hilbert, elle aussi orthonormée et constituée de fonctions localisées au voisinage des minima locaux du réseau (« sites ») appelées *fonctions de Wannier* (Wannier 1937). L'hamiltonien à une particule écrit dans la base des fonctions de Wannier est très intuitif : il correspond à des termes de sauts entre sites plus ou moins proches, dont l'amplitude dépend de la hauteur des barrières de potentiel entre puits.

Dans la limite des *liaisons fortes*, qui correspond pour le potentiel sinusoïdal $V_0 \sin^2(kx)$ à la situation où V_0 est grand devant l'énergie de recul E_r , on peut se limiter à des sauts entre sites adjacents. Nous étudierons cette limite, en nous plaçant dans la situation où seule une bande d'énergie, la

bande fondamentale par exemple, contribue de manière significative à la dynamique. On obtient alors l'*hamiltonien de Hubbard*, qui permet d'illustrer de nombreux phénomènes physiques. Nous montrerons en particulier comment prendre en compte les interactions entre particules dans le cadre de ce modèle, et nous donnerons quelques exemples de formes de bandes d'énergie très intéressante qui apparaissent pour des réseaux de forme plus complexe que le simple cas sinusoidal.

1 Les fonctions de Wannier

1-1 Une nouvelle base

Pour définir la base des fonctions de Wannier, on commence par se donner une série de points équidistants $x_j, j \in \mathbb{Z}$, séparés les uns des autres par la distance a . Dans la suite, nous prendrons ces points aux minima du potentiel $V(x) : x_j = ja = j\lambda/2$. On définit alors la fonction de Wannier $w_{j,n}$ pour la bande n par :

$$w_{n,j}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \psi_{n,q}(x) e^{-ijaq} dq, \quad (3.2)$$

Il est immédiat de montrer à partir de la définition (3.2) que les fonctions de Wannier $w_{n,j}$ se déduisent les unes des autres (à n donné) par translation :

$$w_{n,0}(x - ja) = w_{n,j}(x). \quad (3.3)$$

Il suffit donc de caractériser les fonctions de Wannier $w_{n,0}(x)$ pour les connaître toutes. La définition (3.2) peut s'inverser pour donner¹

$$\psi_{n,q}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \sum_{j \in \mathbb{Z}} w_{n,0}(x - ja) e^{ijaq}, \quad (3.5)$$

1. On utilise pour les fonctions en jeu ici la relation

$$\sum_{j \in \mathbb{Z}} e^{iqja} = (2\pi/a) \delta(q). \quad (3.4)$$

où la distribution $\delta(q)$ est à un élément du réseau réciproque près (les multiples de $2\pi/a$ à 1D).

et, pour la partie périodique $u_{n,q}$ des ondes de Bloch :

$$u_{n,q}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \sum_{j \in \mathbb{Z}} w_{n,0}(x - ja) e^{-iq(x-ja)}. \quad (3.6)$$

La définition des fonctions de Wannier dépend de la phase qu'on donne à chaque onde de Bloch, cette phase étant à ce stade arbitraire. Pour un potentiel symétrique par réflexion [$V(x) = V(-x)$] et pour des bandes d'énergie I_n disjointes, Kohn (1959) a montré qu'il y a un choix unique pour cette phase qui garantit que la fonction de Wannier (i) est réelle, (ii) est paire ou impaire vis à vis de $x = 0$ ou $x = a/2$, (iii) décroît exponentiellement vite à l'infini. Pour le réseau en $\sin^2(kx)$, un choix de phase pertinent correspond à prendre $\psi_{n,q}(0)$ réel positif pour tout q si n est pair, et $d\psi_{n,q}/dx|_{x=0}$ réel positif si n est impair. Ceci entraîne

$$\psi_{n,q}(-x) = \psi_{n,q}^*(x) = \psi_{n,-q}(x). \quad (3.7)$$

On vérifie alors à partir de la définition (3.2) que la fonction de Wannier $w_{0,0}(x)$ est paire vis à vis de $x = 0$. Les fonctions de Wannier associées au site $j = 0$ pour plusieurs valeurs du potentiel V_0 sont tracées sur la figure 3.1. Pour un potentiel nul, cette fonction de Wannier est proportionnelle² à $\text{sinc}(kx)$.

En utilisant le fait que les fonctions de Bloch forment une base orthonormée de l'espace des fonctions de carré sommable de la variable x , on peut facilement vérifier en utilisant (3.2-3.5) que l'ensemble des fonctions de Wannier forme lui aussi une base orthonormée de l'espace des fonctions :

$$\int w_{n,j}(x) w_{n',j'}(x) dx = \delta_{n,n'} \delta_{j,j'}. \quad (3.8)$$

Notons que chaque fonction de Wannier $w_{n,j}(x)$ doit nécessairement prendre des valeurs positives et négatives, pour assurer l'orthogonalité entre elle-même et la fonction de Wannier décalée d'une quantité a , $w_{n,j \pm 1}(x)$.

2. Elle ne décroît pas exponentiellement à l'infini car l'hypothèse de W. Kohn de bandes d'énergie disjointes n'est pas vérifiée.

Fonctions de Wannier pour la bande fondamentale

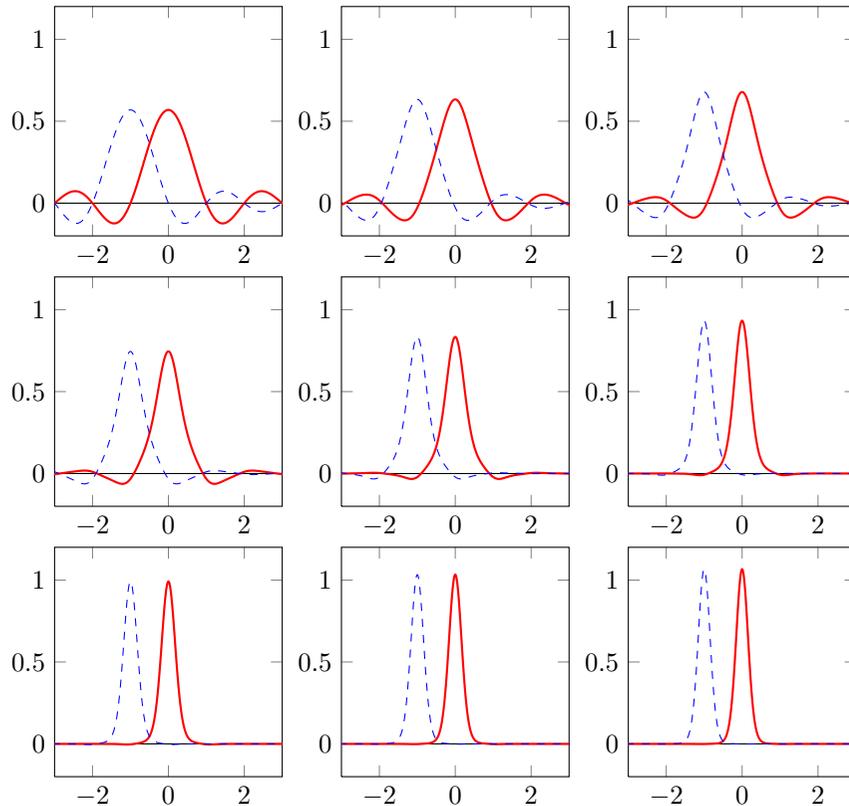


FIGURE 3.1. Fonctions de Wannier $w_{0,0}(x)$ en fonction de kx/π pour le potentiel périodique $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$. De gauche à droite, et de haut en bas : $V_0/E_x = (0, 0.5, 1)$; $(2, 4, 8)$; $(12, 16, 20)$. Les pointillés indiquent la fonction de Wannier décalée d'un site ($w_{0,-1}(x)$).

1-2 Fonctions de Wannier dans l'espace réciproque

Définissons la transformée de Fourier $\tilde{w}_n(\kappa)$ de la fonction de Wannier centrale $w_{n,0}(x)$:

$$\tilde{w}_n(\kappa) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} w_{n,0}(x) e^{-ix\kappa} dx. \tag{3.9}$$

Il est alors assez simple de montrer que cette fonction est directement reliée au développement de la fonction de Bloch sur la base des ondes planes. Plus précisément, on a

$$\psi_{n,q}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \tilde{w}_n(q + 2\pi j/a) e^{ix(q+2\pi j/a)}. \tag{3.10}$$

On pourra prouver ce résultat soit en reportant la définition (3.2) dans la transformée de Fourier (3.9), soit en utilisant la formule sommatoire de Poisson.

Cette formule donne un nouvel éclairage sur les fonctions de Wannier : le module carré de leur transformée de Fourier donne le poids des différentes composantes du peigne d'impulsion qui forme chaque fonction de Bloch. Notons qu'en absence de réseau, on sait que les fonctions de Bloch sont des ondes planes : une seule dent du peigne est non nulle ; par exemple, pour la bande fondamentale, $\psi_{0,q}(x) \propto e^{ixq}$ pour q dans l'intervalle $]-\pi/a, +\pi/a[$ correspondant à la zone de Brillouin. La transformée de Fourier $\tilde{w}_0(\kappa)$ est alors une fonction créneau, constante sur cet intervalle [égale à $(a/2\pi)^{1/2}$] et nulle partout ailleurs.

1-3 L'hamiltonien en termes de fonctions de Wannier

Dans la base des fonctions de Bloch, l'hamiltonien décrivant le mouvement d'une particule est par définition diagonal

$$H = \sum_n \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dq E_n(q) |\psi_{n,q}\rangle \langle \psi_{n,q}| = \sum_n \int dq E_n(q) \hat{a}_{n,q}^\dagger \hat{a}_{n,q}, \tag{3.11}$$

où nous avons adopté dans le membre de droite une notation en seconde quantification, plus commode pour traiter ultérieurement les problèmes

d'interaction entre particules. Dans cette notation, l'opérateur $\hat{a}_{n,q}$ détruit une particule dans l'onde de Bloch $\psi_{n,q}$.

Le changement de base (3.5), qui s'écrit en seconde quantification

$$\hat{a}_{n,q} = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \sum_j e^{ijaq} \hat{b}_{n,j}, \quad (3.12)$$

où $\hat{b}_{n,j}$ détruit une particule dans la fonction de Wannier $w_{n,j}$, conduit à l'expression suivante pour l'hamiltonien :

$$\hat{H} = \sum_n \sum_{j,j'} J_n(j-j') \hat{b}_{n,j}^\dagger \hat{b}_{n,j'}. \quad (3.13)$$

L'interprétation de cet hamiltonien est simple : il décrit le saut de la particule du site $x_{j'} = j'a$ vers le site $x_j = ja$ avec l'amplitude $J_n(j-j')$ qui dépend que la bande n considérée et de la distance entre les deux sites. Par construction, $J_n(j-j')$ est égal à l'élément de matrice de l'hamiltonien entre deux fonctions de Wannier

$$J_n(j) = \int w_{n,j}^*(x) \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right) w_{n,0}(x) dx, \quad (3.14)$$

et vérifie la propriété

$$J_n(-j) = J_n^*(j), \quad (3.15)$$

qui garantit que \hat{H} dans (3.13) est hermitien. Si les fonctions de Wannier peuvent être choisies réelles, $J_n(j)$ est également réel et $J_n(-j) = J_n(j)$.

L'élément de matrice $J_n(j)$ s'écrit en fonction des énergies $E_n(q)$:

$$J_n(j) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dq E_n(q) e^{ijaq}, \quad (3.16)$$

relation qui peut s'inverser pour donner

$$E_n(q) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} J_n(j) e^{-ijaq}, \quad (3.17)$$

$$= 2 \sum_{j=1}^{\infty} J_n(j) \cos(jaq), \quad (3.18)$$

où la deuxième ligne est vraie si les fonctions de Wannier peuvent être choisies réelles. Bandes d'énergies et amplitudes de sauts entre voisins (plus ou moins proches) sont donc reliées par des relations de type transformée de Fourier. Le coefficient $J_n(0)$ correspond simplement à la moyenne uniforme de l'énergie $E_n(q)$ sur la zone de Brillouin.

1-4 Le cas multi-dimensionnel

Considérons une particule mobile à trois dimensions dans le potentiel périodique

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \sin^2(kx) + V_0' \sin^2(ky) + V_0'' \sin^2(kz). \quad (3.19)$$

Comme l'hamiltonien peut s'écrire comme la somme $\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$, on peut chercher ses états propres sous la forme de produits d'ondes de Bloch selon chacune des directions :

$$\Psi_{\mathbf{n},\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \psi_{n_x,q_x}(x) \psi_{n_y,q_y}(y) \psi_{n_z,q_z}(z), \quad (3.20)$$

le quasi-moment \mathbf{q} étant choisit dans la première zone de Brillouin qui est dans ce cas un cube centré en 0 et de côté $2\pi/a$.

On peut définir comme pour le cas uni-dimensionnel des fonctions de Wannier associées à chaque site du réseau cubique $\mathbf{j}a = (j_x, j_y, j_z)a$:

$$w_{\mathbf{n},\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{3/2} \int_{\text{Z.B.}} \Psi_{\mathbf{n},\mathbf{q}}(\mathbf{r}) d^3q = w_{n_x,j_x}(x) w_{n_y,j_y}(y) w_{n_z,j_z}(z). \quad (3.21)$$

On peut de même définir et calculer les éléments de matrice de l'hamiltonien entre deux fonctions de Wannier quelconques :

$$\langle w_{\mathbf{n},\mathbf{j}} | \hat{H} | w_{\mathbf{n}',\mathbf{j}'} \rangle = \int w_{\mathbf{n},\mathbf{j}}(\mathbf{r}) (\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z) w_{\mathbf{n}',\mathbf{j}'}(\mathbf{r}) d^3r. \quad (3.22)$$

Comme à 1D, ces coefficients ne sont non nuls que si $\mathbf{n} = \mathbf{n}'$: les « sauts » d'un site à l'autre ne se font qu'à l'intérieur d'une même bande, ce qui est naturel puisque ces bandes correspondent à des sous-espaces propres de l'hamiltonien. Un autre résultat, plus surprenant à première vue, apparaît quand on évalue (3.22) : les sauts ne peuvent se faire que selon les axes du réseau. En effet, l'élément de matrice (3.22) s'écrit comme la somme de

trois termes provenant des contributions de \hat{H}_x , \hat{H}_y , \hat{H}_z , la contribution de \hat{H}_x par exemple s'écrivant

$$\left(\int w_{n_x, j_x} \hat{H}_x w_{n_x, j'_x} dx \right) \delta_{j_y, j'_y} \delta_{j_z, j'_z} = J_{n_x} (j_x - j'_x) \delta_{j_y, j'_y} \delta_{j_z, j'_z}. \quad (3.23)$$

Les sauts selon les diagonales du réseau sont bien sûr présents *in fine* dans cette description, mais ils résultent de combinaisons de sauts selon les axes x, y, z . Cette remarque indique qu'il faut se méfier du caractère apparemment très intuitif des fonctions de Wannier : ce sont des outils de calcul puissants, en particulier dans le cas des potentiels fortement modulés que nous allons étudier ci-dessous, mais ils ont également certains aspects déroutants ; nous en verrons un autre exemple plus loin lorsque nous discuterons les conséquences de l'arbitraire de phase des fonctions de Bloch.

2 Potentiel sinusoïdal fortement modulé

Intéressons-nous maintenant au cas important en pratique des potentiels à forte modulation $V_0 \gg E_r$. Dans cette limite, on s'attend à ce que l'influence de l'effet tunnel, qui permet à une particule de sauter d'un puits à un puits voisin même si son énergie est inférieure à V_0 , devienne de plus en plus faible. Si l'effet tunnel joue un rôle négligeable, on prévoit que les niveaux d'énergie seront similaires à ceux de chaque puits individuel, au moins pour les énergies $E \ll V_0$. Les bandes d'énergie doivent donc s'affiner, pour tendre vers des niveaux d'énergie discrets.

2-1 Largeur des bandes permises

L'étude quantitative des états propres et des énergies associées confirme ce scénario. Commençons par regarder comment la largeur W_n des bandes varie avec V_0 . Cette variation est tracée sur la figure 3.2 pour les quatre premières bandes d'énergie et on y voit une décroissance rapide de W_n avec V_0 . Dans la limite des grands V_0 , on peut établir une expression analytique approchée pour les largeurs des bandes les plus basses (Campbell 1955). En particulier, on obtient pour la bande fondamentale une décroissance

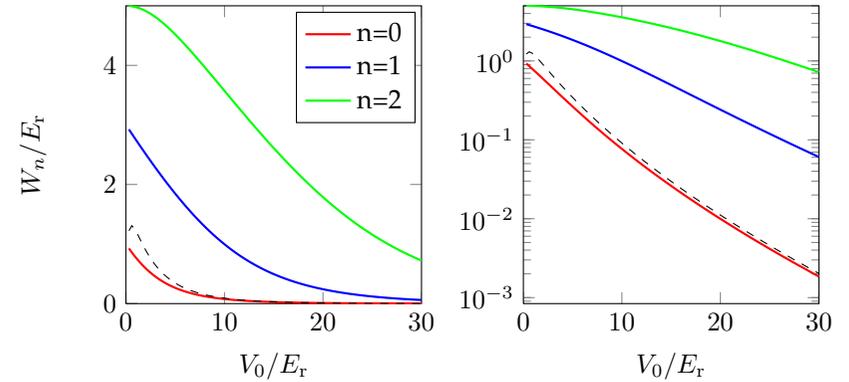


FIGURE 3.2. Courbes continues : largeur W_n des trois premières bandes d'énergie du potentiel sinusoïdal en fonction de V_0 , en coordonnées linéaires (à gauche) et logarithmiques (à droite). La courbe en tiret est la valeur asymptotique (3.24) pour la largeur de la bande fondamentale.

exponentielle de la largeur avec $(V_0/E_r)^{1/2}$:

$$\frac{W_0}{E_r} \approx \frac{16}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^{3/4} \exp \left[-2 \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^{1/2} \right], \quad (3.24)$$

prédiction tracée en ligne tiretée sur la figure (3.2). La précision relative de cette approximation est meilleure que 20% dès que $V_0 > 10 E_r$.

2-2 Éléments de matrice des sauts entre voisins

À cette réduction de la largeur des bandes les plus basses est associée une localisation de plus en plus forte des fonctions de Wannier, clairement visible sur la figure 3.1. Cette forte localisation des fonctions de Wannier a elle-même une conséquence sur les amplitudes de sauts $J_n(j)$ qui caractérisent l'hamiltonien (3.13). Si les fonctions de Wannier $w_{n,0}(x)$ et $w_{n,j}(x)$ ne prennent pas de valeurs significatives en une même région de l'espace, l'amplitude de saut $J_n(j)$ donnée en (3.14) est négligeable. Plus précisément, on peut montrer que l'amplitude $J_n(j)$ décroît exponentiellement avec la distance j , avec la même distance caractéristique que la fonction de

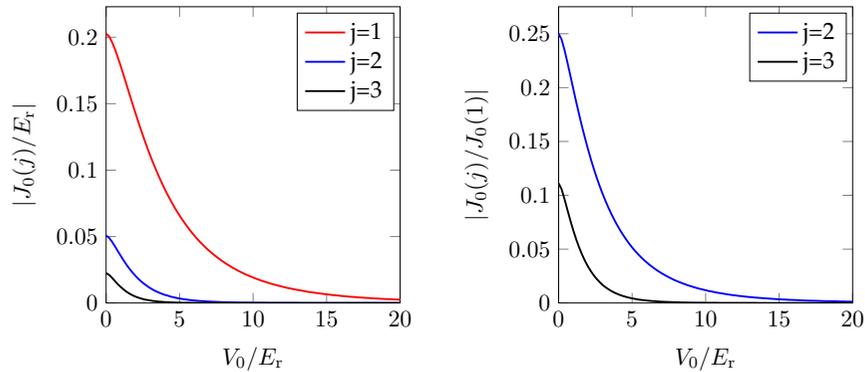


FIGURE 3.3. Éléments de matrice associés aux sauts de longueur j , en fonction de V_0 .

Wannier elle-même. Quand V_0/E_r augmente, les amplitudes $J_n(j)$ ($j \geq 2$) pour les sauts « à longue portée » de longueur j décroissent donc plus vite que l'amplitude $J_n(1)$ des sauts entre proches voisins. On a tracé sur la figure 3.3 la variation des éléments de matrice associés aux sauts $J_0(j)$ ainsi que les rapports $J_0(j)/J_0(1)$ pour les premières valeurs de j , en se limitant à la bande fondamentale $n = 0$. On note en particulier que pour $V_0 \gtrsim 10 E_r$, tous les éléments de matrice pour les sauts « distants », c'est-à-dire $j > 1$, sont inférieures à 1% de l'élément de matrice pour un saut entre proches voisins ($j = 1$). Si on considère que dans cette situation les amplitudes $J_0(j)$ ($j \geq 2$) peuvent être négligées, on réalise alors le régime des liaisons fortes, où la dynamique des atomes dans le réseau est régie quasi-exclusivement par les sauts entre proches voisins.

Quand la largeur de $w_{0,0}(x)$ devient très petite devant la période a du potentiel, au plus un terme de la somme (3.5) contribue en un point x donné. On en déduit que dans ce cas asymptotique, la distribution de probabilité $|\psi_{n,q}(x)|^2$ ne dépend pas de q et est à peu près égale à la somme de la distribution de probabilité des fonctions de Wannier.

2-3 Spectre de liaisons fortes

Considérons le cas limite des très grands V_0 , pour lequel l'effet tunnel entre puits voisins devient très faible, au moins pour les énergies permises les plus basses. On peut alors étudier le spectre du mouvement d'une particule en linéarisant le potentiel de piégeage au voisinage du fond du potentiel, soit pour le puits centré sur $x = 0$:

$$kx \ll 1 \quad \Rightarrow \quad V(x) \approx V_0 k^2 x^2. \quad (3.25)$$

En fait, pour $|kx| = 1/2$, cette approximation harmonique est valable avec une précision de 10%. On obtient alors un hamiltonien d'oscillateur harmonique, de pulsation ω telle que

$$\hbar\omega = 2\sqrt{V_0 E_r}, \quad (3.26)$$

avec un spectre en $(n + 1/2)\hbar\omega$. Une condition nécessaire pour que cette approximation harmonique soit valable pour les premiers niveaux de l'oscillateur est que l'extension de l'état fondamental

$$a_{\text{oh}} = (\hbar/m\omega)^{1/2} \quad (3.27)$$

vérifie l'hypothèse de (3.25), $ka_{\text{oh}} \ll 1$, ce qui peut encore s'écrire

$$ka_{\text{oh}} = (E_r/V_0)^{1/4} \ll 1. \quad (3.28)$$

On a alors la succession d'inégalités :

$$E_r \ll \hbar\omega \ll V_0. \quad (3.29)$$

Le critère (arbitraire) $ka_{\text{oh}} \leq 1/2$ entraîne $V_0/E_r \geq 16$, ou encore $\omega \geq 8\omega_r$. Avec cette contrainte « minimale », on trouve deux états liés ($E_0 \approx 4E_r$, $E_1 \approx 12E_r$) à l'intérieur de chaque puits de potentiel.

On a tracé pour $n = 1, 2$ sur la figure 3.4 (gauche) le module carré du produit scalaire entre la fonction de Wannier $w_{n,0}(x)$ et l'état attendu pour un potentiel harmonique, la fonction de Hermite $H_n(x)$. Pour la bande fondamentale, ce recouvrement prend très vite des valeurs proches de 1 (> 0.97 pour $V_0/E_r > 3$). La figure 3.4 (droite) compare les énergies moyennes des deux premières bandes $\bar{E}_n = J_n(0)$, avec la prédiction

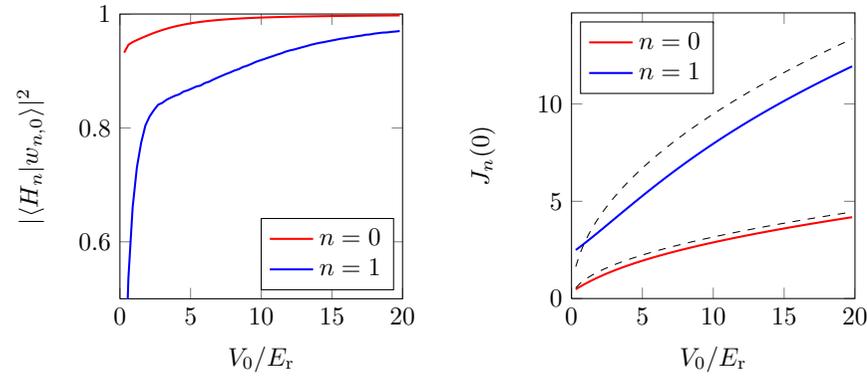


FIGURE 3.4. Gauche : recouvrement $|\langle H_n | w_{n,0} \rangle|^2$ entre les fonctions de Wannier $w_{n,0}(x)$ et les fonctions de Hermite $H_n(x)$. Droite : énergies moyennes $\bar{E}_n = J_n(0)$, comparées à la valeur attendue pour un puits harmonique $(n + 1/2)\hbar\omega$.

$(n + 1/2)\hbar\omega$. Les énergies moyennes réelles sont inférieures à la prédiction harmonique (d'une quantité $\sim E_r$), ce qui s'explique bien en considérant la première correction « sub-harmonique » au potentiel $\sin^2(kx)$.

Dans la suite, nous utiliserons fréquemment l'expression approchée pour la fonction de Wannier de la bande fondamentale $w_{0,0}(x) \approx H_0(x)$, ce qui s'écrit explicitement

$$w_{0,0}(x) \approx \frac{1}{(\pi a_{\text{oh}}^2)^{1/4}} e^{-x^2/(2a_{\text{oh}}^2)}. \quad (3.30)$$

3 Hamiltonien de Hubbard

Dans le cas d'un potentiel de forte modulation, on peut souvent se limiter à des états qui appartiennent à la bande fondamentale. Ceci correspond à une diminution considérable de l'espace de Hilbert et permet de simplifier fortement les notations et les calculs. Nous allons détailler ici les principaux ingrédients de cette approche sur le cas très simple du potentiel en $V_0 \sin^2(kx)$ que nous avons considéré jusqu'à maintenant. Nous verrons comment introduire les interactions dans ce formalisme et nous

illustrerons leur rôle sur une expérience remarquable, la mise en évidence de paires d'atomes liées, bien qu'étant en interaction répulsive.

Notons que le potentiel sinusoïdal considéré dans ce paragraphe a la particularité de n'avoir qu'un site dans sa cellule unité, ce qui rend le traitement de la physique à une particule très simple. Nous reviendrons un peu plus tard sur ce modèle de Hubbard dans le cas un peu plus compliqué (et plus riche) de cellules unités à deux sites.

3-1 L'hamiltonien à une particule (pas d'interaction)

Plaçons-nous donc dans cette approximation et supposons de plus que seuls les éléments de matrice $J_{n=0}(j=0)$ (sur site) et $J_{n=0}(j=1)$ (entre proches voisins) prennent des valeurs significatives. Le terme $\bar{E}_0 = J_0(0)$ est une constante donnant l'énergie sur site, que nous décalerons à partir de maintenant à $\bar{E}_0 = 0$. En posant

$$J = -J_{n=0}(j=1), \quad J \text{ étant alors positif}, \quad (3.31)$$

l'hamiltonien est alors très simple

$$\hat{H} = -J (\hat{T} + \hat{T}^\dagger) \quad (3.32)$$

où \hat{T} est l'opérateur qui translate la particule d'un site vers la droite :

$$\hat{T} = \sum_{j \in \mathbb{Z}} |w_{j+1}\rangle \langle w_j|. \quad (3.33)$$

Nous avons noté les fonctions de Wannier $w_j \equiv w_{0,j}$ puisque nous limitons notre espace de travail à la bande $n=0$. Nous utiliserons aussi une écriture du même hamiltonien en seconde quantification :

$$\hat{H} = -J \sum_j \hat{b}_{j+1}^\dagger \hat{b}_j + \text{h.c.}, \quad (3.34)$$

où \hat{b}_j^\dagger crée une particule sur le site j avec la fonction d'onde $w_j(x)$.

Dans ce modèle de Hubbard, représenté graphiquement sur la figure 3.5, la seule fonction périodique sur le réseau est dans cette approximation

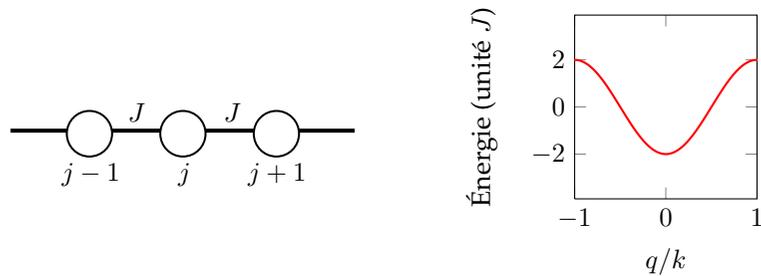


FIGURE 3.5. Représentation graphique du modèle de Hubbard 1D décrit par l'hamiltonien (3.34) à gauche, et spectre correspondant à droite (cf. eq. (3.38)).

à une bande :

$$|u\rangle = \sum_j |w_j\rangle \quad (3.35)$$

et les états de Bloch sont de la forme

$$|\psi_q\rangle = \sum_j e^{ijaq} |w_j\rangle. \quad (3.36)$$

Si on reporte cette forme dans l'équation aux valeurs propres pour l'hamiltonien, on obtient l'équation très simple

$$-J (e^{iaq} + e^{-iaq}) = E \quad (3.37)$$

c'est-à-dire

$$E(q) = -2J \cos(aq), \quad (3.38)$$

Le spectre $E_0(q) \equiv E(q)$ de la bande fondamentale est donc sinusoïdal dans ce cas, ce qui était prévisible puisqu'on ne garde qu'une seule de ses composantes de Fourier dans (3.17).

La bande fondamentale a pour largeur³ $4J$. Cette largeur peut être identifiée avec l'expression approchée (3.24) obtenue dans la limite $V_0 \gg E_r$, ce qui fournit l'expression approchée de J

$$\frac{J}{E_r} \approx \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^{3/4} \exp \left[-2 \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^{1/2} \right]. \quad (3.39)$$

3. Dans le cas carré à 2D (cubique à 3D), chaque atome a 4 (6) proches voisins, et la largeur de cette bande devient $8J$ ($12J$).

3-2 Le signe du coefficient tunnel

Nous avons indiqué lors de la définition de l'élément de matrice tunnel J du modèle de liaisons fortes [cf. (3.31)] que ce coefficient est toujours positif. Ceci entraîne que l'état de Bloch $|\psi_{q=0}\rangle$, d'énergie $-2J$ est l'état fondamental de la particule sur le réseau. Au contraire, si J était négatif, l'état fondamental serait $|\psi_{q=k}\rangle$, d'énergie $+2J$.

Pour prouver cette propriété, utilisons le théorème de Sturm–Liouville. Restreignons-nous à un réseau de taille finie L (multiple de a). Le potentiel $V(x)$ étant régulier, on sait qu'on peut classer les états propres de l'hamiltonien par énergie croissante en fonction du nombre de leur nœuds : l'état fondamental n'a pas de zéro, le premier état excité a un nœud, etc. Dans un double puits par exemple, l'état antisymétrique est toujours au dessus de l'état symétrique. Or la fonction de bord de bande $\psi_k(x)$ vérifie

$$\psi_k(x) = \sum_j (-1)^j w_j(x) \quad \Rightarrow \quad \psi_k(x+a) = -\psi_k(x). \quad (3.40)$$

Cette fonction s'annule donc nécessairement entre 0 et a . Sur le segment de longueur $L = Na$, elle a au moins N nœuds et ne peut pas être l'état fondamental. J ne peut donc pas être négatif. Nous verrons plus tard que cette conclusion peut être invalidée si on élargit la classe des hamiltoniens disponibles en considérant des potentiels dépendant explicitement du temps.

3-3 Les interactions dans le modèle de Hubbard

Décrivons maintenant comment les interactions entre particules sont prises en compte dans ce modèle de liaisons fortes, avec une dynamique restreinte à la bande fondamentale. Nous prendrons l'exemple de bosons sans spin, mais le formalisme s'étend sans difficulté au cas d'un gaz de fermions non polarisés.

L'hamiltonien d'interaction à courte portée (onde s pour des bosons) vaut dans l'approximation du pseudo-potentiel

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{g}{2} \int \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x) dx, \quad (3.41)$$

où l'opérateur champ $\hat{\psi}(x)$ détruit une particule au point x . Cet opérateur s'écrit en termes des fonctions de Wannier

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_{n,j} w_{n,j}(x) \hat{b}_{n,j}. \quad (3.42)$$

Quand on insère ce développement dans (3.41), on obtient une expression compliquée, faisant intervenir des termes qui couplent les différentes bandes et les différents sites du réseau :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} &= \frac{g}{2} \sum_{n_1,j_1} \sum_{n_2,j_2} \sum_{n_3,j_3} \sum_{n_4,j_4} \hat{b}_{n_3,j_3}^\dagger \hat{b}_{n_4,j_4}^\dagger \hat{b}_{n_1,j_1} \hat{b}_{n_2,j_2} \\ &\times \int w_{n_1,j_1}(x) w_{n_2,j_2}(x) w_{n_3,j_3}(x) w_{n_4,j_4}(x) dx \end{aligned} \quad (3.43)$$

Toutefois, pour un réseau profond ($V_0 \gg E_r$) et si on exclut le voisinage d'une résonance de Feshbach, l'énergie d'interaction par atome reste petite devant l'écart $\hbar\omega$ entre la bande fondamentale et la première bande excitée. Ceci conduit à deux simplifications successives :

- On peut restreindre le développement de H_{int} à la bande fondamentale $n = 0$, comme on l'a fait pour l'énergie cinétique. La somme sur n_1, n_2, n_3, n_4 disparaît de (3.43) et on ne garde plus que le terme $n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 0$.
- Dès que la profondeur du réseau dépasse une dizaine de E_r , le recouvrement entre deux fonctions de Wannier sur deux sites différents, $w_{0,j}(x)$ et $w_{0,j'}(x)$, devient négligeable (voir figure 3.1). L'intégrale sur x apparaissant dans (3.43) ne prend donc des valeurs significativement différentes de 0 que si tous les indices j qui y figurent sont égaux entre eux. L'intégrale résultante

$$\int w_{0,j}^4(x) dx \quad (3.44)$$

est alors indépendante de j , puisque la fonction $w_{0,j}$ est simplement la translatée de $w_{0,0}$ par la distance ja .

Le développement de \hat{H}_{int} est alors considérablement simplifié. Il ne reste plus que les termes décrivant l'interaction sur site et le résultat s'écrit :

$$\hat{H}_{\text{int}} \approx \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1), \quad (3.45)$$

où on a introduit l'opérateur nombre de particules sur le site j , $\hat{n}_j = \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j$ et utilisé $\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_j = \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j - \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j = \hat{n}_j^2 - \hat{n}_j$. Notons qu'on a omis ici d'écrire l'indice de bande n puisqu'on se restreint à $n = 0$. L'énergie U est l'énergie à fournir pour mettre deux atomes sur le même site ; elle s'écrit explicitement

$$U = g \int w_{0,0}^4(x) dx \approx \frac{g}{\sqrt{2\pi} a_{\text{oh}}}, \quad (3.46)$$

où nous avons utilisé l'approximation gaussienne (3.30) pour la fonction de Wannier de la bande fondamentale.

Comme nous l'avons indiqué, le formalisme présenté ici porte sur des bosons sans spin. Indiquons sans démonstration (elle est simple à établir) comment l'expression (3.47) est modifiée pour un gaz de fermions de spin $1/2$, toujours en interaction à courte portée :

$$\hat{H}_{\text{int}} \approx U \sum_j \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow}. \quad (3.47)$$

Les opérateurs $\hat{n}_{j,\uparrow}$ et $\hat{n}_{j,\downarrow}$ ont pour valeurs propres 0 et 1, puisqu'on ne peut pas mettre plus d'un fermion dans un état donné, en l'occurrence la fonction de Wannier w_j avec un certain état de spin.

Les calculs ci-dessus ont été menés pour un réseau 1D. Ils se transposent directement au cas 3D pour un réseau cubique et on obtient

$$U^{(3D)} = \frac{g^{(3D)}}{(\sqrt{2\pi} a_{\text{oh}})^3}. \quad (3.48)$$

Le couplage $g^{(3D)}$ s'exprime en terme de la longueur de diffusion a_d sous la forme

$$g^{(3D)} = \frac{4\pi\hbar^2 a_d}{m}, \quad (3.49)$$

et (3.48) s'écrit alors

$$\frac{U^{(3D)}}{E_r} = \sqrt{\frac{8}{\pi}} k a_d \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^{3/4}. \quad (3.50)$$

Discutons maintenant la valeur de ce coefficient U . Nous ferons cette discussion dans le cas 3D puisque nous avons l'expression explicite (3.50)

à notre disposition. En dehors d’une résonance de Feshbach, la longueur de diffusion a une échelle nanométrique (3 nm pour ^{23}Na , 5 nm pour ^{87}Rb). Puisque la lumière utilisée pour le réseau a une longueur d’onde λ micro-métrique, le produit $ka_d = 2\pi a_d/\lambda$ est petit, entre 10^{-2} et 10^{-1} . Le produit V_0/E_r ne dépasse en général pas quelques dizaines : au delà de cette valeur, l’effet tunnel entre sites devient complètement négligeable et le réseau n’est plus qu’une collection de pièges indépendants. Le coefficient U est donc en général plus petit que l’énergie de recul. Rappelons par ailleurs qu’il est important que $Un_j(n_j - 1)/2$ reste petit devant $\hbar\omega = 2\sqrt{V_0E_r}$ pour que la restriction à la bande fondamentale soit légitime.

Cette valeur relativement faible $U \lesssim E_r$ n’empêche pas aux interactions de pouvoir jouer un rôle considérable et de faire apparaître un état fondamental fortement corrélé (Jaksch et al. 1998). Pour comprendre ce point, il faut comparer la force de ces interactions, caractérisée par U , à l’énergie cinétique, caractérisée par le coefficient tunnel J . Les effets à N corps deviennent importants quand les interactions prennent le pas sur l’énergie cinétique, et cela peut se produire pour des réseaux relativement peu profonds, en raison de la décroissance exponentielle du coefficient J avec V_0/E_r [cf. eq. (3.39)].

En résumé, la mise en place d’un réseau optique permet de cumuler deux effets favorisant la physique à N corps :

- Il réduit fortement le terme d’énergie cinétique, grâce à la décroissance exponentielle de J avec V_0/E_r [cf. eq. (3.39)].
- Il augmente modérément le terme d’interaction, grâce à la croissance en loi de puissance de U avec V_0/E_r [cf. eq. (3.50)].

3-4 Illustration : les paires répulsives liées

Cette compétition entre énergie cinétique et énergie d’interaction a été mise en évidence à de multiples reprises dans les réseaux optiques au cours des dix dernières années⁴. La manifestation la plus célèbre est probablement la transition de phase entre le régime superfluide et le régime *isolant*

4. Cette compétition se produit aussi dans un gaz uniforme ; pour un fluide de densité ρ , correspondant à une distance moyenne entre particules $\ell = \rho^{-1/3}$, on peut évaluer une énergie cinétique caractéristique $\hbar^2/(m\ell^2)$. Cette dernière doit être comparée à l’énergie d’interaction qui vaut à un facteur multiplicatif près $\hbar^2 a_d \rho/m$. Le rapport entre ces deux énergies fait

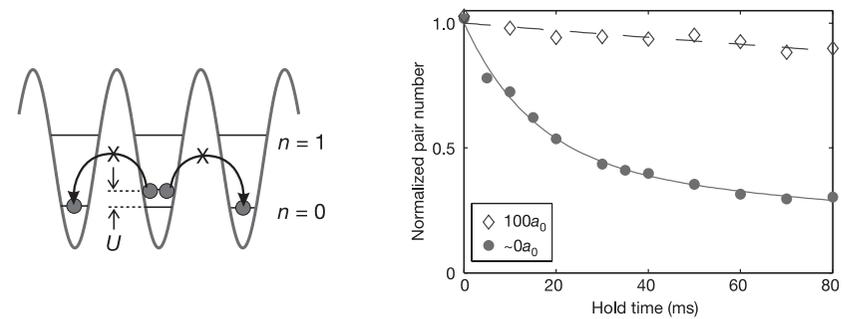


FIGURE 3.6. Gauche : principe de l’expérience de Winkler et al. (2006) : des atomes en interaction répulsive sont préparés sur un même site d’un réseau. Si l’interaction est assez forte, les atomes restent ensemble en dépit de la répulsion. Droite : évolution du nombre de paires en présence de répulsion (longueur de diffusion de 5 nm, i.e. $100a_0$) et absence de répulsion (longueur de diffusion nulle). Ces figures sont extraites de Winkler et al. (2006).

de Mott pour une valeur critique du rapport U/J , pour un remplissage donné du réseau, par exemple un atome par site (Fisher et al. 1989; Jaksch et al. 1998; Greiner et al. 2002). Nous aurons l’occasion de décrire en détail ce phénomène dans un cours ultérieur.

Nous l’illustrerons ici par un phénomène, plus simple à décrire théoriquement, qui porte sur l’existence de paires liées en présence d’interactions répulsives (cf. figure 3.6). Ce phénomène a été mis en évidence et interprété par le groupe d’Innsbruck (Winkler et al. 2006). On part d’un gaz de molécules de Rb_2 , préparées au voisinage d’une résonance de Feshbach (à ~ 1000 G). Ces molécules sont confinées aux minima d’un réseau optique cubique de haute intensité, avec un taux de remplissage relativement faible (~ 0.3). À un instant donné, on abaisse la profondeur du réseau selon une direction pour autoriser l’effet tunnel selon cet axe. Simultanément on varie le champ magnétique pour s’éloigner de la résonance de Feshbach, ce qui a pour effet de dissocier les paires. L’interaction entre les deux atomes qui formaient la paire devient répulsive et elle est caractérisée

apparaître le facteur $(\rho a_d^3)^{1/3}$. Quand ce paramètre est petit devant 1 (gaz dilué), une description en terme de champ moyen (équation de Gross-Pitaevskii) est une bonne approximation, alors que le fluide devient fortement corrélé quand ce paramètre devient d’ordre unité.

par la longueur de diffusion $a_d = +5$ nm (environ 100 rayons de Bohr a_0). On s'attendrait naïvement à ce que les paires d'atomes se séparent d'autant plus rapidement que cette répulsion est forte. Il n'en est rien, comme on peut le voir sur la figure 3.6. Alors que les paires se séparent assez vite si le coefficient U est nul, une répulsion forte les maintient ensemble !

L'explication de ce phénomène est simple, au moins sur le plan qualitatif. La paire liée a une énergie U ; si cette énergie est grande devant la largeur de bande $4J$ (ou plutôt $8J$ car chaque atome de la paire a une bande de largeur $4J$ à sa disposition), alors on ne peut pas convertir cette énergie d'interaction en énergie cinétique.

On peut assez facilement déterminer l'expression exacte de l'état lié correspondant (Winkler et al. 2006). L'hamiltonien de Hubbard des deux atomes (que nous supposons ici discernables) dans le réseau s'écrit

$$\hat{H} = -J \left(\hat{T}(1) + \hat{T}^\dagger(1) \right) - J \left(\hat{T}(2) + \hat{T}^\dagger(2) \right) + U \sum_{j_1, j_2} \delta_{j_1, j_2} |w_{j_1}, w_{j_2}\rangle \langle w_{j_1}, w_{j_2}|, \quad (3.51)$$

où nous avons noté $|j_1, j_2\rangle$ l'état tel que l'atome 1 occupe le site w_{j_1} et l'atome 2 occupe le site w_{j_2} . L'opérateur $\hat{T}(\alpha)$ déjà introduit plus haut déplace la particule α d'un site vers la droite.

Comme toujours dans un problème à deux corps, on a intérêt à introduire les variables du centre de masse et de la coordonnée relative. Posons donc

$$c = j_1 + j_2, \quad r = j_1 - j_2, \quad |c, r\rangle \equiv |w_{j_1}, w_{j_2}\rangle \quad (3.52)$$

la position du centre de masse étant $ac/2$ (multiple ou demi-multiple de a). L'hamiltonien se réécrit en fonction de ces nouvelles variables :

$$\hat{H} = -J \left(\hat{T}(c) + \hat{T}^\dagger(c) \right) \otimes \left(\hat{T}(r) + \hat{T}^\dagger(r) \right) + U \hat{1}_c \otimes \hat{P}_0. \quad (3.53)$$

où $\hat{T}(c)$ et $\hat{T}(r)$ sont les opérateurs de saut d'un site vers droite, pour le centre de masse et pour la variable relative, et où \hat{P}_0 est le projecteur sur l'état $|r = 0\rangle$, correspondant au cas où les deux atomes sont sur le même site :

$$\hat{P}_0 = |r = 0\rangle \langle r = 0|. \quad (3.54)$$

À r fixé, le mouvement du centre de masse décrit par (3.53) est celui d'une particule libre sur un réseau et ses états propres sont les ondes de Bloch

$$|\Psi_q\rangle = \sum_{c \in \mathbb{Z}} e^{icaq/2} |c\rangle. \quad (3.55)$$

On va donc chercher les états propres de \hat{H} sous la forme

$$|\Psi_q\rangle \otimes |\Phi\rangle, \quad \text{avec} \quad |\Phi\rangle = \sum_{r \in \mathbb{Z}} \alpha_r |r\rangle. \quad (3.56)$$

Précisons le domaine de variation du quasi-moment q pour le mouvement du centre de masse. À partir de l'expression (3.55) dans laquelle c est un entier, l'intervalle $-\pi < qa/2 \leq \pi$ (de largeur $4\pi/a$) semblerait naturel. En fait, on peut réduire cet intervalle d'un facteur 2 en remarquant que

$$|\Psi_q\rangle \otimes |\Phi\rangle = |\Psi_{q \pm 2\pi/a}\rangle \otimes |\tilde{\Phi}\rangle, \quad \text{avec} \quad |\tilde{\Phi}\rangle = \sum_r (-1)^r \alpha_r |r\rangle, \quad (3.57)$$

cette identité provenant de $(-1)^c = (-1)^{j_1+j_2} = (-1)^{j_1-j_2} = (-1)^r$. Pour éviter les doubles comptages, nous restreindrons donc les valeurs de q à

$$-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}. \quad (3.58)$$

Injectons maintenant la forme (3.56) dans l'équation aux valeurs propres pour l'hamiltonien (3.53). Pour une valeur de q donnée, nous obtenons :

$$-J_q \left(\hat{T}(r) + \hat{T}^\dagger(r) \right) |\Phi\rangle + U \hat{P}_0 |\Phi\rangle = E |\Phi\rangle, \quad (3.59)$$

où nous avons posé

$$J_q = 2J \cos(qa/2). \quad (3.60)$$

Cette équation s'écrit en termes des coefficients α_j du développement de $|\Phi\rangle$:

$$\begin{aligned} j \neq 0 & \quad -J_q (\alpha_{j+1} + \alpha_{j-1}) = E \alpha_j \\ j = 0 & \quad -J_q (\alpha_1 + \alpha_{-1}) = (E - U) \alpha_0. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Ce système admet deux types de solutions : (i) des états de diffusion pour lesquels α_j est une fonction trigonométrique de j , (ii) un état lié, pour lequel α_j décroît exponentiellement avec $|j|$. C'est ce deuxième type de solution qui nous intéresse ici. On peut vérifier simplement que

$$\alpha_j = \alpha_0 e^{-\beta|j|} (-1)^j \quad (3.62)$$

est solution du système (3.61) si on prend

$$E_q = [U^2 + 4J_q^2]^{1/2}, \quad \beta_q = \ln [2J_q / (E_q - U)]. \quad (3.63)$$

Pour chaque valeur du moment q du centre de masse, il y a donc un état lié de la paire d'atomes. L'énergie de cet état lié est comme on s'y attendait de l'ordre de U si on choisit $U \gg J$. Cet état lié étant un état propre de l'hamiltonien, une paire de particules préparée dans cet état y restera indéfiniment, même si son énergie est supérieure à celle du continuum des états de diffusion (la bande d'énergie de largeur $4J$).

4 Le cas d'un super-réseau

La simplicité de la définition des fonctions de Wannier pour le réseau sinusoïdal est un peu trompeuse. Pour des réseaux plus compliqués, par exemple des potentiels présentant plusieurs minima locaux par période a , il n'est pas toujours évident de choisir la « bonne » base de fonctions de Wannier, correspondant à l'intuition de fonctions d'onde bien localisées au voisinage de ces minima locaux.

Nous n'allons pas décrire ici les principes généraux de la recherche de ces fonctions de Wannier de localisation maximale. On pourra consulter à ce sujet l'article de revue récent de Marzari et al. (2012). Dans ce qui suit, nous indiquons simplement la nature du problème et nous l'illustrons sur un exemple simple.

4-1 L'arbitraire de phase

La propriété requise pour les fonctions de Bloch est de former une base normalisée d'états propres de l'hamiltonien et de l'opérateur translation. En absence de dégénérescence (au moins à 1D), elles sont donc définies à une phase près : on peut multiplier $\psi_{n,q}(x)$ par une phase $e^{i\theta_n(q)}$ tout en continuant à satisfaire cette propriété⁵.

5. Nous avons indiqué plus haut que nous imposions aux fonctions de Bloch d'être périodiques en q , $\psi_{n,q+2\pi/a} = \psi_{n,q}$, ce qui impose à $\theta_n(q)$ d'être également périodique en q .

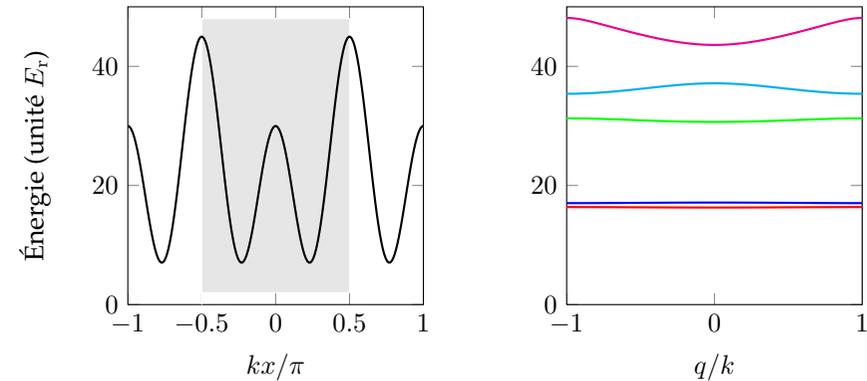


FIGURE 3.7. Gauche : super-réseau $V(x)/E_T = 15[\sin^2(kx) + 2\cos^2(2kx)]$. La zone grisée représente la cellule unité centrale, localisée entre $kx/\pi = -1/2$ et $kx/\pi = 1/2$ (c'est-à-dire entre $x = -a/2$ et $x = a/2$). Droite : spectre de bande pour ce super-réseau. Les deux bandes les plus basses, quasi-plates, sont bien séparées du reste du spectre.

Si cet arbitraire de phase n'a aucune incidence sur la variation spatiale des fonctions de Bloch, il peut jouer une influence considérable sur la forme de la fonction de Wannier

$$w_{n,0}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \psi_{n,q}(x) dq. \quad (3.64)$$

On peut donc exploiter cet arbitraire de phase pour construire « sur mesure » une base de fonctions de Wannier optimisant un critère donné.

4-2 Le mélange de différentes bandes

Une deuxième subtilité dans la construction de la base de fonctions de Wannier apparaît quand le spectre de l'hamiltonien est composé de plusieurs bandes d'énergie proches les unes des autres, ces bandes étant bien séparées du reste du spectre. On a alors intérêt à mélanger les fonctions de Wannier issues de ces bandes pour construire les fonctions les mieux adaptées au problème considéré.

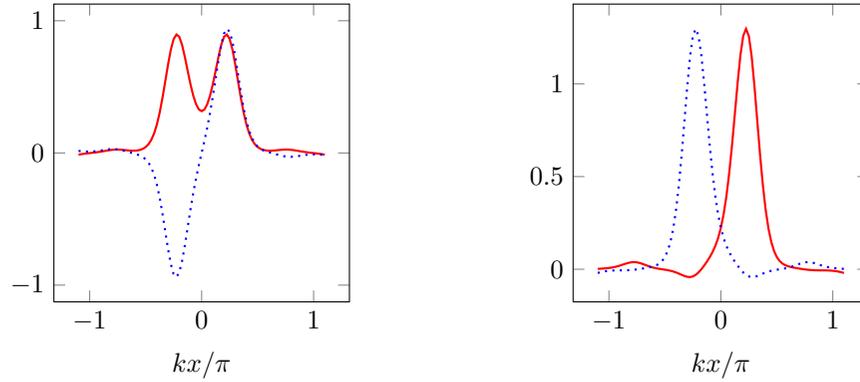


FIGURE 3.8. Gauche : fonctions de Wannier $w_0(x)$ (trait continu rouge) et $w_1(x)$ (trait pointillé bleu) associées aux deux bandes les plus basses du super-réseau de la figure 3.7. Droite : fonctions de Wannier localisées w_A et w_B , obtenues par somme et différence de w_0 et w_1 .

Illustrons ce point sur le cas d'un super-réseau, obtenu en superposant le potentiel sinusoïdal $V_0 \sin^2(kx)$ avec un potentiel de périodicité moitié $V_1 \cos^2(2kx)$. Ce potentiel, tracé sur la figure 3.7 dans le cas $V_1 = 2V_0$ présente deux minima locaux dans la période $a = \pi/k$. Le spectre de bande associé à ce potentiel est tracé sur la figure 3.7 pour $V_0 = 15 E_r$. On voit clairement que les deux bandes les plus basses $n = 0$ et $n = 1$ forment un doublet resserré, séparé des bandes supérieures par un gap important. L'origine de ce doublet est claire : il provient de l'effet tunnel à travers la barrière de faible hauteur localisée (pour la cellule unité centrale) en $x = 0$ et séparant les deux minima locaux de cette cellule unité.

Si on applique à la lettre la procédure décrite plus haut dans ce chapitre, en particulier l'équation (3.64), on va construire une fonction de Wannier pour chaque bande, en particulier une fonction de Wannier $w_0(x)$ pour la bande $n = 0$ et une fonction de Wannier $w_1(x)$ pour la bande $n = 1$. Ces fonctions de Wannier w_0 et w_1 sont tracées en figure 3.8 ; elles sont respectivement symétriques et antisymétriques, tout comme les états propres bien connus pour un double puits unique.

Dans de nombreux cas, ces fonctions de Wannier symétriques et antisym-

métriques ne sont pas les fonctions les mieux adaptées à la modélisation du problème. Si on souhaite faire un traitement de type Hubbard par exemple, on préfère disposer de vecteurs de base correspondant à un atome localisé dans le puits de gauche (A) ou de droite (B) de la cellule unité. Pour notre exemple, le remède est simple : il suffit de définir les fonctions de Wannier correspondantes à partir du mélange des bandes $n = 0$ et $n = 1$:

$$w_A(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (w_0(x) - w_1(x)), \quad \text{localisée à gauche,} \quad (3.65)$$

$$w_B(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (w_0(x) + w_1(x)), \quad \text{localisée à droite.} \quad (3.66)$$

Ces deux fonctions sont tracées sur la partie droite de la figure 3.8.

Dans ce cas particulier, le mélange des bandes se fait donc de manière naturelle. Dans des cas plus compliqués, il faut identifier le bon minimiseur qui permet d'obtenir l'hybridation optimale en terme de localisation de ces fonctions de Wannier (Marzari et al. 2012).

4-3 L'hamiltonien de Hubbard pour le super-réseau

Une fois identifiées les fonctions de Wannier w_A et w_B , on peut chercher les états propres de l'hamiltonien dans la limite de Hubbard, en se limitant cette fois-ci aux deux bandes les plus basses. Comme précédemment, on ne considèrera dans ce qui suit que les sauts entre proches voisins.

L'hamiltonien s'écrit donc

$$\hat{H} = -J \sum_j |w_{B,j}\rangle \langle w_{A,j}| - J' \sum_j |w_{A,j+1}\rangle \langle w_{B,j}| + \text{h.c.} \quad (3.67)$$

Le premier terme décrit le taux tunnel à travers la barrière de faible hauteur de la figure 3.7, et le second terme décrit le taux à travers la barrière la plus haute. Une représentation graphique de ce modèle de Hubbard est donnée en figure 3.9.

La cellule unité de ce problème comporte deux sites, A et B , et les fonctions périodiques pertinentes sont donc de la forme

$$|u_q\rangle = \alpha_q \left(\sum_j |w_{A,j}\rangle \right) + \beta_q \left(\sum_j |w_{B,j}\rangle \right), \quad (3.68)$$

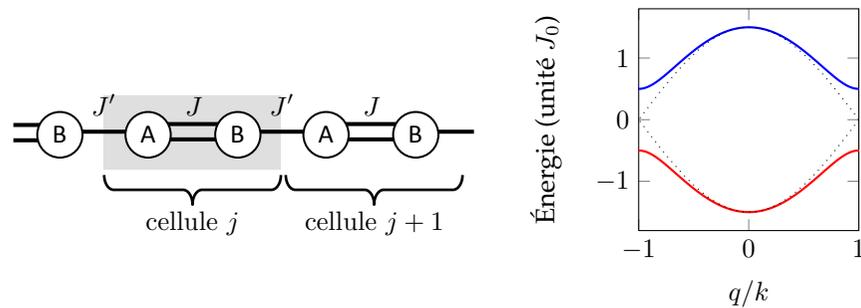


FIGURE 3.9. Gauche : Version discrétisée du super-réseau de la figure 3.7. Droite : spectre de bande (3.71) obtenu pour $J = J_0$, $J' = J_0/2$. Les pointillés représentent le résultat obtenu pour $J = J' = 3/4 J_0$.

où α_q et β_q sont pour l'instant des coefficients arbitraires. Écrivons que la fonction de Bloch

$$|\psi_q\rangle = \sum_j e^{ijaq} (\alpha_q |w_{A,j}\rangle + \beta_q |w_{B,j}\rangle) \quad (3.69)$$

est état propre de l'hamiltonien (3.67). En projetant l'équation aux valeurs propres sur les deux fonctions $|w_{A,j}\rangle$ et $|w_{B,j}\rangle$ d'un site j quelconque, on obtient une équation aux valeurs propres pour une matrice 2×2 hermitienne $\hat{\mathcal{H}}(q)$ (hamiltonien dans l'espace réciproque)

$$\hat{\mathcal{H}}(q) \begin{pmatrix} \alpha_q \\ \beta_q \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha_q \\ \beta_q \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathcal{H}}(q) = - \begin{pmatrix} 0 & J + J'e^{-iaq} \\ J + J'e^{iaq} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.70)$$

Les valeurs propres de $\hat{\mathcal{H}}(q)$ sont

$$E(q) = \pm |J + J'e^{iaq}| = \pm (J^2 + J'^2 + 2JJ' \cos(aq))^{1/2}. \quad (3.71)$$

Hormis dans le cas $J = J'$ où ce modèle correspond en fait au modèle de Hubbard à un site étudié en § 3, on trouve deux⁶ sous-bandes séparées par un gap $2|J - J'|$, l'ouverture de ce gap étant appelée *instabilité de Peierls* : un cristal 1D avec un électron par ion est instable car on peut abaisser son

6. Le nombre de sous-bandes est égal à la dimension de la matrice $\hat{\mathcal{H}}(q)$, elle-même égale au nombre de sites dans la cellule élémentaire du réseau.

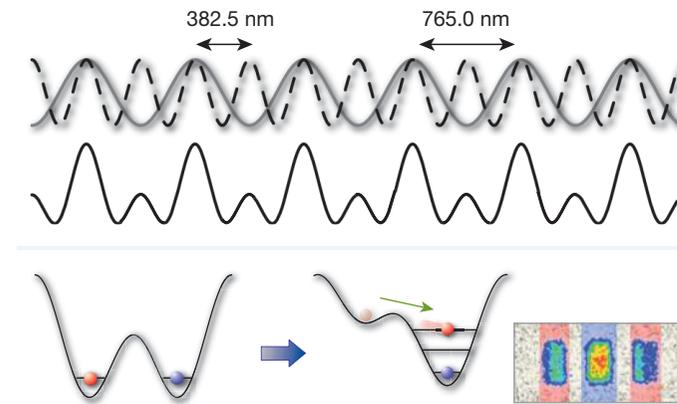


FIGURE 3.10. Super-réseau réalisé dans le groupe d'Immanuel Bloch pour des atomes de rubidium. En contrôlant l'intensité et la phase spatiale relative des deux ondes lumineuses créant ce réseau, on peut déformer le super-réseau et se ramener à un réseau simple, les atomes des puits B finissant dans la bande fondamentale $n = 0$ du réseau final, et les atomes des puits A se déversant dans la bande $n = 2$. La technique de dépliage de bandes (bandes mapping) vue au cours 2 permet ensuite de compter les populations respectives de ces deux types de puits [figure extraite de Folling et al. (2007)]. On pourra également consulter les articles de Sebby-Strabley et al. (2007) et Lee et al. (2007).

énergie en le distordant comme sur la figure 3.9, de manière à former des liaisons longues et des liaisons courtes. Ce type d'hamiltonien obtenu pour un super-réseau a été étudié expérimentalement par plusieurs groupes, en particulier le groupe de Bloch à Munich (Folling et al. 2007) [voir figure 3.10] et le groupe de Porto au NIST (Lee et al. 2007).

4-4 Bandes plates

À titre d'illustration, nous décrivons ici un autre aspect remarquable de ce modèle de Hubbard à plusieurs sites, qui est la possible apparition de bandes d'énergie complètement plates. Nous restons à une dimension et considérons le réseau en dents de scie représenté sur la figure 3.11. Ce réseau est caractérisé par 3 coefficients tunnel *a priori* différents J, J', J'' .

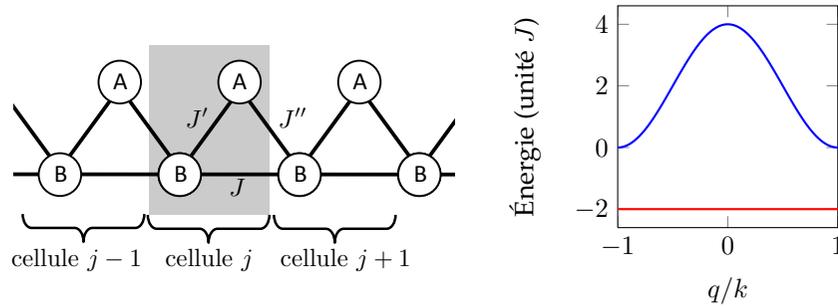


FIGURE 3.11. Réseau à deux sites donnant naissance à une bande fondamentale plate pour $J' = J'' = \sqrt{2} J$. Le tracé des bandes d'énergie a été fait pour $J < 0$.

La cellule unité contient toujours deux sites, et l'hamiltonien dans l'espace réciproque s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}}(q) = - \begin{pmatrix} 0 & J' + J''e^{-iaq} \\ J' + J''e^{iaq} & 2J \cos(aq) \end{pmatrix}. \quad (3.72)$$

La diagonalisation de cette matrice donne deux sous-bandes $E_{\pm}(q)$ qui sont des racines de fonctions trigonométriques de qa . Leur expression se simplifie considérablement dans le cas

$$J' = J'' = \sqrt{2} J. \quad (3.73)$$

et on trouve

$$E_+(q) = 2J, \quad E_-(q) = -2J [1 + \cos(aq)]. \quad (3.74)$$

Une des bandes d'énergie est complètement plate ! La masse effective correspondante est donc infinie, ce qui signifie qu'un atome préparé dans cette bande restera sur place indéfiniment sans que son paquet d'ondes ne subisse le moindre étalement. Si on prend le signe habituel ($J > 0$) pour le coefficient tunnel, la bande plate est la première bande excitée. Nous verrons plus tard qu'il est possible en modulant temporellement le réseau de changer le signe de J , ce qui permet alors d'avoir cette bande plate comme bande fondamentale.

L'interprétation physique de ces états non diffusifs est simple. On peut écrire explicitement des états localisés qui n'évoluent pas, du fait d'un phé-

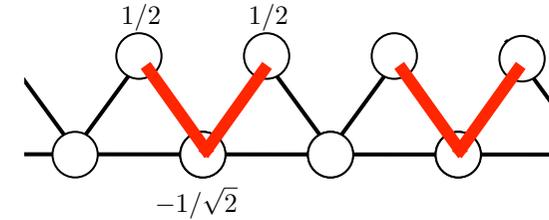


FIGURE 3.12. Représentation de l'état en V non diffusif donné en (3.75). Pour un réseau à N sites (i.e. $N/2$ cellules élémentaires), on peut disposer $N/4$ atomes dans ces états sans qu'ils se recouvrent. Pour un remplissage plus élevé et en présence d'interactions, l'état fondamental est un liquide de Luttinger (Huber & Altman 2010).

nomène d'interférence. Il existe un tel état⁷ par cellule du réseau, l'un d'entre eux étant représenté sur la figure 3.12 :

$$|\psi_j^{(\text{loc})}\rangle = \frac{1}{2} (|w_{A,j-1}\rangle + |w_{A,j}\rangle - \sqrt{2} |w_{B,j}\rangle). \quad (3.75)$$

Pour s'étaler à partir d'un tel « état en V », la particule devrait passer sur un des deux sites $|w_{B,j\pm 1}\rangle$. Mais les signes présents dans l'expression du vecteur d'état (3.75) et le rapport $\sqrt{2}$ choisi entre les coefficients J et $J' = J''$ font que l'amplitude de transition de $|\psi_j^{(\text{loc})}\rangle$ vers chacun de ces deux états s'annule.

Outre le caractère remarquablement élégant de cet effet d'interférence quantique, ces bandes plates sont très intéressantes pour la recherche d'états fortement corrélés. Nous avons indiqués plus haut que le régime intéressant du problème à N corps apparaissait quand l'énergie d'interaction entre particules devenait de l'ordre de l'énergie cinétique de ces particules. Dans le modèle de Hubbard utilisé ici, l'énergie cinétique est donnée par la largeur de bande et elle est donc nulle. L'état fondamental du système est alors régi uniquement par les interactions, du moins tant que l'énergie d'interaction reste plus petite que le gap entre la bande plate et la première bande excitée qui est dispersive.

7. Les états (3.75) ne sont pas orthogonaux entre eux, mais on peut construire une base orthogonale de fonctions de Wannier pour ce problème [voir Huber & Altman (2010)].

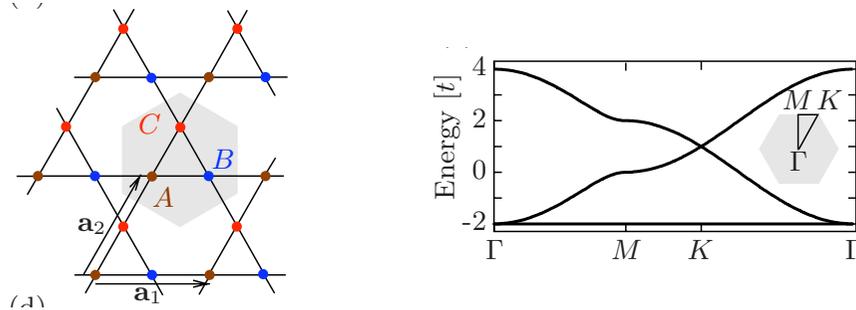


FIGURE 3.13. À gauche : réseau de Kagomé. La cellule élémentaire contient 3 sites A , B , C . Tous les éléments de matrice tunnels entre proches voisins sont égaux. La diagonalisation de l'hamiltonien dans l'espace réciproque (3.77) montre que la bande fondamentale (pour un coefficient tunnel positif) est plate. Le spectre correspondant est montré sur la figure de droite pour $J < 0$, ce choix plaçant la bande plate comme bande fondamentale (Figures extraites de Huber & Altman (2010)).

Une question naturelle est de déterminer l'état fondamental de N bosons préparés dans une telle bande. En l'absence d'interactions, il n'y a pas de condensation puisque tous les états à une particule ont la même énergie. En présence d'interactions répulsives, une transition se produit quand la densité devient supérieure à $1/4$ atome par site, auquel cas on a forcément un recouvrement entre les états en V disposés sur le réseau. L'état à haute densité est une phase *liquide de Luttinger*, analysée analytiquement et numériquement dans Huber & Altman (2010).

À titre d'exercice, on pourra étudier un problème similaire (du point de vue de la physique à une particule) en dimension deux. Il s'agit de la structure appelée *réseau de Kagomé* et représentée sur la figure 3.13. Ce réseau est obtenu en pavant le plan par translation d'une cellule unité selon un réseau triangulaire généré par les vecteurs

$$\mathbf{a}_1 = a \mathbf{u}_x, \quad \mathbf{a}_2 = a \left(\frac{1}{2} \mathbf{u}_x + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{u}_y \right). \quad (3.76)$$

La cellule unité comporte trois sites notés A , B , C couplés deux à deux par effet tunnel. Tous les éléments de matrice entre proches voisins ont la

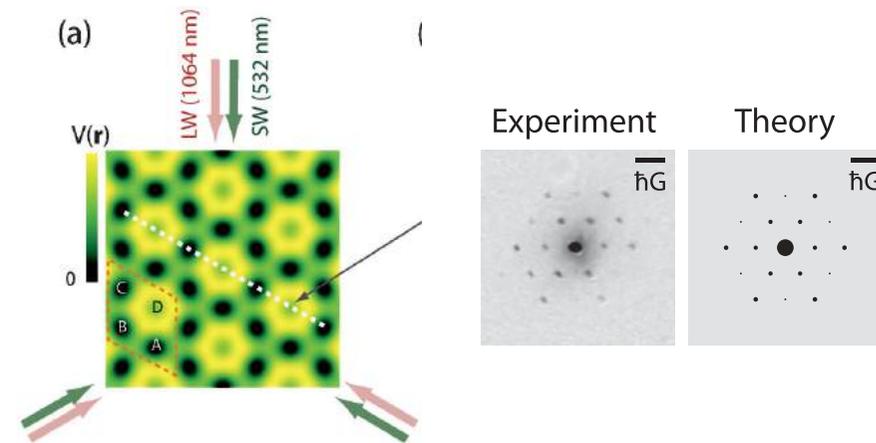


FIGURE 3.14. Figures extraites de Jo et al. (2012). Gauche : réalisation d'un réseau de Kagomé à partir de deux réseaux triangulaires. Droite : figure de temps de vol pour une superfluide initialement confiné dans le réseau de Kagomé.

même valeur. L'hamiltonien en réseau réciproque est

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{q}) = -J \begin{pmatrix} 0 & 1 + e^{-iQ_1} & 1 + e^{-iQ_2} \\ 1 + e^{iQ_1} & 0 & 1 + e^{-iQ_3} \\ 1 + e^{iQ_2} & 1 + e^{iQ_3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.77)$$

où on a posé $Q_j = \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_j$, $j = 1, 2$ et $Q_3 = Q_1 - Q_2$. La diagonalisation de cette matrice 3×3 donne une bande plate d'énergie $2J$ et deux bandes dispersives. L'analyse des états à N corps pouvant apparaître à haute densité, à savoir une phase de type super-solide, est faite dans Huber & Altman (2010).

Ce réseau a été réalisé expérimentalement dans le groupe de D. Stamper-Kurn à Berkeley (Jo et al. 2012), en superposant deux réseaux triangulaires commensurables générés par des faisceaux lumineux à 532 nm et 1064 nm (voir figure 3.14). La structure de Kagomé a été identifiée en plaçant un superfluide dans ce réseau et en observant les pics de Bragg lors d'un temps de vol après coupure soudaine du réseau. Notons que dans cette expérience, le signe du coefficient tunnel était le signe usuel ($-J$), la bande plate étant alors la bande supérieure des trois sous-bandes les plus

basses. Outre l'apparition de bandes plates, ce réseau de Kagomé est particulièrement intéressant en magnétisme, avec un diagramme de phase très riche en présence d'interaction antiferromagnétismes.

Winkler, K., G. Thalhammer, F. Lang, R. Grimm, J. Hecker-Denschlag, A. J. Daley, A. Kantian, H. P. Büchler & P. Zoller (2006), « Repulsively bound atom pairs in an optical lattice », in *Nature* 441, p. 853.

5 Références

- Campbell, R. (1955), *Théorie générale de l'équation de Mathieu*, Masson et Cie.
- Fisher, Matthew P. A., Peter B. Weichman, G. Grinstein & Daniel S. Fisher (1989), « Boson localization and the superfluid-insulator transition », in *Phys. Rev. B* 40 (1), pp. 546–570.
- Folling, S., S. Trotzky, P. Cheinet, M. Feld, R. Saers, A. Widera, T. Müller & I. Bloch (2007), « Direct observation of second-order atom tunnelling », in *Nature* 448, p. 1029.
- Greiner, M., M. O. Mandel, T. Esslinger, T. Hänsch & I. Bloch (2002), « Quantum Phase Transition from a Superfluid to a Mott Insulator in a Gas of Ultracold Atoms », in *Nature* 415, p. 39.
- Huber, Sebastian D. & Ehud Altman (2010), « Bose condensation in flat bands », in *Phys. Rev. B* 82 (18), p. 184502.
- Jaksch, D., C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner & P. Zoller (1998), « Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices », in *Phys. Rev. Lett.* 81 (15), pp. 3108–3111.
- Jo, Gyu-Boong, Jennie Guzman, Claire K. Thomas, Pavan Hosur, Ashvin Vishwanath & Dan M. Stamper-Kurn (2012), « Ultracold Atoms in a Tunable Optical Kagome Lattice », in *Phys. Rev. Lett.* 108 (4), p. 045305.
- Kohn, W. (1959), « Analytic Properties of Bloch Waves and Wannier Functions », in *Phys. Rev.* 115 (4), pp. 809–821.
- Lee, P. J., M. Anderlini, B. L. Brown, J. Sebby-Strabley, W. D. Phillips & J. V. Porto (2007), « Sublattice Addressing and Spin-Dependent Motion of Atoms in a Double-Well Lattice », in *Phys. Rev. Lett.* 99 (2), p. 020402.
- Marzari, Nicola, Arash A. Mostofi, Jonathan R. Yates, Ivo Souza & David Vanderbilt (2012), « Maximally localized Wannier functions : Theory and applications », in *Rev. Mod. Phys.* 84 (4), pp. 1419–1475.
- Sebby-Strabley, J., B. L. Brown, M. Anderlini, P. J. Lee, W. D. Phillips, J. V. Porto & P. R. Johnson (2007), « Preparing and Probing Atomic Number States with an Atom Interferometer », in *Phys. Rev. Lett.* 98 (20), p. 200405.
- Wannier, Gregory H. (1937), « The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals », in *Phys. Rev.* 52 (3), pp. 191–197.

Chapitre 4

Réseaux dépendant du temps

Sommaire

1	Quelques hamiltoniens pertinents	2
1-1	Transformations unitaires	2
1-2	Changement de référentiels	3
2	Le réseau vibrant	3
2-1	Hamiltonien à l'approximation des liaisons fortes	5
2-2	L'expérience de Pise (Lignier et al. 2007)	6
3	Une approche « naïve » au réseau vibrant	7
3-1	Étude préliminaire : un système à deux sites	7
3-2	Analogie avec un spin 1/2 dans un champ oscillant	8
3-3	Le réseau vibrant : approche naïve	9
4	L'approche de Bloch pour un réseau vibrant	10
4-1	Théorème de Bloch dans le cas dépendant du temps	10
4-2	Évolution du quasi-moment $q(t)$	10
4-3	Localisation dans la bande fondamentale	11
4-4	La méthode de Floquet	13
5	Réseau vibrant à 2D : l'expérience d'Hambourg	15
6	Références	17

Parmi les possibilités offertes par les réseaux optiques, on trouve au premier rang le contrôle dans le temps des paramètres du réseau. Nous avons déjà abordé au cours 2 les conséquences d'une variation de l'amplitude du réseau et discuté les deux limites, adiabatique et soudaine, pour le branchement ou le débranchement du potentiel périodique. Dans ce cours et le suivant, nous allons nous intéresser à un autre type de variation temporelle : nous allons étudier les phénomènes qui apparaissent quand on varie dans le temps la position des nœuds du réseau, en remplaçant le potentiel $V(x)$ (à 1D) par le potentiel $V[x - x_0(t)]$, où $x_0(t)$ est une fonction contrôlée du temps.

Dans ce chapitre, nous allons d'abord établir, via des transformations unitaires, l'équivalence entre plusieurs hamiltoniens permettant de décrire un réseau en mouvement. Nous étudierons ensuite le cas particulier d'une modulation périodique $x_0(t)$ et nous discuterons le phénomène de localisation dynamique qui peut alors apparaître. Le chapitre suivant sera consacré aux oscillations de Bloch, qui se manifestent quand $x_0(t)$ correspond à un mouvement uniformément accéléré. Cette situation est équivalente (par changement de référentiel) au cas où on ajoute à la force créée par le réseau une force uniforme dans l'espace et indépendante du temps .

Faute de temps, nous n'aborderons pas d'autres classes de phénomènes, également très intéressants, liés à la variation temporelle de certains paramètres du réseau. Citons la spectroscopie des atomes dans le réseau, que l'on peut effectuer en modulant dans le temps l'amplitude V_0 du potentiel périodique [voir par exemple l'article de Kollath et al. (2006) et ses

références]. Un autre exemple est l'utilisation d'un réseau pulsé pour étudier des phénomènes de chaos ou de localisation d'Anderson [voir l'article récent de Lopez et al. (2012) et ses références].

1 Quelques hamiltoniens pertinents

Les études que nous allons mener dans ce chapitre et le suivant portent sur des hamiltoniens dépendant du temps, mais qui gardent leur structure spatialement périodique. Dans le cas 1D qui va d'abord nous intéresser, ces hamiltoniens sont de la forme

$$\hat{H}(t) = \frac{(\hat{p} - A(t))^2}{2m} + V(\hat{x}, t), \quad (4.1)$$

avec

$$V(x + a, t) = V(x, t). \quad (4.2)$$

Nous verrons un peu plus loin comment le théorème de Bloch permet de déduire des informations générales sur l'évolution de systèmes régis par ces hamiltoniens. Dans ce premier paragraphe, nous allons commencer notre étude par l'identification de certains hamiltoniens qui peuvent se ramener à la forme (4.1) via une transformation unitaire, même si le problème qu'ils décrivent n'est pas spatialement périodique.

1-1 Transformations unitaires

Commençons par rappeler le principe d'une transformation unitaire. On se donne un opérateur unitaire dépendant éventuellement du temps $\hat{U}(t)$ et on considère un système décrit par un état $|\psi(t)\rangle$ évoluant sous l'effet de l'hamiltonien $\hat{H}(t)$:

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (4.3)$$

On effectue sur les états $|\psi(t)\rangle$ la transformation

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (4.4)$$

L'équation d'évolution de l'état transformé $|\tilde{\psi}\rangle$ est encore hamiltonienne

$$i\hbar \frac{d|\tilde{\psi}\rangle}{dt} = \hat{\tilde{H}}(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (4.5)$$

et l'hamiltonien correspondant est

$$\hat{\tilde{H}}(t) = \hat{U}(t) \hat{H}(t) \hat{U}^\dagger(t) + i\hbar \frac{d\hat{U}(t)}{dt} \hat{U}^\dagger(t). \quad (4.6)$$

Si certains aspects techniques (recherches des états propres par exemple) sont plus simples pour $\hat{\tilde{H}}$ que pour \hat{H} , on a intérêt à mener les calculs dans le point de vue *transformé* et revenir à la fin dans le point de vue initial via la transformation inverse de (4.4).

Nous allons envisager dans la suite deux classes de transformations unitaires :

$$\hat{U}_1(t) = e^{-i\hat{x} p_0(t)/\hbar}, \quad \hat{U}_2(t) = e^{-i x_0(t) \hat{p}/\hbar}, \quad (4.7)$$

où $x_0(t)$ et $p_0(t)$ sont des fonctions quelconques du temps, ayant respectivement la dimension d'une position et d'une impulsion. Les opérateurs position et impulsion¹ se transforment de la manière suivante :

$$\hat{U}_1 \hat{x} \hat{U}_1^\dagger = \hat{x}, \quad \hat{U}_1 \hat{p} \hat{U}_1^\dagger = \hat{p} + p_0, \quad (4.8)$$

et

$$\hat{U}_2 \hat{x} \hat{U}_2^\dagger = \hat{x} - x_0, \quad \hat{U}_2 \hat{p} \hat{U}_2^\dagger = \hat{p}. \quad (4.10)$$

Indiquons également la valeur du terme $i\hbar(d\hat{U}/dt)\hat{U}^\dagger$ apparaissant dans l'hamiltonien transformé (4.6)

$$i\hbar \frac{d\hat{U}_1}{dt} \hat{U}_1^\dagger = \hat{x} \dot{p}_0, \quad i\hbar \frac{d\hat{U}_2}{dt} \hat{U}_2^\dagger = \dot{x}_0 \hat{p}. \quad (4.11)$$

1. Dans tout ce chapitre, les opérateurs position et impulsion sont définis par leur action sur une fonction $\psi(x)$ de la manière habituelle :

$$\hat{x} \psi(x) = x \psi(x), \quad \hat{p} \psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}. \quad (4.8)$$

Le lien entre ces opérateurs et le résultat d'une mesure de position ou de vitesse dépend de la transformation unitaire effectuée.

1-2 Changement de référentiels

Partons d'un système décrit par l'hamiltonien

$$\hat{H}_0(t) = \frac{[\hat{p} - A(t)]^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad V(x+a) = V(x), \quad (4.12)$$

avec un potentiel spatial périodique indépendant du temps $V(x)$ et un potentiel vecteur $A(t)$ spatialement uniforme. Nous allons regarder comment l'évolution de ce système se transforme sous l'effet de \hat{U}_1 ou de \hat{U}_2 pour des fonctions x_0 et p_0 bien choisies.

Commençons par \hat{U}_1 en prenant

$$p_0(t) = A(t). \quad (4.13)$$

On obtient

$$\hat{H}_1(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - F(t) \hat{x} \quad \text{avec} \quad F(t) = -\frac{dA(t)}{dt}. \quad (4.14)$$

L'hamiltonien (4.14) décrit le mouvement d'une particule dans la superposition du potentiel périodique $V(x)$ et d'un potentiel correspondant à une force constante spatialement, mais dépendant éventuellement du temps $F(t)$. Ceci n'est pas une surprise : on sait qu'en électromagnétisme, un potentiel vecteur dépendant du temps est associé à un champ électrique $\mathcal{E} = -\dot{A}$: c'est ce qu'on retrouve ici pour une particule pour laquelle on a pris par convention une charge unité dans (4.12). La transformation unitaire qui fait passer de \hat{H}_0 à \hat{H}_1 est d'ailleurs exactement la même que celle utilisée en électrodynamique pour introduire l'hamiltonien dipolaire électrique dans l'approximation des grandes longueurs d'onde (voir le complément A_{IV} de Cohen-Tannoudji et al. 1987). Notons qu'il est remarquable que le problème (4.14) **qui n'est pas périodique**, puisse se ramener au problème (4.12) **qui est périodique**.

Regardons maintenant l'action de \hat{U}_2 sur l'hamiltonien de départ (4.12), en prenant²

$$x_0(t) = \frac{1}{m} \int_0^t A(t') dt'. \quad (4.15)$$

2. Cette transformation est connue sous le nom de Kramers-Henneberger en électrodynamique quantique, voir par exemple Cohen-Tannoudji et al. 1987, §IV.B.4.

On trouve

$$\hat{H}_2(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V[\hat{x} - x_0(t)] + \frac{A^2(t)}{2m}. \quad (4.16)$$

Le dernier terme est une énergie indépendante de x et p qui vient s'ajouter à l'hamiltonien. On peut l'éliminer en faisant une dernière transformation unitaire (très simple) générée par

$$\hat{U}_3 = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{A^2(t')}{2m} dt'\right) \quad (4.17)$$

qui laisse \hat{x} et \hat{p} inchangés. Après cette opération, nous arrivons à

$$\hat{H}_2(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V[\hat{x} - x_0(t)]. \quad (4.18)$$

Cette forme indique comment réaliser en pratique les situations abordées dans ce chapitre : il faut contrôler les phases des ondes progressives composant l'onde stationnaire pour déplacer la position de ses noeuds et de ses ventres selon la loi donnée par $x_0(t)$.

En conclusion, les trois hamiltoniens (4.12)-(4.14)-(4.18), qui sont regroupés dans le tableau 4.1, permettent de décrire la même situation physique et on pourra choisir l'un ou l'autre selon les aspects que l'on souhaite privilégier. Notons qu'il y a une interprétation simple pour la suite de transformations générée par $\hat{U} = \hat{U}_1 \hat{U}_2^\dagger \hat{U}_3^\dagger$, qui fait passer de l'hamiltonien (4.18), décrivant un réseau en mouvement, à l'hamiltonien (4.14), décrivant un réseau fixe superposé à une force uniforme $F(t)$. Il s'agit d'un changement de référentiel, qui fait passer du référentiel du laboratoire au référentiel bougeant avec le réseau, dans lequel apparaît la force d'inertie $F(t) = -m\ddot{x}_0(t) = -\dot{A}(t)$.

2 Le réseau vibrant

La configuration que nous allons aborder dans la suite de ce chapitre est celle d'un réseau infini dont on module périodiquement la position en prenant par exemple :

$$\hat{H}_2(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V[\hat{x} - x_0(t)], \quad x_0(t) = \bar{x}_0 \cos(\omega t). \quad (4.19)$$

\hat{H}_1	\hat{H}_0	\hat{H}_2
$\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - F(t) \hat{x}$	$\frac{[\hat{p} - A(t)]^2}{2m} + V(\hat{x})$	$\frac{\hat{p}^2}{2m} + V[\hat{x} - x_0(t)]$
$q(t) = q_{\text{in}} + \frac{1}{\hbar} \int_0^t F(t') dt'$	$q(t) = q_{\text{in}}$	$q(t) = q_{\text{in}}$
$-J \sum_j (w_{j+1}\rangle\langle w_j + \text{h.c.}) - a F(t) \sum_j j w_j\rangle\langle w_j $	$-J \sum_j (w_{j+1}\rangle\langle w_j e^{i a A(t)/\hbar} + \text{h.c.})$	

$$\overleftarrow{U}_1 = \exp(-i\hat{x} p_0(t)/\hbar)$$

$$\overrightarrow{U}_2 = \exp(-ix_0(t) \hat{p}/\hbar)$$

TABLE 4.1. Les trois hamiltoniens utilisés dans ce chapitre, l'évolution temporelle du quasi-moment et la version « liaisons fortes » de cet hamiltonien. On passe de l'un à l'autre par les transformations unitaires indiquées en dernière ligne, avec $p_0(t) = A(t) = m\dot{x}_0(t)$ et $F(t) = -m\ddot{x}_0(t)$.

Ce problème a été étudié théoriquement par Dunlap & Kenkre (1986) et Holthaus (1992), la question étant de comprendre le comportement d'électrons dans des cristaux quand ils sont soumis au champ électrique d'une onde électromagnétique. Le phénomène qui apparaît est appelé *localisation dynamique*. La conclusion principale est l'existence d'une valeur du champ oscillant pour laquelle le transport disparaît ; l'étalement d'un paquet d'ondes électronique qu'on observerait en absence de champ est complètement bloqué. Holthaus (1992) prédit en particulier un collapse des mini-bandes attendues dans un super-réseau de période d'une dizaine de nanomètres, quand il est éclairé avec une lumière dans l'infra-rouge lointain.

Cette question d'un réseau vibrant s'est donc posée bien avant les expériences d'atomes dans des réseaux optiques, mais la physique des atomes froids l'a remise en avant car la modulation du réseau permet de contrôler l'amplitude et le signe du coefficient tunnel J , et même de le rendre complexe. Le contrôle de l'amplitude du coefficient J permet de faire varier le rapport entre l'énergie cinétique et l'énergie d'interaction, dont nous avons expliqué dans un cours précédent qu'il était déterminant pour l'émergence de la physique à N corps. C'est ainsi que Eckardt et al. (2005) ont proposé d'utiliser la modulation d'un réseau pour induire la transition entre un superfluide et un isolant de Mott. La possibilité de rendre le coefficient J complexe est quant à elle intéressante quand on considère un réseau à deux ou trois dimensions. On peut alors réaliser une situation où l'atome accumule une phase non nulle lorsqu'il effectue une boucle fermée en sautant par effet tunnel d'un site à l'autre. C'est exactement ce dont on a besoin pour réaliser un champ de jauge artificiel. Nous ne traiterons pas ces champs de jauge artificiels dans le cours de cette année, mais nous donnons néanmoins ci-dessous quelques indications sur cette possible modification de J .

2-1 Hamiltonien à l'approximation des liaisons fortes

Sur le plan théorique, notre point de départ sera l'hamiltonien d'un atome dans un réseau optique « vibrant »

$$\hat{H}_2(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V[\hat{x} - x_0(t)], \quad (4.20)$$

où $x_0(t)$ est une fonction périodique du temps, de pulsation ω . Nous allons supposer que les atomes sont préparés dans une bande donnée du réseau, la bande fondamentale par exemple, et qu'ils y restent au cours de l'évolution. Nous allons donc restreindre la dynamique des atomes à cette bande et omettre dans la suite l'indice de bande. Les conditions nécessaires pour ce suivi adiabatique de la bande d'énergie initialement peuplée seront abordées en détail dans le prochain chapitre portant sur les oscillations de Bloch.

Nous allons de plus faire la plus grande partie de notre étude dans la limite des liaisons fortes, décrite par l'hamiltonien de Hubbard, où seuls les sauts entre proches voisins jouent un rôle significatif. Pour écrire l'hamiltonien correspondant à partir de (4.20), il est utile d'effectuer d'abord les transformations unitaires \hat{U}_1 et \hat{U}_2 pour passer à l'hamiltonien \hat{H}_1

$$\hat{H}_1(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - F(t) \hat{x}. \quad (4.21)$$

L'expression de cet hamiltonien dans le modèle des liaisons fortes est simple. Sa partie non modulée est l'hamiltonien de Hubbard que nous avons déjà rencontré :

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \longrightarrow -J \left(\hat{T}_1 + \hat{T}_1^\dagger \right) \quad (4.22)$$

où \hat{T}_j décale la particule de j sites vers la droite :

$$\hat{T}_j = \sum_{j' \in \mathbb{Z}} |w_{j+j'}\rangle \langle w_{j'}| \quad (4.23)$$

Le terme lié à la force d'inertie s'écrit quant à lui

$$-F(t) \hat{x} \longrightarrow -a F(t) \sum_j j |w_j\rangle \langle w_j| \quad (4.24)$$

où on a utilisé le fait que l'opérateur position est diagonal dans la base des fonctions de Wannier (voir par exemple Eckardt et al. (2009))

$$\langle w_j | \hat{x} | w_{j'} \rangle = ja \delta_{j,j'}. \quad (4.25)$$

L'hamiltonien de Hubbard d'un réseau vibrant est donc

$$\hat{H}_1 = -J \left(\hat{T}_1 + \hat{T}_1^\dagger \right) + \hbar\omega \xi(t) \sum_j j |w_j\rangle \langle w_j|, \quad (4.26)$$

où on a caractérisé l'amplitude de la modulation par le paramètre sans dimension $\xi(t)$

$$\xi(t) = -\frac{aF(t)}{\hbar\omega} = \frac{ma}{\hbar\omega} \ddot{x}_0(t). \quad (4.27)$$

Ce coefficient est défini (au signe près) comme le rapport entre le travail aF de la force d'inertie $F = -m\ddot{x}_0$ sur un période a du réseau, et le quantum de vibration $\hbar\omega$ associé à cette force vibrante.

Pour une modulation sinusoïdale, on définit plus précisément

$$x_0(t) = \bar{x}_0 \cos(\omega t), \quad F(t) = -m\ddot{x}_0(t) = m\omega^2 \cos(\omega t), \quad (4.28)$$

soit

$$\xi(t) = \xi_0 \cos(\omega t), \quad \xi_0 = -ma\omega\bar{x}_0/\hbar. \quad (4.29)$$

À partir de l'expression (4.26) de \hat{H}_1 en régime de Hubbard, on peut revenir à la version « \hat{H}_0 » de ce problème. Il faut pour cela utiliser la version discrétisée de la transformation unitaire $\hat{U}_1(t)$:

$$\hat{U}_1(t) = e^{-i\hat{x} p_0(t)/\hbar} \quad \longrightarrow \quad \hat{U}_1(t)|w_j\rangle = e^{-i j a p_0(t)/\hbar} |w_j\rangle \quad (4.30)$$

ce qui conduit à

$$\begin{aligned} \hat{H}_0(t) &= \hat{U}_1^\dagger(t) \hat{H}_1(t) \hat{U}_1(t) + i\hbar \frac{d\hat{U}_1^\dagger}{dt} \hat{U}_1 \\ &= -J \left(\hat{T}_1 e^{i a p_0(t)/\hbar} + \hat{T}_1^\dagger e^{-i a p_0(t)/\hbar} \right) \end{aligned} \quad (4.31)$$

avec $p_0(t) = m\dot{x}_0(t)$. Dans ce point de vue, la vibration du réseau se décrit donc par une modulation périodique des coefficients tunnels, qui deviennent complexes.

Notons qu'on peut facilement, à partir de (4.31), prendre en compte des sauts entre voisins plus distants. En notant $J(j)$ l'élément de matrice pour un saut de j sites (cf. chapitre 3), l'expression (4.31) se généralise immédiatement en

$$\hat{H}_0 = \sum_{j=1}^{+\infty} J(j) \left(\hat{T}_j e^{i j a p_0(t)/\hbar} + \hat{T}_j^\dagger e^{-i j a p_0(t)/\hbar} \right). \quad (4.32)$$

Rappelons qu'on a posé dans tout ce qui précède $J(1) = -J$ pour disposer d'un coefficient $J > 0$. Rappelons également que les éléments de matrice

tunnel $J(j)$ sont les coefficients de Fourier de l'énergie $E(q)$ de la bande considérée :

$$E(q) = 2 \sum_{j=1}^{+\infty} J(j) \cos(jaq). \quad (4.33)$$

2-2 L'expérience de Pise (Lignier et al. 2007)

La première mise en évidence avec des atomes froids de l'effet de localisation dynamique a été faite dans le groupe de M. Raizen (Madison et al. 1998). Le réseau était mis en mouvement oscillant en modulant en phase un des faisceaux composant l'onde stationnaire. En faisant la spectroscopie d'une bande d'énergie dans le réseau, Raizen et son groupe ont pu voir un affinement spectaculaire de cette bande pour une valeur critique de l'amplitude de l'oscillation du réseau.

Nous montrons sur la figure 4.1 le résultat obtenu dans le groupe d'Arimondo (Lignier et al. 2007) avec un condensat de rubidium chargé dans un réseau optique 1D vibrant de manière sinusoïdale :

$$x_0(t) = \bar{x}_0 \cos(\omega t). \quad (4.34)$$

Les profondeurs de réseau étaient choisies entre 4 et 9 énergies de recul E_r , ce qui est un peu juste pour que l'approximation des liaisons fortes du paragraphe précédent soit très bonne, mais elle permet néanmoins de donner une bonne justification des résultats expérimentaux, comme nous le verrons dans la suite.

Les chercheurs de Pise ont mesuré l'étalement dans le temps de la distribution spatiale des atomes dans le réseau. Pour cela, ils ont d'abord confiné les particules au voisinage de $x = 0$ grâce à un piège dipolaire additionnel, puis ils ont éteint ce piège en laissant le réseau allumé. Les résultats de cette expérience sont compatibles avec l'idée que le réseau vibrant est essentiellement équivalent à un réseau fixe, mais avec un coefficient tunnel J' modifié.

La mesure du coefficient tunnel J' a été faite pour plusieurs profondeurs de réseau V_0 , plusieurs fréquences de modulation ω et plusieurs amplitudes de modulation \bar{x}_0 . Les résultats expérimentaux montrent un phénomène remarquable : le rapport J'/J des taux tunnel avec et sans

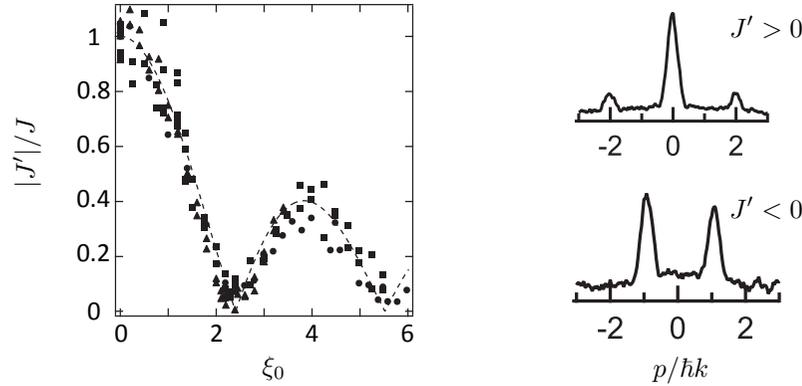


FIGURE 4.1. Suppression dynamique de l'effet tunnel dans un réseau 1D vibrant pour un condensat d'atomes de ^{87}Rb . À gauche : La valeur absolue du coefficient tunnel (normalisé par la valeur en absence de vibration) est obtenue à partir de l'étalement d'un paquet d'ondes dans le réseau. Cette figure « universelle » regroupe des points obtenus pour différentes profondeurs de réseau (4 à $9 E_r$) et différentes fréquence de vibration (0.5 et 1 kHz). L'amplitude de vibration \bar{x}_0 est au maximum de l'ordre de $0.5 a$ et le rapport $\hbar\omega/J$ varie entre 0.3 et 30. À droite : distribution en impulsion des atomes dans le réseau vibrant pour $\xi_0 < 2.4$ (en haut) et pour ξ_0 légèrement supérieur à 2.4 (en bas). Dans le second cas, la présence de deux pics à $p = \pm\hbar k$ indique que le bas de la bande est situé en bord de zone de Brillouin, correspondant à un coefficient tunnel effectif $J' < 0$. Ces figures sont extraites de Lignier et al. (2007).

modulation dépend seulement du paramètre $\xi_0 = -m\omega\bar{x}_0/\hbar$ introduit plus haut (4.29). La ligne pointillée est la valeur absolue de la fonction de Bessel $\mathcal{J}_0(\xi_0)$, résultat que nous allons justifier plus loin. En particulier, on trouve une annulation du coefficient tunnel (pas de diffusion spatiale) pour $\xi_0 \approx 2.4$ (le premier zéro de la fonction de Bessel est en 2.405).

L'étude de la diffusion spatiale ne fournit pas le signe de J' . Celui-ci est accessible dans une expérience de temps de vol, où l'on mesure la distribution en impulsion des atomes. Pour $\xi_0 < 2.4$, on trouve que cette distribution est centrée sur $p = 0$, indiquant que le bas de la bande d'énergie se situe en $q = 0$, soit $J' > 0$. En revanche pour $\xi_0 > 2.4$, on trouve une distri-

bution en impulsion avec deux pics de hauteurs comparables en $p = \pm\hbar k$, indiquant que le bas de la bande est passé à $q = \pm k$, conformément à ce qu'on attend pour un coefficient tunnel $J' < 0$. Nous allons dans la suite expliquer l'essentiel de ces résultats et nous renvoyons le lecteur intéressé par des analyses théoriques plus détaillées aux articles de Eckardt et al. (2009) et Creffield et al. (2010).

3 Une approche « naïve » au réseau vibrant

3-1 Étude préliminaire : un système à deux sites

Pour commencer, nous allons nous intéresser à un système plus simple qu'un réseau infini, en nous limitant à un double puits de potentiel dans lequel nous identifions deux états $|w_j\rangle$, $j = \pm$, correspondant à une particule localisée à droite ($x = +a/2$) ou à gauche ($x = -a/2$) du centre. Ce problème a été étudié théoriquement par Grossmann et al. (1991) et on pourra consulter l'article de Grifoni & Hänggi (1998) pour une revue des traitements théoriques possibles. Nous allons nous limiter ici à une approche mathématique très simple, qui nous permettra néanmoins de capturer l'essentiel du phénomène.

Pour un système à deux sites, l'hamiltonien (4.26) est remplacé par

$$\hat{H}(t) = -J(|w_+\rangle\langle w_-| + |w_-\rangle\langle w_+|) + \frac{1}{2}\hbar\omega \xi(t) (|w_+\rangle\langle w_+| - |w_-\rangle\langle w_-|) \quad (4.35)$$

ou encore

$$\hat{H} = -J \hat{\sigma}_x + \frac{1}{2}\hbar\omega \xi(t) \hat{\sigma}_z \quad (4.36)$$

où les $\hat{\sigma}_i$ sont les matrices de Pauli dans la base $\{|w_+\rangle, |w_-\rangle\}$. Écrivons l'état de la particule sous la forme

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{j=\pm} \alpha_j(t)|w_j\rangle; \quad (4.37)$$

l'évolution des α_j est alors donnée par :

$$i\dot{\alpha}_+ = \frac{\omega}{2} \xi(t) \alpha_+ - \frac{J}{\hbar} \alpha_-, \quad i\dot{\alpha}_- = -\frac{\omega}{2} \xi(t) \alpha_- - \frac{J}{\hbar} \alpha_+. \quad (4.38)$$

Ces deux équations se réécrivent

$$i\hbar \dot{\tilde{\alpha}}_+ = -J e^{i\eta} \tilde{\alpha}_-, \quad i\hbar \dot{\tilde{\alpha}}_- = -J e^{-i\eta} \tilde{\alpha}_+, \quad (4.39)$$

où on a posé

$$\tilde{\alpha}_\pm = \alpha_\pm \exp(\pm i\eta/2), \quad \eta(t) = \omega \int_0^t \xi(t') dt'. \quad (4.40)$$

Plaçons-nous dans la situation où l'évolution due à l'effet tunnel entre les deux puits, de constante de temps \hbar/J , est beaucoup plus lente que la modulation de pulsation ω donnant l'évolution de la fonction $\xi(t)$. Prenons la moyenne temporelle³ des équations (4.39) sur une période temporelle $T = 2\pi/\omega$ de l'oscillation rapide et écrivons, à l'ordre le plus bas en $J/\hbar\omega$:

$$i\hbar \dot{\tilde{\alpha}}_+ = -J' \tilde{\alpha}_-, \quad i\hbar \dot{\tilde{\alpha}}_- = -J'^* \tilde{\alpha}_+, \quad (4.41)$$

où on a posé :

$$J' = J \langle e^{i\eta} \rangle. \quad (4.42)$$

Ces équations d'évolution pour $\tilde{\alpha}_\pm$ sont les mêmes que celles pour un double puits sans modulation rapide, à part une « renormalisation » du coefficient tunnel J qui devient J' .

Prenons le cas d'une modulation sinusoïdale :

$$\xi(t) = \xi_0 \cos(\omega t), \quad \eta(t) = \xi_0 \sin(\omega t), \quad (4.43)$$

qui conduit à

$$J' = J \mathcal{J}_0(\xi_0), \quad (4.44)$$

où \mathcal{J}_0 est la fonction de Bessel de première espèce définie par

$$\mathcal{J}_0(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos[x \sin(\tau)] d\tau. \quad (4.45)$$

Comme cette fonction prend des valeurs positives et négatives selon son argument, on voit que la modulation rapide en $\xi(t)$ permet de réduire le coefficient tunnel, voire même de l'annuler et changer son signe.

3. On pourrait justifier cette procédure en utilisant un développement de Fourier pour la fonction connue $\eta(t)$ et les fonction inconnues $\tilde{\alpha}_\pm(t)$ et en résolvant perturbativement ces équations en puissance du petit paramètre $J/\hbar\omega$. Nous ne le ferons pas ici car cette procédure revient en fait à reconstruire l'approche de Floquet que nous présenterons plus loin.

3-2 Analogie avec un spin 1/2 dans un champ oscillant

Pour le cas d'atomes dans un potentiel optique créant un double puits de potentiel, la mise en évidence expérimentale de la modification du coefficient tunnel a été décrite par Kierig et al. (2008). La situation que nous avons étudiée ici est par ailleurs complètement équivalente sur le plan mathématique à la modification du facteur de Landé d'un atome de spin 1/2 dont le moment magnétique est couplé à un champ magnétique oscillant rapidement :

$$\mathbf{B}(t) = B_0 \mathbf{u}_x + B_1(t) \mathbf{u}_z, \quad B_1(t) = \bar{B}_1 \cos(\omega t). \quad (4.46)$$

Cette situation est en effet décrite par un hamiltonien formellement identique à (4.36) :

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar\omega_0}{2} \hat{\sigma}_x + \frac{\hbar\bar{\omega}_1}{2} \cos(\omega t) \hat{\sigma}_z. \quad (4.47)$$

On a noté ici ω_0 et $\bar{\omega}_1$ les pulsations de Larmor dans les champs B_0 et \bar{B}_1 . Dans la limite $\omega_0 \ll \bar{\omega}_1$, l'équivalent de la modification du coefficient tunnel J est une modification de la pulsation de Larmor ω_0 qui devient

$$\omega'_0 = \omega_0 \mathcal{J}_0(\bar{\omega}_1/\omega). \quad (4.48)$$

Ce changement de ω_0 , qui peut s'interpréter comme une modification du facteur de Landé causée par le champ oscillant rapidement, a été observé par Haroche et al. (1970). Le résultat principal est montré sur la figure 4.2 : on observe notamment une annulation, puis un changement de signe du facteur de Landé selon une loi faisant intervenir la fonction de Bessel \mathcal{J}_0 .

Notons que l'étude théorique de cette modification du facteur de Landé devient nettement plus simple à mener si on considère une modulation en créneau du champ $B_1(t)$ plutôt qu'une modulation sinusoïdale. Pour un champ $\mathbf{B}_1(t) = \bar{B}_1 \mathbf{u}_z$ pendant une demi-période π/ω et $\mathbf{B}_1(t) = -\bar{B}_1 \mathbf{u}_z$ pendant l'autre demi-période, on peut calculer explicitement l'évolution du spin 1/2 à l'ordre 1 en B_0/\bar{B}_1 , en prenant en compte les points suivants :

- La fréquence de Larmor est indépendante du temps et elle vaut $\omega_L = (\omega_0^2 + \bar{\omega}_1^2)^{1/2} \approx \bar{\omega}_1$.
- La direction du champ magnétique oscille entre les deux directions $\mathbf{n} = \pm \cos \theta \mathbf{u}_z + \sin \theta \mathbf{u}_x$, avec $\tan \theta = B_0/\bar{B}_1 \ll 1$.

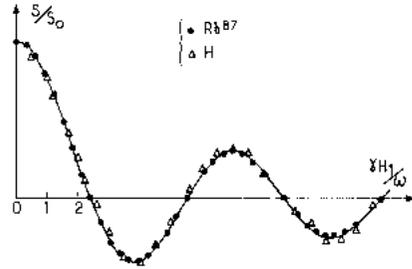


FIGURE 4.2. Modification du facteur de Landé d’atomes de rubidium et d’hydrogène, lorsqu’ils sont éclairés par un champ H_1 radiofréquence, de fréquence $\omega/2\pi$ de quelques kHz. Figure extraite de Haroche et al. (1970).

– L’opérateur d’évolution pendant une durée t où le champ magnétique garde une direction fixe \mathbf{n} vaut

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{1} \cos(\bar{\omega}_1 t/2) - i(\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \sin(\bar{\omega}_1 t/2) \quad (4.49)$$

On peut alors calculer le produit des opérateurs d’évolution sur les deux segments⁴ qui composent une période d’oscillation $T = 2\pi/\omega$ et on arrive sans (trop de) difficulté à :

$$\hat{U}(T) \approx \hat{1} - i\hat{\sigma}_x \frac{\omega_0 T}{2} \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi}{2} \frac{\bar{\omega}_1}{\omega}\right), \quad (4.50)$$

ce qui, pour $\omega_0 T \ll 1$, correspond à la modification de la fréquence de Larmor

$$\omega_0 \rightarrow \omega'_0 = \omega_0 \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi}{2} \frac{\bar{\omega}_1}{\omega}\right) \quad (4.51)$$

la fonction de Bessel de (4.48) étant remplacée par un sinus cardinal.

L’annulation du facteur de Landé est particulièrement simple dans ce point de vue : elle se produit pour $\bar{\omega}_1 T/2 = 2\pi$, ce qui signifie que le

4. Pour éviter des termes parasites, il convient de choisir convenablement l’origine des temps. On peut prendre par exemple $B_1(t) = \bar{B}_1$ entre 0 et $T/4$, puis $B_1(t) = -\bar{B}_1$ entre $T/4$ et $3T/4$, et enfin $B_1(t) = \bar{B}_1$ entre $3T/4$ et T , pour calculer l’opérateur d’évolution entre 0 et T . Ce choix de phase, qui est l’équivalent pour un réseau carré de $\bar{B}_1 \cos(\omega t)$ pour une modulation sinusoïdale, sera fait dans tout ce chapitre. On pourra consulter l’article de Eckardt et al. (2009) pour une discussion des effets « parasites » pouvant apparaître avec d’autres choix de phase.

spin fait un tour complet pendant chaque demi-période durant laquelle le champ B_1 garde une direction constante. Il est clair que le spin n’évolue alors pas « en moyenne », ce qui correspond à un facteur de Landé nul vis à vis du champ B_0 .

3-3 Le réseau vibrant : approche naïve

Notre approche naïve se déroule pour un réseau de manière presque identique à celle mise en place pour le double puits. En écrivant le vecteur d’état d’une particule sous la forme

$$|\phi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(t) |w_j\rangle, \quad (4.52)$$

on obtient l’évolution des coefficients α_j pour l’hamiltonien $H_1(t)$ en liaisons fortes (4.26)

$$i\dot{\alpha}_j = j\omega \xi(t)\alpha_j - \frac{J}{\hbar}(\alpha_{j-1} + \alpha_{j+1}). \quad (4.53)$$

On introduit les variables

$$\tilde{\alpha}_j = \alpha_j \exp(ij\eta) \quad (4.54)$$

où η est défini comme en (4.40) par $\eta = \omega \int_0^t \xi(t') dt'$, et on arrive à⁵

$$i\hbar\dot{\tilde{\alpha}}_j = -J(e^{i\eta}\tilde{\alpha}_{j-1} + e^{-i\eta}\tilde{\alpha}_{j+1}). \quad (4.55)$$

Après moyenne sur une période de l’oscillation rapide, cette équation du mouvement est identique à celle d’un réseau sans modulation et un coefficient tunnel renormalisé $J\langle e^{\pm i\eta} \rangle$, où le signe + (resp. –) correspond aux sauts vers la droite (resp. gauche). Pour une modulation sinusoïdale, la moyenne temporelle s’exprime en terme de la fonction de Bessel de première espèce

$$J' = J\mathcal{J}_0(\xi_0), \quad (4.56)$$

un résultat identique à celui du double puits. On retrouve en particulier le fait que l’on peut annuler l’effet tunnel en choisissant ξ_0 égal au premier

5. Notons qu’on aurait pu écrire directement ce système d’équations en partant de l’hamiltonien \hat{H}_0 (4.31) au lieu de \hat{H}_1 , en utilisant $a_{p0}(t)/\hbar = \eta(t)$.

zéro de la fonction de Bessel (≈ 2.405) et changer le signe de J en choisissant ξ_0 légèrement supérieur à cette valeur. Cette approximation très simple permet donc de rendre compte des résultats expérimentaux obtenus par le groupe de Pise et décrits au paragraphe précédent.

4 L'approche de Bloch pour un réseau vibrant

Nous allons maintenant chercher à aller au delà de cette approche naïve pour étudier de manière plus rigoureuse l'évolution d'un paquet d'ondes dans un réseau vibrant. L'outil essentiel est une nouvelle fois le théorème de Bloch, qui vient mettre des contraintes fortes sur la forme des solutions de l'équation de Schrödinger. Ces contraintes sont en fait tellement fortes que la solution « exacte » du problème peut être écrite explicitement si on se limite la dynamique des atomes à une seule bande. Dans le cas où plusieurs bandes sont simultanément peuplées, il faut avoir recours à la méthode de Floquet, dont nous présenterons les grandes lignes.

4-1 Théorème de Bloch dans le cas dépendant du temps

Le théorème de Bloch que nous avons rencontré au cours 2 portait sur la recherche des états propres d'un hamiltonien indépendant du temps avec un potentiel $V(x)$ spatialement périodique

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad V(x+a) = V(x). \quad (4.57)$$

Le théorème de Bloch indique qu'une base d'états propres de cet hamiltonien peut être recherchée sous la forme d'ondes de Bloch $\psi_q(x) = e^{ixq}u_q(x)$, où $u_q(x)$ est également spatialement périodique et où q est le quasi-moment choisi par convention dans la première zone de Brillouin $]-\pi/a, \pi/a]$. Rappelons que la propriété définissant ces ondes de Bloch est le fait qu'elles sont états propres de l'opérateur de translation spatiale \hat{T}_a avec la valeur propre e^{-iaq} .

Nous avons également évoqué au chapitre 2 le cas d'hamiltoniens spatialement périodiques, mais dépendant du temps, et nous avons indiqué

que la forme d'onde de Bloch est alors préservée lors de l'évolution. Démontrons de nouveau brièvement sur ce point en considérant par exemple l'hamiltonien

$$\hat{H}(t) = \frac{(\hat{p} - A(t))^2}{2m} + V(\hat{x}, t), \quad (4.58)$$

avec

$$V(x+a, t) = V(x, t). \quad (4.59)$$

Cet hamiltonien commute à chaque instant avec l'opérateur de translation spatiale \hat{T}_a , et il en va de même pour l'opérateur d'évolution entre un instant initial t_0 et un instant final t_1 . On en déduit que si l'état initial $\psi(x, t_0)$ est état propre de \hat{T}_a avec la valeur propre e^{-iaq} [i.e. $\psi(x, t_0) = e^{ixq}u_q(x, t_0)$], il en sera de même pour l'état final $\psi(x, t_1)$, avec la même valeur propre [i.e. $\psi(x, t_1) = e^{ixq}u_q(x, t_1)$].

4-2 Évolution du quasi-moment $q(t)$

Puisqu'un hamiltonien de la forme (4.58) préserve la forme des fonctions de Bloch, un état initial $e^{ixq_{in}}u(x, 0)$ avec $u(x, 0)$ spatialement périodique reste sous cette forme lors de l'évolution, avec le même quasi-moment q_{in} . Cette propriété s'applique aux deux hamiltoniens $\hat{H}_0(t)$ et $\hat{H}_2(t)$ qui sont bien de la forme (4.58), mais ne s'applique pas à l'hamiltonien $\hat{H}_1(t)$

$$\hat{H}_1(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - F(t) \hat{x} \quad (4.60)$$

décrivant le mouvement de la particule en présence de la force spatialement uniforme $F(t)$, en plus du potentiel périodique $V(x)$.

Toutefois, les solutions de l'équation de Schrödinger pour $\hat{H}_1(t)$ sont également très simples. Si $\phi_0(x, t) = e^{ixq_{in}}u(x, t)$ est la solution de l'équation de Schrödinger pour l'hamiltonien \hat{H}_0 , alors la transformation unitaire \hat{U}_1 donne la solution $\phi(x, t)$ pour l'hamiltonien \hat{H}_1 :

$$\phi(x, t) = \hat{U}_1\phi_0(x, t) = e^{ixq(t)/\hbar}u(x, t) \quad (4.61)$$

avec

$$q(t) = q_{in} - A(t)/\hbar = q_{in} + \frac{1}{\hbar} \int_0^t F(t') dt'. \quad (4.62)$$

L'hamiltonien $\hat{H}_1(t)$ préserve donc la forme d'onde de Bloch, mais avec un quasi-moment qui dépend du temps en « intégrant » la force $F(t)$.

Il reste finalement à déterminer l'évolution de la partie périodique $u(x, t)$, que l'on choisisse de travailler avec $\hat{H}_0(t)$, $\hat{H}_1(t)$ ou $\hat{H}_2(t)$. Nous avons déjà rencontré ce type de question lorsque nous avons étudié le branchement ou le débranchement d'un réseau. Nous avons expliqué à ce moment-là que si les paramètres du réseau variaient suffisamment lentement, alors la particule initialement préparée dans une fonction de Bloch de la bande n , associée à l'état périodique $|u_{n,q}\rangle$, suivait adiabatiquement cet état $|u_{n,q}\rangle$. Dans ce qui suit, nous allons de nouveau faire cette hypothèse adiabatique. Comme nous l'avons déjà indiqué, nous reviendrons sur les conditions à satisfaire pour que cette approximation soit valable dans le cours suivant, lors de l'étude des oscillations de Bloch.

4-3 Localisation dans la bande fondamentale

Pour résoudre le problème de l'évolution d'une particule dans un réseau vibrant (évolution restreinte à la bande fondamentale), nous allons utiliser le point de vue de l'hamiltonien \hat{H}_0 , pour lequel les calculs sont les plus simples. Nous partons donc de l'hamiltonien de Hubbard

$$\hat{H}_0(t) = -J \left(\hat{T}_1 e^{i a p_0(t)/\hbar} + \hat{T}_1^\dagger e^{-i a p_0(t)/\hbar} \right), \quad (4.63)$$

ou de sa version plus complète incluant les sauts entre voisins distants, mais toujours restreinte à la bande fondamentale [avec $J(1) = -J$] :

$$\hat{H}_0(t) = \sum_{j'=1}^{+\infty} J(j') \left(\hat{T}_{j'} e^{i j' a p_0(t)/\hbar} + \hat{T}_{j'}^\dagger e^{-i j' a p_0(t)/\hbar} \right). \quad (4.64)$$

Supposons que le système est initialement préparé dans une fonction de Bloch ψ_q (on oublie l'indice de bande puisqu'on se restreint à $n = 0$). Du fait de l'approximation à une bande, cette fonction de Bloch est unique et s'écrit à une phase globale près :

$$|\psi(0)\rangle \propto |\psi_q\rangle = \sum_{j \in \mathbb{Z}} e^{i j a q} |w_j\rangle. \quad (4.65)$$

La fonction périodique $|u_q\rangle$ associée à $|\psi_q\rangle$ est elle aussi unique dans cette approximation à une bande et est en fait indépendante de q :

$$|u\rangle = \sum_{j \in \mathbb{Z}} |w_j\rangle. \quad (4.66)$$

Cherchons l'évolution de $|\psi(t)\rangle$ sous l'effet de l'hamiltonien $\hat{H}_0(t)$. Puisque cet hamiltonien est spatialement périodique, on sait que la forme de Bloch va être préservée et le quasi-moment q ne va pas changer au cours du temps. Puisqu'on suppose que le système reste dans la bande fondamentale, le vecteur d'état à l'instant t est forcément proportionnel à l'état $|\psi_q\rangle$, puisque c'est le seul état de Bloch disponible pour ce quasi-moment. L'état $|\psi(t)\rangle$ ne peut différer de $|\psi_q\rangle$ que par un facteur de phase et s'écrit donc

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i \Phi_q(t)} |\psi_q\rangle. \quad (4.67)$$

La détermination de la phase globale $\Phi_q(t)$ est simple. Il suffit de reporter l'expression (4.67) pour $|\psi(t)\rangle$ dans l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Par construction, l'état $|\psi_q\rangle$ est état propre des opérateurs translations $T_{j'}$ avec les valeurs propres $e^{-i j' a q}$. Il est donc état propre de l'hamiltonien $\hat{H}_0(t)$ à tout instant t

$$\hat{H}_0(t) |\psi_q\rangle = E[q - p_0(t)/\hbar] |\psi_q\rangle, \quad (4.68)$$

où on a utilisé l'expression de l'énergie de la bande considérée :

$$E(q) = -2J \cos(aq) \quad (4.69)$$

dans la version (4.63) de l'hamiltonien où on ne garde que les sauts entre proches voisins et

$$E(q) = 2 \sum_{j'=1}^{+\infty} J(j') \cos(j' a q) \quad (4.70)$$

pour l'hamiltonien (4.64) incluant les sauts distants.

L'équation permettant de déterminer la phase globale $\Phi_q(t)$ s'écrit donc

$$\hbar \dot{\Phi}_q = E[q - p_0(t)/\hbar], \quad (4.71)$$

qui s'intègre formellement pour donner

$$\Phi_q(t) = \Phi_q(0) + \frac{1}{\hbar} \int_0^t E[q - p_0(t')/\hbar] dt'. \quad (4.72)$$

Considérons les instants $0, T, 2T, \dots, nT, \dots$, où $T = 2\pi/\omega$ est la période de vibration du réseau. Du fait de la périodicité temporelle de $p_0(t')$, il est immédiat de montrer à partir de (4.72) que

$$\Phi_q(nT) - \Phi_q(0) = n [\Phi_q(T) - \Phi_q(0)] \quad (4.73)$$

où n est un entier quelconque : la phase accumulée $\Delta\Phi_q$ est proportionnelle à la durée écoulée nT . Cette évolution est très similaire à celle que l'on trouverait pour un problème indépendant du temps, tout du moins si on se limite à une observation « stroboscopique » de cet état en regardant sa valeur aux multiples entiers nT de la période d'oscillation T .

Pour formaliser cette analogie, introduisons la *quasi-énergie*

$$\epsilon(q) = \frac{\hbar}{T} [\Phi_q(T) - \Phi_q(0)] = \frac{1}{T} \int_0^T E[q - p_0(t)/\hbar] dt. \quad (4.74)$$

On peut alors réécrire le résultat précédent sous la forme

$$|\psi(nT)\rangle = e^{-i\epsilon(q) nT/\hbar} |\psi(0)\rangle, \quad (4.75)$$

ce qui est très similaire à l'évolution qu'on aurait dans un réseau indépendant du temps pour une onde de Bloch :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE(q) t/\hbar} |\psi(0)\rangle. \quad (4.76)$$

En d'autres termes, si on se limite à une observation « stroboscopique » aux instants multiples de T , l'évolution d'une onde de Bloch (ou plus généralement d'un paquet d'ondes formé à partir d'ondes de Bloch de la bande considérée), est identique au cas d'un réseau non modulé pourvu que l'on fasse la substitution

$$E(q) \rightarrow \epsilon(q) = \frac{1}{T} \int_0^T E[q - p_0(t)/\hbar] dt. \quad (4.77)$$

Nous verrons dans le paragraphe suivant que cette conclusion est un cas particulier des conséquences de l'approche de Floquet, qui permet de traiter les hamiltoniens dépendant périodiquement du temps. La simplicité du traitement présenté ici provient du fait qu'on s'est limité à une seule bande. Dès que l'on souhaite prendre plusieurs bandes en compte, la méthode de Floquet passe par un traitement numérique. En effet, la modulation peut

induire des transitions interbandes (à q donné), ce qui rend le problème beaucoup plus complexe.

Puisque nous disposons de l'expression explicite de l'énergie $E(q)$ en fonction des coefficients tunnel $J(j')$, nous pouvons évaluer précisément l'intégrale (4.74). Considérons le mouvement sinusoïdal

$$x_0(t) = \bar{x}_0 \cos(\omega t), \quad p_0(t) = -m\omega \bar{x}_0 \sin(\omega t), \quad (4.78)$$

pour lequel l'équation (4.74) donnant la quasi-énergie ϵ_q devient :

$$\epsilon(q) = \frac{2}{T} \sum_{j'=1}^{\infty} J(j') \int_0^T \cos\{j'[aq + \xi_0 \sin(\omega t')]\} dt'. \quad (4.79)$$

où l'on a posé comme précédemment

$$\xi(t) = \frac{ma}{\hbar\omega} \ddot{x}_0(t) = \xi_0 \cos(\omega t), \quad \xi_0 = -m a \omega \bar{x}_0 / \hbar. \quad (4.80)$$

Cette intégrale se calcule aisément :

$$\epsilon(q) = 2 \sum_{j'=1}^{\infty} J(j') \cos(j' a q) \mathcal{J}_0(j' \xi_0). \quad (4.81)$$

à comparer aux énergies en absence de modulation ($\xi_0 = 0$)

$$E(q) = 2 \sum_{j'=1}^{\infty} J(j') \cos(j' a q). \quad (4.82)$$

L'expression (4.81) pour les quasi-énergies permet de décrire de manière très simple le phénomène de localisation dynamique. Considérons la limite de Hubbard où seuls les sauts entre proches voisins, décrits par le paramètre $J = -J(1)$, sont significatifs. On a alors :

$$E(q) = -2J \cos(aq) \rightarrow \epsilon(q) \approx -2J \cos(aq) \mathcal{J}_0(\xi_0), \quad (4.83)$$

où l'on retrouve la renormalisation du coefficient tunnel $J \rightarrow J'$ déterminée en (4.56) et observée dans l'expérience de Pise. Plus précisément, les quasi-énergies forment une bande de largeur réduite par rapport à la bande initiale, le coefficient de réduction étant $\mathcal{J}_0(\xi_0) < 1$. Quand l'argument de cette fonction de Bessel est choisi égal au premier zéro de cette

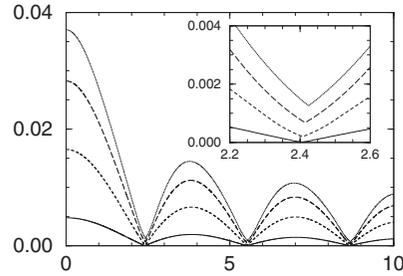


FIGURE 4.3. Largeur de la quasi-bande d'énergie fondamentale (en unité de E_r) en fonction de l'indice de modulation ξ_0 pour différentes profondeurs du réseau ; de haut en bas : $V_0/E_r = 2, 3, 5, 10$. La prise en compte des termes au delà de $j = 1$ dans la somme (4.81) entraîne que la largeur de la bande ne s'annule pas exactement quand ξ_0 est égal à un zéro de la fonction de Bessel J_0 . Figure extraite de Eckardt et al. (2009).

fonction (≈ 2.405), la bande est infiniment étroite : toutes les quasi-énergies $\epsilon(q)$ sont égales entre elles (en l'occurrence nulles). Il est alors immédiat de montrer que l'état de la particule va rester le même à tous les instants $0, T, 2T$, etc. Il suffit de considérer le développement de cet état sur les états de Bloch

$$|\psi(0)\rangle = \int C(q)|\psi_q\rangle dq \quad \rightarrow \quad |\psi(nT)\rangle = \int C(q) e^{-i\epsilon(q) nT/\hbar} |\psi_q\rangle dq, \quad (4.84)$$

et d'utiliser le fait que toutes les quasi-énergies $\epsilon(q)$ prennent la même valeur. Le vecteur d'état $|\psi(nT)\rangle$ est alors égal à $|\psi(0)\rangle$ et un paquet d'ondes initial ne s'étale pas sur des temps longs devant T ; plus précisément, son évolution entre nT et $(n+1)T$ est identique à son évolution entre 0 et T .

Si les sauts entre proches voisins ne suffisent pas à décrire la dynamique dans la bande fondamentale, il faut considérer les termes suivants $J(2), J(3)$ dans le développement (4.81). Il n'y a alors plus de valeur de l'amplitude de modulation pour laquelle la quasi-bande est infiniment étroite. Cette quasi-bande est néanmoins fortement rétrécie au voisinage du point $\xi_0 = 2.405$. Nous montrons sur la figure 4.3 un résultat extrait de Eckardt et al. (2009), qui montre la largeur de la quasi-bande pour différentes valeurs du potentiel V_0 . Même pour une valeur relativement faible de V_0

($V_0 = 2 E_r$), la largeur de bande au voisinage de $\xi_0 = 2.4$ est réduite par plus d'un facteur 20 par rapport à sa valeur sans modulation.

Remarque. Nous nous sommes intéressés ici à une modulation sinusoïdale de la position $x_0(t)$ du réseau. Eckardt et al. (2009) montrent que si on choisit une modélisation telle que la force $F(t)$ est un créneau (le réseau est accéléré uniformément vers la gauche, puis vers la droite), alors la quasi-bande peut avoir une largeur nulle même si on prend en compte les couplages J_2, J_3 , etc. En effet, la fonction de Bessel de (4.81) est remplacée, comme pour le cas du spin 1/2 étudié en (4.51), par un sinus cardinal :

$$\mathcal{J}_0(j\xi_0) \quad \rightarrow \quad \text{sinc}(\pi j\xi_0/2) \quad (4.85)$$

et ce coefficient s'annule pour ξ_0 entier pair, quelle que soit la valeur de j .

4-4 La méthode de Floquet

Dans le paragraphe précédent, nous avons pu résoudre « à la main » le problème du réseau vibrant grâce à l'approximation à une bande qui nous a permis de dégager très simplement la notion de quasi-énergie. Si on souhaite aller au delà de cette approximation, il est nécessaire de bien formaliser le problème de l'évolution d'un système sous l'effet d'un hamiltonien périodique en temps. La méthode théorique adaptée à ce problème a été développée par Floquet. Nous allons rappeler dans ce qui suit les éléments les plus utiles de cette approche pour le problème qui nous intéresse et nous ferons le lien avec les résultats du paragraphe précédent.

L'approche de Floquet est une méthode générale pour traiter l'évolution d'un système dynamique régie par

$$\frac{d}{dt} \mathbf{X} = \hat{M}(t) \mathbf{X}, \quad (4.86)$$

où \mathbf{X} est un vecteur colonne à d composantes (réelles ou complexes) et $\hat{M}(t)$ une matrice carrée $d \times d$, dépendant explicitement du temps et périodique de période T :

$$\hat{M}(t+T) = \hat{M}(t). \quad (4.87)$$

Cette méthode est une transposition au domaine temporel de la méthode des fonctions de Bloch, qui exploite l'invariance par translation dans le domaine spatial.

Avant de présenter la méthode de Floquet, rappelons d'abord les résultats connus pour un hamiltonien \hat{H} indépendant du temps. Notons $|\phi_\alpha\rangle$ les vecteurs propres de \hat{H} et E_α les énergies associées. L'opérateur d'évolution de l'instant 0 à l'instant T , noté $\hat{U}(T)$, est égal à $\exp(-i\hat{H}T/\hbar)$. Cet opérateur unitaire admet donc également les $|\phi_\alpha\rangle$ comme états propres :

$$\hat{U}(T) = e^{-i\hat{H}T/\hbar}, \quad \hat{U}(T) |\phi_\alpha\rangle = e^{-iE_\alpha T/\hbar} |\phi_\alpha\rangle. \quad (4.88)$$

Passons maintenant au cas d'un hamiltonien périodique en temps et à la méthode de Floquet. Nous n'allons pas utiliser cette méthode dans tous ses détails, mais certains de ses résultats généraux vont nous servir de guide. Précisons-les ici :

- L'équation de Schrödinger est du type (4.86) et l'opérateur d'évolution depuis l'instant 0 à l'instant nT , où n est un entier, vérifie

$$\hat{U}(nT) = [\hat{U}(T)]^n. \quad (4.89)$$

- L'opérateur $\hat{U}(T)$ est unitaire et peut être diagonalisé, ses valeurs propres étant de module 1. Notons ces valeurs propres $e^{-i\epsilon_\alpha T/\hbar}$, où les ϵ_α sont réels et ont la dimension d'une énergie. Les ϵ_α sont appelées *quasi-énergies*, par analogie au quasi-moment q , et sont définies à $2\pi\hbar/T$ près, tout comme le quasi-moment q est défini à $2\pi/a$ près. Notons $|\phi_\alpha\rangle$ les vecteurs propres associés

$$\hat{U}(T)|\phi_\alpha\rangle = e^{-i\epsilon_\alpha T/\hbar}|\phi_\alpha\rangle. \quad (4.90)$$

Ces vecteurs forment une base orthogonale de l'espace de Hilbert et nous trouvons pour un état initial quelconque $|\psi(0)\rangle$:

$$|\psi(nT)\rangle = \sum_\alpha C_\alpha e^{-in\epsilon_\alpha T/\hbar} |\phi_\alpha\rangle \quad (4.91)$$

où les coefficients C_α sont donnés par $C_\alpha = \langle \phi_\alpha | \psi(0) \rangle$.

- Considérons l'état $|\psi_\alpha(t)\rangle$ obtenu en partant de $|\phi_\alpha\rangle$ à l'instant $t = 0$ lors d'une évolution sous l'effet de $\hat{H}(t)$:

$$|\psi_\alpha(t)\rangle = \hat{U}(t) |\phi_\alpha\rangle. \quad (4.92)$$

Puisque $|\phi_\alpha\rangle$ est état propre de $\hat{U}(T)$, il est clair que

$$|\psi_\alpha(T)\rangle = e^{-i\epsilon_\alpha T/\hbar} |\psi_\alpha(0)\rangle. \quad (4.93)$$

Même si l'évolution de $|\psi_\alpha(t)\rangle$ peut être arbitrairement compliquée entre 0 et T , on voit que ce vecteur redevient égal à sa valeur de départ au bout d'une période T , à la phase $\epsilon_\alpha T/\hbar$ près.

- Pour éliminer cette phase restante $\epsilon_\alpha T/\hbar$ dans l'évolution des $|\psi_\alpha(t)\rangle$, introduisons le vecteur d'état $|u_\alpha(t)\rangle$ tel que

$$|\psi_\alpha(t)\rangle = e^{-i\epsilon_\alpha t/\hbar} |u_\alpha(t)\rangle. \quad (4.94)$$

Il est immédiat que $|u_\alpha(t)\rangle$ est périodique en temps de période T , ce qui permet de le décomposer en série de Fourier :

$$|u_\alpha(t)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{in\omega t} |\chi_{\alpha,n}\rangle, \quad (4.95)$$

où les vecteurs indépendants du temps $|\chi_{n,\alpha}\rangle$ sont à ce stade inconnus.

- Pour simplifier les notations, nous supposons que $\hat{H}(t)$ peut s'écrire sous la forme⁶

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + e^{i\omega t} \hat{V}_+ + e^{-i\omega t} \hat{V}_-, \quad (4.96)$$

avec $\hat{V}_- = \hat{V}_+^\dagger$. L'équation de Schrödinger $i\hbar|\dot{\psi}_\alpha\rangle = \hat{H}(t)|\psi_\alpha\rangle$, devient quand on remplace $|\psi_\alpha\rangle$ par son expression en terme de $|u_\alpha\rangle$ et qu'on y injecte le développement de Fourier de ce vecteur

$$(\epsilon_\alpha - n\hbar\omega)|\chi_{\alpha,n}\rangle = \hat{H}_0|\chi_{\alpha,n}\rangle + \hat{V}_+|\chi_{\alpha,n-1}\rangle + \hat{V}_-|\chi_{\alpha,n+1}\rangle. \quad (4.97)$$

- Le problème de l'évolution sous l'effet de l'hamiltonien périodique $\hat{H}(t)$ sera complètement résolu une fois qu'on aura déterminé explicitement les états $|\chi_{\alpha,n}\rangle$ et les quasi-énergies ϵ_α . Pour cela, faisons l'hypothèse que l'on peut restreindre la partie pertinente de l'espace de Hilbert à un sous-espace de dimension d . Les opérateurs \hat{H}_0 , V_+ , V_- sont alors des matrices carrées $d \times d$ et les kets $|\chi_{\alpha,n}\rangle$ sont des vecteurs à d composantes. Formons alors le vecteur de dimension infinie

$$|\Xi\rangle = {}^t(\dots, |\chi_{\alpha,n-1}\rangle, |\chi_{\alpha,n}\rangle, |\chi_{\alpha,n+1}\rangle, \dots) \quad (4.98)$$

6. Il n'est pas difficile d'introduire plus d'harmoniques dans l'hamiltonien $\hat{H}(t)$, mais cela complique un peu l'écriture, en ajoutant un indice supplémentaire.

obtenu en mettant tous les $|\chi_{\alpha,n}\rangle$ les uns en dessous des autres. Le système (4.97) peut se réécrire comme une équation aux valeurs propres

$$\epsilon_{\alpha} |\Xi\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\Xi\rangle \quad (4.99)$$

pour l'opérateur $\hat{\mathcal{H}}$ également de dimension infinie, obtenu comme une matrice de bande définie par blocs $d \times d$:

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \dots & \dots \\ \dots & 0 & \hat{V}_+ & \hat{H}_0 + (n-1)\hbar\omega & \hat{V}_- & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \hat{V}_+ & \hat{H}_0 + n\hbar\omega & \hat{V}_- & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 0 & \hat{V}_+ & \hat{H}_0 + (n+1)\hbar\omega & \hat{V}_- & 0 & \dots \\ \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (4.100)$$

Du fait de la présence du terme $n\hbar\omega$ sur la diagonale, on obtient un spectre qui s'étend de manière périodique depuis $-\infty$ à $+\infty$. Dans une « zone de Brillouin » de largeur $\hbar\omega$, on trouve d valeurs propres. En pratique, on tronque cette matrice infinie à $|n| < n_{\max}$ et on diagonalise numériquement la matrice carrée résultante.

Lien avec les résultats du paragraphe précédent. Dans l'approximation à une bande, la conservation du quasi-moment implique que les ondes de Bloch sont états propres de l'opérateur d'évolution $\hat{U}(T)$. L'étape la plus délicate de la méthode de Floquet, à savoir la recherche de ces états propres, est donc immédiatement franchie ($|\psi_{\alpha}\rangle = |\psi_{n,q}\rangle$), et les quasi-énergies $\epsilon_{\alpha} = \epsilon(q)$ sont également connues. On pourrait prolonger l'approche de Floquet pour déterminer les fonctions périodiques $|u_{\alpha}(t)\rangle$ à un instant t quelconque, ce qui permettrait de préciser l'évolution de n'importe quel état initial entre 0 et T . On pourrait ainsi évaluer la « respiration » d'un paquet d'ondes entre 0 et T dans le cas sans diffusion obtenu pour $\mathcal{J}_0(\xi_0) = 0$.

5 Réseau vibrant à 2D : l'expérience d'Hambourg

La manipulation du coefficient tunnel par modulation de la position d'un réseau optique a été mise en œuvre à deux dimensions dans une expérience menée à Hamburg dans le groupe de K. Sengstock (Struck et al.

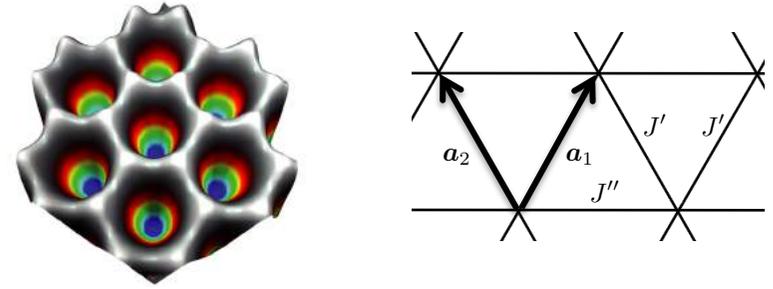


FIGURE 4.4. (a) Profil d'intensité pour un réseau désaccordé sur le rouge, formé par trois ondes planes se propageant à 120 degrés l'une de l'autre dans le plan xy . Les trois ondes ont la même intensité et sont polarisées linéairement selon Oz [Figure extraite de Becker et al. 2010]. (b) Réseau triangulaire avec les vecteurs de base \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 , et les coefficients tunnels J' et J'' qu'on peut contrôler indépendamment en modulant les phases φ_2 et φ_3 de deux des ondes formant le réseau.

2011). Le réseau est formé par trois ondes quasi-planes se propageant dans le plan xy à 120 degrés l'une de l'autre, de vecteurs d'onde

$$\mathbf{k}_1 = k \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{k}_2 = \frac{k}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{k}_3 = -\frac{k}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (4.101)$$

Les trois ondes ont la même intensité I_0 et sont toutes les trois polarisées selon l'axe Oz , de sorte que l'intensité en un point xy s'écrit

$$\begin{aligned} I(x, y) &= I_0 \left| e^{ikx} + e^{-ik(x-\sqrt{3}y)/2} + e^{-ik(x+\sqrt{3}y)/2} \right|^2 \\ &= I_0 \left| e^{3ikx/2} + 2 \cos(\sqrt{3}ky/2) \right|^2. \end{aligned} \quad (4.102)$$

Nous avons choisi par convention que les trois faisceaux sont en phase au point $x = y = 0$. Le désaccord est choisi négatif (sur le rouge) de sorte que les minima de potentiel sont localisés aux maxima d'intensité. Ces maxima pour lesquels $I = 9I_0$ se répartissent sur un réseau triangulaire, aux points du réseau de Bravais formé par la réunion des deux ensembles

$$\begin{aligned} (i) \quad & 3kx/2 = 0 \pmod{2\pi}, \quad \sqrt{3}ky/2 = 0 \pmod{2\pi}, \\ (ii) \quad & 3kx/2 = \pi \pmod{2\pi}, \quad \sqrt{3}ky/2 = \pi \pmod{2\pi}. \end{aligned} \quad (4.103)$$

c'est-à-dire

$$\mathcal{B} = \{j_1 \mathbf{a}_1 + j_2 \mathbf{a}_2, j_1, j_2 \in \mathbb{Z}\} \quad (4.104)$$

avec

$$\mathbf{a}_1 = \frac{2\pi}{3k} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{2\pi}{3k} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (4.105)$$

Le profil d'intensité est représenté sur la figure 4.4a. Dans l'expérience de Struck et al. (2011), l'intensité I_0 est suffisamment grande pour que la dynamique dans la bande fondamentale du réseau soit en bonne approximation dans la limite des liaisons fortes, avec une profondeur de $5.6 E_r$ et un coefficient tunnel entre sites $J = 0.002 E_r$. Le confinement selon la direction z est beaucoup plus mou, et on réalise en fait un réseau triangulaire de tubes, contenant chacun quelques centaines d'atomes. Le gaz est suffisamment froid pour que chaque tube puisse être considéré comme un micro-condensat, avec une phase bien déterminée.

Si on change les phases φ_2 et φ_3 des deux ondes de vecteurs d'onde \mathbf{k}_2 et \mathbf{k}_3 , il est facile de montrer que le profil d'intensité $I(x, y)$ est simplement translaté dans le plan xy par la quantité

$$\Delta x = \frac{1}{3k}(\varphi_2 + \varphi_3), \quad \Delta y = \frac{1}{\sqrt{3}k}(\varphi_2 - \varphi_3). \quad (4.106)$$

Une modulation temporelle sinusoïdale de φ_2 et φ_3 induit donc une vibration du réseau.

Struck et al. (2011) ont choisi des variations temporelles de φ_2 et φ_3 telles que $\Delta x = x_0 \cos(\omega t)$, $\Delta y = y_0 \sin(\omega t)$, ce qui permet de modifier de manière différente les deux coefficients tunnels J' et J'' indiqués sur la figure 4.4; J' correspond aux transitions selon \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 , J'' aux transitions selon $\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$, parallèle à l'axe Ox . Avec des arguments similaires à ceux de l'approche naïve développée plus haut pour le cas d'un réseau 1D, les coefficients tunnels J' et J'' s'écrivent

$$J' = J\mathcal{J}(\xi'_0), \quad J'' = J\mathcal{J}(\xi''_0), \quad (4.107)$$

avec

$$\xi'_0 = \frac{m\omega^2 a}{2\hbar} \sqrt{x_0^2 + 3y_0^2}, \quad \xi''_0 = \frac{m\omega^2 a}{\hbar} x_0. \quad (4.108)$$

En contrôlant séparément les valeurs de x_0 et y_0 , on peut donc ajuster indépendamment les amplitudes et les signes des coefficients J' et J'' . En

particulier, on peut choisir des modulations telles que $J' > 0$, $J'' < 0$ (et vice versa), alors qu'en absence de modulation, $J' = J'' > 0$.

Comme dans l'expérience 1D de Pise, le changement de signe d'un des coefficients tunnel se traduit par un déplacement des minima de la bande fondamentale dans l'espace des quasi-moments \mathbf{q} . Ces minima sont observés directement par temps de vol, puisqu'ils correspondent aux états macroscopiquement occupés quand on place un condensat dans le réseau. On a représenté sur la figure 4.5 deux figures de temps de vol clairement différentes, celle de gauche étant obtenue pour $J', J'' > 0$ et celle de droite pour $J' < 0, J'' > 0$.

Pour rendre compte de ce changement de la structure de bande, écrivons l'hamiltonien à une particule sous la forme

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -J' \sum_{j_1, j_2} (|w_{j_1+1, j_2}\rangle \langle w_{j_1, j_2}| + |w_{j_1, j_2+1}\rangle \langle w_{j_1, j_2}| + \text{h.c.}) \\ & -J'' \sum_{j_1, j_2} (|w_{j_1+1, j_2-1}\rangle \langle w_{j_1, j_2}| + \text{h.c.}) \end{aligned} \quad (4.109)$$

où la première ligne correspond aux sauts le long des directions \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 , et la seconde ligne aux sauts parallèlement à l'axe Ox , selon le vecteur $\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$. Un état de Bloch

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{q}} |w_j\rangle \quad (4.110)$$

est état propre de \hat{H} avec la valeur propre

$$E(\mathbf{q}) = -2[J' \cos(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{q}) + J' \cos(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{q}) + J'' \cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{q})]. \quad (4.111)$$

Prenons d'abord $J', J'' > 0$. Dans ce cas, l'état fondamental est obtenu pour $\mathbf{q} = 0$, l'énergie correspondante étant $E = -4J' - 2J''$. C'est effectivement l'état le plus peuplé sur l'image de gauche de la figure 4.5. Choisissons maintenant $J' < 0, J'' > 0$. Le minimum est obtenu en prenant par exemple $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{q} = \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{q} = \pi$, ce qui correspond à $\mathbf{q} = \mathbf{u}_y \sqrt{3}k/2$, l'énergie correspondante étant $E = -4|J'| - 2J''$. Cette prédiction⁷ correspond au résultat visible sur l'image de droite de la figure 4.5.

7. On peut également prendre $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{q} = \pi$ et $\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{q} = -\pi$, ce qui correspond à $\mathbf{q} = \mathbf{u}_x(3k/2)$ également visible sur l'image de droite de la figure 4.5.

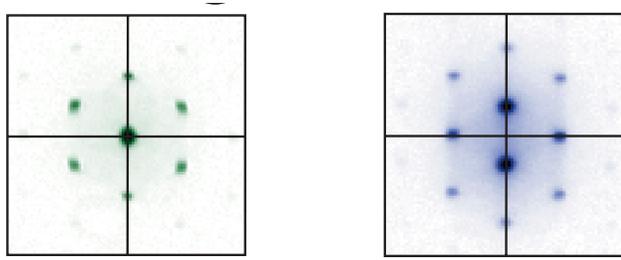


FIGURE 4.5. Figures de temps de vol extraites de l'article de Struck et al. (2011). Gauche : figure obtenue pour $J', J'' > 0$. Droite : figure obtenue pour $J' < 0, J'' > 0$.

Un point de vue original sur la physique des atomes dans ce réseau triangulaire est mis en avant par Struck et al. (2011); il porte sur l'utilisation du réseau pour simuler le magnétisme classique d'un réseau triangulaire. En assignant une phase θ_i à chaque condensat piégé sur un site $|w_i\rangle$ du réseau, on peut écrire l'énergie d'une configuration donnée $\{\theta_i\}$ sous la forme

$$E(\{\theta_i\}) = -N \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \cos(\theta_i - \theta_j). \quad (4.112)$$

La somme porte sur toutes les paires de proches voisins $\langle i, j \rangle$, et on a fait la substitution

$$|w_i\rangle\langle w_j| \longrightarrow e^{i(\theta_i - \theta_j)}. \quad (4.113)$$

Cette substitution est valable si l'on peut décrire l'état de chaque micro-condensat par un champ classique $\sqrt{N_j} e^{i\theta_j}$ et supposer que les nombres d'atomes dans tous ces micro-condensats sont voisins et $\approx N$.

La fonctionnelle d'énergie (4.112) est formellement identique à celle d'une assemblée de spins $\mathbf{S}_i = [\cos(\theta_i), \sin(\theta_i)]$ disposés sur les nœuds du réseau \mathcal{B} , avec des interactions entre proches voisins :

$$E(\{\theta_i\}) = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (4.114)$$

Les différentes structures qui apparaissent en temps de vol quand on varie l'amplitude et le signe de J' et J'' permettent donc de retrouver les phases magnétiques de ce réseau de spins en interaction. Les deux images

montrées sur la figure 4.5 correspondent ainsi à la phase ferromagnétique (tous les spins alignés, tous les θ_j égaux, minimum en $\mathbf{q} = 0$) et à la phase rhombique (des lignes selon l'axe x de spins pointant dans une direction donnée, alternant avec des lignes de spins opposés).

Terminons ce paragraphe en mentionnant qu'il est également possible de moduler dans le temps le réseau d'une manière qui confère une partie imaginaire non nulle au coefficient tunnel (Struck et al. 2012). Il suffit pour cela de choisir une fonction $\eta(t)$ telle que $\langle e^{i\eta} \rangle$ ait une partie imaginaire non nulle. Ceci permet de faire en sorte qu'une particule parcourant les bords de la cellule unité du réseau accumule une phase non nulle, ce qui est à la base de la génération de champs magnétiques artificiels. Nous reviendrons sur ce point dans un cours ultérieur.

6 Références

- Becker, C, P Soltan-Panahi, J Kronjäger, S Dörscher, K Bongs & K Sengstock (2010), « Ultracold quantum gases in triangular optical lattices », in *New Journal of Physics* 12.6, p. 065025.
- Cohen-Tannoudji, C., J. Dupont-Roc & G. Grynberg (1987), *Photons et Atomes—Introduction à l'électrodynamique quantique*, Paris: InterEditions/Éditions du CNRS.
- Creffield, C. E., F. Sols, D. Ciampini, O. Morsch & E. Arimondo (2010), « Expansion of matter waves in static and driven periodic potentials », in *Phys. Rev. A* 82 (3), p. 035601.
- Dunlap, D. H. & V. M. Kenkre (1986), « Dynamic localization of a charged particle moving under the influence of an electric field », in *Phys. Rev. B* 34 (6), pp. 3625–3633.
- Eckardt, André, Christoph Weiss & Martin Holthaus (2005), « Superfluid-Insulator Transition in a Periodically Driven Optical Lattice », in *Phys. Rev. Lett.* 95 (26), p. 260404.
- Eckardt, André, Martin Holthaus, Hans Lignier, Alessandro Zenesini, Donatella Ciampini, Oliver Morsch & Ennio Arimondo (2009), « Exploring dynamic localization with a Bose-Einstein condensate », in *Phys. Rev. A* 79 (1), p. 013611.
- Grifoni, Milena & Peter Hänggi (1998), « Driven quantum tunneling », in *Physics Reports* 304.5–6, pp. 229–354.

- Grossmann, F., T. Dittrich, P. Jung & P. Hänggi (1991), « Coherent destruction of tunneling », in *Phys. Rev. Lett.* 67 (4), pp. 516–519.
- Haroche, S., C. Cohen-Tannoudji, C. Audoin & J. P. Schermann (1970), « Modified Zeeman Hyperfine Spectra Observed in H^1 and Rb^{87} Ground States Interacting with a Nonresonant rf Field », in *Phys. Rev. Lett.* 24 (16), pp. 861–864.
- Holthaus, Martin (1992), « Collapse of minibands in far-infrared irradiated superlattices », in *Phys. Rev. Lett.* 69 (2), pp. 351–354.
- Kierig, E., U. Schnorrberger, A. Schietinger, J. Tomkovic & M. K. Oberthaler (2008), « Single-Particle Tunneling in Strongly Driven Double-Well Potentials », in *Phys. Rev. Lett.* 100 (19), p. 190405.
- Kollath, C., A. Iucci, T. Giamarchi, W. Hofstetter & U. Schollwöck (2006), « Spectroscopy of Ultracold Atoms by Periodic Lattice Modulations », in *Phys. Rev. Lett.* 97 (5), p. 050402.
- Lignier, H., C. Sias, D. Ciampini, Y. Singh, A. Zenesini, O. Morsch & E. Arimondo (2007), « Dynamical Control of Matter-Wave Tunneling in Periodic Potentials », in *Phys. Rev. Lett.* 99 (22), p. 220403.
- Lopez, Matthias, Jean-François Clément, Pascal Szriftgiser, Jean Claude Garreau & Dominique Delande (2012), « Experimental Test of Universality of the Anderson Transition », in *Phys. Rev. Lett.* 108 (9), p. 095701.
- Madison, K. W., M. C. Fischer, R. B. Diener, Qian Niu & M. G. Raizen (1998), « Dynamical Bloch Band Suppression in an Optical Lattice », in *Phys. Rev. Lett.* 81 (23), pp. 5093–5096.
- Struck, J., C. Oelschlaeger, R. Le Targat, P. Soltan-Panahi, A. Eckardt, M. Lewenstein, P. Windpassinger & K. Sengstock (2011), « Quantum Simulation of Frustrated Classical Magnetism in Triangular Optical Lattices », in *SCIENCE* 333.6045, 996–999.
- Struck, J., C. Ölschläger, M. Weinberg, P. Hauke, J. Simonet, A. Eckardt, M. Lewenstein, K. Sengstock & P. Windpassinger (2012), « Tunable Gauge Potential for Neutral and Spinless Particles in Driven Optical Lattices », in *Phys. Rev. Lett.* 108 (22), p. 225304.

Chapitre 5

Les oscillations de Bloch dans un réseau optique

Sommaire

1	Le principe des oscillations de Bloch	2
1-1	Le défilement du quasi-moment	2
1-2	L'approximation adiabatique	3
2	Observations expérimentales	5
2-1	Premières expériences avec des atomes froids	5
2-2	Remarque : bilan d'impulsion dans un réseau accéléré	6
2-3	Oscillations dues à la gravité	7
3	L'approximation adiabatique et au delà	8
3-1	Validité de l'approximation adiabatique	8
3-2	Transitions de Landau-Zener	10
3-3	Au delà de Landau-Zener	11
3-4	Un séparateur de faisceau	11
4	Oscillations de Bloch en liaisons fortes	12
4-1	La fonction d'onde « oscillante »	12
4-2	Opérateur d'évolution et oscillations dans l'espace réel	13
5	Les échelles de Wannier-Stark	14
6	Perspectives et applications	15
7	Références	17

Dans le chapitre précédent, nous avons étudié la dynamique d'atomes placés dans un réseau optique dont le potentiel périodique $\mathcal{V}(x, t)$ dépend du temps. Dans le cas où cette dépendance se ramène à un déplacement du réseau

$$\mathcal{V}(x, t) = V(x - x_0(t)), \quad (5.1)$$

nous avons montré que l'on peut, grâce à une transformation unitaire, analyser le problème dans le référentiel en mouvement avec le réseau. On se ramène alors au problème du réseau immobile $V(x)$ auquel on superpose la force d'inertie $F(t) = -m\ddot{x}_0(t)$.

Il est donc naturel à ce stade d'approfondir la question de la dynamique d'une particule soumise simultanément à un potentiel périodique indépendant du temps et une force uniforme dans l'espace. Le cas le plus simple est celui d'une force F indépendante du temps, et c'est ce cas qui va nous occuper dans la plus grande partie du cours. Notre hamiltonien de départ sera donc

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - F \hat{x}. \quad (5.2)$$

Ce problème a initialement été abordé par Zener pour modéliser le comportement d'un électron dans un réseau cristallin, soumis à un champ électrique extérieur. L'hamiltonien (5.2) décrit alors le mouvement de la particule dans le référentiel du laboratoire. On rencontre ce même problème avec des atomes froids dans un réseau stationnaire auquel on superpose la gravité ou la force de type Stern et Gerlach créée par un gradient de champ

magnétique.

Par ailleurs, en revenant à l'équivalence entre un réseau mobile (sans force additionnelle) et un réseau fixe superposé à $F(t)$, on voit que l'on peut créer ce potentiel en partant d'un réseau périodique en mouvement uniformément accéléré dans le référentiel du laboratoire : si on prend $x_0(t) = -Ft^2/(2m)$ dans l'hamiltonien

$$\hat{H}_2(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x} - x_0(t)), \quad (5.3)$$

on se ramène à l'hamiltonien (5.2) en passant dans le référentiel uniformément accéléré dans lequel le réseau est immobile, après la transformation unitaire donnée au cours précédent.

Les oscillations de Bloch d'atomes froids dans des réseaux optiques sont devenues ces dernières années un outil puissant qu'on rencontre dans de nombreuses applications : mesure de la gravité, étude de champs de force au voisinage des surfaces, séparateur de faisceaux pour l'interférométrie atomique. Même si les atomes froids ne sont pas le premier système physique sur lequel les oscillations ont été observées (voir par exemple l'article de revue de Mendez & Bastard (1993) pour des études menés sur des super-réseaux solides), la richesse des applications pour les gaz atomiques pour les gaz froids en fait un objet d'étude très riche et très varié.

1 Le principe des oscillations de Bloch

1-1 Le défilement du quasi-moment

Dans le cours précédent, nous avons étudié l'évolution d'une particule sous l'effet d'un hamiltonien de type

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - F(t) \hat{x}. \quad (5.4)$$

où $V(x)$ est périodique de période a . Nous avons montré en particulier que la forme de Bloch est préservée lors de l'évolution. Un état initial

$$\psi(x, 0) = e^{ixq_{in}} u(x, 0) \quad (5.5)$$

va garder cette forme et s'écrire à l'instant t

$$\psi(x, t) = e^{ixq(t)} u(x, t). \quad (5.6)$$

Le quasi-moment $q(t)$ est donné par

$$q(t) = q_{in} + \frac{1}{\hbar} \int_0^t F(t') dt'. \quad (5.7)$$

Pour le cas qui nous intéresse ici, la force F est indépendante du temps et $q(t)$ évolue linéairement en temps

$$q(t) = q_{in} + Ft/\hbar. \quad (5.8)$$

Une échelle de temps et une échelle d'énergie s'introduisent donc naturellement : le temps

$$\tau_B = 2\hbar k/F \quad (5.9)$$

représente la durée nécessaire pour que $q(t)$ balaye la zone de Brillouin, d'extension $2k = 2\pi/a$. À ce temps est associée la pulsation $\omega_B = 2\pi/\tau_B$ et l'énergie

$$\hbar\omega_B = \pi F/k = Fa. \quad (5.10)$$

Cette énergie représente le travail de la force F sur une période du potentiel $V(x)$; c'est donc la chute en énergie entre deux minima locaux successifs du potentiel $V(x) - Fx$ (cf. figure 5.1).

À ce stade, nous ne pouvons encore rien dire sur la fonction spatialement périodique $u(x, t)$ qui vient multiplier $e^{iq(t)x}$ dans (5.6), si ce n'est qu'elle est solution de

$$i\hbar \frac{d}{dt} |u(t)\rangle = \hat{H}_{\text{per.}}[q(t)] |u(t)\rangle, \quad (5.11)$$

où $\hat{H}_{\text{per.}}[q]$ est l'hamiltonien pour la partie périodique des fonctions de Bloch :

$$\hat{H}_{\text{per.}}[q] = \frac{(\hat{p} + \hbar q)^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (5.12)$$

C'est l'approximation adiabatique qui, comme au chapitre précédent dans le cas d'une force sinusoidale, va nous permettre de progresser.

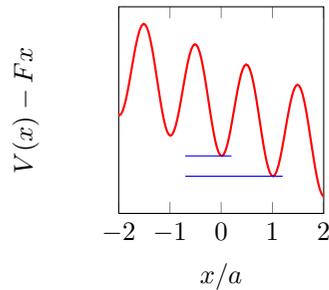


FIGURE 5.1. Potentiel $V(x) - Fx$ donnant naissance aux oscillations de Bloch, avec ici $V(x) = V_0 \sin^2(\pi x/a)$ et $\hbar\omega_B \equiv Fa = V_0/5$. La différence d'énergie entre les deux traits horizontaux est égale à $\hbar\omega_B$.

1-2 L'approximation adiabatique

À partir de maintenant, nous supposons que l'état initial $e^{iq_{in}x} u(x, 0)$ est une fonction de Bloch, c'est-à-dire un état propre $\psi_{n,q_{in}}(x)$ de la $n^{\text{ième}}$ bande d'énergie de l'hamiltonien

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{5.13}$$

correspondant au cas $F = 0$. En d'autres termes, la fonction $u(x, 0) = \langle x|u(t=0)\rangle$ coïncide (à une phase près) avec l'état propre $u_{n,q_{in}}(x)$ de l'hamiltonien $\hat{H}_{\text{per.}}[q_{in}]$ pour la partie périodique (5.12).

L'approximation adiabatique consiste à poser que l'état $|u(t)\rangle$ solution de (5.11) reste (à une phase globale près) égal à $|u_{n,q(t)}\rangle$, soit

$$\psi(x, t) \propto e^{ixq(t)} u_{n,q(t)}(x). \tag{5.14}$$

Puisque le quasi-moment $q(t)$ défile à vitesse uniforme et parcourt la zone de Brillouin en un temps τ_B , l'évolution dans le temps de $\psi(x, t)$ est périodique (à une phase globale près¹), avec cette même période τ_B . Ce défilement est représenté sur la figure 5.2 dans la représentation dite de *zone répétée*.

1. Nous ne nous préoccupons pas de la phase (Zak 1989) accumulée au cours d'une oscillation dans ce chapitre, ce sujet faisant l'objet d'un cours ultérieur.

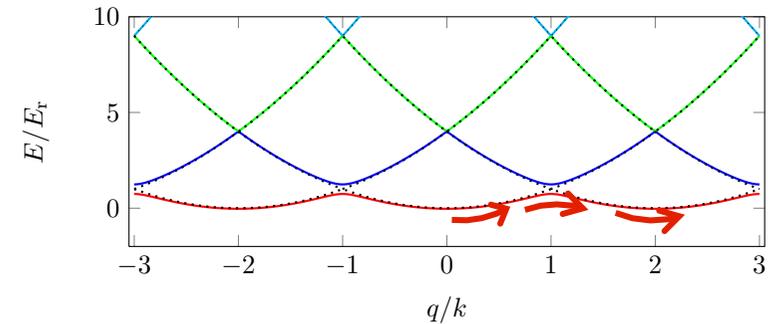


FIGURE 5.2. Le défilement du quasi-moment dans le schéma de bande étendue. Le régime des oscillations de Bloch correspond à la situation où la particule suit adiabatiquement le niveau d'énergie initial (ici la courbe rouge) et ne bascule pas vers un autre niveau d'énergie (ici la courbe bleue). La zone « dangereuse » est située aux points où q/k est un entier impair, là où les bandes rouge et bleue sont les plus proches. Cette figure est tracée pour $V_0 = E_r$.

Cette évolution périodique de l'état de la particule soumise à une force uniforme (en plus du potentiel $V(x)$) est un phénomène remarquable, qui trouve son origine dans la structure en bandes d'énergies du spectre de l'hamiltonien non perturbé. L'appellation *Oscillations de Bloch* pour ce phénomène est assez paradoxale. En effet, ce effet n'est pas décrit dans le papier séminal de Bloch (1929) sur la physique quantique des électrons dans les cristaux. Sa première apparition publique semble dater de l'article de Zener (1934). Un autre paradoxe est que l'oscillation n'est pas ce qui intéressait Zener. Il recherchait l'effet qu'un champ électrique pouvait avoir sur un isolant et c'était donc les transition interbandes que nous allons voir un peu plus tard dans ce cours qui motivaient son étude : le but était de trouver une force F assez grande pour que le suivi adiabatique n'ait pas lieu, l'oscillation elle-même étant probablement considérée comme « triviale » par Zener...

Il est d'ailleurs intéressant de jeter un œil sur la première figure de l'article de Zener de 1934, avec laquelle il interprète le phénomène d'oscillation (voir Figure 5.3). Il y fait une « approximation locale » des bandes d'énergie, en traçant ces bandes en fonction de la position après leur avoir ajouté l'énergie potentielle $-Fx$. Les bandes interdites sont représentées

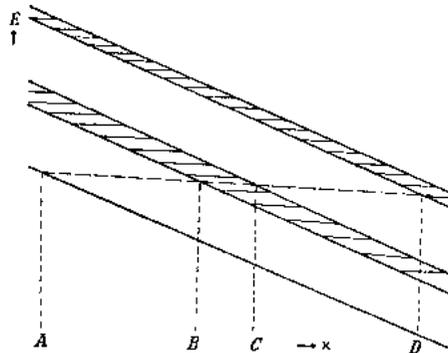


Fig. 1.—“Potential barrier” diagram. The shaded regions represent zones of forbidden energy in the presence of an electric field.

FIGURE 5.3. Figure tirée de l'article original de Zener (1934), représentant des bandes d'énergies « tiltées » sous l'effet du potentiel $-Fx$.

par les zones hachurées. Le trait horizontal représente une énergie possible pour un électron. Cet électron part du point A , est accéléré par la force F jusqu'à arriver au point B , et il peut alors (i) faire demi-tour et c'est le phénomène d'oscillation ou (ii) passer par effet tunnel au point C , bas de la bande d'énergie suivante, et contribuer ainsi à la conduction électrique. On déduit de cette image l'amplitude des oscillations dans l'espace réel, $x_B - x_A = \Delta E/F$, où ΔE est la largeur de la bande permise initialement occupée.

Ce résultat concernant l'amplitude des oscillations dans l'espace réel peut se retrouver en considérant un paquet d'ondes de centre $\bar{q}(t)$ dans l'espace des moments, et dont la dispersion en q reste à chaque instant petite devant k . Dans l'espace réel, notons $\bar{x}(t)$ le centre de ce paquet d'ondes ; la vitesse moyenne de déplacement du paquet d'ondes est donnée par la vitesse de groupe

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = v_g(t) = \frac{1}{\hbar} \left. \frac{dE_{n,q}}{dq} \right|_{q=\bar{q}(t)}, \quad (5.15)$$

qui évolue périodiquement dans le temps. Cette équation d'évolution s'in-

tègre pour donner

$$\bar{x}(t) - \bar{x}(0) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t \frac{dE_{n,q}}{dq} dt = \frac{1}{F} \int_{q_{in}}^{q(t)} \frac{dE_{n,q}}{dq} dq, \quad (5.16)$$

où on a utilisé la relation $q = Ft/\hbar$. On arrive finalement à

$$\bar{x}(t) - \bar{x}(0) = \frac{1}{F} (E_{n,\bar{q}(t)} - E_{n,q_{in}}), \quad (5.17)$$

qui correspond à la relation pressentie à partir de la figure 5.3.

Il existe plusieurs manières de représenter le phénomène d'oscillations de Bloch. Nous avons jusqu'ici privilégié celle tirant parti de la structure de bande du diagramme d'énergie (en absence de force). Un autre point de vue très utile, directement inspiré par l'optique quantique, est représenté sur la figure 5.4ab. Ce point de vue, valable pour les faibles profondeurs de réseau, consiste à traiter perturbativement l'effet du réseau sous forme de transitions multi-photoniques pouvant se produire quand une condition de résonance est satisfaite. On trace d'abord la relation de dispersion $E = p^2/2m$ en absence de réseau ; la présence de la force F va forcer l'atome à parcourir l'espace des impulsions selon la loi $\dot{p} = F$. Quand un atome, parti par exemple de $p = 0$ arrive en $p = \hbar k$, une transition à deux photons résonnante peut le faire basculer vers $p = -\hbar k$ (5.4a). Cette bascule peut aussi être vue comme une réflexion de Bragg totale de l'onde atomique de longueur d'onde $2\pi/k$ sur le réseau de pas π/k . L'accélération reprend à partir de ce point $p = -\hbar k$ et on assiste alors à l'oscillation périodique, de fréquence $F/(2\hbar k) = \omega_B/2\pi$, prévue plus haut. Cette image se généralise sans difficulté aux oscillations de Bloch dans les bandes supérieures. La figure 5.4b représente par exemple l'oscillation de Bloch dans la première zone excitée, $n = 1$, en terme de deux transitions multi-photoniques, l'une à deux photons, et l'autre à quatre photons.

Le dernier point de vue sur ces oscillations de Bloch que nous mentionnerons ici est basé sur le développement en ondes planes des fonctions de Bloch, qui s'exprime en fonction de la transformée de Fourier des fonctions de Wannier (cf. cours 3) :

$$\psi_{n,q}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \tilde{w}_n(q + 2\pi j/a) e^{ix(q+2\pi j/a)}. \quad (5.18)$$

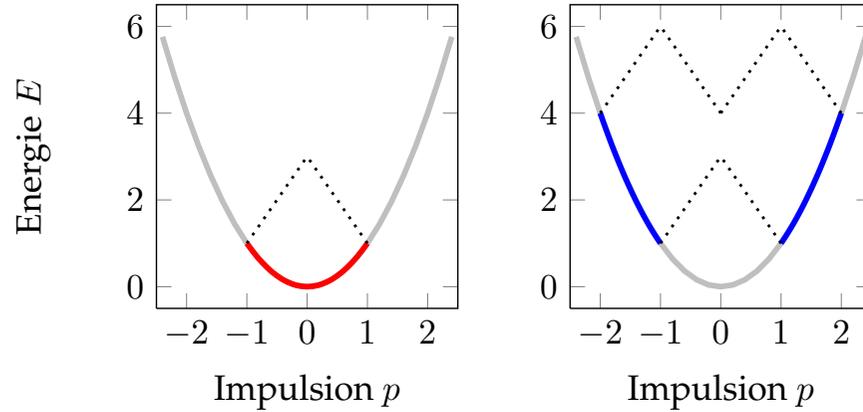


FIGURE 5.4. Représentation des oscillations de Bloch dans la bande fondamentale ($n = 0$) à gauche et dans la première bande excitée ($n = 1$) à droite, en termes de transitions multi-photoniques. Sous l'effet de la force constante F , l'impulsion augmente linéairement avec le temps ($\dot{p} = F$). Quand l'impulsion de l'atome est telle qu'une transition multi-photonique résonante, représentée par les lignes pointillées noires, peut se produire ($p/\hbar k$ entier non nul), une réflexion de Bragg se produit et l'impulsion de l'atome bascule de p à $-p$. La fréquence de l'oscillation, indépendante de la bande, est $F/(2\hbar k) = \omega_B/2\pi$.

Lors de l'oscillation, ce peigne d'impulsions défile à vitesse constante et l'amplitude des différentes composantes suit l'enveloppe donnée par la fonction $\tilde{w}_n(\kappa)$, transformée de Fourier de la fonction de Wannier $w_{n,0}(x)$.

2 Observations expérimentales

2-1 Premières expériences avec des atomes froids

En optique quantique, les premières oscillations de Bloch ont été observées dans les groupes de Christophe Salomon à Paris et Mark Raizen à Austin (Wilkinson et al. 1996; Niu et al. 1996; Ben Dahan et al. 1996; Peik et al. 1997; Raizen et al. 1997). Ces observations faisaient suite à une mise en évidence dans des échantillons solides, en particulier dans des super-

réseaux (Mendez & Bastard 1993). Aussi bien à Paris qu'à Austin, la force F était une force d'inertie, $F = -m\ddot{x}_0$, obtenue grâce à un réseau accéléré

$$V(x, t) = V_0 \sin^2 [k(x - x_0(t))] \quad (5.19)$$

avec $x_0(t) = \gamma t^2/2$. Rappelons qu'une telle accélération est réalisée en faisant varier dans le temps les phases ϕ_1 et ϕ_2 des deux ondes progressives $e^{i(kx - \omega t - \phi_1)}$ et $e^{-i(kx + \omega t + \phi_2)}$ composant le réseau. Cette accélération a peut par exemple être obtenue en choisissant

$$\phi_1(t) = k\gamma t^2/2, \quad \phi_2(t) = -k\gamma t^2/2, \quad (5.20)$$

ce qui correspond aux « fréquences instantanées »

$$\omega_1 = \omega + \frac{d\phi_1}{dt} = \omega + k\gamma t, \quad \omega_2 = \omega + \frac{d\phi_2}{dt} = \omega - k\gamma t. \quad (5.21)$$

L'expérience de Paris était menée avec des atomes de césium ($m = 133$) alors que l'expérience d'Austin utilisait des atomes de sodium ($m = 23$). Ce facteur significatif sur les masses, associé à un facteur également significatif sur les longueurs d'onde des réseaux utilisés, entraîne des différences qualitatives importantes sur les accélérations compatibles avec un suivi adiabatique (voir par exemple le tableau 5.1). En pratique, l'accélération typique des expériences de Paris se situait entre 1 et quelques dizaines de ms^{-2} , alors que celles utilisées à Austin allaient jusqu'à plusieurs milliers de ms^{-2} . Dans les deux cas, la profondeur du réseau V_0 mesurée en unité de E_r était de l'ordre de quelques unités.

On a représenté sur la figure 5.5 quelques résultats illustrant ces oscillations mesurées dans le référentiel du réseau (données extraites de Ben Dahan et al. (1996); Peik et al. (1997)). On voit dans la colonne de gauche l'évolution périodique de la distribution en impulsion. Dans la colonne de droite, on a représenté l'évolution de la vitesse moyenne du paquet d'ondes, en bon accord avec la loi (5.15). On notera en particulier la déformation de cette courbe quand on va des petits V_0/E_r (liaisons faibles, en haut) vers les grands V_0/E_r (liaisons fortes, en bas) :

- Dans le cas des liaisons faibles, on a $E_{0,q} \approx \hbar^2 q^2/2m$ sauf en bord de zone, et la vitesse de groupe est donc presque partout égale à $\hbar q/m$, c'est-à-dire une fonction linéaire du temps puisque $q(t) = q_0 + Ft/\hbar$. La réflexion de Bragg en bord de zone correspond à une variation rapide de v , d'où cette évolution en dents de scie.

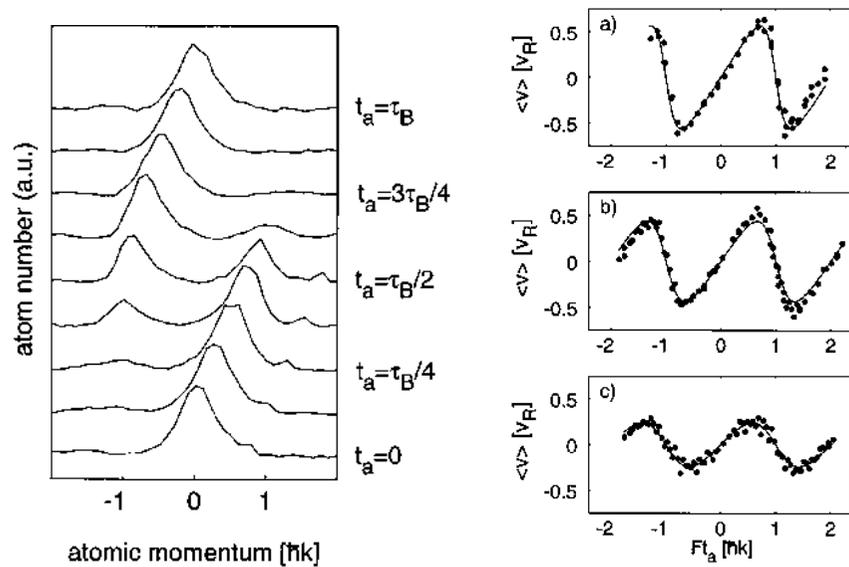


FIGURE 5.5. Oscillations de Bloch observées dans le groupe de C. Salomon en 1996-97 dans un réseau optique accéléré (Ben Dahan et al. 1996; Peik et al. 1997). Les vitesses atomiques sont mesurées dans le référentiel dans lequel le réseau optique est immobile. Les atomes sont préparés initialement dans la bande fondamentale $n = 0$. Gauche : évolution de la distribution en vitesse pour $V_0 = 2.3 E_r$ et $\gamma = 0.85 \text{ ms}^{-2}$. Droite : évolution de la vitesse moyenne du paquet d'ondes pour différentes profondeurs de réseau : $V_0/E_r = 1.4, 2.3, 4.4$.

- Dans la limite des liaisons fortes, on a vu au cours 3 que la bande fondamentale est sinusoidale, $E_{0,q} \approx -2J \cos(aq)$, et la vitesse varie donc sinusoidalement avec le temps : $v(t) \propto \sin[aq(t)]$.

Les distributions de la figure 5.5 représentent des mesures des vitesses dans le référentiel accéléré du réseau. Il est également intéressant de représenter ces vitesses dans le référentiel du laboratoire, ce qui est fait sur la figure 5.6. On y voit que pour ces paramètres qui correspondent à une limite de liaisons faibles, les atomes gardent une vitesse constante la plupart du temps, mais subissent périodiquement une accélération forte qui augmente leur vitesse de $2\hbar k/m$. Cette dynamique s'interprète simplement en terme de transitions à deux photons (cf. figure 5.7). Ces transitions sont

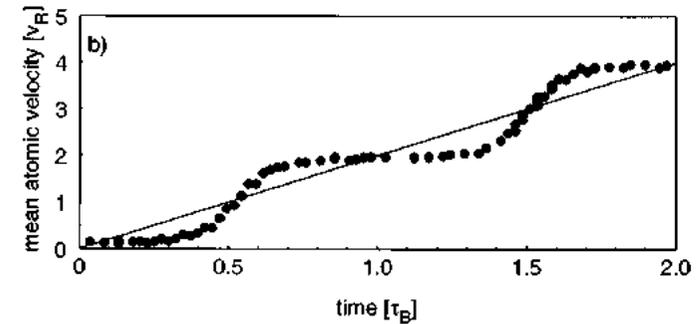


FIGURE 5.6. Évolution de la vitesse moyenne des atomes dans le référentiel du laboratoire pour les paramètres de la figure 5.5 (gauche). Figure extraite de Peik et al. (1997).

successivement résonnantes aux instants t_j tels que les fréquences instantanées des ondes lasers composant le réseau vérifient

$$\hbar[\omega_1(t_j) - \omega_2(t_j)] = [(2j+2)^2 - (2j)^2]E_r = (8j+4)E_r, \quad (5.22)$$

pour la transition $p = 2j\hbar k \rightarrow p = (2j+2)\hbar k$ (j est un entier quelconque). En prenant l'expression (5.21) de $\omega_{1,2}(t)$, on constate bien que ces accélérations se produisent pour

$$t_j = \left(j + \frac{1}{2}\right) \tau_B. \quad (5.23)$$

Ce dispositif de réseau accéléré constitue donc un moyen efficace pour communiquer une impulsion déterminée à des atomes, cette impulsion pouvant en pratique atteindre plusieurs centaines de $\hbar k$.

2-2 Remarque : bilan d'impulsion dans un réseau accéléré

Quand on considère l'image des transitions multi-photoniques de la figure 5.7, il est clair que le gain d'impulsion de l'atome au cours de l'accélération d'un réseau est un multiple de $2\hbar k$. Ce même résultat est un peu moins évident quand on raisonne dans le référentiel accéléré; nous nous proposons de le montrer explicitement dans les lignes qui suivent (voir aussi Browaeys et al. (2005)).

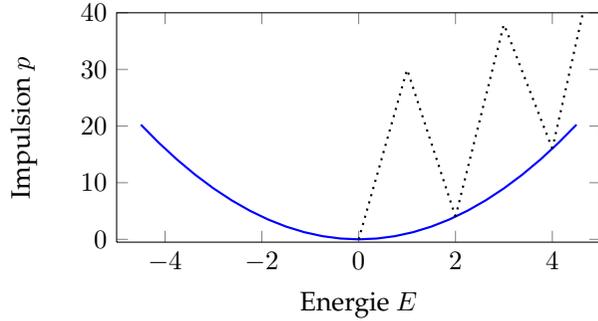


FIGURE 5.7. Principe de l'accélération des atomes en termes de transitions multi-photoniques successivement résonantes.

Partons d'un atome d'impulsion p_{in} bien déterminée. Prenons $|p_{\text{in}}| < \hbar k$, de sorte que cette impulsion soit dans la première zone de Brillouin². Branchons d'abord adiabatiquement le réseau immobile. L'état de l'atome suit la fonction de Bloch $\psi_{n=0, q_{\text{in}}}$ avec $q_{\text{in}} = p_{\text{in}}/\hbar$. Une fois que le réseau a atteint sa pleine puissance, mettons-le en mouvement avec une accélération $\ddot{x}_0(t)$. Dans le référentiel du réseau, la force d'inertie $F(t) = -m\ddot{x}_0(t)$ crée le défilement de la quasi-impulsion

$$q(t) = q_{\text{in}} + \frac{1}{\hbar} \int_0^t F(t') dt' = q_{\text{in}} - \frac{m}{\hbar} \dot{x}_0(t), \quad (5.24)$$

l'atome restant dans la bande fondamentale $n = 0$.

Arrêtons alors l'accélération du réseau à l'instant T , puis diminuons sa profondeur adiabatiquement jusqu'à l'éteindre complètement. Dans le référentiel du réseau, cette méthode de déploiement de bande (*band mapping*) va amener l'atome dans un état d'impulsion bien déterminée $p_{\text{fin}}^{(\text{réseau})}$, associée à la bande fondamentale, donc comprise entre $-\hbar k$ et $\hbar k$. Plus précisément $p_{\text{fin}}^{(\text{réseau})}$ est égale à $\hbar q(T)$, modulo un vecteur du réseau réciproque :

$$p_{\text{fin}}^{(\text{réseau})} = \hbar q(T) + 2N\hbar k \quad (5.25)$$

où N est l'entier le plus proche de $-q(T)/(2k)$.

2. Le raisonnement qui suit est valable même si la distribution d'impulsion n'est pas un pic delta, l'important étant qu'elle soit entièrement dans la zone de Brillouin.

Si on revient dans le référentiel du laboratoire à cet instant, l'impulsion de l'atome est

$$\begin{aligned} p_{\text{fin}}^{(\text{labo})} &= p_{\text{fin}}^{(\text{réseau})} + mv^{(\text{réseau})}(T) \\ &= p_{\text{fin}}^{(\text{réseau})} + m\dot{x}_0(T) \\ &= \hbar q(T) + 2N\hbar k + m\dot{x}_0(T) \\ &= p_{\text{in}} + 2N\hbar k, \end{aligned} \quad (5.26)$$

ce qui correspond bien au résultat recherché. Le seul cas où cette démonstration n'est pas valable est quand $p_{\text{fin}}^{(\text{réseau})}$ est au voisinage immédiat du bord de bande, c'est-à-dire $q(T) = k$ modulo $2k$, car le débranchement adiabatique du réseau n'est alors pas possible : l'atome se retrouve dans une superposition linéaire de $q_{\text{in}} + 2N\hbar k$ et $q_{\text{in}} + (2N + 2)\hbar k$; ce cas correspond à une interruption de l'accélération au moment précis où une transition à deux photons de la figure 5.7 est en train de se produire.

2-3 Oscillations dues à la gravité

Une des difficultés principales pour observer les oscillations de Bloch réside dans la nécessité de préparer une assemblée d'atomes avec une dispersion en impulsion initiale petite devant $\hbar k$. Cette difficulté est presque automatiquement levée si l'on dispose de condensats de Bose-Einstein ou de gaz de Fermi dégénérés. Nous ne pouvons pas décrire, ni même citer toutes les expériences d'oscillations de Bloch qui ont suivi l'arrivée de ces gaz dégénérés dans les laboratoires. Mentionnons simplement une classe d'expériences sensiblement différentes de celles de Paris et d'Austin, dans

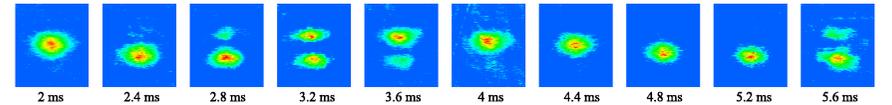


FIGURE 5.8. Oscillations de Bloch d'atomes de ^{40}K (fermions) sous l'effet de la gravité, observées avec un potentiel $V_0 = 2 E_r$, $\lambda = 873 \text{ nm}$ [figure extraite de Roati et al. (2004)]. L'absence d'interaction entre les fermions polarisés permet d'observer ces oscillations avec un bon contraste pendant une longue durée (plus de $100 \tau_B$).

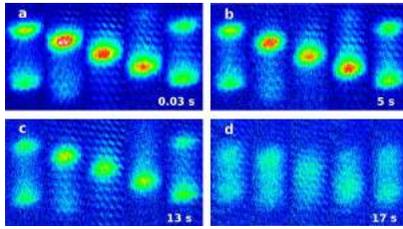


FIGURE 5.9. Oscillations de Bloch d'atomes de ^{88}Sr (bosons) sous l'effet de la gravité dans un réseau de période $a = 266 \text{ nm}$ et de profondeur $V_0 \approx 3 E_r$ [figure extraite de Poli et al. (2011)]. La période de Bloch est $\omega_B/2\pi = 574 \text{ Hz}$ et les oscillations de Bloch peuvent être observées pendant près de 20 secondes. Les images correspondent à l'oscillation $n^\circ 1, 2900, 7500$ et 9800 . La valeur extrêmement basse de la longueur de diffusion pour les atomes de ^{88}Sr permet de minimiser le déphasage des oscillations dû aux interactions. On peut déduire de ces oscillations la valeur de g à 6×10^{-6} près. La précision de cette mesure de g est notablement amélioré si on utilise plutôt – sur le même montage expérimental – la spectroscopie des états de Wannier–Stark (voir § 5).

lesquelles la force F n'est pas une force d'inertie, mais existe dans le référentiel du laboratoire. Le plus simple est de choisir la gravité, en disposant le réseau optique selon l'axe vertical. On a reproduit sur les figures 5.8 et 5.9 des résultats obtenus dans les groupes de M. Inguscio (Roati et al. 2004) et G. Tino (Poli et al. 2011) où l'on voit des atomes « suspendus » dans un réseau optique. La mesure de la fréquence d'oscillation donne en principe directement accès à la valeur de la gravité au point où se trouvent les atomes. En fait, pour optimiser la détermination de g avec des atomes confinés dans un réseau, il semble préférable d'utiliser la spectroscopie des états de Wannier–Stark, que nous verrons un peu plus loin (Poli et al. 2011; Pelle et al. 2013). Poli et al. (2011) indiquent en effet des fluctuations nettement plus importantes quand on observe directement les oscillations de Bloch, dues à l'instabilité résiduelle de la position initiale des atomes et à une plus grande sensibilité au « timing » de l'expérience.

	Li	Na	K	Rb	Cs
masse (uma)	7	23	39	87	133
λ_0 (nm)	671	589	770	780	852
$E_r/(2\pi\hbar)$ (kHz)	63.0	25.9	8.59	3.75	2.06
$\omega_B/2\pi$ (kHz)	0.058	0.17	0.37	0.84	1.4
$\hbar\omega_B/E_r$	0.0009	0.0067	0.043	0.22	0.68
F_c/m pour $V_0 = E_r$ (ms^{-2})	3300	450	70	13.5	4.4

TABLE 5.1. Energie de recul et fréquence des oscillations de Bloch pour les atomes alcalins soumis à la gravité ($F/m = 9.81 \text{ ms}^{-2}$). Le réseau optique est supposé être à la fréquence de résonance de l'atome $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$ et son pas est $a = \lambda_0/2$. Le rapport $\hbar\omega_B/E_r$ est déterminant pour évaluer l'adiabaticité du mouvement dans la bande $n = 0$ (cf figure 5.10). La dernière ligne donne l'accélération critique apparaissant dans la formule de Landau–Zener (5.38), pour une profondeur de réseau choisie égale à l'énergie de recul.

3 L'approximation adiabatique et au delà

3-1 Validité de l'approximation adiabatique

Nous allons maintenant discuter la validité de l'approximation adiabatique à la base du phénomène d'oscillation. Nous avons déjà donné dans un cours précédent le critère général caractérisant cette approximation (Messiah 2003). Rappelons-le ici pour mémoire. On considère un hamiltonien $\hat{H}(\lambda)$ dépendant d'un paramètre λ , pour lequel on a su résoudre le problème aux valeurs propres. On suppose pour simplifier que les énergies $\epsilon_n(\lambda)$ sont non-dégénérées et forment un ensemble discret. Les vecteurs propres associés sont notés $|\phi_n(\lambda)\rangle$. On s'intéresse à un problème où le paramètre λ dépend du temps. On suppose que le système est préparé à l'instant $t = 0$ dans un état propre $|\phi_n[\lambda(0)]\rangle$ et on cherche à quelle condition le système sera à l'instant t dans l'état $|\phi_n[\lambda(t)]\rangle$ avec probabilité voisine de 1. On peut montrer que ceci sera le cas si l'inégalité

$$\hbar \left| \langle \phi_{n'} | \frac{d}{dt} | \phi_n \rangle \right| \ll |E_{n'} - E_n|, \quad \forall n' \neq n, \quad (5.27)$$

est satisfaite à chaque instant (le paramètre $\lambda(t)$ est sous-entendu).

Dans le cas qui nous intéresse ici, le quasi-moment q joue le rôle du paramètre λ et le nombre quantique n est l'indice de bande. L'hamiltonien est $\hat{H}_{\text{per.}}[q]$ donné en (5.12), qui détermine la partie périodique des fonctions de Bloch, et les états $|\phi_n(\lambda)\rangle$ sont les parties périodiques $|u_{n,q}\rangle$. En utilisant le fait que $\dot{q} = F/\hbar$, le critère d'adiabaticité est donc

$$F |\langle u_{n',q} | \partial_q u_{n,q} \rangle| \ll |E_{n'}(q) - E_n(q)|, \quad (5.28)$$

où on a noté

$$|\partial_q u_{n,q}\rangle \equiv \frac{d}{dq} |u_{n,q}\rangle. \quad (5.29)$$

Le produit scalaire $\langle u_{n',q} | \partial_q u_{n,q} \rangle$ peut être réécrit sous une forme commode, faisant intervenir l'élément de matrice de l'opérateur impulsion \hat{p} . On établit cette relation en dérivant par rapport à q l'équation aux valeurs propres pour l'hamiltonien $\hat{H}_{\text{per.}}$, et en projetant l'équation obtenue sur $|u_{n',q}\rangle$ (Ashcroft & Mermin 1976). On trouve

$$[E_n(q) - E_{n'}(q)] \langle u_{n',q} | \partial_q u_{n,q} \rangle = \frac{\hbar}{m} \langle u_{n',q} | \hat{p} | u_{n,q} \rangle, \quad (5.30)$$

ce qui permet de réécrire la condition d'adiabaticité sous la forme

$$\frac{F\hbar}{m} |\langle u_{n',q} | \hat{p} | u_{n,q} \rangle| \ll [E_n(q) - E_{n'}(q)]^2. \quad (5.31)$$

Plaçons-nous dans le régime des liaisons faibles et appliquons ce résultat au point le plus critique pour le suivi adiabatique, $q \approx k$, là où la bande fondamentale $n = 0$ est la plus proche de la première bande excitée $n' = 1$. L'écart entre les niveaux vaut $V_0/2$ et les fonctions $u_{n,q}(x)$ sont égales à $1 \pm e^{\pm 2ikx}$ (cf. cours 2). L'élément de matrice de \hat{p} est donc $\sim \hbar k$ et la condition (5.31) devient

$$\frac{F\hbar}{m} \hbar k \ll \frac{V_0^2}{4} \quad \Leftrightarrow \quad F \ll \frac{V_0^2}{8E_r} k \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\hbar\omega_B}{E_r} \ll \frac{\pi}{8} \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^2. \quad (5.32)$$

On trouvera dans la thèse de M.Dahan (1997) une condition d'adiabaticité (relativement peu contraignante) pour le régime des liaisons fortes déduite de (5.31). Nous en donnons ici une autre qui consiste à imposer que le décalage en énergie $aF = \hbar\omega_B$ entre deux puits successifs (cf. fig. 5.1) reste inférieur à la différence d'énergie $\hbar\omega \approx 2\sqrt{V_0 E_r}$ entre les deux

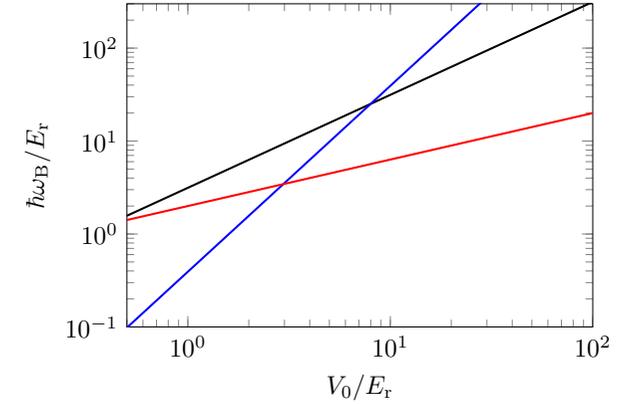


FIGURE 5.10. Zones de validité de l'approximation adiabatique (il faut se situer sous les droites correspondantes pour que l'approximation soit valable). Bleu : cas des liaisons faibles (5.32); rouge : cas des liaisons fortes (5.33). La droite noire donne la limite (5.34) pour la force F , au dessus de laquelle le potentiel $V(x) - Fx$ n'a plus de minimum local.

bandes les plus basses. Ceci permet d'éviter un effet tunnel résonnant de l'état de vibration $n = 0$ du puits situé en ja vers l'état de vibration $n = 1$ du puits situé en $(j + 1)a$. Cette condition s'écrit dans la limite $V_0 \gg E_r$:

$$\frac{\hbar\omega_B}{E_r} < 2 \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^{1/2}. \quad (5.33)$$

Nous avons tracé en figure 5.10 les différentes zones d'intérêt dans le plan $(V_0, \hbar\omega_B)$. Nous avons ajouté la zone délimitée par la condition

$$F < kV_0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\hbar\omega_B}{E_r} < \pi \frac{V_0}{E_r}, \quad (5.34)$$

qui correspond à imposer que le potentiel tilté de la figure 5.1 possède des minima locaux. Les conditions d'adiabaticité données en (5.32-5.33) se situent bien à l'intérieur de ce domaine.

3-2 Transitions de Landau–Zener

On peut évaluer plus quantitativement la validité de l'approximation adiabatique dans le cas des liaisons faibles, en modélisant le croisement évité entre les deux bandes les plus basses par une approche de type Landau–Zener.

Rappelons d'abord les résultats principaux de cette approche. On considère un système à deux niveaux modélisé par un spin 1/2 et on suppose que ce spin évolue sous l'effet de l'hamiltonien dépendant explicitement du temps

$$\hat{H}(t) = \alpha t \hat{\sigma}_z + \beta \hat{\sigma}_x, \quad (5.35)$$

où les $\hat{\sigma}_i$ sont les matrices de Pauli. Les valeurs propres instantanées sont $\pm (\alpha^2 t^2 + \beta^2)^{1/2}$. Considérons un spin préparé dans l'état $|+\rangle$ à un instant t_i négatif tel que $|t_i| \gg \beta/\alpha$. À un instant t_f positif et $\gg \beta/\alpha$, le spin aura suivi adiabatiquement le niveau d'énergie correspondant avec une probabilité

$$\mathcal{P} = 1 - e^{-\pi\beta^2/(\hbar\alpha)}. \quad (5.36)$$

Dans le cas qui nous intéresse, les niveaux d'énergie qui se croisent sont $E = \hbar^2 q^2/2m$ et $E = \hbar^2(q - 2k)^2/2m$ au point $q = k$. Comme $\dot{q} = F/\hbar$, le coefficient α vaut $\alpha = \hbar k F/m$. Le coefficient β , qui caractérise le couplage entre les deux niveaux, vaut $\beta = V_0/4$. La probabilité de suivi adiabatique peut donc s'écrire

$$\mathcal{P} = 1 - e^{-F_c/F}, \quad (5.37)$$

où on a introduit la force critique

$$F_c = \frac{\pi}{32} \frac{V_0^2}{E_r} k. \quad (5.38)$$

La condition de suivi adiabatique, $\mathcal{P} \approx 1$ et donc $F \ll F_c$, redonne bien le résultat trouvé en (5.32).

La vérification de cette loi pour un atome dans un réseau optique a été faite dès les premières expériences de Paris et d'Austin dans les années 1996-97. Nous montrons sur la figure 5.11 un résultat plus récent obtenu à Pise (Zenesini et al. 2009) où l'on voit les décroissances successives de l'occupation de la bande $n = 0$ à chaque fois que le moment de l'atome passe au bord de la zone de Brillouin.

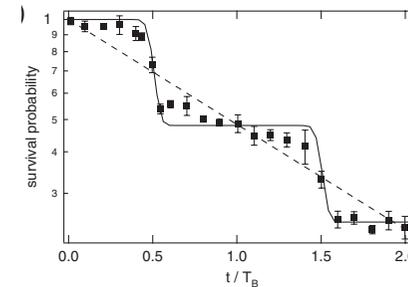


FIGURE 5.11. Résultat tiré de Zenesini et al. (2009), montrant la décroissance de la probabilité d'occupation de la bande $n = 0$ dans une expérience d'oscillations de Bloch menée avec des atomes de rubidium. Le réseau a une profondeur $V_0 = E_r$. Le réseau, de pas $a = 421$ nm, est accéléré uniformément de manière à produire une force d'inertie telle que $\hbar\omega_B \approx 0.4E_r$. La courbe en trait continu correspond à l'intégration numérique de l'équation de Schrödinger dépendant du temps, ce qui redonne essentiellement la prédiction de Landau–Zener. La courbe tiretée correspond à une approximation exponentielle.

Comme nous l'avons écrit plus haut, cette question des transitions interbandes était centrale dans le papier original de Zener de 1934. Après avoir dérivé la probabilité de transition à chaque passage en bord de zone de Brillouin, Zener termine son analyse par une raisonement similaire à celui de Gamow pour déterminer la durée de vie d'un noyau dans un processus de radioactivité α . L'atome (ou l'électron pour Zener) "tente sa chance" $\omega_B/2\pi$ fois par unité de temps, et il a à chaque fois la probabilité \mathcal{P} de rester dans la bande $n = 0$. Si on multiplie ces probabilités pour les $j = t/\tau_B$ essais qui ont lieu pendant une durée t , on en déduit la probabilité $\Pi(t)$ pour la particule d'être encore dans la bande $n = 0$ à l'instant t

$$\Pi(t) \approx \mathcal{P}^j = \exp \left[j \ln \left(1 - e^{-F_c/F} \right) \right] \approx \exp(-t/\tau) \quad (5.39)$$

où le temps de décroissance τ est donné par

$$\tau = \tau_B e^{F_c/F}. \quad (5.40)$$

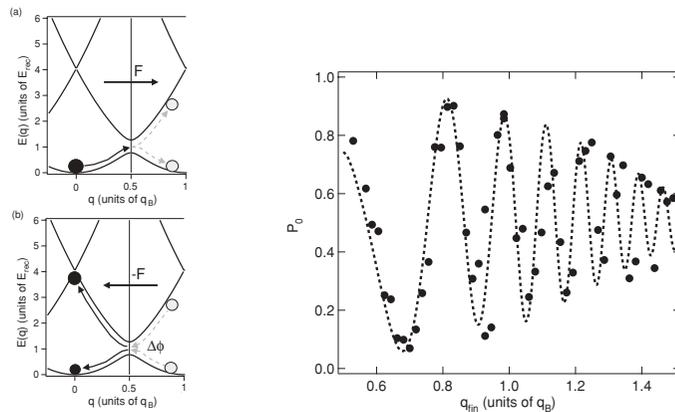


FIGURE 5.12. Observation d'oscillations de Stückelberg, avec un réseau optique pour atomes de rubidium, $V_0 = 1.4 E_r$ and $\hbar\omega_B = 1.2 E_r$ ($a = 421 \text{ nm}$). Les atomes sont placés dans la bande fondamentale $n = 0$ à $q = 0$. Ils sont accélérés pour franchir le bord de la première zone de Brillouin et atteindre un moment q_{fin} tel que $0.5 < q_{\text{fin}}/k < 1.5$. La force est alors inversée pour ramener les atomes à $q = 0$. On mesure finalement la population de la bande fondamentale. La ligne tiretée est une prédiction faite en supposant une largeur en impulsion initiale $\Delta q/k = 0.03$ (figures extraites de Zenesini et al. (2010)).

3-3 Au delà de Landau–Zener

Dans le traitement qui conduit à la loi exponentielle de taux (5.40), on additionne de manière incohérente les différentes amplitudes de probabilité correspondant aux transitions diabatiques successives quand l'atome passe sur un bord de zone de Brillouin. En réalité, ces transitions sont des processus cohérents et il est possible d'observer des déviations notables par rapport à la loi simple de Landau–Zener du fait des interférences entre ces processus. Une première analyse, théorique et expérimentale, de ces déviations a été faite à Austin à la fin des années 1990 (Wilkinson et al. 1997; Niu & Raizen 1998). Un traitement théorique détaillé est présenté par Holthaus (2000). Récemment, une expérience menée à Pise dans le groupe de E. Arimondo a mis en évidence de manière très convaincante les *interférences de Stückelberg* entre deux processus de Landau-Zener successifs (Zenesini et al. 2010). Le principe de l'expérience et son résultat sont représentés sur

la figure 5.12. Des résultats similaires ont été obtenus à Bonn dans le groupe de M. Weitz (Kling et al. 2010).

3-4 Un séparateur de faisceau

Grâce aux oscillations de Bloch, on a la possibilité de transférer de manière cohérente une impulsion contrôlée (et importante) à des atomes en les plaçant dans un réseau accéléré. Le fait que la probabilité de transférer ou non cette impulsion dépende de manière forte de la bande n occupée par les atomes permet de réaliser des séparateurs cohérents de faisceaux. Le principe, mis en œuvre par Denschlag et al. (2002), puis repris notamment par Cladé et al. (2009) et Müller et al. (2009) est simple :

- Partant d'atomes d'impulsion p_0 telle que $|p_0| < \hbar k$, on applique à ces atomes une impulsion de Bragg qui place chaque atome dans une superposition de p_0 et de $p_0 + 2\hbar k$, voire p_0 et de $p_0 + 4\hbar k$ dans le cas de Denschlag et al. (2002).
- On branche adiabatiquement un réseau optique jusqu'à une profondeur V_0 de sorte que les atomes soient placés dans une superposition cohérente de l'état $|n = 0, q_0\rangle$ et de l'état $|n = 2, q_0\rangle$, où $q = p_0/\hbar$. Notons qu'il vaut mieux choisir $p_0 \neq 0$ pour éviter d'être gêné par la quasi-dégénérescence des bandes $n = 1$ et $n = 2$ quand le réseau est encore de très faible intensité, qui empêche une bonne adiabaticité .
- On accélère le réseau optique. Le couple *accélération–profondeur* est choisi de manière (i) à avoir un excellent suivi adiabatique pour la bande $n = 0$, (ii) ne quasiment pas avoir de suivi adiabatique pour la bande $n = 2$. Grâce à ce choix, la composante $|n = 0, q\rangle$ est accélérée avec le réseau et acquiert une impulsion importante dans le référentiel du laboratoire. Au contraire, la composante $|n = 2, q\rangle$ subit des transitions diabatiques, l'atome est transféré vers les bandes supérieures $n = 2 \rightarrow n = 3 \rightarrow \dots$ dans le référentiel accéléré. Plus simplement, ceci revient à dire que pour cette partie du vecteur d'état, l'atome reste immobile dans le référentiel du laboratoire. On pourra vérifier sur la figure 5.13, extraite de l'article de Cladé et al. (2009), qu'il existe effectivement une plage appréciable de valeurs de V_0 pour lesquelles ces deux conditions « antagonistes » sont simultanément satisfaites.
- A l'issue de cette accélération de durée t , $N = t/\tau_B$ oscillations de

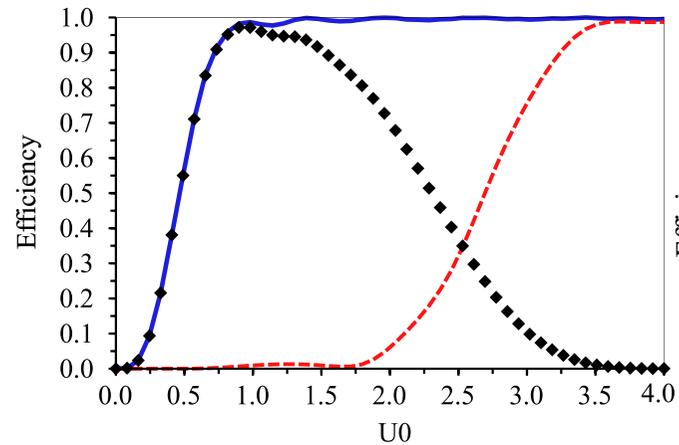


FIGURE 5.13. Probabilité \mathcal{P}_n de suivi adiabatique de la bande n pour des atomes de ^{87}Rb placés dans un réseau optique accéléré à $\sim 100 \text{ ms}^{-2}$, en fonction de la profondeur du réseau $U_0 = V_0/(8 E_r)$. La courbe bleue (resp. rouge) correspond à $n = 0$ (resp. $n = 2$). Le séparateur de faisceau sera efficace si $\mathcal{P}_0 \approx 1$ et $\mathcal{P}_2 \approx 0$. La courbe noire $\mathcal{P}_0(1 - \mathcal{P}_2)$ est une mesure de l'efficacité globale, qui est optimale pour $U_0 \approx 1$, donc $V_0 \approx 8 E_r$ (Figure extraite de Cladé et al. (2009)).

Bloch se sont produites et l'atome est vis-à-vis du référentiel du laboratoire dans l'état

$$|n = 0, p_0 + 2N\hbar k\rangle + e^{i\phi}|n = 2, p_0 + 2\hbar k\rangle. \quad (5.41)$$

On peut tester la cohérence de cette superposition en construisant un interféromètre de type Mach-Zender, où les deux bras subissent cette accélération à des instants différents (Denschlag et al. 2002).

Si on veut utiliser ce séparateur de faisceau à des fins d'interférométrie atomique et de mesures de précision, une difficulté importante provient des déplacements lumineux différentiels entre les deux bras. La partie de la fonction d'onde correspondant à un atome accéléré (dans la bande $n = 0$) n'a pas la même localisation spatiale dans le réseau que la partie de la fonction d'onde d'un atome non accéléré (dans la bande $n = 2$). Par exemple,

si le réseau est désaccordé sur le bleu de la résonance atomique, les atomes dans la bande $n = 0$ resteront localisés au voisinage des nœuds de l'onde stationnaire, alors que les atomes dans la bande $n = 2$ exploreront successivement les nœuds et les ventres de cette onde stationnaire. Le déplacement lumineux n'est donc pas le même dans les deux cas, ce qui conduit à un déphasage difficile à contrôler entre les deux bras. Il faut avoir recours à des schémas interférométriques plus compliqués pour rétablir une symétrie suffisante entre ces bras [Cladé et al. (2009), Müller et al. (2009)].

4 Oscillations de Bloch en liaisons fortes

Compte tenu de l'importance pratique du phénomène des oscillations de Bloch, il est utile de le voir sous plusieurs angles, en particulier dans le cas des liaisons fortes. Dans cette limite, on dispose en effet d'expressions analytiques simples pour les différentes grandeurs en jeu, utiles pour se forger une intuition du problème.

4-1 La fonction d'onde « oscillante »

Dans la limite des liaisons fortes, on restreint par hypothèse la dynamique de la particule à la bande fondamentale. On omettra donc dans cette section l'indice de bande $n = 0$. En ne prenant en compte que les sauts entre proches voisins, l'hamiltonien de départ (5.2) s'écrit :

$$\hat{H} = -J \left(\hat{T} + \hat{T}^\dagger \right) - Fa \sum_j j |w_j\rangle \langle w_j|, \quad (5.42)$$

où $|w_j\rangle$ représente l'état où la particule est localisée sur le site j et \hat{T} est l'opérateur translation d'un site vers la droite :

$$\hat{T} = \sum_j |w_{j+1}\rangle \langle w_j|. \quad (5.43)$$

Rappelons que les fonctions de Bloch $|\psi_q\rangle$, leur partie périodique $|u_q\rangle$ et l'énergie associée $E(q)$ s'écrivent

$$|\psi_q\rangle = \sum_j e^{ijaq} |w_j\rangle, \quad |u_q\rangle = \sum_j |w_j\rangle, \quad E(q) = -2J \cos(aq), \quad (5.44)$$

avec $|u_q\rangle$ indépendante de q dans ce cas particulier.

On peut d'ores et déjà introduire un nombre sans dimension qui sera utile pour caractériser l'influence de la force F sur la particule placée dans le réseau. Reprenons pour cela la figure initiale de Zener (Figure 5.3), qui fait apparaître une longueur caractéristique pour l'oscillation, $L = \Delta E/F$, où ΔE est la largeur de bande. Dans le cas des liaisons fortes, on a simplement $\Delta E = 4J$. Intéressons-nous au nombre de sites, noté ν , compris dans cette longueur L

$$\nu = \frac{4J}{Fa} = \frac{\Delta E}{\hbar\omega_B}. \quad (5.45)$$

On s'attend à ce que ce nombre sans dimension ν intervienne dans la caractérisation de l'amplitude des oscillations.

Partons d'une particule préparée dans la fonction de Bloch $|\psi_{q_{\text{in}}}\rangle$. Les résultats généraux obtenus au chapitre précédent s'écrivent dans cette limite

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\Phi(t)} \sum_j e^{ijaq(t)} |w_j\rangle, \quad (5.46)$$

où $q(t) = q_{\text{in}} + Ft/\hbar$ comme en (5.8) et où la phase Φ correspond à la phase dynamique :

$$\Phi(t) = \Phi(0) + \frac{1}{\hbar} \int_0^t E[q(t')] dt' = \frac{\nu}{2} \{\sin[aq(t)] - \sin[aq_{\text{in}}]\}. \quad (5.47)$$

Il est bien clair que dans cette limite des liaisons fortes, on a négligé *de facto* toutes les transitions interbandes étudiées plus haut. L'hypothèse de suivi adiabatique est donc implicite dans toute cette section.

4-2 Opérateur d'évolution et oscillations dans l'espace réel

Dans l'approximation des liaisons fortes, l'écriture de l'opérateur d'évolution est remarquablement simple, aussi bien dans la base des fonctions de Bloch que dans la base des fonctions de Wannier. Les calculs sont détaillés dans l'article de Hartmann et al. (2004), et nous donnons ici simplement les résultats essentiels.

Dans la base des fonctions de Bloch, l'opérateur d'évolution se déduit immédiatement de (5.46) :

$$\langle \psi_{q'} | \hat{U}(t) | \psi_q \rangle = \delta(q' - q - Ft/\hbar) e^{-i\nu[\sin(aq') - \sin(aq)]/2}. \quad (5.48)$$

Dans la base des fonctions de Wannier, le calcul est un peu plus long mais ne présente pas de difficulté de principe. En reportant l'expression des fonctions de Wannier en fonction des ondes de Bloch, on arrive à

$$\langle w_{j'} | \hat{U}(t) | w_j \rangle = e^{i(j+j')\omega_B t/2} \mathcal{J}_{j'-j}[\nu \sin(\omega_B t/2)]. \quad (5.49)$$

La périodicité des oscillations de Bloch est manifeste sur chacune de ces deux expressions.

Nous pouvons profiter de l'expression explicite (5.49) pour étudier le mouvement dans l'espace réel d'un paquet d'ondes. Nous allons passer en revue les deux cas limites d'un paquet d'ondes initial très localisé ou au contraire s'étalant sur de nombreux sites.

Dans le cas d'un état initial n'occupant qu'un seul site, par exemple l'état $|w_0\rangle$, le mouvement correspond à une « respiration » du paquet d'ondes, se faisant symétriquement par rapport au point de départ. La probabilité $P(j)$ de trouver la particule sur le site $|w_j\rangle$ à l'instant t est obtenue directement à partir de (5.49) :

$$P(j) = |\mathcal{J}_j[\nu \sin(\omega_B t/2)]|^2 \quad (5.50)$$

L'extension du paquet d'ondes est maximale après une demi-oscillation ($\sin(\omega_B t/2) = \pm 1$) et elle est typiquement de l'ordre de $\Delta j \sim \nu$ sites.

Prenons maintenant le cas d'un paquet d'ondes initial de grande extension, et choisissons une distribution gaussienne pour l'amplitude de probabilité d'occupation du site $|w_j\rangle$:

$$\langle w_j | \Psi(0) \rangle \propto e^{-j^2/4\sigma^2}, \quad \sigma \gg 1. \quad (5.51)$$

On peut alors montrer que l'extension du paquet d'ondes reste à peu près constante dans le temps, et que son centre $j_c(t)$ évolue périodiquement

$$|\langle w_j | \Psi(t) \rangle|^2 \propto e^{-[j-j_c(t)]^2/2\sigma^2}, \quad j_c(t) = \nu \sin^2(\omega_B t/2). \quad (5.52)$$

L'amplitude totale (pic à pic) de l'oscillation est donc de ν sites, comme nous l'avions pressenti lors de la définition de ν , à partir de l'argument de Zener. Nous montrons sur la figure 5.14 deux résultats numériques obtenus par Hartmann et al. (2004) dans ces deux cas limites.

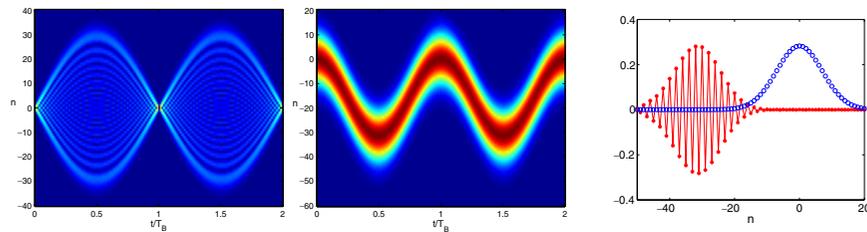


FIGURE 5.14. Oscillations de Bloch dans la limite des liaisons fortes. Gauche et milieu : évolution dans l'espace réel d'un paquet d'ondes pendant deux périodes de Bloch pour $\nu = -31.6$ (force négative). Pour la figure de gauche, l'état initial est la fonction de Wannier $j = 0$. Le mouvement est alors un mouvement de « respiration » symétrique par rapport à $j = 0$. Sur la figure centrale, l'état initial est un paquet gaussien de largeur $\sigma = 5$ et l'évolution ultérieure est essentiellement une oscillation du centre du paquet d'ondes, sans déformation notable. La figure de droite montre la partie réelle de $\langle w_n | \Psi(t) \rangle$, en $t = 0$ (point bleus) et en $t = \pi/\omega_B$ en rouge [figures extraites de Hartmann et al. (2004)].

5 Les échelles de Wannier–Stark

Dans la mesure où l'hamiltonien considéré dans ce chapitre est indépendant du temps, au moins dans la version (5.2) que nous redonnons ici :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - F \hat{x}, \quad (5.53)$$

une approche naturelle au problème des oscillations de Bloch consiste à chercher les états propres de cet hamiltonien, pour en déduire ensuite les différents aspects de la dynamique (Wannier 1960). On note immédiatement que si $\psi(x)$ est état propre pour l'énergie E , alors $\psi(x+a)$ est état propre pour l'énergie $E + Fa = E + \hbar\omega_B$. A chaque état propre est donc associée une échelle d'énergie appelée *échelle de Wannier–Stark*, les barreaux de cette échelle étant espacés de $\hbar\omega_B$.

Cette recherche d'états propres comporte des aspects mathématiques non triviaux : (i) Le spectre de l'hamiltonien est *a priori* un continuum s'étendant de $-\infty$ à $+\infty$, puisque pour toute énergie E , on peut trouver un état asymptotiquement libre pour $x \rightarrow \infty$. Les échelles de Wannier–Stark sont dans ce contexte des résonances, qui apparaissent comme pôles d'une

matrice de diffusion (Gluck et al. 2002). (ii) Cependant le fait de restreindre l'espace de recherche des états propres à une bande (ou un nombre fini de bandes) change radicalement la nature de ce spectre, qui devient complètement discret (Avron et al. 1977; Nenciu 1991).

C'est ce deuxième point de vue que nous allons adopter dans ce qui suit. En toute rigueur, les états de Wannier–Stark que nous allons trouver seront donc des états de durée de vie finie, cette durée de vie étant reliée à la largeur des résonances du problème exact. Cette durée de vie finie est elle-même la signature des transitions Landau-Zener, causant une fuite de l'oscillation de Bloch du fait des transitions vers des bandes supérieures. Mais on peut la négliger si les critères dégagés plus haut pour assurer la validité de l'approximation adiabatique sont vérifiés.

Limitons nous pour simplifier au modèle de liaisons fortes à une bande, avec l'hamiltonien donné en (5.42). Il est immédiat de vérifier³ que l'état

$$|\Phi_j\rangle = \sum_{j' \in \mathbb{Z}} \mathcal{J}_{j'-j}(\nu/2) |w_{j'}\rangle \quad (5.55)$$

est état propre de \hat{H} avec la valeur propre $-jFa$ (Gluck et al. 2002; Hartmann et al. 2004). Cet état $|\Psi_j\rangle$ est centré sur le site j et il s'étend de part et d'autre sur un nombre de sites $\sim \nu/2$. En effet, si $|n| \gg x$, la fonction de Bessel $\mathcal{J}_n(x)$ décroît comme $(x/2)^n/n!$. L'extension de l'état de Wannier–Stark détermine donc *grosso modo* le domaine de l'oscillation de Bloch. On voit bien sur cet exemple simple le caractère mathématique particulier de ce problème : une force F même infinitésimale change radicalement le spectre de l'hamiltonien : il passe d'un continuum borné entre $-2J$ et $2J$ à un ensemble entièrement discret, s'étendant de $-\infty$ à $+\infty$.

La spectroscopie des états de Wannier–Stark est faite soumettant les atomes à une perturbation dépendant du temps à la pulsation ω : $\hat{W}(x, t) = \hat{W}^{(+)}(x) e^{-i\omega t} + \text{c.c.}$. Cette sonde induit une transition de $|\Phi_j\rangle$ vers $|\Phi_{j'}\rangle$, une résonance se produisant à chaque fois que $\omega = (j' - j)\omega_B$, pourvu évidemment que l'élément de matrice $\langle \Phi_{j'} | \hat{W}^{(\pm)}(x) | \Phi_j \rangle$ soit non nul. On obtient *a priori* un spectre symétrique, puisque les échelle de Wannier–Stark

3. Rappelons que les fonctions de Bessel vérifient la relation

$$x(\mathcal{J}_{n+1}(x) + \mathcal{J}_{n-1}(x)) = 2n\mathcal{J}_n(x). \quad (5.54)$$

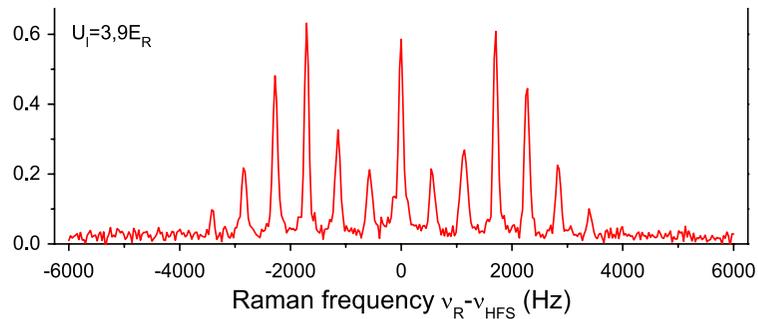


FIGURE 5.15. Spectroscopie Raman des états de Wannier–Stark d’atomes de rubidium dans un réseau optique en présence de gravité. On observe des transitions $|\Phi_j\rangle \rightarrow |\Phi_{j'}\rangle$ allant jusqu’à $|j' - j| = 6$ pour cette valeur de la profondeur du réseau. La fréquence des oscillations de Bloch est $\omega_B/(2\pi) = 569$ Hz pour la longueur d’onde de la lumière choisie pour le réseau (532 nm) [figure extraite de Beaufils et al. (2011)].

s’étendent aussi bien vers les énergies positives que négatives. On pourra consulter l’article de Mendez & Bastard (1993) pour trouver des exemples de spectroscopie des échelles de Wannier–Stark pour des électrons dans des super-réseaux.

Cette méthode spectroscopique est un autre moyen de regarder un même phénomène physique : les oscillations de Bloch comme celles de la figure 5.5 constituent la réponse percussionnelle du système placé hors d’équilibre, alors que cette spectroscopie de Wannier–Stark étudie la réponse du système à l’équilibre quant on le pilote par une sonde de faible amplitude. Lors des premières mises en évidence des oscillations de Bloch avec des atomes froids, le groupe de Christophe Salomon à l’ENS a privilégié la méthode percussionnelle alors que celui de Mark Raizen à Austin a plutôt mis en avant cette méthode spectroscopique (Niu et al. 1996; Wilkinson et al. 1996).

Nous avons reporté sur la figure 5.15 un résultat obtenu récemment dans l’équipe de Franck Pereira dos Santos (Beaufils et al. 2011) [voir aussi Tackmann et al. (2011), Pelle et al. (2013)]. Ce résultat est obtenu pour des atomes de rubidium 87 dans un réseau vertical, la force F étant donc la gravité. Le réseau est formé par une onde stationnaire à la longueur d’onde

de 532 nm, correspondant à une fréquence de Bloch $\omega_B/(2\pi) = 569$ Hz. La profondeur du réseau est d’environ $4 E_r$, ce qui correspond à une largeur de bande de $0.5 E_r \approx 4$ kHz. Le paramètre ν caractérisant le nombre de sites visités lors d’une oscillation ainsi que l’extension de chaque état de Wannier–Stark est $\nu \approx 7$. L’échelle de Wannier–Stark est mesurée en induisant une transition Raman entre deux états internes de l’atome de rubidium $|g_1, \Phi_j\rangle \rightarrow |g_2, \Phi_{j'}\rangle$, avec $|g_F\rangle = |F, m_F = 0\rangle$, séparés de l’écart hyperfin ≈ 6.8 GHz.

Récemment le groupe du Syrte a utilisé ce type de transitions pour construire un interféromètre de type Ramsey et obtenir une mesure précise de ω_B , donc de g . La précision relative obtenue est de 0.9×10^{-5} en une seconde (Pelle et al. 2013), une valeur comparable à celle obtenue à Florence (1.5×10^{-7} en une heure), également par spectroscopie des échelles de Wannier–Stark (Poli et al. 2011). Pour comparaison, la combinaison d’oscillations de Bloch et d’un interféromètre de Ramsey–Bordé a permis à une équipe de l’ONERA d’obtenir une précision meilleure (2×10^{-7} en 300 s seulement) (Charrière et al. 2012), et un pur interféromètre de Ramsey–Bordé au SYRTE a fourni une sensibilité de $0.6 \times 10^{-9} g$ en 3000 s (Louchet-Chauvet et al. 2011), mais au prix d’une chute des atomes de 0.8 mm dans le premier cas et d’une dizaine de cm dans le second. Dans la méthode de la spectroscopie de Wannier–Stark, les atomes restent piégés et la distance qu’ils explorent est de l’ordre de quelques microns seulement : cette méthode est donc bien adaptée à la mesure de forces locales, comme celles de type Casimir–Polder.

6 Perspectives et applications

Les oscillations de Bloch sont devenues un outil important de l’optique quantique et de la physique atomique, utilisé dans de multiples applications allant de la métrologie à l’étude de phénomènes collectifs. Pour terminer ce chapitre, nous allons en discuter brièvement deux.

Mesure de h/m . La première application discutée ici porte sur la mesure de la constante h/m , où m est la masse d’un atome d’une espèce donnée. Cette constante est le « maillon faible » dans la détermination de

la constante de structure fine α par une méthode ne faisant pas appel à l'électrodynamique quantique (indépendante du $g - 2$ de l'électron par exemple) :

$$\alpha^2 = \frac{2R_\infty}{c} \frac{m}{m_e} \frac{h}{m}, \quad (5.56)$$

où R_∞ est la constante de Rydberg et m_e la masse de l'électron, la précision sur les autres termes (R_∞/c et m/m_e) étant notablement meilleure que 10^{-9} .

La méthode utilisée par le groupe de François Biraben au LKB pour mesurer h/m tire parti des oscillations de Bloch pour transférer à des atomes une impulsion $2N\hbar k$, où N est un nombre entier très grand (entre 500 et 1000). L'impulsion initiale des atomes est quasi-nulle, et définie avec une précision bien meilleure que $\hbar k$. La vitesse des atomes est mesurée par une transition Raman qui transfère les atomes d'un état hyperfin g_1 vers un autre état hyperfin g_2 , par un processus "absorption d'un photon de nombre d'onde k_1 - émission d'un photon de nombre d'onde k_2 ". Si les atomes ont une impulsion p avant le transfert Raman, la transition se fera de manière résonante si l'écart en énergie $\hbar\omega$ entre les deux faisceaux créant la transition Raman vérifie :

$$\hbar\omega(p) = \Delta E_{\text{hf}} + \frac{[p + \hbar(k_1 + k_2)]^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}, \quad (5.57)$$

toutes les impulsions étant supposées colinéaires et $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ de sens opposés. La différence entre $\hbar\omega(p_{\text{in}})$ et $\hbar\omega(p_{\text{fi}})$, avec $p_{\text{fi}} = p_{\text{in}} + 2N\hbar k$ conduit à :

$$\omega(p_{\text{fi}}) - \omega(p_{\text{in}}) = 2N \frac{\hbar k(k_1 + k_2)}{m}, \quad (5.58)$$

soit en inversant cette relation

$$\frac{\hbar}{m} = \frac{\omega(p_{\text{fi}}) - \omega(p_{\text{in}})}{2Nk(k_1 + k_2)}. \quad (5.59)$$

Dans la première version de cette expérience, l'impulsion transférée était horizontale et $N \sim 50$ (Battesti et al. 2004). Le groupe du LKB est ensuite passé à une géométrie verticale qui autorise des valeurs plus grandes de N , l'effet de la gravité étant éliminé en comparant l'accélération vers le haut et vers le bas (Cladé et al. 2006). Par ailleurs, pour une meilleure précision sur la détermination des impulsions initiale et finale, l'oscillation de Bloch

a été placée entre deux paires de pulses $\pi/2$ reliant g_1 et g_2 , réalisant ainsi un interféromètre de Ramsey-Bordé (Cadoret et al. 2008; Bouchendira et al. 2011). La précision obtenue sur h/m est désormais $\sim 10^{-9}$ (systématique + statistique), à un niveau comparable à celui des autres facteurs entrant dans l'expression (5.56) pour α .

Notons que ces mesures sont effectuées avec des réseaux extrêmement profonds, $V_0 \sim 100 E_r$, pour lesquels l'efficacité mesurée de l'oscillation de Bloch atteint 99.97% par période. A cette profondeur de réseau, l'effet tunnel entre sites adjacents est complètement négligeable : la formule asymptotique vue en cours 3 donne une largeur de bande de $10^{-6} E_r$, soit un temps tunnel de plusieurs centaines de secondes. Pour l'accélération utilisée dans l'expérience, de l'ordre de 2000 ms^{-2} , le paramètre $\nu = 4J/Fa$ est de l'ordre de 10^{-8} . Les états de Wannier-Stark sont alors quasiment confondus avec les fonctions de Wannier dans chaque puits. Les atomes sont piégés au fond des puits de potentiel créés par l'onde stationnaire et ils suivent adiabatiquement ces puits quand le réseau est mis en mouvement.

Mesure de forces faibles La possibilité de relier directement la force ressentie par les atomes à une fréquence via l'oscillation de Bloch a conduit plusieurs auteurs à proposer d'utiliser ce phénomène pour mesurer des forces faibles, la force de Casimir-Polder au voisinage d'une surface par exemple, voire même rechercher des forces plus exotiques correspondant à une modification de la gravité aux courtes distances. Une première expérience dans cette direction est présentée par Sorrentino et al. (2009). Par ailleurs, l'étude des oscillations de Bloch dans une cavité Fabry-Perot a également fait l'objet d'une étude approfondie (Prasanna Venkatesh et al. 2009).

Nous discutons ici brièvement les résultats obtenus par Carusotto et al. (2005), qui ont étudié la valeur de ω_B au voisinage d'une surface, et l'ont comparé à la valeur qu'elle prendrait pour un réseau vertical dans l'espace libre. Carusotto et al. (2005) proposent d'utiliser un gaz de fermions polarisés, donc sans interaction, pour n'observer que des effets « à une particule ». Par une étude analytique simple, ils montrent que le déplacement

relatif de la pulsation de Bloch vaut

$$\frac{\Delta\omega_B}{\omega_B} = -\frac{0.17}{D^4} (\mu\text{m})^4, \quad (5.60)$$

où D est la distance entre l'atome et la surface. Pour $D = 10$ microns, la force de Casimir (incluant les effets thermiques à 300 K) est environ 10^5 fois plus faible que la gravité, ce qui devrait être détectable puisqu'on a vu que la précision sur la mesure de g avec les oscillations de Bloch pouvait atteindre 10^{-7} après une heure d'intégration. Dans l'article de Carusotto et al. (2005), une étude numérique plus approfondie prend en compte le moyennage du potentiel du fait de l'extension initiale du nuage et de la région explorée pendant l'oscillation (de l'ordre du micron), mais les corrections sont mineures. Par ailleurs le brouillage des oscillations du fait de l'inhomogénéité de ω_B est faible et ne devrait pas compromettre cette approche.

Wolf et al. (2007) ont proposé une approche légèrement différente de celle de Carusotto et al. (2005), en imaginant un interféromètre à partir des états de Wannier–Stark, situés à $j, j \pm 1, \dots$ sites de la paroi, dans deux états internes g_1 et g_2 différents. La sensibilité attendue pour ce type d'expérience est un décalage de 10^{-4} Hz entre deux sites adjacents, la gravité créant quand à elle un décalage typique du kHz pour des atomes de strontium et une longueur d'onde de réseau autour de 700 nm. On trouvera dans l'article de Wolf et al. (2007) une discussion des possibilités de ce dispositif pour la recherche de forces correspondant à une déviation par rapport à la loi de Newton, à la fois en terme d'intensité et de portée de la force pour un potentiel de Yukawa. La conclusion des auteurs est qu'il existe un domaine de paramètres assez étendu que ce type d'expérience pourrait aborder de manière plus précise que les dispositifs existants.

7 Références

- Ashcroft, N. W. & N. D. Mermin (1976), *Solid State Physics*, New York: Holt, Rinehardt and Winston.
- Avron, JE, J Zak, A Grossman & L Gunther (1977), « Instability of continuous spectrum – N -band Stark Ladder », in *Journal of Mathematical Physics* 18.5, 918–921.
- Battesti, R., P. Cladé, S. Guellati-Khélifa, C. Schwob, B. Grémaud, F. Nez, L. Julien & F. Biraben (2004), « Bloch Oscillations of Ultracold Atoms : A Tool for a Metrological Determination of h/m_{Rb} », in *Phys. Rev. Lett.* 92 (25), p. 253001.
- Beaufils, Q., G. Tackmann, X. Wang, B. Pelle, S. Pelisson, P. Wolf & F. Pereira dos Santos (2011), « Laser Controlled Tunneling in a Vertical Optical Lattice », in *Phys. Rev. Lett.* 106 (21), p. 213002.
- Ben Dahan, Maxime, Ekkehard Peik, Jakob Reichel, Yvan Castin & Christophe Salomon (1996), « Bloch Oscillations of Atoms in an Optical Potential », in *Phys. Rev. Lett.* 76 (24), pp. 4508–4511.
- Bloch, F. (July 1929), « Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern », in *Zeitschrift für Physik* 52, pp. 555–600.
- Bouchendira, R., P. Cladé, S. Guellati-Khélifa, F. Nez & F. Biraben (2011), « New Determination of the Fine Structure Constant and Test of the Quantum Electrodynamics », in *Phys. Rev. Lett.* 106 (8), p. 080801.
- Browaeys, A., H. Häffner, C. McKenzie, S. L. Rolston, K. Helmerson & W. D. Phillips (2005), « Transport of atoms in a quantum conveyor belt », in *Phys. Rev. A* 72 (5), p. 053605.
- Cadoret, M., E. de Mirandes, P. Cladé, S. Guellati-Khélifa, C. Schwob, F. Nez, L. Julien & F. Biraben (2008), « Combination of Bloch Oscillations with a Ramsey-Bordé Interferometer : New Determination of the Fine Structure Constant », in *Phys. Rev. Lett.* 101 (23), p. 230801.
- Carusotto, I., L. Pitaevskii, S. Stringari, G. Modugno & M. Inguscio (2005), « Sensitive Measurement of Forces at the Micron Scale Using Bloch Oscillations of Ultracold Atoms », in *Phys. Rev. Lett.* 95 (9), p. 093202.
- Charrière, Renée, Malo Cadoret, Nassim Zahzam, Yannick Bidel & Alexandre Bresson (2012), « Local gravity measurement with the combination of atom interferometry and Bloch oscillations », in *Phys. Rev. A* 85 (1), p. 013639.
- Cladé, P., E. de Mirandes, M. Cadoret, S. Guellati-Khélifa, C. Schwob, F. Nez, L. Julien & F. Biraben (2006), « Determination of the Fine Structure Constant Based on Bloch Oscillations of Ultracold Atoms in a Vertical Optical Lattice », in *Phys. Rev. Lett.* 96 (3), p. 033001.
- Cladé, P., S. Guellati-Khélifa, F. Nez & F. Biraben (2009), « Large Momentum Beam Splitter Using Bloch Oscillations », in *Phys. Rev. Lett.* 102 (24), p. 240402.

- Dahan, Maxime (1997), « Transport et relaxation d'atomes de césium : oscillations de Bloch et résonance de diffusion », PhD thesis, Université Paris 6.
- Denschlag, J Hecker, J E Simsarian, H Häffner, C McKenzie, A Browaeys, D Cho, K Helmerson, S L Rolston & W D Phillips (2002), « A Bose-Einstein condensate in an optical lattice », in *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* 35.14, p. 3095.
- Gluck, M, AR Kolovsky & HJ Korsch (2002), « Wannier-Stark resonances in optical and semiconductor superlattices », in *PHYSICS REPORTS-REVIEW SECTION OF PHYSICS LETTERS* 366.3, 103–182.
- Hartmann, T, F Keck, H J Korsch & S Mossmann (2004), « Dynamics of Bloch oscillations », in *New Journal of Physics* 6.1, p. 2.
- Holthaus, Martin (2000), « Bloch oscillations and Zener breakdown in an optical lattice », in *Journal of Optics B : Quantum and Semiclassical Optics* 2.5, p. 589.
- Kling, Sebastian, Tobias Salger, Christopher Grossert & Martin Weitz (2010), « Atomic Bloch-Zener Oscillations and Stückelberg Interferometry in Optical Lattices », in *Phys. Rev. Lett.* 105 (21), p. 215301.
- Louchet-Chauvet, Anne, Tristan Farah, Quentin Bodart, André Clairon, Arnaud Landragin, Sébastien Merlet & Franck Pereira Dos Santos (2011), « The influence of transverse motion within an atomic gravimeter », in *New Journal of Physics* 13.6, p. 065025.
- Mendez, Emilio E. & Gérald Bastard (1993), « Wannier-Stark Ladders and Bloch Oscillations in Superlattices », in *Physics Today* 46.6, pp. 34–42.
- Messiah, A. (2003), *Mécanique quantique*, vol. II, Paris: Dunod.
- Müller, Holger, Sheng-wei Chiow, Sven Herrmann & Steven Chu (2009), « Atom Interferometers with Scalable Enclosed Area », in *Phys. Rev. Lett.* 102 (24), p. 240403.
- Nenciu, G. (1991), « Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields : rigorous justification of the effective Hamiltonians », in *Rev. Mod. Phys.* 63 (1), pp. 91–127.
- Niu, Qian & M. G. Raizen (1998), « How Landau-Zener Tunneling Takes Time », in *Phys. Rev. Lett.* 80 (16), pp. 3491–3494.
- Niu, Qian, Xian-Geng Zhao, G. A. Georgakis & M. G. Raizen (1996), « Atomic Landau-Zener Tunneling and Wannier-Stark Ladders in Optical Potentials », in *Phys. Rev. Lett.* 76 (24), pp. 4504–4507.
- Peik, Ekkehard, Maxime Ben Dahan, Isabelle Bouchoule, Yvan Castin & Christophe Salomon (1997), « Bloch oscillations of atoms, adiabatic rapid passage, and monokinetic atomic beams », in *Phys. Rev. A* 55 (4), pp. 2989–3001.
- Pelle, B., A. Hilico, G. Tackmann, Q. Beaufils & F. Pereira dos Santos (2013), « State-labeling Wannier-Stark atomic interferometers », in *Phys. Rev. A* 87 (2), p. 023601.
- Poli, N., F.-Y. Wang, M. G. Tarallo, A. Alberti, M. Prevedelli & G. M. Tino (2011), « Precision Measurement of Gravity with Cold Atoms in an Optical Lattice and Comparison with a Classical Gravimeter », in *Phys. Rev. Lett.* 106 (3), p. 038501.
- Prasanna Venkatesh, B., M. Trupke, E. A. Hinds & D. H. J. O'Dell (2009), « Atomic Bloch-Zener oscillations for sensitive force measurements in a cavity », in *Phys. Rev. A* 80 (6), p. 063834.
- Raizen, Mark, Christophe Salomon & Qian Niu (1997), « New Light on Quantum Transport », in *Physics Today* 50.7, pp. 30–34.
- Roati, G., E. de Mirandes, F. Ferlaino, H. Ott, G. Modugno & M. Inguscio (2004), « Atom Interferometry with Trapped Fermi Gases », in *Phys. Rev. Lett.* 92 (23), p. 230402.
- Sorrentino, F., A. Alberti, G. Ferrari, V. V. Ivanov, N. Poli, M. Schioppo & G. M. Tino (2009), « Quantum sensor for atom-surface interactions below 10 μm », in *Phys. Rev. A* 79 (1), p. 013409.
- Tackmann, G., B. Pelle, A. Hilico, Q. Beaufils & F. Pereira dos Santos (2011), « Raman-laser spectroscopy of Wannier-Stark states », in *Phys. Rev. A* 84 (6), p. 063422.
- Wannier, Gregory H. (1960), « Wave Functions and Effective Hamiltonian for Bloch Electrons in an Electric Field », in *Phys. Rev.* 117 (2), pp. 432–439.
- Wilkinson, S. R., C. F. Bharucha, K. W. Madison, Qian Niu & M. G. Raizen (1996), « Observation of Atomic Wannier-Stark Ladders in an Accelerating Optical Potential », in *Phys. Rev. Lett.* 76 (24), pp. 4512–4515.
- Wilkinson, SR, CF Bharucha, MC Fischer, KW Madison, PR Morrow, Q Niu, B Sundaram & MG Raizen (1997), « Experimental evidence for non-exponential decay in quantum tunnelling », in *NATURE* 387.6633, 575–577.
- Wolf, Peter, Pierre Lemonde, Astrid Lambrecht, Sébastien Bize, Arnaud Landragin & André Clairon (2007), « From optical lattice clocks to the measurement of forces in the Casimir regime », in *Phys. Rev. A* 75 (6), p. 063608.

- Zak, J. (1989), « Berry's phase for energy bands in solids », in *Phys. Rev. Lett.* 62 (23), pp. 2747–2750.
- Zener, C (1934), « A Theory of the Electrical Breakdown of Solid Dielectrics », in *Proc. R. Soc. Lond. A* 145, 523.
- Zenesini, A., H. Lignier, G. Tayebirad, J. Radogostowicz, D. Ciampini, R. Mannella, S. Wimberger, O. Morsch & E. Arimondo (2009), « Time-Resolved Measurement of Landau-Zener Tunneling in Periodic Potentials », in *Phys. Rev. Lett.* 103 (9), p. 090403.
- Zenesini, A., D. Ciampini, O. Morsch & E. Arimondo (2010), « Observation of Stückelberg oscillations in accelerated optical lattices », in *Phys. Rev. A* 82 (6), p. 065601.

Chapitre 6

Topologie dans un réseau : l'exemple des points de Dirac

Sommaire

1	Points de Dirac dans une zone de Brillouin	2
1-1	Relation de dispersion linéaire	2
1-2	Chiralité des points de Dirac	2
2	Le réseau en « mur de briques »	3
2-1	Hamiltonien de Hubbard	3
2-2	Paires de points de Dirac	4
3	Le réseau du graphène	5
3-1	Maille élémentaire et réseau réciproque	5
3-2	Points de Dirac pour le graphène	6
3-3	Remarques complémentaires	7
4	Le graphène en version "atomes froids"	8
4-1	Réalisation du réseau en « mur de briques »	8
4-2	Oscillations de Bloch et points de Dirac	9
4-3	Perspectives	10
5	Références	11

Les points de Dirac jouent un rôle central dans de nombreux phénomènes de la matière condensée. On les rencontre notamment dans le graphène, pour lequel ils confèrent aux électrons de conduction un mouvement ultra-relativiste. Ils apparaissent également dans les isolants topologiques, où ils sont l'origine des états de bord conducteurs.

Un point de Dirac est caractérisé par un contact entre deux bandes avec une relation de dispersion linéaire, ce qui permet d'illustrer plusieurs caractéristiques bien connues de l'équation de Dirac pour des particules de masse nulle, comme le paradoxe de Klein ou le *Zitterbewegung*. Cette relation de dispersion très différente d'un bas de bande habituel (où $E \propto q^2$) se manifeste également en présence d'un champ magnétique, en donnant naissance à un effet Hall quantique entier « anormal ».

L'existence des points de Dirac est une conséquence de la géométrie, ou plutôt de la topologie (au sens défini plus loin) de la structure des bandes. La flexibilité des réseaux optiques a conduit plusieurs auteurs à imaginer des structures de faisceaux lumineux permettant d'obtenir de tels points dans la structure de bande (Zhu et al. 2007; Wunsch et al. 2008; Lee et al. 2009). Nous allons dans ce chapitre dégager d'abord les caractéristiques d'un réseau périodique permettant de faire apparaître des points de Dirac. Nous décrirons ensuite la première mise en évidence de ces points de Dirac avec des atomes froids, faite dans le groupe de T. Esslinger à Zurich (Tarruell et al. 2012).

1 Points de Dirac dans une zone de Brillouin

1-1 Relation de dispersion linéaire

De manière générale, on définit un point de Dirac comme un point \mathbf{q}_D dans la zone de Brillouin où deux bandes se touchent de manière linéaire (figure 6.1). Dans le cas particulier où les deux bandes se touchent de manière isotrope, la relation de dispersion au voisinage de \mathbf{q}_D s'écrit

$$E(\mathbf{q}) = \pm \hbar c |\mathbf{q} - \mathbf{q}_D| + \epsilon_0, \quad (6.1)$$

où c a la dimension d'une vitesse et ϵ_0 est l'énergie au point de contact.

Dans le graphène, le potentiel chimique est égal à ϵ_0 de sorte que le comportement des électrons de conduction permet de simuler l'électrodynamique quantique de fermions de masse nulle. La vitesse de groupe c aux points de Dirac y est environ $1/300^{\text{ème}}$ de la vitesse de la lumière.

La relation de dispersion (6.1) peut se rencontrer dès la dimension 1. Toutefois, l'aspect bi-dimensionnel du graphène ajoute une deuxième caractéristique essentielle, la chiralité de ces points de Dirac, que nous allons maintenant décrire.

1-2 Chiralité des points de Dirac

Pour donner une intuition de l'origine de cette chiralité, considérons un réseau dans un modèle de liaisons fortes, tel que la maille du réseau

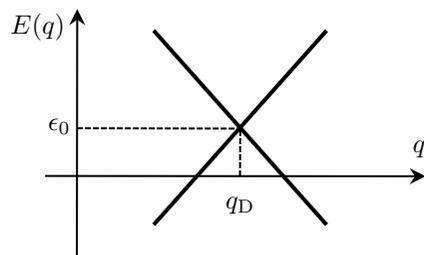


FIGURE 6.1. Point de Dirac

comporte deux sites A et B . Supposons de plus qu'une particule sur un site A (resp. B) ne peut sauter que sur un site de type B (resp. A), ce site appartenant ou bien à la même cellule, ou bien à une cellule adjacente (voir figures 6.2 et 6.4).

Si l'énergie sur site est la même pour A et B ($E_A = E_B \equiv \epsilon_0$), on sait (cf. cours 3) que l'hamiltonien de Hubbard dans l'espace réciproque $\hat{H}(\mathbf{q})$ est une matrice 2×2 du type :

$$\hat{H}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & f^*(\mathbf{q}) \\ f(\mathbf{q}) & \epsilon_0 \end{pmatrix}, \quad (6.2)$$

dont les énergies propres sont

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) = \epsilon_0 \pm |f(\mathbf{q})|. \quad (6.3)$$

Nous déterminerons un peu plus loin la valeur explicite de la fonction $f(\mathbf{q})$ pour deux types de réseaux, le réseau carré en forme de « mur de briques » et le réseau hexagonal du graphène.

Plaçons-nous à deux dimensions, de sorte que \mathbf{q} est un vecteur (q_x, q_y) . Un point de Dirac \mathbf{q}_D est un point de la zone de Brillouin pour lequel

$$f(\mathbf{q}_D) = 0, \quad (6.4)$$

de sorte que les deux énergies propres (6.3) sont dégénérées. Posons au voisinage de \mathbf{q}_D

$$\delta \mathbf{q} = \mathbf{q} - \mathbf{q}_D = \delta q (\cos \varphi \mathbf{u}_x + \sin \varphi \mathbf{u}_y) \quad (6.5)$$

et supposons que sur ce voisinage, on a le développement

$$f(\mathbf{q}) = \hbar c (\delta q_x \pm i \delta q_y) = \hbar c \delta q e^{\pm i \varphi}, \quad (6.6)$$

Nous verrons un peu plus loin que ce développement au voisinage d'un zéro est, moyennant une généralisation très simple, naturel pour la fonction complexe $f(q_x, q_y)$. Au voisinage de \mathbf{q}_D , l'hamiltonien (6.2) s'écrit donc

$$f(\mathbf{q}) = \hbar c (\delta q_x + i \delta q_y) : \quad \hat{H}(\mathbf{q}) = \epsilon_0 \hat{1} + \hbar c \hat{\sigma} \cdot \delta \mathbf{q}, \quad (6.7)$$

$$f(\mathbf{q}) = \hbar c (\delta q_x - i \delta q_y) : \quad \hat{H}(\mathbf{q}) = \epsilon_0 \hat{1} + \hbar c \hat{\sigma} \cdot \delta \mathbf{q}^*, \quad (6.8)$$

où les $\hat{\sigma}_j$ ($j = x, y$) sont les matrices de Pauli

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.9)$$

L'hamiltonien (6.7–6.8) est formellement identique à celui d'une particule de spin 1/2 au voisinage d'un zéro du champ magnétique. Dans la base $|+\rangle_z, |-\rangle_z$ de $\hat{\sigma}_z$, c'est-à-dire la base des fonctions de Wannier $|w_A\rangle, |w_B\rangle$ centrées sur les sites A et B , les états propres $|\chi_{\pm}\rangle$ de (6.7–6.8) associés aux énergies $E_{\pm}(\mathbf{q})$ données en (6.3) sont du type :

$$f(\mathbf{q}) = \hbar c(\delta q_x + i\delta q_y) : \quad |\chi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (6.10)$$

$$f(\mathbf{q}) = \hbar c(\delta q_x - i\delta q_y) : \quad |\chi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \quad (6.11)$$

La chiralité due au terme $e^{\pm i\varphi}$ apparaît clairement sur ces expressions. Plus précisément, si on considère un cercle centré sur le point de Dirac et qu'on suit adiabatiquement un des deux états propres $|\chi_{\pm}\rangle$ sur ce cercle, la phase géométrique accumulée vaut $\pm\pi$, correspondant au changement de signe bien connu d'un spin 1/2 quand il effectue une rotation de 2π .

2 Le réseau en « mur de briques »

Avant de présenter le cas du graphène, avec son réseau hexagonal régulier, considérons le réseau en mur de briques représenté sur la figure 6.2b, qui est légèrement plus simple à traiter mathématiquement et qui correspond à ce qui a été réalisé par le groupe de Zurich. Ce réseau est obtenu en partant d'un réseau carré de maille a (fig. 6.2a) et en supprimant un lien horizontal sur deux, les liens verticaux étant tous conservés¹. Notons qu'on peut passer de ce mur de briques au graphène par une déformation continue en prenant des liaisons articulées aux nœuds des réseaux.

1. Un maçon nous dirait que pour un vrai mur de briques, il faudrait intervertir lignes horizontales et verticales, mais nous prenons ici la convention utilisée par Tarruell et al. (2012).

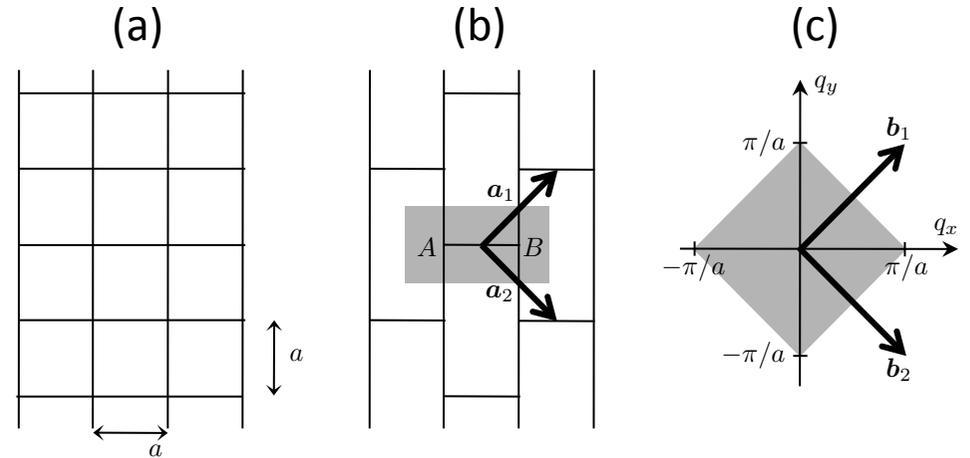


FIGURE 6.2. Réseau « mur de briques ». (a) Réseau carré de côté a . (b) On obtient le réseau « mur de briques » en supprimant un lien sur deux selon la direction horizontale. (c) Espace réciproque et zone de Brillouin.

2-1 Hamiltonien de Hubbard

La maille élémentaire de ce réseau, représentée en grisé sur la figure 6.2b comporte deux sites, notés A et B . On génère le réseau en copiant la cellule unité selon le réseau de Bravais carré

$$\mathcal{B} \equiv \{r_j = j_1 \mathbf{a}_1 + j_2 \mathbf{a}_2, j_1, j_2 \in \mathbb{Z}\} \quad (6.12)$$

avec les deux vecteurs dans la base cartésienne $\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y$:

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (6.13)$$

Le réseau de Bravais de l'espace réciproque est également carré, engendré par les deux vecteurs

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (6.14)$$

Les vecteurs $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ vérifient bien la relation générale

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{i,j}. \quad (6.15)$$

La zone de Brillouin correspondante est représentée en grisé sur la figure 6.2c.

Plaçons-nous dans le régime des liaisons fortes et notons $-J_x, -J_y$ les éléments de matrice tunnel le long des directions horizontale et verticale de la figure 6.2b. Rappelons les règles d'écriture de l'hamiltonien de Hubbard, déjà vues en cours 4. On sait en toute généralité que les fonctions propres de l'hamiltonien sont les fonctions de Bloch $\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$. Le vecteur \mathbf{q} peut être choisi dans la zone de Brillouin et $u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ est une fonction périodique sur le réseau. Dans la limite des liaisons fortes et en se limitant à la bande fondamentale, l'ensemble des fonctions périodiques sur le réseau est un espace vectoriel de dimension 2, chaque fonction étant caractérisée par deux coefficients (α, β) :

$$|u_{\mathbf{q}}\rangle = \alpha_{\mathbf{q}} \left(\sum_j |w_{A,j}\rangle \right) + \beta_{\mathbf{q}} \left(\sum_j |w_{B,j}\rangle \right), \quad (6.16)$$

où $|w_{A/B,j}\rangle$ sont les fonctions de Wannier centrées sur les nœuds A/B de la cellule j . La fonction de Bloch correspondante s'écrit quant à elle

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{r}_j\cdot\mathbf{q}} (\alpha_{\mathbf{q}} |w_{A,j}\rangle + \beta_{\mathbf{q}} |w_{B,j}\rangle), \quad (6.17)$$

notre but étant de trouver les valeurs $(\alpha_{\mathbf{q}}, \beta_{\mathbf{q}})$ pour que $|\psi_{\mathbf{q}}\rangle$ soit état propre de l'hamiltonien de Hubbard.

Écrivons explicitement cet hamiltonien. Les énergies de la particule sur un site A ou sur un site B sont égales, et notées E_0 . L'hamiltonien de Hubbard contient par hypothèse uniquement les termes de saut entre proches voisins. Quand un électron est sur un atome de type B , il peut uniquement sauter vers un site A , qui peut être celui de sa propre cellule (j , saut horizontal) ou celui des deux cellules adjacentes ($j + \mathbf{a}_1$ ou $j + \mathbf{a}_2$, sauts verticaux). Il en va de même pour un électron sur le site A de la cellule j , qui peut sauter vers (B, j) , $(B, j - \mathbf{a}_1)$ et $(B, j - \mathbf{a}_2)$.

Posons que $|\psi_{\mathbf{q}}\rangle$ défini par (6.17) est état propre de cet hamiltonien de Hubbard avec la valeur propre $E(\mathbf{q})$, et projetons cette équation aux valeurs propres sur une cellule donnée j . On arrive au système 2×2 pour les

coefficients $(\alpha_{\mathbf{q}}, \beta_{\mathbf{q}})$:

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{q}) \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{q}} \\ \beta_{\mathbf{q}} \end{pmatrix} = E(\mathbf{q}) \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{q}} \\ \beta_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}, \quad (6.18)$$

où l'hamiltonien de Hubbard dans l'espace réciproque a la structure proposée en (6.2). En particulier le coefficient $f(\mathbf{q})$ correspond au couplage d'un site B donné (j_x, j_y) avec ses trois voisins de type A : l'un de ses voisins appartient à la même cellule unité (lien horizontal J_x), le deuxième à la cellule $(j_x + 1, j_y)$ et le troisième à la cellule $(j_x, j_y + 1)$ (liens verticaux J_y). On a donc

$$f(\mathbf{q}) = -J_x - J_y (e^{ia_1\cdot\mathbf{q}} + e^{ia_2\cdot\mathbf{q}}) = -J_x - 2J_y e^{iaq_x} \cos(aq_y). \quad (6.19)$$

Les points de Dirac, s'ils existent, correspondent aux zéros de cette fonction et sont donc obtenus pour

$$\sin(aq_x) = 0 \quad \Rightarrow \quad q_x = 0 \quad \text{mod. } \pi/a \quad (6.20)$$

$$\cos(aq_x) \cos(aq_y) = -\frac{J_x}{2J_y}. \quad (6.21)$$

2-2 Paires de points de Dirac

L'existence de solutions possibles au système d'équations (6.20-6.21) dépend de la valeur du rapport $J_x/(2J_y)$:

- Si $J_x > 2J_y$, ce système n'a pas de solution. La fonction $f(\mathbf{q})$ ne s'annule en aucun point de la zone de Brillouin et il n'y a pas de points de Dirac. Les deux sous-bandes $E_0 \pm |f(\mathbf{q})|$ sont séparées par un gap non nul.
- Si $J_x = 2J_y$, la fonction $f(\mathbf{q})$ s'annule aux quatre coins de la zone de Brillouin. Il s'agit d'un zéro d'ordre deux selon la direction y , donc pas d'un point de Dirac au sens strict du terme.
- Si $J_x < 2J_y$, la fonction $f(\mathbf{q})$ s'annule sur deux points de Dirac situés symétriquement sur l'axe vertical $q_x = 0$, aux points tels que $\cos(aq_y) = -J_x/(2J_y)$ (figure 6.3). Quand J_x devient très petit devant J_y , ces points se rapprochent de $q_y = \pm\pi/(2a)$.

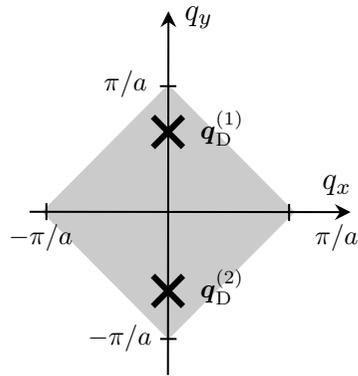


FIGURE 6.3. Positions des deux points de Dirac pour le réseau en « mur de briques », dans le cas $J_x < 2J_y$.

Plaçons-nous dans le cas $J_x < 2J_y$ et développons la fonction $f(\mathbf{q})$ au voisinage d'un point de Dirac \mathbf{q}_D . On trouve :

$$f(\mathbf{q}) \approx iaJ_x [\delta q_x + i \delta q_y \tan(aq_{D,y})], \quad (6.22)$$

ce qui est voisin de la forme particulière supposée en (6.6). Plus précisément, puisque $\tan(aq_{D,y})$ n'a pas le même signe pour les deux points de Dirac (il est négatif pour le point situé dans la partie supérieure de la zone de Brillouin, positif pour l'autre), les deux points de Dirac ont des chiralités opposées. On note que la fonction $f(\mathbf{q})$ n'est généralement pas isotrope autour des points de Dirac, sauf si $\tan(aq_{D,y}) = 1$, ce qui est obtenu pour $J_x = \sqrt{2} J_y$.

Le fait que les points de Dirac apparaissent par paires est une conséquence directe de l'invariance par renversement du temps du problème considéré. Nous avons vu au cours 2 que cette invariance entraîne que si $\psi_{\mathbf{q}}$ est état propre pour la valeur propre $E(\mathbf{q})$, alors $\psi_{-\mathbf{q}} \propto \psi_{\mathbf{q}}^*$ est état propre pour la même valeur propre. On en déduit que si $\mathbf{q}_D^{(1)}$ est un point de Dirac associé à une certaine chiralité, $\mathbf{q}_D^{(2)} = -\mathbf{q}_D^{(1)}$ est également un point de Dirac, avec une chiralité opposée du fait de la conjugaison complexe intervenant dans $\psi_{-\mathbf{q}} \propto \psi_{\mathbf{q}}^*$.

Quand on diminue continûment le paramètre J_x/J_y et qu'on passe sur la valeur 2, les points de Dirac apparaissent superposés l'un sur l'autre en un coin de la zone de Brillouin, ce qui est encore compatible avec $\mathbf{q}_D^{(2)} = -\mathbf{q}_D^{(1)}$, puisque $\mathbf{q}_D^{(2)}$ et $\mathbf{q}_D^{(1)}$ diffèrent alors d'un vecteur du réseau réciproque (Montambaux et al. 2009).

3 Le réseau du graphène

L'étude des points de Dirac du graphène se fait d'une manière très voisine de ce que nous venons de faire pour le réseau en « mur de briques », et nous nous contenterons donc de présenter les grandes lignes de la démarche à suivre pour les trouver.

3-1 Maille élémentaire et réseau réciproque

Le graphène est obtenu en plaçant un atome de carbone par site d'une structure hexagonale de côté a . La cellule unité de cette structure comporte deux sites, notés A et B sur la figure 6.4. On génère le réseau hexagonal en copiant cette cellule unité (représentée en grisé sur la figure) sur tous les nœuds du réseau de Bravais triangulaire

$$\mathcal{B} \equiv \{\mathbf{r}_j = j_1 \mathbf{a}_1 + j_2 \mathbf{a}_2, j_1, j_2 \in \mathbb{Z}\} \quad (6.23)$$

où les vecteurs $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ sont définis par (voir aussi la figure 6.4) :

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (6.24)$$

Le réseau réciproque $\mathcal{B}' \equiv \{\mathbf{Q}_j = j_1 \mathbf{b}_1 + j_2 \mathbf{b}_2, j_1, j_2 \in \mathbb{Z}\}$ est engendré par les vecteurs

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (6.25)$$

Le réseau réciproque est donc également triangulaire.

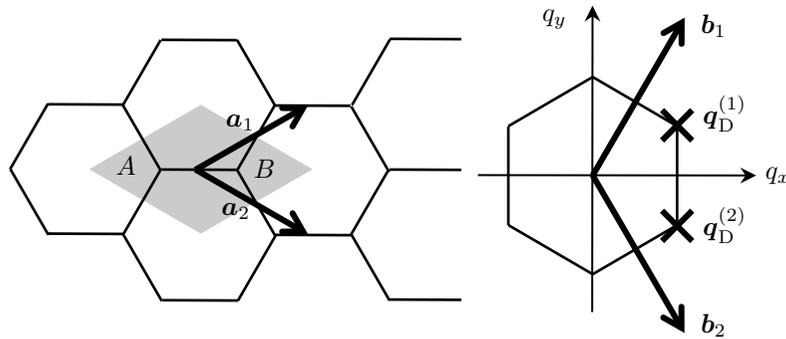


FIGURE 6.4. Gauche : structure hexagonale du graphène. Cette structure se compose d'une cellule unité à deux sites A et B , qu'on répète en la disposant sur les nœuds d'un réseau triangulaire $j_1\mathbf{a}_1 + j_2\mathbf{a}_2$, $j_1, j_2 \in \mathbb{Z}$. Une cellule unité est représentée en grisé. Droite : réseau réciproque pour le graphène, $j_1\mathbf{b}_1 + j_2\mathbf{b}_2$, $j_1, j_2 \in \mathbb{Z}$. La zone de Brillouin est hexagonale et les points de Dirac sont les sommets de cet hexagone.

Zone de Brillouin. Rappelons que les fonctions de Bloch $|\psi_{\mathbf{q}}\rangle$ sont déterminées en leur imposant d'être états propres simultanément de l'hamiltonien et des opérateurs de translation $\hat{T}_{\mathbf{a}_1}$ et $\hat{T}_{\mathbf{a}_2}$ laissant le réseau invariant. Les valeurs propres associées à ces deux opérations de translation sont notées $e^{i\theta_1} = e^{i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{q}}$ et $e^{i\theta_2} = e^{i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{q}}$. La zone de Brillouin est un domaine² centré en $\mathbf{q} = 0$, pour lequel un et seul vecteur \mathbf{q} correspond à un couple (θ_1, θ_2) . C'est un hexagone de côté $4\pi/(3\sqrt{3}a)$, dont l'orientation est pivotée de 30° par rapport aux hexagones du réseau dans l'espace réel (figure 6.4).

3-2 Points de Dirac pour le graphène

Par un raisonnement identique à celui mené pour le réseau « mur de briques », on trouve que l'hamiltonien de Hubbard dans l'espace réci-

² Plus précisément, on la définit comme la maille de Wigner-Seitz centrée en $\mathbf{q} = 0$ du réseau réciproque.

proque a la forme annoncée en (6.2) (Wallace 1947)

$$\hat{H}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} E_0 & f^*(\mathbf{q}) \\ f(\mathbf{q}) & E_0 \end{pmatrix}, \quad (6.26)$$

avec la fonction $f(\mathbf{q})$ définie par

$$f(\mathbf{q}) = -J(1 + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2}). \quad (6.27)$$

Cherchons les zéros de $f(\mathbf{k})$, en annulant à la fois la partie réelle f_r et la partie imaginaire f_i :

$$\text{Annulation de } f_r(\mathbf{q}) \quad : \quad 1 + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) = 0,$$

$$\text{Annulation de } f_i(\mathbf{q}) \quad : \quad \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) = 0. \quad (6.28)$$

Deux types de zéros apparaissent. Le premier correspond à

$$\begin{aligned} \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) &= \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) = -\frac{1}{2}, \\ \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) &= -\sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) = -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{aligned} \quad (6.29)$$

c'est-à-dire

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1 = \frac{4\pi}{3} \bmod 2\pi, \quad \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2 = \frac{2\pi}{3} \bmod 2\pi. \quad (6.30)$$

Le deuxième type de zéro est donné par

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1 = \frac{2\pi}{3} \bmod 2\pi, \quad \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2 = \frac{4\pi}{3} \bmod 2\pi. \quad (6.31)$$

En écrivant le vecteur \mathbf{q} solution sous la forme $\mathbf{q} = \alpha_1\mathbf{b}_1 + \alpha_2\mathbf{b}_2$, on en déduit immédiatement les coordonnées (α_1, α_2) de ces points de Dirac dans l'espace réciproque. Il y a deux points de Dirac (un de chaque chiralité) dans la zone de Brillouin, et ces points sont localisés en

$$\mathbf{q}_D^{(1)} = \frac{1}{3}(2\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}(\sqrt{3}\mathbf{u}_x + \mathbf{u}_y), \quad (6.32)$$

$$\mathbf{q}_D^{(2)} = \frac{1}{3}(\mathbf{b}_1 + 2\mathbf{b}_2) = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}(\sqrt{3}\mathbf{u}_x - \mathbf{u}_y). \quad (6.33)$$

Ces points sont situés en bord de zone de Brillouin, aux sommets de l'hexagone limitant cette zone (figure 6.4). Notons que chacun des six sommets

de l'hexagone limitant la zone de Brillouin est un point de Dirac. Toutefois, il faut faire attention au double comptage. Un vecteur \mathbf{q} et un vecteur \mathbf{q}' différant d'un vecteur du réseau réciproque correspondent à un seul état de Bloch. C'est le cas pour les quatre autres sommets de l'hexagone correspondant à la zone de Brillouin : ils se déduisent de ceux marqués sur la figure 6.4 par soustraction de \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 et $\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$. Par ailleurs, on peut vérifier que la fonction $f(\mathbf{q})$ est au premier ordre isotrope autour de ces deux zéros, avec

$$f(\mathbf{q}) \approx i \frac{3Ja}{2} (\delta q_x \pm i \delta q_y), \quad (6.34)$$

ce qui correspond (au facteur global i près) à la forme annoncée en (6.6). La vitesse c est donnée ici par $c = 3Ja/2$ et elle est de l'ordre de 10^6 m/s pour le graphène (Castro Neto et al. 2009).

3-3 Remarques complémentaires

La chiralité des zéros de $f(\mathbf{q})$. Nous avons vu dans les exemples qui précèdent que la recherche des points de Dirac se ramène à celle des zéros d'une fonction $f(\mathbf{q})$ à deux variables réelles, q_x et q_y , à valeurs dans le plan complexe. Les zéros d'une telle fonction ont généralement une structure de vortex, avec un enroulement de phase positif ou négatif. C'est cet enroulement de phase qui vient donner sa chiralité à un point de Dirac.

Précisons l'origine de cet enroulement de manière très qualitative. Selon la valeur de \mathbf{q} , la partie réelle $f_r(\mathbf{q})$ de $f(\mathbf{q})$ peut être positive ou négative. Les domaines du plan (q_x, q_y) correspondant à une valeur positive de f_r et ceux correspondant à une valeur négative de f_r sont séparés par des lignes (ouvertes ou fermées) le long desquelles f_r s'annule. Il en va de même pour la partie imaginaire f_i , qui s'annule le long d'autres lignes du plan (q_x, q_y) . Un zéro \mathbf{q}_D de la fonction complexe $f(\mathbf{q})$ correspond à un point où deux lignes de zéros, l'une pour f_r , l'autre pour f_i , se croisent. Ce croisement définit généralement³ quatre quadrants, correspondant aux 4 choix possibles pour les signes du couple $(f_r, f_i) : (+, +), (+, -), (-, -), (-, +)$. Selon qu'on trouve cet ordre en tournant autour du zéro dans le sens direct ou dans le sens rétrograde, on a une chiralité ou son opposé pour le point de Dirac.

3. On peut imaginer des solutions plus rares, où le zéro de f_r ou f_i est double, mais nous décrivons ici uniquement la situation « standard ».

Effet Hall quantique anormal. La chiralité des points de Dirac a d'importantes conséquences. Citons-en simplement une ici. Quand on place un tel matériau dans un champ magnétique, les niveaux d'énergie (niveaux de Landau) sont repérés par un entier n et varient en $E_n \propto \sqrt{n}$. En particulier, il y a un niveau d'énergie nul, ce qui est très différent du cas ordinaire où on trouve $E_n \propto (n + 1/2)$. L'apparition de cet état d'énergie nulle peut s'interpréter semi-classiquement en évaluant l'action sur une trajectoire cyclotron dans l'espace réciproque encerclant le point de Dirac. À l'action habituelle vient s'ajouter la phase de Berry associée à la chiralité du point de Dirac, qui remplace $n + 1/2$ par $n + 1/2 \pm 1/2$ (Mikitik & Sharlai 1999); ceci permet en particulier l'apparition d'un état d'énergie nulle, qui joue un rôle important dans l'effet Hall quantique anormal observé sur le graphène (Zhang et al. 2005; Novoselov et al. 2005).

Robustesse des points de Dirac. Supposons que les paramètres du réseau soient choisis tels que la fonction $f(\mathbf{q})$ ait effectivement 2 (ou 4, 6, ...) zéros dans la zone de Brillouin. Quand les paramètres du réseau sont modifiés en maintenant une même énergie pour les deux sites, seule la fonction $f(\mathbf{q})$ change. Mais les zéros de $f(\mathbf{q})$ sont protégés topologiquement par leur chiralité : en d'autres termes, les deux courbes définissant $f_r(\mathbf{q}) = 0$ et $f_i(\mathbf{q}) = 0$ vont continuer à se croiser (en un autre point) si on modifie légèrement ces courbes. La seule manière de faire disparaître les croisements dans ce contexte est de faire fusionner deux zéros, l'un de chiralité positive et l'autre de chiralité négative, en réalisant une situation où les deux courbes $f_r(\mathbf{q}) = 0$ et $f_i(\mathbf{q}) = 0$ deviennent tangentes l'une à l'autre. Pour un remplissage des états de type graphène, ce cas particulier de fusion de points de Dirac correspond à une transition topologique entre une phase semi-métallique et un isolant de bande, et il est étudié en détail par Montambaux et al. (2009).

Énergies sur site. Si les points de Dirac résistent à une modification (légère) de la fonction $f(\mathbf{k})$, il n'en va pas de même vis à vis d'une dissymétrie entre les deux nœuds A et B . Si on modifie l'hamiltonien de Hubbard en donnant une énergie $E_0 + \Delta$ (resp. $E_0 - \Delta$) aux sites A (resp. B), alors les

valeurs propres de

$$\hat{H}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} E_0 + \Delta & f^*(\mathbf{q}) \\ f(\mathbf{q}) & E_0 - \Delta \end{pmatrix}, \quad (6.35)$$

deviennent

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) = E_0 \pm [|f(\mathbf{q})|^2 + \Delta^2]^{1/2} \quad (6.36)$$

et on retrouve deux sous-bandes « ordinaires », séparées par un gap 2Δ et sans propriété topologique remarquable. Si une telle dissymétrie est difficile à créer sur du graphène réel (voir par exemple Montambaux et al. (2009) et refs. in), elle apparaît en revanche aisément dans des réseaux optiques, comme nous allons le voir ci-dessous.

4 Le graphène en version "atomes froids"

Le groupe de Tilman Esslinger à Zurich a récemment réalisé un réseau optique de type « mur de briques », dans lequel il a pu mettre en évidence des points de Dirac et montrer que leurs positions étaient contrôlables grâce au paramètre J_x/J_y . L'existence de ces points de Dirac a été montrée grâce aux oscillations de Bloch, les particules étant transférées avec une forte probabilité de la bande inférieure vers la bande supérieure quand elles passent au voisinage de ces points de contact.

4-1 Réalisation du réseau en « mur de briques »

Le potentiel lumineux utilisé résulte de la superposition de plusieurs ondes lumineuses stationnaires. L'onde la plus intense est une onde stationnaire selon la direction x créant le potentiel

$$V_1(\mathbf{r}) = -V_{\bar{X}} \cos^2(kx + \theta/2) \quad (6.37)$$

où θ est un paramètre que l'on peut ajuster en variant légèrement la fréquence de cette onde. On superpose un réseau optique dans le plan xy formé par deux ondes lumineuses stationnaires selon les directions x et y ,

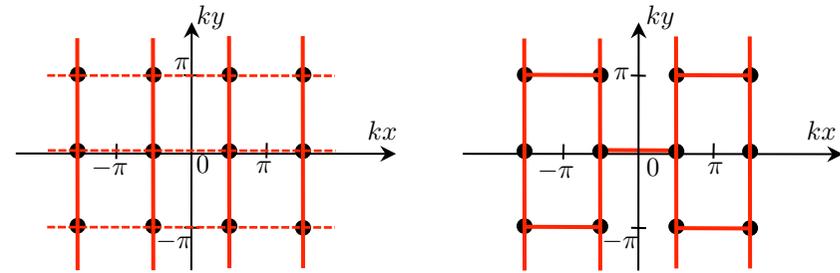


FIGURE 6.5. Construction d'un réseau en « mur de briques » (Tarruell et al. 2012). en Gauche : réseau carré obtenu en superposant $V_1(\mathbf{r}) = -V_{\bar{X}} \sin^2(kx)$ et $V_2^{(a)} = -V_Y \cos^2(ky)$. Droite : augmentation ou diminution des coefficients tunnels horizontaux par le terme $V_2^{(b)}(\mathbf{r}) = -2\sqrt{V_{\bar{X}}V_Y} \cos(kx) \cos(ky)$. Des valeurs typiques sont (en unité de E_r) : $V_{\bar{X}} = 4.0$, $V_Y = 2.0$, $V_X = 0.3$.

verrouillées en phase l'une par rapport à l'autre⁴

$$V_2(\mathbf{r}) = -V_Y \cos^2(ky) - 2\sqrt{V_{\bar{X}}V_Y} \cos(kx) \cos(ky) - V_X \cos^2(kx) \quad (6.38)$$

Les intensités de ces ondes sont choisies telles que

$$V_X \ll \sqrt{V_{\bar{X}}V_Y} \ll V_Y < V_{\bar{X}}. \quad (6.39)$$

En pratique, seuls les trois termes les plus importants sont pertinents pour la formation du réseau recherché et nous négligerons le quatrième terme, $-V_X \cos^2(kx)$, dans notre discussion.

Prenons pour commencer $\theta = \pi$, soit $V_1(\mathbf{r}) = -V_{\bar{X}} \sin^2(kx)$; ce paramètre sera varié ultérieurement, notamment pour obtenir les résultats de la figure 6.8. Avec seulement les termes en V_1 et en $V_2^{(a)} = -V_Y \cos^2(ky)$, on fabrique un réseau carré dont les sites sont les points

$$kx = \pi/2 \text{ [modulo } \pi], \quad ky = 0 \text{ [modulo } \pi]. \quad (6.40)$$

4. Dans l'article de Tarruell et al. (2012), le terme en $\sqrt{V_{\bar{X}}V_Y}$ est réduit par un facteur multiplicatif $\alpha \approx 0.9$ qui caractérise la visibilité de l'interférence entre l'onde stationnaire selon y et celle selon x . Nous omettons ici ce coefficient qui ne joue pas de rôle au niveau de notre description semi-quantitative.

Notons que l'effet tunnel est plus faible selon x que selon y puisque $V_{\bar{X}} > V_{\bar{Y}}$. Le terme en $V_2^{(b)}(\mathbf{r}) = -2\sqrt{V_{\bar{X}}V_{\bar{Y}}}\cos(kx)\cos(ky)$ va venir moduler certains coefficients tunnels (figure 6.5) :

- Les liens verticaux sont centrés sur des points tels que $kx = \pi/2$ modulo π et $ky = \pi/2$ modulo π . Les éléments de matrice tunnels de ces liens sont peu affectés par $V_2^{(b)}$ puisque $V_2^{(b)}(\mathbf{r}) \propto \cos(kx)$ est nul le long de ces liens.
- Les liens horizontaux sont centrés sur des points tels que $kx = 0$ modulo π et $ky = 0$ modulo π . Au centre de ces liens, on a donc $\cos(kx) = \pm 1$ et $\cos(ky) = \pm 1$. Le potentiel $V_2^{(b)}$ y prend une valeur significative et modifie les éléments de matrice tunnel. Deux cas sont possibles :
 - Un lien horizontal centré sur un point tel que $\cos(kx)$ et $\cos(ky)$ sont de même signe (et égaux à ± 1) correspond à une valeur négative de $V_2^{(b)}$ qui vient abaisser la barrière tunnel entre les deux sites concernés par ce lien : l'effet tunnel entre ces deux sites est augmenté.
 - Un lien horizontal centré sur un point tel que $\cos(kx)$ et $\cos(ky)$ sont de signe opposés correspond à une valeur positive de $V_2^{(b)}$ et l'effet tunnel correspondant (déjà faible en absence de $V_2^{(b)}$) est encore diminué.

Au final, on réalise effectivement le réseau en « mur de briques » recherché.

4-2 Oscillations de Bloch et points de Dirac

Pour sonder la position des points de Dirac, la méthode utilisée à Zurich a été d'observer le résultat d'oscillations de Bloch. Ces oscillations se produisent selon la direction x sous l'effet d'une force constante causée par un gradient de champ magnétique. Quand la trajectoire dans l'espace des \mathbf{q} passe au voisinage d'un point de Dirac, l'atome peut avec une forte probabilité être transféré vers la bande supérieure (pour une étude détaillée de cette transition, voir Lim et al. (2012)). Le passage vers la bande excitée peut ensuite être détecté par la technique du *band mapping* présentée au chapitre 2 de ce cours : on éteint adiabatiquement le réseau (durée 0.5 ms)

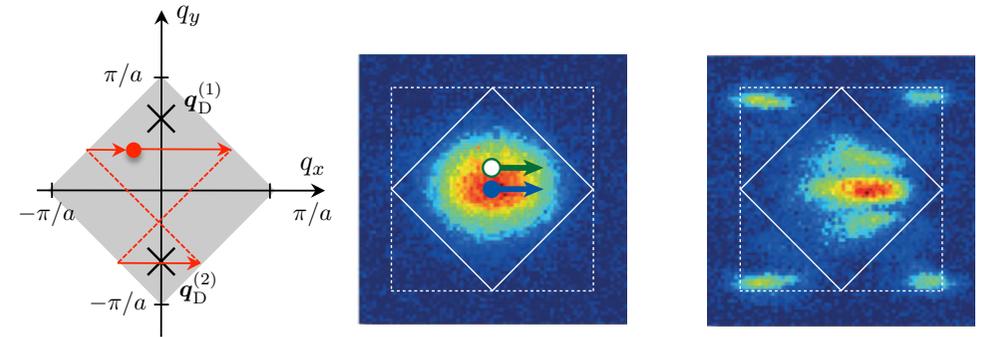


FIGURE 6.6. Gauche : oscillations de Bloch induites par une force le long de l'axe x . Milieu : distribution initiale dans l'espace des \mathbf{q} . Droite : distribution dans l'espace des \mathbf{q} après une oscillation de Bloch (période τ_B). On distingue nettement les atomes qui sont passés au voisinage d'un point de Dirac au cours de l'oscillation et qui ont alors été transférés vers la bande supérieure [figure extraite de Tarruell et al. (2012)].

de sorte qu'un atome reste dans la bande qu'il occupait au début de l'extinction, et on effectue un temps de vol qui révèle ainsi la population de chaque bande.

Le gaz atomique utilisé est un ensemble de fermions polarisé et sans interactions (^{40}K). Les atomes occupent initialement plutôt le centre de la zone de Brillouin et ne rencontrent donc pas dans un premier temps les points de Dirac qui sont situés plutôt en bord de bande (figure 6.3). En revanche, la seconde partie de l'oscillation de Bloch (après réflexion de Bragg sur une paroi de la zone de Brillouin) peut les amener au voisinage des points de Dirac et la transition peut alors se produire (figure 6.6).

La position des pics ayant été transférés dans la bande supérieure renseigne directement sur la position des points de Dirac. Cette position est, rappelons-le, fonction du rapport J_x/J_y , les points disparaissant quand ce rapport devient trop élevé. Le groupe de Zurich a étudié la position des points de Dirac en variant le potentiel $V_{\bar{X}}$. Le résultat, montré sur la figure 6.7, est en bon accord avec les prédictions. Notons que le modèle de liaisons fortes n'est pas quantitativement valable dans ce domaine de paramètres

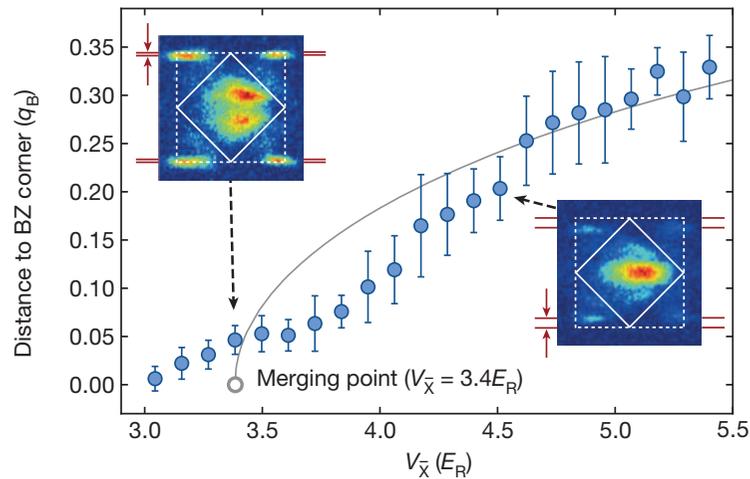


FIGURE 6.7. Variation de la position des points de Dirac sur l'axe $q_x = 0$ en fonction de la profondeur de potentiel $V_{\bar{x}}$. Pour cette figure, $V_Y = 1.8$ et $V_X = 0.28$. On s'attend à ce que les deux points de Dirac fusionnent dans le coin de la zone de Brillouin pour $V_{\bar{x}} = 3.4$, ce qui correspond bien aux observations [figure extraite de Tarruell et al. (2012)].

et qu'il faut utiliser une diagonalisation numérique de l'hamiltonien du réseau pour déterminer précisément la position des points de Dirac dans ce cas.

Il est également possible de dissymétriser les deux sites A et B du réseau dans cette expérience. Il suffit pour cela de prendre une valeur de θ dans (6.37) différente de π . On a vu en (6.36) que ceci revient à ouvrir un gap entre les deux sous-bandes ; l'oscillation de Bloch ne doit alors plus causer de transition entre ces deux sous-bandes, au moins si la force qui la crée n'est pas trop grande. C'est effectivement ce qui est observé expérimentalement (figure 6.8).

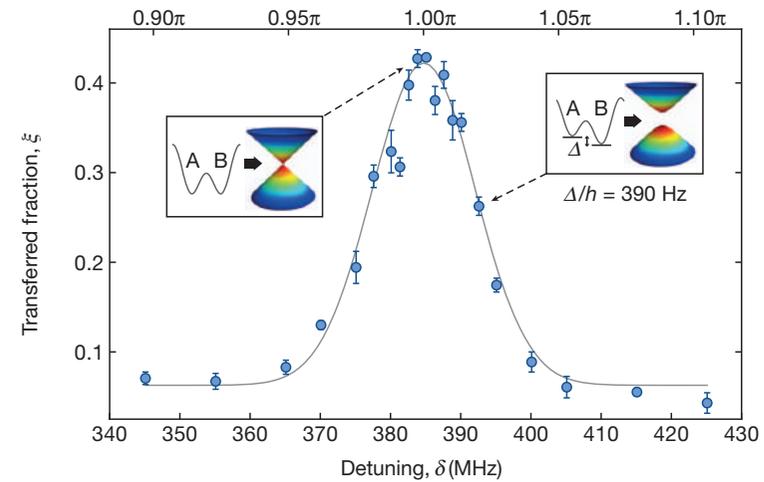


FIGURE 6.8. Disparition des points de Dirac quand on dissymétrise les sites A et B : probabilité de passage vers la bande supérieure en fonction de l'angle θ entrant dans la définition de $V_1(\mathbf{r})$ (6.37). Cet angle θ , indiqué sur l'échelle horizontale supérieure, est contrôlé par le désaccord du faisceau créant cette onde stationnaire, donné sur l'échelle horizontale inférieure [figure extraite de Tarruell et al. (2012)].

4-3 Perspectives

L'expérience de Zurich a donc permis de mettre en évidence l'existence de points de Dirac dans un réseau optique. La flexibilité offerte par ces réseaux est illustrée sur la figure 6.7, où l'on contrôle la position de ces points, on les fait fusionner, puis disparaître. Cette expérience n'est probablement qu'un point de départ dans cette simulation du graphène par des atomes froids. De nombreux aspects de la physique ultra-relativiste que l'on rencontre au voisinage de points de Dirac devraient pouvoir être abordés avec ces systèmes. Le paradoxe de Klein, c'est-à-dire la transmission quasi-totale d'un paquet d'ondes à travers une barrière de très grande hauteur, devrait ainsi pouvoir être étudié (Katsnelson et al. 2006). Rappelons que ce paradoxe joue un rôle important dans le graphène réel car il empêche la rétro-diffusion des électrons de conduction ; les électrons de Dirac sont insensibles aux effets de localisation observés pour des élec-

trons « ordinaires » (Castro Neto et al. 2009) et se propagent donc ballistiquement sur de longues distances (micromètres). Par ailleurs, la mise en place de champs magnétiques artificiels sur ce réseau devraient permettre d'aborder l'étude de l'effet Hall quantique anormal avec des atomes froids.

5 Références

- Castro Neto, A. H., F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov & A. K. Geim (2009), « The electronic properties of graphene », in *Rev. Mod. Phys.* 81 (1), pp. 109–162.
- Katsnelson, M. I., K. S. Novoselov & A. K. Geim (2006), « Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene », in *Nature Physics* 2, pp. 620–625.
- Lee, Kean Loon, Benoit Grémaud, Rui Han, Berthold-Georg Englert & Christian Miniatura (2009), « Ultracold fermions in a graphene-type optical lattice », in *Phys. Rev. A* 80 (4), p. 043411.
- Lim, Lih-King, Jean-Noël Fuchs & Gilles Montambaux (2012), « Bloch-Zener Oscillations across a Merging Transition of Dirac Points », in *Phys. Rev. Lett.* 108 (17), p. 175303.
- Mikitik, G. P. & Yu. V. Sharlai (1999), « Manifestation of Berry's Phase in Metal Physics », in *Phys. Rev. Lett.* 82 (10), pp. 2147–2150.
- Montambaux, G., F. Piéchon, J.-N. Fuchs & M. O. Goerbig (2009), « Merging of Dirac points in a two-dimensional crystal », in *Phys. Rev. B* 80 (15), p. 153412.
- Novoselov, KS, AK Geim, SV Morozov, D Jiang, MI Katsnelson, IV Grigorieva, SV Dubonos & AA Firsov (2005), « Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene », in *NATURE* 438.7065, 197–200.
- Tarruell, Leticia, Daniel Greif, Thomas Uehlinger, Gregor Jotzu & Tilman Esslinger (2012), « Creating, moving and merging Dirac points with a Fermi gas in a tunable honeycomb lattice », in *Nature* 483.7389, 302–U91.
- Wallace, P. R. (1947), « The Band Theory of Graphite », in *Phys. Rev.* 71 (9), pp. 622–634.
- Wunsch, B, F Guinea & F Sols (2008), « Dirac-point engineering and topological phase transitions in honeycomb optical lattices », in *New Journal of Physics* 10.10, p. 103027.
- Zhang, YB, YW Tan, HL Stormer & P Kim (2005), « Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene », in *NATURE* 438.7065, 201–204.

Zhu, Shi-Liang, Baigeng Wang & L.-M. Duan (2007), « Simulation and Detection of Dirac Fermions with Cold Atoms in an Optical Lattice », in *Phys. Rev. Lett.* 98 (26), p. 260402.