

# Chapitre 2

## Réseaux optiques : les principes de base

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Comment générer un réseau optique . . . . .</b>	<b>1</b>
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
<b>2</b>	<b>Le théorème de Bloch . . . . .</b>	<b>3</b>
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
<b>3</b>	<b>Bandes d'énergie pour le potentiel sinusoidal . . . . .</b>	<b>6</b>
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
<b>4</b>	<b>Branchement et débranchement d'un réseau . . . . .</b>	<b>10</b>
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
<b>5</b>	<b>Propagation de paquets d'ondes . . . . .</b>	<b>15</b>
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
<b>6</b>	<b>Références . . . . .</b>	<b>18</b>

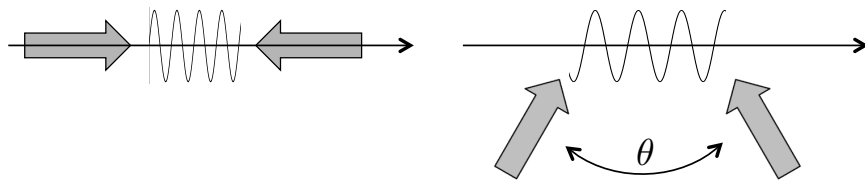
---

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 forme<sup>1</sup>. 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*<sup>2</sup> 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

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

décrivant le mouvement de la particule. Le théorème de Bloch<sup>3</sup> 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  $\lambda$  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  $\theta_j$ , 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 propriété<sup>4</sup>

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

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  $\theta_j$  caractérisant les valeurs propres  $e^{-i\theta_j}$  des opérateurs de translation  $\hat{T}_{\mathbf{a}_j}$  sont définis modulo  $2\pi$ . 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  $\psi_q$  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 propres<sup>5</sup>

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

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 dégénérescence<sup>6</sup>, 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 sinusoïdal

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.

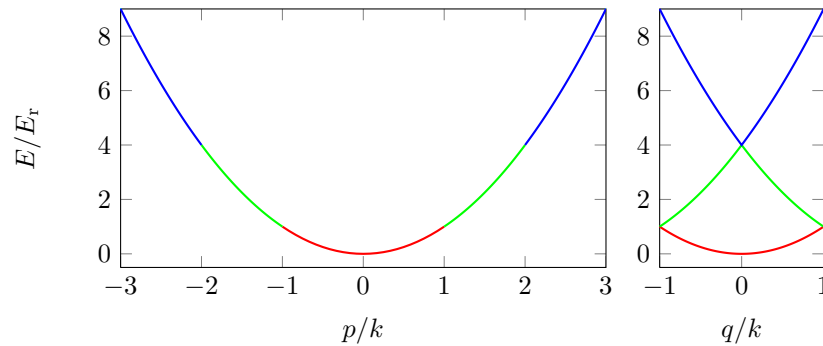


FIGURE 2.2. Gauche : relation de dispersion pour une particule libre  $E = p^2/2m$ . Droite : parabole repliée, donnant les bandes d'énergie pour la même particule libre dans le formalisme des ondes de Bloch.

### 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  $\psi_{n,q}(x)$

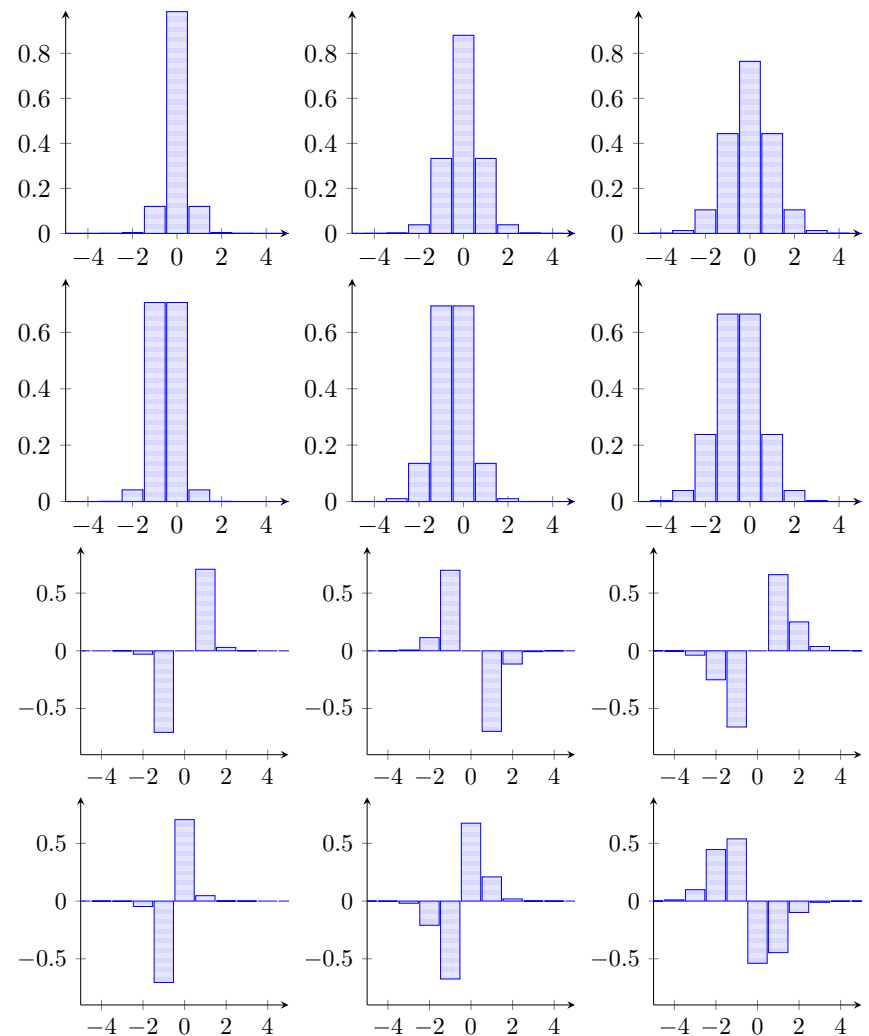
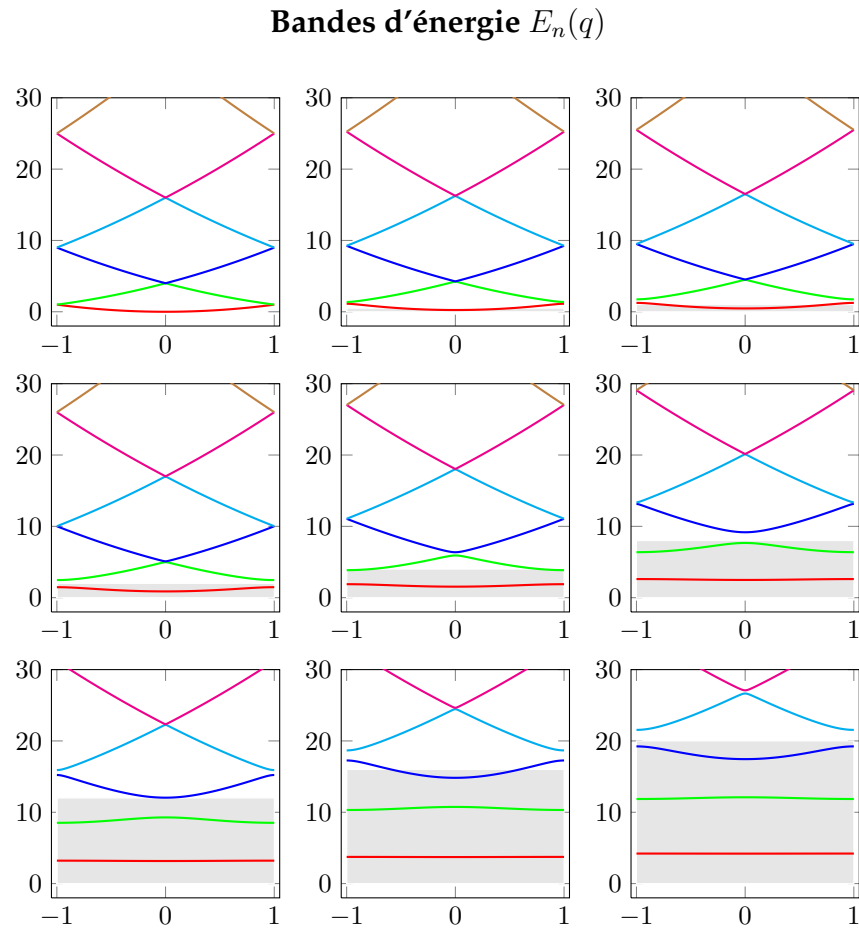
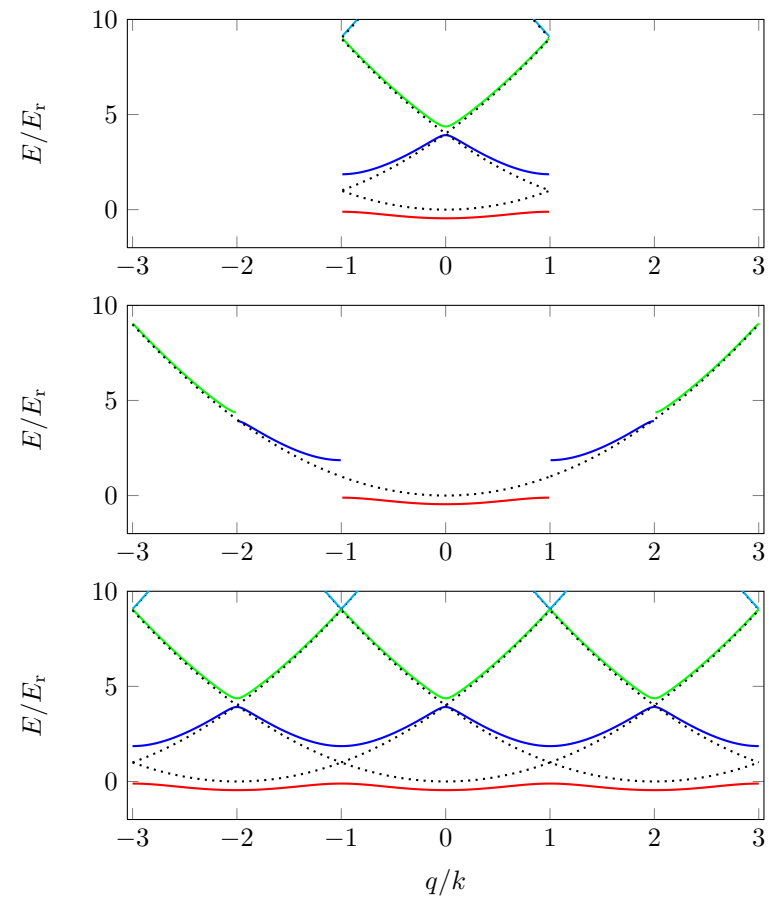


FIGURE 2.3. Coefficients de Fourier  $C_j(n, q)$  en fonction de leur indice  $j$ . Ces coefficients sont solutions de l'équation centrale (2.37) pour  $V_0/E_r = 2$  (colonne de gauche),  $V_0/E_r = 8$  (colonne du milieu),  $V_0/E_r = 20$  (colonne de droite). Les lignes correspondent de haut en bas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

Différentes représentations de la même structure de bande



**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  $V_0$ .



**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  $\psi_{n,q}(x)$

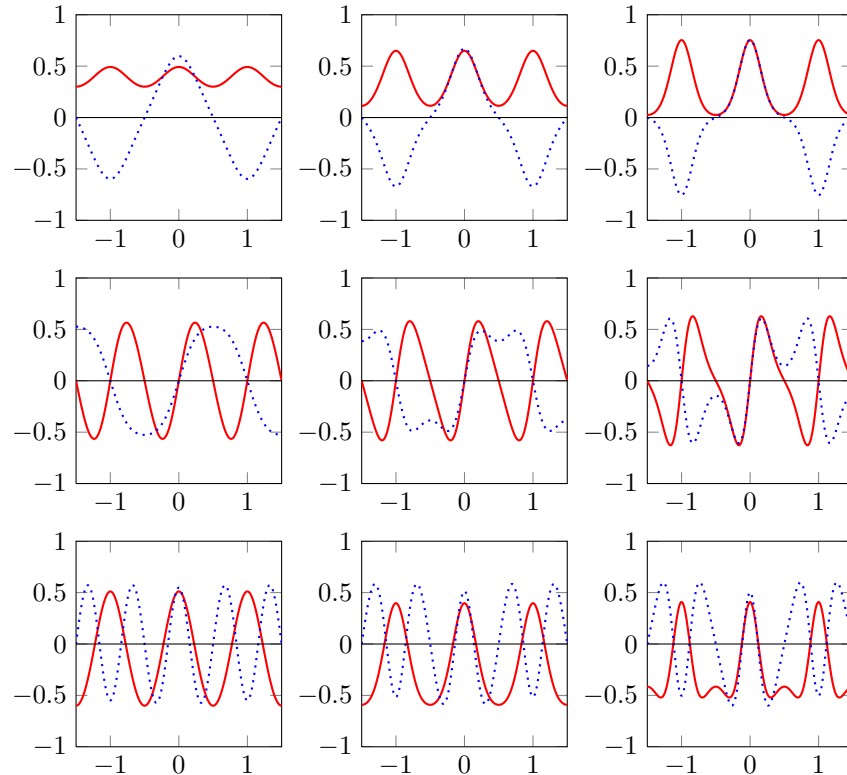


FIGURE 2.6. Fonctions de Bloch  $\psi_{n,q}(x)$  en fonction de  $x/a$  pour  $V_0/E_r = 2$  (colonne de gauche),  $V_0/E_r = 8$  (colonne médiane) et  $V_0/E_r = 20$  (colonne de droite). Les lignes correspondent à la bande  $n = 0$  (haut),  $n = 1$  (milieu),  $n = 2$  (bas). Sur chaque graphe, on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

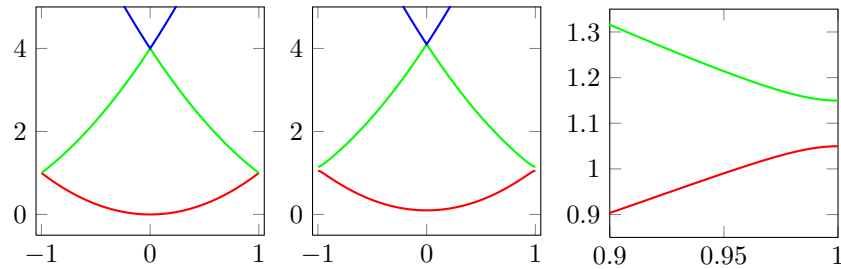
Nous avons représenté sur la figure 2.6 quelques fonctions de Bloch  $\psi_{n,q}(x)$  pour trois valeurs de  $V_0/E_r$ . Ces tracés ont été faits en fixant la phase (arbitraire) de la fonction de Bloch de la manière suivante :

- 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  $\phi_p$  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  $\lambda$ , 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  $\lambda$  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

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

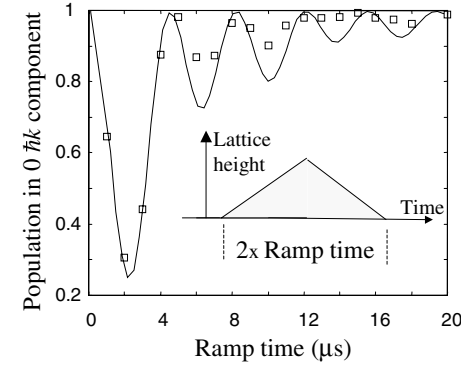
et l'écart d'énergie du membre de droite vaut  $4E_r$ . Le critère d'adiabaticité s'écrit dans ce cas :

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

Prenons le cas où l'on branche un potentiel montant à la valeur  $V_0 = E_r$  linéairement en temps, pendant une durée  $\tau$ . 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

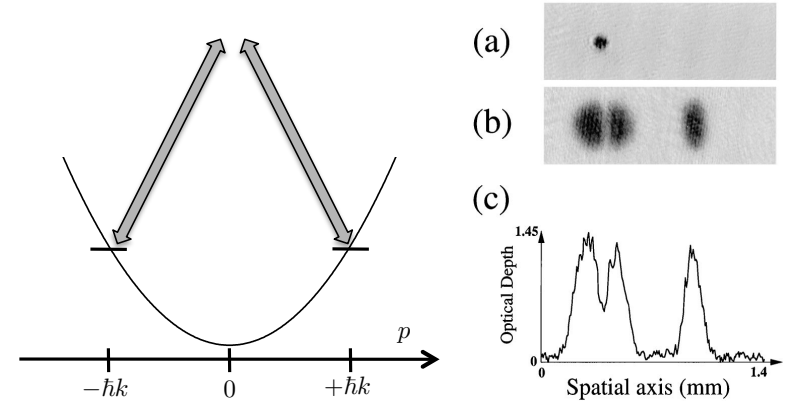
$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{p} + 2n\hbar\mathbf{k} \quad (2.55)$$

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  $t_{\text{int}}$  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 l'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  $t_{\text{int}}$  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  $\theta$  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

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

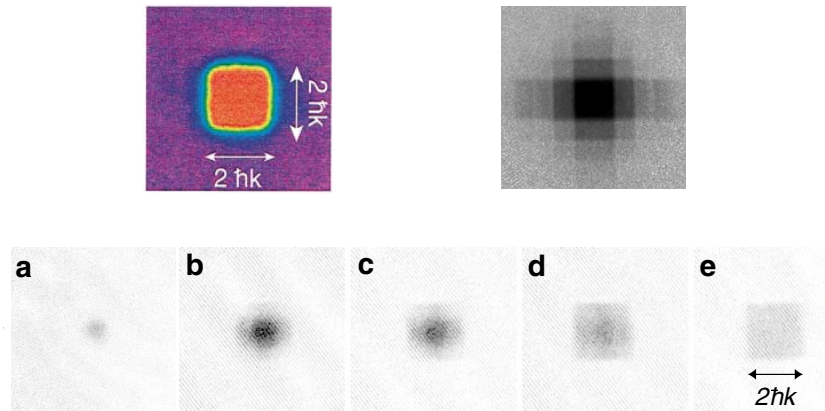
conditionne la sélectivité en impulsion du phénomène de diffraction de Bragg. Pour  $p = \hbar k$ , l'oscillation se fait avec une amplitude de 100% : en choisissant  $\Omega t_{\text{int}} = \pi/2$ , on réalise un séparateur de faisceau 50%-50%, et on obtient un miroir de Bragg parfait pour  $\Omega t_{\text{int}} = \pi$ . 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); Gauguet 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  $\omega_j$  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  $^{87}\text{Rb}$  placés dans un réseau carré à deux dimensions. Ligne inférieure : figure extraite de Köhl et al. (2005), obtenue avec des atomes fermioniques de  $^{40}\text{K}$  (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

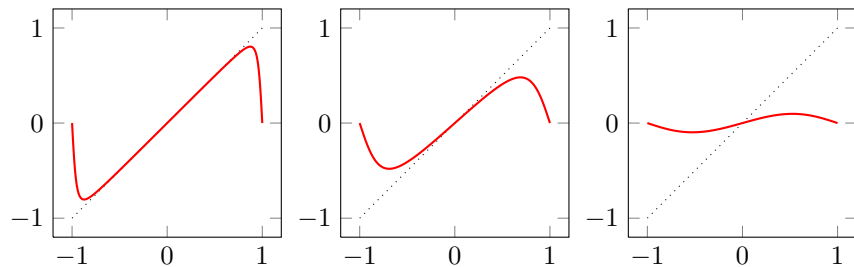
un gaz de bosons ( $^{87}\text{Rb}$ ) dont la température est intermédiaire entre ces deux échelles d'énergie :  $W_0 \ll k_B T \ll \Delta_0$ . Le gaz remplit donc les états  $\psi_{0,q}$  de la première bande de manière uniforme, mais la population des bandes excitées est négligeable. Après extinction 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  $t_{\text{vol}}$  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 ( $^{40}\text{K}$ ) 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  $\Delta q$  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

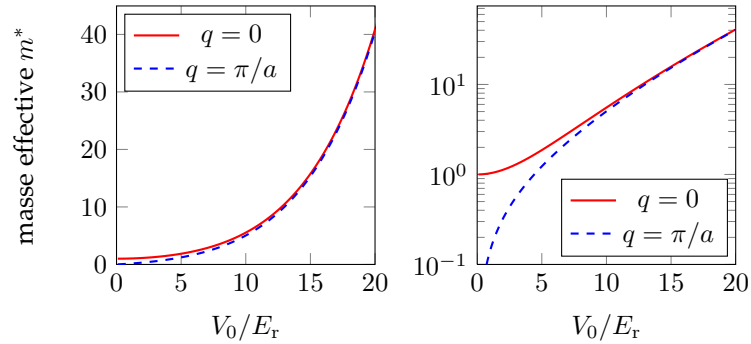
$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E_n}{dq^2}, \quad (2.68)$$

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  $\Delta q$ , 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

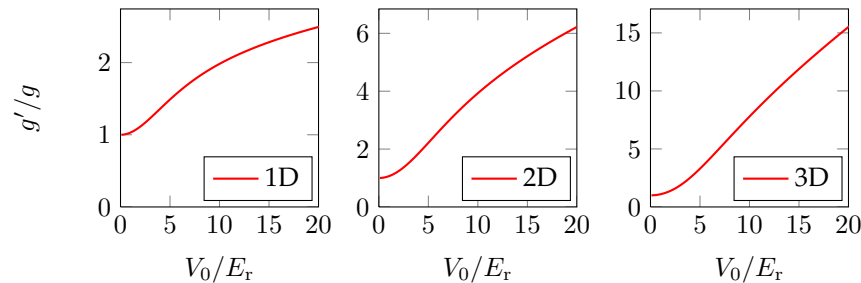
$$\hat{H} = \sum_q E_0(q) \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q + \frac{g}{2} \sum_{q_1, q_2, q'_1, q'_2} C(q_1, q_2, q'_1, q'_2) \hat{b}_{q'_1}^\dagger \hat{b}_{q'_2}^\dagger \hat{b}_{q_2} \hat{b}_{q_1} \quad (2.74)$$

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.