

Chapitre 3

Phase de Berry et potentiels de jauge géométriques

Sommaire

1	L'approximation adiabatique	2
1-1	Position du problème et notations	2
1-2	Évolution du système	2
1-3	Principe de l'approximation adiabatique	3
1-4	Exemple	4
2	La phase de Berry	5
2-1	Phase dynamique et phase géométrique	5
2-2	Le cas d'un circuit fermé	6
2-3	Courbure de Berry et champ magnétique artificiel	6
2-4	Influence d'un changement de jauge	7
3	Exemples	8
3-1	Spin dans un champ magnétique extérieur	8
3-2	Lien avec le transport parallèle	9
3-3	Le pendule de Foucault	10
3-4	Lumière dans une fibre optique	11
4	Approche à la Born–Oppenheimer	12
4-1	Traitement quantique des « variables lentes »	13
4-2	Équation de Schrödinger effective	14
4-3	Interprétation physique du potentiel scalaire	14
5	Références	16

Il est fréquent d'avoir recours en physique, classique ou quantique, à la notion d'évolution adiabatique pour un système dont l'état dépend de paramètres extérieurs, volume d'une boîte confinant un fluide, champs extérieurs appliqués au système, etc.. Considérons ce type d'évolution et intéressons-nous plus particulièrement à une « trajectoire fermée » des paramètres extérieurs. On entend par là une évolution telle que ces paramètres extérieurs, représentés de manière générique par un vecteur λ , évoluent lentement de l'instant 0 à l'instant T pour reprendre à l'instant T la valeur qu'ils avaient à l'instant 0 :

$$\lambda(0) \longrightarrow \lambda(t) \longrightarrow \lambda(T) = \lambda(0). \quad (3.1)$$

Il est alors naturel de penser que le système étudié est à l'instant T dans le même état qu'à l'instant 0. Toutefois, le résultat est parfois un peu plus complexe que cette simple identité. Un exemple bien connu est le pendule de Foucault. Supposons que le pendule oscille linéairement à l'instant initial en un point de latitude donnée. À l'instant $T = 24$ heures, correspondant à une rotation complète de la Terre sur son axe, le plan d'oscillation du pendule ne sera pas le même. Il aura tourné d'une quantité qui dépend de la latitude du lieu où l'expérience est faite.

Le but de ce chapitre est de tirer partie de cette « *anholonomie* », c'est-à-dire cette possibilité qu'ont certaines variables de ne pas revenir à leur valeur initiale alors que d'autres variables, qui pilotent le mouvement des premières, parcourent un cycle fermé. Nous nous intéresserons principalement au cas quantique, qui nous permettra de dégager la notion de

phase de Berry et de générer de cette manière l'équivalent d'une phase de Aharonov–Bohm même si la particule ne possède pas de charge électrique.

1 L'approximation adiabatique

1-1 Position du problème et notations

On considère dans cette partie un système quantique décrit par un hamiltonien $\hat{H}(\lambda)$ dépendant d'un paramètre *continu* λ . On suppose pour l'instant que ce paramètre est contrôlé par un opérateur extérieur au système. Ce peut être un nombre réel ou un ensemble de nombres réels représentés par un vecteur, d'où la notation générique λ .

Pour chaque valeur de λ , on suppose connus les états propres $|\psi_n(\lambda)\rangle$ de $\hat{H}(\lambda)$ et leurs énergies associées $E_n(\lambda)$:

$$\hat{H}(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle. \quad (3.2)$$

On supposera dans la suite que les $|\psi_n(\lambda)\rangle$ forment une base orthonormée de l'espace de Hilbert pour toute valeur de λ . On va chercher à déterminer l'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ du système quand le paramètre λ dépend lui-même du temps. On va s'intéresser en particulier aux évolutions lentes de $\lambda(t)$ (en un sens que nous allons préciser).

Exemple 1. Considérons une particule dont le moment magnétique est décrit par l'opérateur $\hat{\mu}$. On suppose la particule immobile et localisée en un point, de sorte que son seul degré de liberté est ce moment magnétique. Le champ magnétique B à l'emplacement de la particule joue ici le rôle du paramètre λ . L'hamiltonien est donc :

$$\lambda \equiv B, \quad \hat{H}(\lambda) \equiv \hat{H}(B) = -\hat{\mu} \cdot B, \quad (3.3)$$

le champ magnétique B pouvant dépendre du temps, comme dans une expérience de RMN.

Exemple 2. Quand on décrit l'interaction d'un atome avec le rayonnement, on a souvent recours à l'*approximation semi-classique*, qui consiste à

décrire quantiquement les degrés de liberté internes de l'atome, et classiquement ses degrés de liberté externes (position r et impulsion p du centre de masse de l'atome). Considérons le cas simple d'un atome « à deux niveaux internes », un niveau fondamental $|g\rangle$ et un niveau excité $|e\rangle$, séparés par l'énergie $\hbar\omega_0$. Supposons que le champ lumineux est monochromatique, de pulsation ω et quasi-résonnant avec l'atome

$$|\Delta| \ll \omega_0 \quad \text{avec le désaccord } \Delta = \omega - \omega_0. \quad (3.4)$$

Limitons-nous pour simplifier à un atome au repos¹ au point r . On peut utiliser l'approximation du champ tournant et mettre l'hamiltonien décrivant le couplage atome-champ sous forme matricielle dans la base $\{|g\rangle, |e\rangle\}$:

$$\hat{H}(r) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Delta & \kappa^*(r) \\ \kappa(r) & -\Delta \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

où $\kappa(r)$ est la fréquence de Rabi² caractérisant le couplage de l'atome avec le champ lumineux au point r , proportionnelle au champ électrique en ce point pour un couplage dipolaire-électrique. Le rôle du paramètre λ est alors joué par la position r du centre de masse de l'atome.

1-2 Évolution du système

Considérons le cas où le paramètre λ dépend du temps. À chaque instant t , on décompose le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ sur la base des états propres instantanés de l'hamiltonien $\hat{H}[\lambda(t)]$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n[\lambda(t)]\rangle. \quad (3.6)$$

Reportons cette expression dans l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}[\lambda(t)] |\psi(t)\rangle. \quad (3.7)$$

1. ou alors bougeant suffisamment lentement pour que l'effet Doppler joue un rôle négligeable.

2. Notons que l'approximation du champ tournant nécessite l'inégalité $|\kappa| \ll \omega_0$, qui est en pratique très bien vérifiée dans toutes les expériences menées avec des atomes froids.

La dérivée du membre de gauche de cette équation fait intervenir :

$$\frac{d}{dt} [c_n |\psi_n(\lambda)\rangle] = \dot{c}_n |\psi_n(\lambda)\rangle + c_n \frac{d|\psi_n(\lambda)\rangle}{dt} \quad \text{avec} \quad \frac{d|\psi_n(\lambda)\rangle}{dt} = \dot{\lambda} \cdot |\nabla \psi_n(\lambda)\rangle \quad (3.8)$$

où on a utilisé la notation compacte pour le gradient d'un état propre par rapport aux composantes du vecteur λ :

$$|\nabla \psi_\ell(\lambda)\rangle \equiv \nabla_\lambda [|\psi_\ell(\lambda)\rangle]. \quad (3.9)$$

On aboutit au système différentiel vérifié par les $c_n(t)$:

$$i\hbar \dot{c}_n = E_n(t) c_n(t) - \hbar \sum_\ell \alpha_{n,\ell}(t) c_\ell(t), \quad (3.10)$$

où on a posé

$$\hbar \alpha_{n,\ell}(t) = i\hbar \langle \psi_n | \left(\frac{d}{dt} |\psi_\ell\rangle \right) = i\hbar \dot{\lambda} \cdot \langle \psi_n(\lambda) | \nabla \psi_\ell(\lambda) \rangle. \quad (3.11)$$

La quantité $\alpha_{n,\ell}(t)$ caractérise la vitesse à laquelle « tournent » les vecteurs propres de $\hat{H}(\lambda)$. Elle peut s'exprimer à l'aide de la dérivée par rapport au temps de l'hamiltonien lui-même. En effet, l'équation aux valeurs propres (3.2) conduit à :

$$\frac{d\hat{H}}{dt} |\psi_\ell\rangle + \hat{H} \left(\frac{d}{dt} |\psi_\ell\rangle \right) = \frac{dE_\ell}{dt} |\psi_\ell\rangle + E_\ell \left(\frac{d}{dt} |\psi_\ell\rangle \right) \quad (3.12)$$

soit en multipliant par $\langle \psi_n |$ pour $n \neq \ell$:

$$\langle \psi_n | \frac{d\hat{H}}{dt} |\psi_\ell\rangle = (E_\ell - E_n) \langle \psi_n | \left(\frac{d}{dt} |\psi_\ell\rangle \right) = i\hbar \omega_{n,\ell} \alpha_{n,\ell}. \quad (3.13)$$

où on a introduit la pulsation de Bohr instantanée entre les états n et ℓ

$$\hbar \omega_{n,\ell}(t) = E_n[\lambda(t)] - E_\ell[\lambda(t)]. \quad (3.14)$$

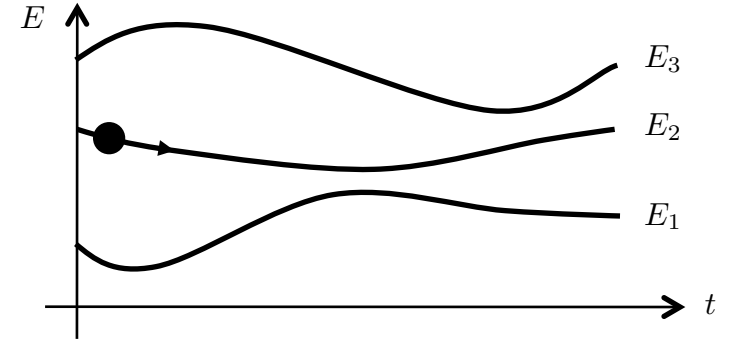


FIGURE 3.1. Variation dans le temps des énergies E_n associées aux états propres $|\psi_n\rangle$ de l'hamiltonien $\hat{H}[\lambda]$.

1-3 Principe de l'approximation adiabatique

Dans ce paragraphe, nous reprenons l'approche du livre de Messiah (2003). Pour simplifier l'analyse, commençons par prendre en compte directement l'évolution liée au terme d'énergie dans le système différentiel (3.10). Pour cela, nous introduisons les coefficients $\tilde{c}_n(t)$

$$\tilde{c}_n(t) = e^{i \int_0^t E_n(t') dt' / \hbar} c_n(t), \quad (3.15)$$

de sorte que le système différentiel (3.10) peut se réécrire

$$i \dot{\tilde{c}}_n = - \sum_\ell e^{i \int_0^t \omega_{n,\ell}(t') dt'} \alpha_{n,\ell}(t) \tilde{c}_\ell(t). \quad (3.16)$$

Supposons que l'état initial du système $|\psi(0)\rangle$ soit un des états propres $|\psi_\ell\rangle$ de l'hamiltonien (cf. figure 3.1)

$$c_\ell(0) = 1, \quad c_n(0) = 0 \quad \text{si } n \neq \ell. \quad (3.17)$$

Si le paramètre λ est constant, les coefficients $\alpha_{n,\ell}$ sont nuls et la solution du système (3.16) est immédiate :

$$\dot{\lambda} = 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{c}_n(t) = \delta_{n,\ell}. \quad (3.18)$$

Si λ évolue lentement dans le temps, on peut envisager une solution du système différentiel en puissances de λ , avec à l'ordre le plus bas pour les coefficients $n \neq \ell$:

$$i \dot{c}_n = -e^{i \int_0^t \omega_{n,\ell}(t') dt'} \alpha_{n,\ell}(t), \quad \tilde{c}_n(0) = 0. \quad (3.19)$$

Pour estimer l'évolution des amplitudes de probabilité c_n pour les états ψ_n tels que $n \neq \ell$, considérons d'abord le cas simple où ni la pulsation de Bohr $\omega_{n,\ell}$, ni « la vitesse de rotation » $\alpha_{n,\ell}$ ne dépendent du temps. Dans ce cas, la solution de (3.19) est très simple :

$$\tilde{c}_n(t) = \frac{1}{\omega_{n,\ell}} (e^{i\omega_{n,\ell}t} - 1) \alpha_{n,\ell}. \quad (3.20)$$

En particulier, si le paramètre λ évolue « lentement », le coefficient $\alpha_{n,\ell}$ est petit et l'amplitude c_n va rester faible à tout instant :

$$n \neq \ell : \quad \frac{|\alpha_{n,\ell}|}{|\omega_{n,\ell}|} \ll 1 \quad \Rightarrow \quad |c_n(t)| \ll 1 \quad \forall t. \quad (3.21)$$

Dans le cas général, les quantités $\omega_{n,\ell}$ et $\alpha_{n,\ell}$ varient dans le temps, mais on peut imposer la condition suffisante suivante pour que la population de chaque état ψ_n , avec $n \neq \ell$, reste petite :

$$\left| \frac{\alpha_{\ell}^{\max}}{\omega_{\ell}^{\min.}} \right| = \frac{\text{vitesse angulaire maximum de } \psi_{\ell}}{\text{pulsation de Bohr minimum associée à } \psi_{\ell}} \ll 1. \quad (3.22)$$

Notons que cette condition exclut le cas où l'état initialement occupé ψ_{ℓ} devient momentanément dégénéré avec un autre état ψ_n .

Quand la condition (3.22) est remplie, on peut donc supposer en bonne approximation³ que le système suit adiabatiquement l'état ψ_{ℓ} , c'est-à-dire qu'il reste avec une probabilité voisine de 1 dans cet état ψ_{ℓ} :

$$|c_{\ell}(t)| \approx 1 \quad \forall t. \quad (3.23)$$

La question qui reste à étudier est celle de la phase du coefficient $c_{\ell}(t)$, et elle fera l'objet de la section suivante.

3. Il y a bien sûr une certaine dose d'optimisme dans cette affirmation. Si la dimension de l'espace de Hilbert est élevée, voire infinie, on peut très bien imaginer des situations où la population de chaque état individuel ψ_n reste faible, mais la population de l'état de départ ψ_{ℓ} tombe notablement en dessous de 1.

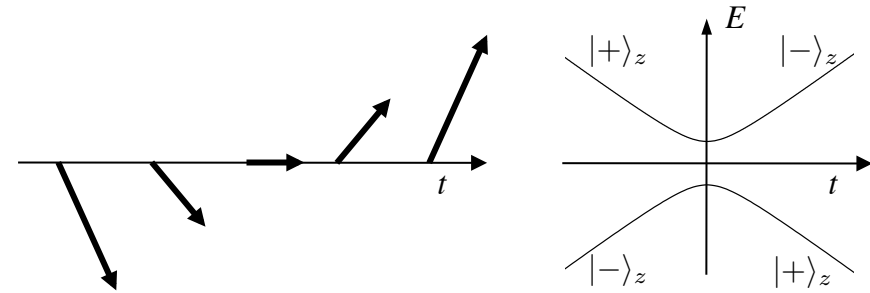


FIGURE 3.2. Gauche : basculement d'un champ magnétique selon la loi (3.24). Droite : énergies des états propres de $\hat{H}(t)$ donné en (3.25) pour $\mu B_0 > 0$. Ces énergies forment les deux branches d'une hyperbole (cf. 3.26).

1-4 Exemple

La condition de validité (3.22) prend une forme remarquablement simple si on considère l'exemple déjà mentionné plus haut d'un moment magnétique μ plongé dans un champ magnétique dépendant du temps. Considérons un champ $B(t)$ variant selon (cf. figure 3.2) :

$$B(t) = B_0 (\mathbf{u}_x + (t/\tau) \mathbf{u}_z). \quad (3.24)$$

Ce champ pointe donc dans les directions $\pm \mathbf{u}_z$ à $t = \pm \infty$ et bascule en un temps $\sim 2\tau$ entre ces deux directions, avec une direction parallèle à $\mathbf{u}_x$ au temps intermédiaire $t = 0$. Supposons que le moment magnétique μ est associé à un spin 1/2 de sorte que l'hamiltonien s'écrit dans la base $\{|+\rangle_z, |-\rangle_z\}$:

$$\hat{H}(t) = -\hat{\mu} \cdot B(t) = -\mu B_0 \begin{pmatrix} t/\tau & 1 \\ 1 & -t/\tau \end{pmatrix}, \quad \mu > 0. \quad (3.25)$$

Les deux énergies propres varient dans le temps en formant les deux branches d'une hyperbole (figure 3.2) :

$$E_{\pm}(t) = \pm \mu B_0 (1 + t^2/\tau^2)^{1/2} \quad (3.26)$$

Considérons le cas où le spin est préparé dans l'état $|-\rangle_z$ à $t = -\infty$ (branche d'hyperbole inférieure). Cherchons la probabilité pour que ce

moment magnétique reste sur l'état correspondant à cette branche d'hyperbole au cours du temps, pour finir par conséquent dans l'état $|+\rangle_z$ à $t = +\infty$. Il est simple d'évaluer le critère (3.22) dans ce cas. La pulsation de Bohr (ici pulsation de Larmor) minimale est obtenue à l'instant $t = 0$ et elle vaut $\omega_0 = 2\mu B_0/\hbar$. La vitesse de rotation des axes propres de $\hat{H}$ est maximale au même point et vaut $1/(2\tau)$ d'après (3.13). Le critère (3.22) s'écrit donc à un facteur multiplicatif près

$$\omega_0 \tau \gg 1. \quad (3.27)$$

Pour que l'approximation adiabatique soit valable, il faut que le moment magnétique effectue de nombreuses rotations pendant la durée τ , caractéristique du temps de basculement du champ magnétique.

2 La phase de Berry

Nous allons suivre dans ce paragraphe une démarche très proche de celle présentée par Michael Berry dans son article fondateur (Berry 1984). Indiquons toutefois que des précurseurs de cette phase géométrique étaient apparus avant le travail de Berry dans différentes branches de la physique :

- En optique avec les travaux de Pancharatnam (1956). Ce dernier s'était intéressé au changement de phase d'une lumière polarisée de vecteur d'onde donné, quand le faisceau lumineux traverse une série de polariseurs, la polarisation revenant à son état initial en sortie du système optique.
- En physique moléculaire, avec l'analyse par Mead & Truhlar (1979) de certaines subtilités dans l'approximation de Born–Oppenheimer. Mead avait notamment introduit la notion d'*effet Aharonov–Bohm moléculaire* en 1980.

L'histoire de l'élaboration de ces différents concepts est retracée dans les articles de Berry (1989) et de Mead (1992), avec de nombreuses références aux articles « pressentant » l'existence de la phase géométrique.

2-1 Phase dynamique et phase géométrique

Nous considérons ici un système quantique équivalent à celui de la section précédente, et nous supposons que l'approximation adiabatique est valable. Le système est préparé à l'instant initial $t = 0$ dans un état propre ψ_ℓ de l'hamiltonien $\hat{H}[\lambda(0)]$ et on suppose qu'il reste dans cet état à chaque instant

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n[\lambda(t)]\rangle \approx c_\ell(t) |\psi_\ell[\lambda(t)]\rangle. \quad (3.28)$$

Le coefficient c_ℓ est solution de l'équation déduite de (3.10)

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{c}_\ell &= \left[E_\ell(t) - i\hbar \dot{\lambda} \cdot \langle \psi_\ell | \nabla \psi_\ell \rangle \right] c_\ell, \\ &= \left[E_\ell(t) - \dot{\lambda} \cdot \mathcal{A}_\ell(\lambda) \right] c_\ell, \end{aligned} \quad (3.29)$$

où l'on a introduit le vecteur réel⁴ appelé *connexion de Berry*

$$\mathcal{A}_\ell(\lambda) = i\hbar \langle \psi_\ell | \nabla \psi_\ell \rangle, \quad (3.31)$$

Cette connexion de Berry va jouer le rôle de potentiel vecteur dans ce qui va suivre.

L'équation d'évolution (3.29) pour l'amplitude c_ℓ s'intègre simplement pour donner :

$$c_\ell(t) = e^{i\Phi^{\text{dyn.}}(t)} e^{i\Phi^{\text{geom.}}(t)} c_\ell(0) \quad (3.32)$$

où on a introduit la *phase dynamique*

$$\Phi^{\text{dyn.}}(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_\ell(t') dt' \quad (3.33)$$

et la *phase géométrique*

$$\Phi^{\text{geom.}}(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t \dot{\lambda}(t') \cdot \mathcal{A}_\ell[\lambda(t')] dt' = \frac{1}{\hbar} \int_{\lambda(0)}^{\lambda(t)} \mathcal{A}_\ell(\lambda) \cdot d\lambda. \quad (3.34)$$

La dernière intégrale est prise le long de ligne $\lambda(t')$, pour t' allant de 0 à t .

Cette distinction entre les deux phases est assez naturelle :

4. Pour montrer que $\mathcal{A}_\ell$ est réel, utilisons le fait que le vecteur $|\psi_\ell(\lambda)\rangle$ est normé :

$$\langle \psi_\ell | \psi_\ell \rangle = 1 \Rightarrow \langle \nabla \psi_\ell | \psi_\ell \rangle + \langle \psi_\ell | \nabla \psi_\ell \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi_\ell | \nabla \psi_\ell \rangle \text{ imaginaire.} \quad (3.30)$$

1. La phase dynamique est la phase habituelle qui apparaît même pour un système indépendant du temps ; c'est elle qui est responsable du « mouvement » en mécanique quantique, quand un système donné est préparé dans une superposition d'états propres d'énergies différentes.
2. La phase géométrique ne dépend que de la « trajectoire » suivie par le paramètre λ au cours de l'évolution. Elle ne dépend pas du temps mis pour aller de $\lambda(0)$ à $\lambda(t)$, pourvu que ce temps soit suffisamment long pour assurer la validité de l'approximation adiabatique.

2-2 Le cas d'un circuit fermé

Un cas particulier important de l'analyse qui précède est celui d'une boucle fermée $\mathcal{C}$ pour le paramètre λ :

$$\lambda(0) \longrightarrow \lambda(t) \longrightarrow \lambda(T) = \lambda(0). \quad (3.35)$$

La phase géométrique est donnée par alors l'intégrale de la connexion de Berry sur cette boucle

$$\Phi^{\text{geom.}}(\mathcal{C}) = \frac{1}{\hbar} \oint_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_{\ell}(\lambda) \cdot d\lambda, \quad (3.36)$$

expression qu'il est évidemment tentant de rapprocher de la phase de Aharonov–Bohm rencontrée à un chapitre précédent. L'approfondissement de cette analogie va nous occuper dans le reste de ce cours.

Signalons tout de suite la propriété essentielle suivante : la phase géométrique $\Phi^{\text{geom.}}(\mathcal{C})$ obtenue pour un circuit fermé est *indépendante* du choix de jauge utilisé pour la définition des états propres $|\psi_n\rangle$. Supposons que l'on fasse la transformation

$$|\psi_n(\lambda)\rangle \longrightarrow |\tilde{\psi}_n(\lambda)\rangle = e^{i\Omega(\lambda)/\hbar} |\psi_n(\lambda)\rangle. \quad (3.37)$$

La connexion de Berry est alors modifiée de la manière suivante :

$$\tilde{\mathcal{A}}_{\ell}(\lambda) = \mathcal{A}_{\ell}(\lambda) - \nabla\Omega(\lambda) \quad (3.38)$$

Dans une intégrale sur un circuit fermé, la contribution du terme additionnel

$$- \oint \nabla\Omega(\lambda) \cdot d\lambda \quad (3.39)$$

est nulle, ce qui assure l'invariance de jauge de $\Phi^{\text{geom.}}(\mathcal{C})$. Cette phase géométrique est donc une quantité physique intrinsèque du système et de son histoire, qui répond à la question

« Par où est passé le système lors de son voyage ? »

alors que la phase dynamique (elle aussi invariante de jauge puisqu'elle ne dépend que des valeurs propres, mais pas des états propres) fournit la réponse à l'autre question :

« Combien de temps a duré ce voyage ? »

2-3 Courbure de Berry et champ magnétique artificiel

Nous allons supposer à partir de maintenant que le paramètre λ évolue dans un espace à trois dimensions :

$$\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3). \quad (3.40)$$

C'est notamment le cas quand ce paramètre représente la position du centre de masse d'un atome ou la quasi-impulsion d'une particule dans un potentiel périodique. On peut alors utiliser la formule de Kelvin–Stokes pour transformer l'intégrale curviligne (3.36) par une intégrale sur une surface $\mathcal{S}$ s'appuyant sur le contour $\mathcal{C}$:

$$\Phi^{\text{geom.}}(\mathcal{C}) = \frac{1}{\hbar} \iint_{\mathcal{S}} \mathcal{B}_{\ell} \cdot d^2\mathcal{S} \quad (3.41)$$

où on a introduit la *courbure de Berry* :

$$\mathcal{B}_{\ell} = \nabla \times \mathcal{A}_{\ell}. \quad (3.42)$$

Le calcul du rotationnel se développe sans difficulté

$$\mathcal{B}_{\ell} = i\hbar \begin{pmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \langle \psi_{\ell} | \partial_1 \psi_{\ell} \rangle \\ \langle \psi_{\ell} | \partial_2 \psi_{\ell} \rangle \\ \langle \psi_{\ell} | \partial_3 \psi_{\ell} \rangle \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} \langle \partial_2 \psi_{\ell} | \partial_3 \psi_{\ell} \rangle - \langle \partial_3 \psi_{\ell} | \partial_2 \psi_{\ell} \rangle \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

avec $\partial_i = \frac{\partial}{\partial \lambda_i}$, ce qui peut encore s'écrire sous forme compacte :

$$\mathcal{B}_{\ell} = i\hbar \langle \nabla \psi_{\ell} | \times | \nabla \psi_{\ell} \rangle, \quad (3.44)$$

où $\mathcal{B}_{\ell}$ est une quantité réelle, dont on pressent l'analogie avec un champ magnétique. Pour approfondir ce point, nous allons regarder l'influence d'un changement de jauge quantique sur cette quantité.

2-4 Influence d'un changement de jauge

Nous avons déjà noté que dans la transformation

$$|\psi_n(\lambda)\rangle \longrightarrow |\tilde{\psi}_n(\lambda)\rangle = e^{i\Omega(\lambda)/\hbar} |\psi_n(\lambda)\rangle.$$

la connexion de Berry était modifiée de la manière suivante

$$\mathcal{A}_\ell(\lambda) \longrightarrow \tilde{\mathcal{A}}_\ell(\lambda) = \mathcal{A}_\ell(\lambda) - \nabla\Omega.$$

En prenant le rotationnel de cette équation, il est alors immédiat d'en déduire

$$\mathcal{B}_\ell(\lambda) \longrightarrow \tilde{\mathcal{B}}_\ell(\lambda) = \mathcal{B}_\ell(\lambda) \quad (3.45)$$

La courbure de Berry $\mathcal{B}_\ell(\lambda)$ étant invariante de jauge, on peut considérer qu'il s'agit d'une quantité physique du système, tout comme la phase de Berry attachée à un circuit fermé $\mathcal{C}$. Toutefois, à la différence de la phase géométrique qui caractérise une trajectoire dans l'espace de λ , la courbure de Berry est une quantité locale, tout comme le champ magnétique en électromagnétisme classique.

Les résultats trouvés pour $\Phi^{\text{geom.}}$, $\mathcal{A}_\ell$ et $\mathcal{B}_\ell$ présentent donc une similitude profonde avec ceux obtenus pour une charge se déplaçant dans un champ magnétique. Dans le cas particulier où le paramètre λ désigne la position $\mathbf{r}$ de la particule, on a la correspondance directe

$$\lambda \longleftrightarrow \mathbf{r}, \quad \mathcal{A}_\ell \longleftrightarrow q\mathbf{A}, \quad \mathcal{B}_\ell \longleftrightarrow q\mathbf{B}. \quad (3.46)$$

et la connection de Berry $\mathcal{A}_\ell$ a dans ce cas la dimension d'une impulsion.

Pour les calculs explicites, il peut être utile de disposer d'une expression de $\mathcal{B}_\ell$ pour laquelle l'invariance de jauge est manifeste. Pour cela, repartons de l'expression (3.43) et introduisons une relation de fermeture dans les différents termes :

$$\langle \partial_2 \psi_\ell | \partial_3 \psi_\ell \rangle - \langle \partial_3 \psi_\ell | \partial_2 \psi_\ell \rangle = \sum_n \langle \partial_2 \psi_\ell | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \partial_3 \psi_\ell \rangle - \langle \partial_3 \psi_\ell | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \partial_2 \psi_\ell \rangle. \quad (3.47)$$

Remarquons que le terme $n = \ell$ de la somme a une contribution nulle, en raison de la relation

$$\langle \psi_\ell | \psi_\ell \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \langle \partial_j \psi_\ell | \psi_\ell \rangle + \langle \psi_\ell | \partial_j \psi_\ell \rangle = 0. \quad (3.48)$$

Par ailleurs, l'équation aux valeurs propres $\hat{H}|\psi_\ell\rangle = E_\ell|\psi_\ell\rangle$ donne après différenciation :

$$(\partial_j \hat{H})|\psi_\ell\rangle + \hat{H}|\partial_j \psi_\ell\rangle = (\partial_j E_\ell)|\psi_\ell\rangle + E_\ell|\partial_j \psi_\ell\rangle \quad (3.49)$$

soit, pour $n \neq \ell$:

$$\langle \psi_n | \partial_j \hat{H} | \psi_\ell \rangle = (E_\ell - E_n) \langle \psi_n | \partial_j \psi_\ell \rangle. \quad (3.50)$$

En reportant cette expression dans (3.47), puis dans (3.43), on arrive à l'expression suivante pour la courbure de Berry :

$$\mathcal{B}_\ell(\lambda) = i\hbar \sum_{n \neq \ell} \frac{\langle \psi_\ell | \nabla \hat{H} | \psi_n \rangle \times \langle \psi_n | \nabla \hat{H} | \psi_\ell \rangle}{(E_\ell - E_n)^2}. \quad (3.51)$$

Sous cette forme, l'invariance de jauge est manifeste puisque chaque terme de la somme est inchangé quand on modifie la phase d'un ou plusieurs états propres $|\psi_n\rangle$. Cette expression est bien appropriée aux calculs numériques, dans lesquels il n'est pas toujours facile d'imposer une phase régulière aux différents états propres issus de la diagonalisation de $\hat{H}$.

Remarque 1. On a supposé dans tout ce qui précède que l'approximation adiabatique était valable, ce qui nécessite que l'état ψ_ℓ ne soit jamais de même énergie qu'un autre état ψ_n . On voit plus précisément sur (3.51) que si l'énergie de l'état ψ_ℓ se rapproche de celle d'un état ψ_n , le terme correspondant de la somme va devenir très important, voire diverger s'il existe un point λ où les deux énergies ont égales.

Remarque 2. Nous avons défini une courbure de Berry pour chaque état propre ψ_ℓ de l'hamiltonien. Considérons maintenant la quantité

$$\sum_\ell \mathcal{B}_\ell(\lambda). \quad (3.52)$$

Il est clair d'après (3.51) que cette quantité est toujours nulle. En effet chaque couple d'états propres (ψ_ℓ, ψ_n) contribue deux fois à la somme, ces deux contributions étant opposées.

3 Exemples

3-1 Spin dans un champ magnétique extérieur

Un des exemples les plus simples dans lesquels la phase de Berry apparaît porte sur le cas déjà évoqué plus haut d'un moment magnétique $\hat{\mu}$ associé à un spin $S = 1/2$:

$$\hat{\mu} = \mu \hat{\sigma}, \quad (3.53)$$

où les $\hat{\sigma}_i$, $i = x, y, z$ sont les trois matrices de Pauli :

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.54)$$

Ce moment magnétique est plongé dans un champ magnétique extérieur $\mathbf{B}$. Nous avons déjà introduit l'hamiltonien de couplage

$$\hat{H} = -\mathbf{B} \cdot \hat{\mu} = \frac{\hbar\omega}{2} \mathbf{n} \cdot \hat{\sigma} \quad (3.55)$$

où la pulsation de Larmor ω est définie par

$$\frac{\hbar\omega}{2} = -\mu B, \quad (3.56)$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur unitaire repérant la direction du champ magnétique ($\mathbf{n} = \mathbf{B}/B$). Les états propres de l'hamiltonien sont notés $|\pm : \mathbf{n}\rangle$ et ont pour énergie $\pm\hbar\omega/2$. Dans ce problème, le champ extérieur joue le rôle du paramètre λ de sorte que

$$\lambda \equiv B, \quad \nabla H = -\hat{\mu}. \quad (3.57)$$

Le calcul de la courbure de Berry définie en (3.51) est alors simple puisqu'un seul terme figure dans la somme sur $n \neq \ell$:

$$\mathcal{B}_+ = i\hbar \frac{\langle + : \mathbf{n} | \hat{\mu} | - : \mathbf{n} \rangle \times \langle - : \mathbf{n} | \hat{\mu} | + : \mathbf{n} \rangle}{(\hbar\omega)^2}, \quad \mathcal{B}_- = -\mathcal{B}_+. \quad (3.58)$$

Le calcul du numérateur de cette expression est un peu technique, mais ne pose pas de difficulté de principe. Pour le simplifier, supposons que $\mathbf{n}$ est parallèle à l'axe z . On a alors :

$$\langle + : \mathbf{u}_z | \hat{\mu} | - : \mathbf{u}_z \rangle = \mu(\mathbf{u}_x + i\mathbf{u}_y), \quad (3.59)$$

de sorte que le numérateur est égal à $\mu^2 (\mathbf{u}_x + i\mathbf{u}_y) \times (\mathbf{u}_x - i\mathbf{u}_y) = -i2\mu^2 \mathbf{u}_z$. En revenant à une orientation quelconque pour $\mathbf{B}$, on trouve :

$$\mathcal{B}_+ = +\hbar \frac{B}{2B^3}, \quad \mathcal{B}_- = -\hbar \frac{B}{2B^3}. \quad (3.60)$$

Cette formule permet d'évaluer directement la phase de Berry acquise par le moment magnétique quand le champ magnétique $\mathbf{B}$ effectue lentement un contour fermé⁵

$$\mathcal{C} : \quad \mathbf{B}(0) \rightarrow \mathbf{B}(t) \rightarrow \mathbf{B}(T) = \mathbf{B}(0). \quad (3.61)$$

Le résultat général (3.41) s'écrit dans ce cas particulier

$$\Phi_{\pm}^{\text{geom.}}(\mathcal{C}) = \frac{1}{\hbar} \iint_S \mathcal{B}_{\pm} \cdot d^2\mathbf{S} = \pm \iint_S \frac{\mathbf{B}}{2B^3} \cdot d^2\mathbf{S} = \pm \frac{\Omega}{2}, \quad (3.62)$$

où la surface S s'appuie sur le contour $\mathcal{C}$, et où Ω désigne l'angle solide sous-tendu par $\mathcal{C}$ depuis l'origine $\mathbf{B} = 0$.

L'expérience a été menée peu de temps après la proposition de Berry sur un jet de neutrons par Bitter & Dubbers (1987). Les neutrons de vitesse $v = 500$ m/s se propagent à l'intérieur d'un solénoïde long de 40 cm dans lequel règne un champ magnétique hélicoïdal, avec une composante uniforme selon z et tournant dans le plan xy (figure 3.3). L'enroulement est tel que le champ $\mathbf{B}$ fait un tour complet sur la longueur du solénoïde : on a bien une trajectoire fermée dans l'espace des paramètres. L'état de polarisation des neutrons à l'entrée du solénoïde est ajustable et peut se décomposer sur les deux états propres locaux $|\pm\rangle$. La différence entre les phases accumulées par chaque composante se traduit par une rotation de la polarisation en sortie de solénoïde. L'expérience a donné des résultats en excellent accord avec la prédiction de Berry : la phase accumulée est proportionnelle à l'angle solide décrit par le champ magnétique $\mathbf{B}$ le long de la trajectoire des neutrons. Cette expérience a ensuite été reprise avec des atomes neutres par Miniatura et al. (1992).

5. Rappelons encore une fois l'hypothèse suivante : il n'y a pas de dégénérescence entre les niveaux d'énergie de $\hat{H}$, ce qui signifie dans ce cas que le contour ne passe pas par le champ nul $\mathbf{B} = 0$. Si le contour passait par ce point, il ne serait pas possible d'utiliser l'approximation adiabatique et le résultat (3.60) perdrait son sens.

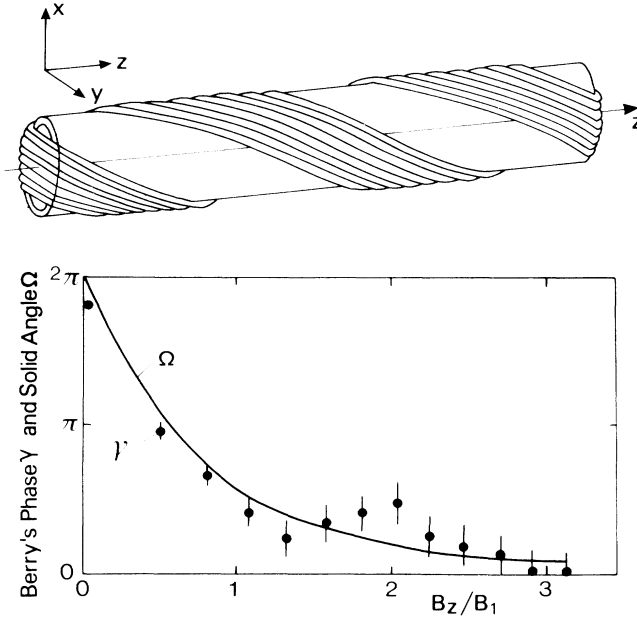


FIGURE 3.3. Haut : Solénoïde utilisé par Bitter & Dubbers (1987) pour mettre en évidence la phase de Berry sur le spin d'un jet de neutrons se propageant selon la direction z . Bas : comparaison de la phase de Berry accumulée par un neutron et l'angle solide décrit par le champ magnétique le long de la trajectoire.

3-2 Lien avec le transport parallèle

Nous avons obtenu l'expression de la phase de Berry en utilisant des concepts quantiques : équation de Schrödinger, phase d'un vecteur d'état, etc. Néanmoins, des notions équivalentes apparaissent en physique classique (Hannay 1985); nous allons en donner un exemple basé sur la notion de transport parallèle.

Considérons une sphère centrée en $\mathbf{r} = 0$, par exemple la surface de la Terre, et donnons-nous un vecteur $\mathbf{e}_i$ en un point initial donné $\mathbf{r}_i$ de la sphère, repéré par sa latitude θ_i et sa longitude φ_i . On définit la notion de transport parallèle de ce vecteur vers un autre point $\mathbf{r}$ de la sphère en

imposant :

- que le vecteur transporté reste tangent à la sphère, soit $\mathbf{e} \cdot \mathbf{r} = 0$ à chaque instant,
- qu'on n'induisse pas de torsion normale à la surface de la sphère durant le transport. Étant donné le trièdre direct

$$\{\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{r}\} \quad \text{avec} \quad \mathbf{e}' = \mathbf{r} \times \mathbf{e}, \quad (3.63)$$

le vecteur $\boldsymbol{\Omega}$ décrivant à chaque instant la rotation de ce trièdre par l'intermédiaire de

$$\dot{\mathbf{e}} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{e}, \quad \dot{\mathbf{r}} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}, \quad \dot{\mathbf{e}}' = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{e}', \quad (3.64)$$

doit vérifier

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{r} = 0. \quad (3.65)$$

En d'autres termes, l'évolution des vecteurs $\mathbf{e}$ et $\mathbf{e}'$ doit vérifier

$$\mathbf{e} \cdot \dot{\mathbf{e}}' = 0, \quad \dot{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{e}' = 0. \quad (3.66)$$

Supposons que l'on fasse un transport parallèle le long d'un circuit fermé $\mathcal{C}$ à la surface de la sphère. Partant d'un vecteur $\mathbf{e}_i$, le calcul (non trivial) montre que le vecteur $\mathbf{e}_f$ auquel on aboutit après transport sur ce circuit a tourné autour de $\mathbf{r}$ d'un angle $\alpha(\mathcal{C})$, qui n'est autre que l'angle solide sous-tendu par $\mathcal{C}$ depuis le centre de la sphère. La même rotation⁶ apparaît pour le vecteur $\mathbf{e}'_i$, ce qui permet de mettre ce résultat du transport parallèle sous une forme très voisine de la phase géométrique de Berry :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}: \quad \Psi_i = \mathbf{e}_i + i\mathbf{e}'_i &\longrightarrow \Psi_f = \mathbf{e}_f + i\mathbf{e}'_f \\ &= (\mathbf{e}_i \cos \alpha + \mathbf{e}'_i \sin \alpha) + i(-\mathbf{e}_i \sin \alpha + \mathbf{e}'_i \cos \alpha) \\ &= e^{-i\alpha} \Psi_i. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Nous n'allons pas prouver cette relation dans le cas général (voir par exemple Berry (1989)), mais vérifions-là sur un exemple (figure 3.4). Partons du point $\mathbf{r}$ situé sur l'équateur avec une longitude $\varphi_i = 0$ et prenons $\mathbf{e}_i$ pointant vers le pôle et $\mathbf{e}'_i$ aligné avec l'équateur :

$$\text{Départ sur l'équateur, } \varphi = 0: \quad \mathbf{e}_i = \mathbf{u}_z, \quad \mathbf{e}'_i = -\mathbf{u}_y. \quad (3.68)$$

6. C'est forcément la même puisqu'on a imposé que le trièdre $\{\mathbf{e}, \mathbf{e}', \mathbf{r}\}$ reste orthogonal et direct lors du transport.

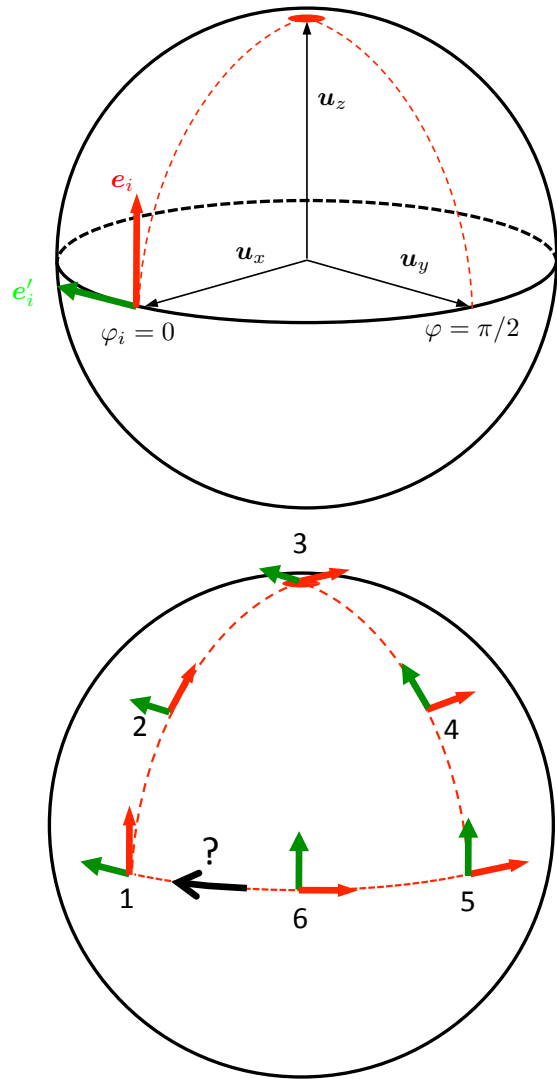


FIGURE 3.4. Transport parallèle : on a représenté en haut la situation de départ présentée à l'équation (3.68). Le dessin du bas représente 6 étapes du transport décrit dans le texte. Quand on complète la boucle après l'étape 6, la paire de vecteurs e, e' ne coïncide plus avec les vecteurs de départ e_i, e'_i .

Suivons le chemin qui monte le long du méridien depuis l'équateur jusqu'au pôle nord. On a alors :

$$\text{Pôle nord : } e = -u_x, \quad e' = -u_y. \quad (3.69)$$

Une fois au pôle, redescendons le long d'un autre méridien, plus précisément celui de longitude $\varphi = \pi/2$. On voit qu'une fois arrivés sur l'équateur, les vecteurs e, e' ont été transportés en

$$\text{Equateur, } \varphi = \pi/2 : \quad e = -u_x, \quad e' = +u_z. \quad (3.70)$$

Pour fermer le circuit, il reste à effectuer un quart de tour sur l'équateur, qui ne change pas e' et qui envoie e sur u_y :

$$\text{Fin sur l'équateur, } \varphi = 0 : \quad e_f = u_y, \quad e'_f = u_z. \quad (3.71)$$

Les deux vecteurs e et e' ont donc tourné d'un angle $\pi/2$ lors de ce transport parallèle le long du contour $\mathcal{C}$. Ce résultat est en accord avec la formule générale (3.67), puisque ce contour fermé sous-tend un angle solide (négatif) de valeur absolue égale à $1/8^{\text{ème}}$ de 4π , donc $\pi/2$:

$$\Psi_i = u_z - iu_y \rightarrow \Psi_f = u_y + iu_z = e^{i\pi/2} \Psi_i. \quad (3.72)$$

3-3 Le pendule de Foucault

Un exemple célèbre de transport parallèle, et par conséquent de phase géométrique, est le pendule de Foucault. Rappelons que dans l'expérience de Foucault, on considère un pendule suspendu en un point lié au référentiel terrestre et on voit le plan d'oscillation du pendule tourner avec une vitesse angulaire

$$\Omega = \Omega_0 \sin \lambda \quad (3.73)$$

où Ω est la vitesse angulaire de rotation sur elle-même [$1/(24 \text{ heures})$] et λ la latitude du lieu. Sur l'équateur, il n'y a pas de précession du plan d'oscillation ; aux pôles, la précession se fait en 24 heures⁷. La précession se fait dans le sens horaire dans l'hémisphère nord et dans le sens anti-horaire dans l'hémisphère sud.

⁷. Le phénomène est alors trivial, puisque le point d'accroche du pendule ne bouge pas.

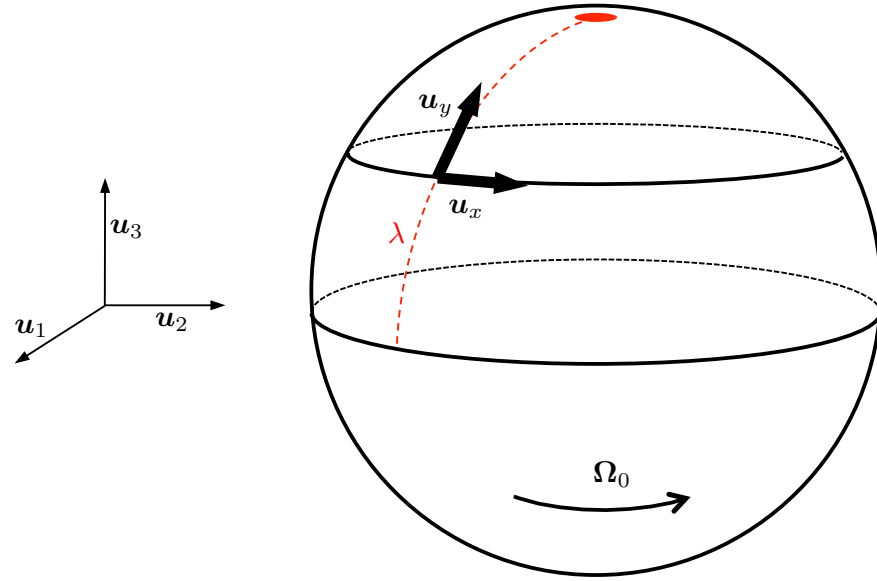


FIGURE 3.5. Repérage d'un point à la surface de la Terre pour l'analyse du mouvement du pendule de Foucault.

Rappelons le traitement mathématique de l'oscillation du pendule. On commence par se donner un référentiel fixe $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$ (cf. figure 3.5), puis un référentiel lié à la Terre, $\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y, \mathbf{u}_z$, la verticale étant orientée selon $\mathbf{u}_z$. Dans le plan horizontal, on peut prendre par exemple $\mathbf{u}_x$ pointant vers l'est et $\mathbf{u}_y$ pointant vers le nord

$$\mathbf{u}_x = -\mathbf{u}_1 \sin(\Omega_0 t) + \mathbf{u}_2 \cos(\Omega_0 t), \quad (3.74)$$

$$\mathbf{u}_y = -[\mathbf{u}_1 \cos(\Omega_0 t) + \mathbf{u}_2 \sin(\Omega_0 t)] \sin \lambda + \mathbf{u}_3 \cos \lambda \quad (3.75)$$

L'oscillation du pendule a lieu quasiment dans le plan horizontal et l'équation du mouvement dans ce plan s'écrit en bonne approximation :

$$\ddot{x} = -\omega^2 x + 2\Omega \dot{y}, \quad \ddot{y} = -\omega^2 y - 2\Omega \dot{x}, \quad (3.76)$$

où ω est la pulsation du pendule et où le terme proportionnel à Ω est dû à la force de Coriolis. Dans le régime (réaliste) où $\Omega \ll \omega$, on résout ces

équations en introduisant la variable complexe $u = x + iy$, qui obéit à l'équation

$$\ddot{u} + 2i\Omega \dot{u} + \omega^2 u = 0 \quad (3.77)$$

et on cherche une solution approchée en $u(t) = \tilde{u}(t) e^{i\omega t}$, où $\tilde{u}$ détermine l'orientation du plan d'oscillation du pendule et évolue lentement : $\tilde{u}(t) \approx \tilde{u}(0) e^{-i\Omega t}$. Plus précisément, l'oscillation se fait le long de la droite de vecteur directeur

$$\mathbf{U} = \mathcal{R}e(\tilde{u}) \mathbf{u}_x + \mathcal{I}m(\tilde{u}) \mathbf{u}_y. \quad (3.78)$$

On peut alors vérifier que le vecteur $\mathbf{U}$ déterminant le plan d'oscillation du pendule évolue en subissant un transport parallèle. Si on note $\mathbf{V}$ le vecteur du plan horizontal orthogonal à $\mathbf{U}$, les expressions précédentes conduisent à

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} \cdot \mathbf{V} = 0, \quad \mathbf{U} \cdot \frac{d\mathbf{V}}{dt} = 0. \quad (3.79)$$

Après un tour complet de la Terre sur elle-même, le vecteur $\mathbf{U}$ ne revient donc pas en son point de départ : il tourne d'une quantité égale à l'angle solide décrit par la verticale au niveau du pendule, c'est-à-dire $2\pi(1 - \sin \lambda)$. C'est précisément le résultat trouvé par Foucault.

3-4 Lumière dans une fibre optique

Un autre exemple dans lequel la phase géométrique se manifeste de manière très claire est la propagation d'une lumière polarisée dans une fibre monomode isotrope. Si la fibre est rectiligne, la polarisation ne tourne pas, tout est simple. Si la fibre est courbée, mais planaire, là encore la situation est facile à analyser. L'axe de polarisation perpendiculaire au plan est préservé, et par conséquent l'autre axe de polarisation, contenu dans le plan, tourne avec la fibre.

La situation est plus subtile quand la fibre subit une torsion et qu'elle n'est plus planaire. C'est le cas de la géométrie envisagée par Tomita et Chiao et reproduite en figure 3.6, où la fibre est enroulée de manière hélicoïdale sur un cylindre (Tomita & Chiao 1986). L'enroulement est tel que les vecteurs tangents à la fibre en entrée et en sortie sont égaux.

On envoie une polarisation linéaire en entrée de fibre et on détecte en sortie de fibre une polarisation elle aussi linéaire. Mais cette dernière a

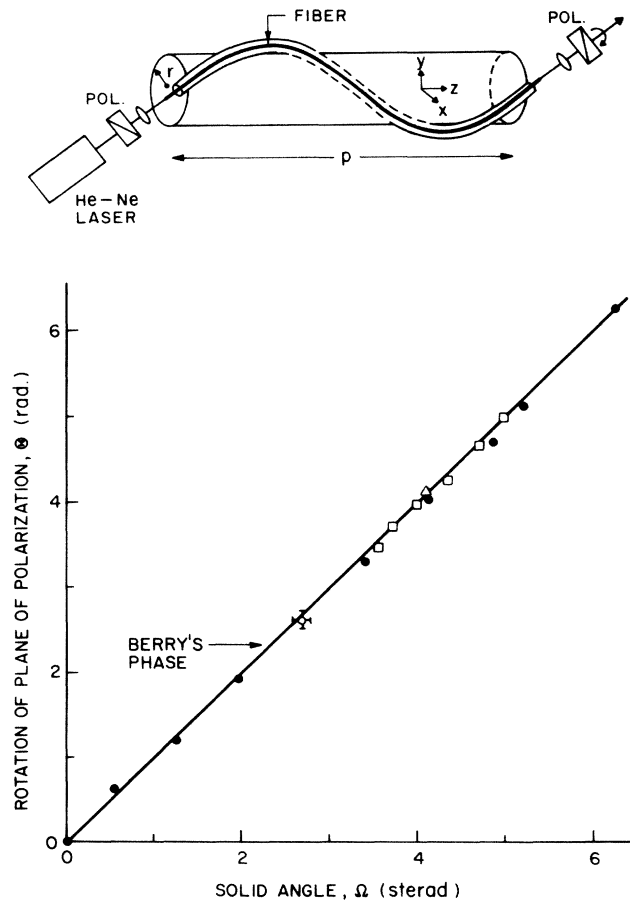


FIGURE 3.6. Expérience de Tomita & Chiao (1986): de la lumière linéairement polarisée est envoyée dans une fibre optique enroulée sur un cylindre. En sortie de fibre, la lumière est toujours polarisée linéairement, mais le vecteur polarisation a tourné. L'angle de rotation est directement relié à l'angle solide balayé par le vecteur tangent à la fibre, comme attendu compte tenu des équations du transport parallèle qui régissent la propagation dans la fibre. Les différents symboles correspondent à différents types d'enroulement.

tourné par rapport à la polarisation initiale, d'un angle directement relié à la phase de Berry, c'est-à-dire l'angle solide décrit par le vecteur tangent à la fibre le long de l'enroulement (figure 3.6). Tomita & Chiao (1986) ont vérifié que cette rotation de la polarisation dépendait de l'angle solide, mais pas de la régularité de l'enroulement sur le cylindre.

Tomita & Chiao (1986) ont initialement interprété leurs résultats en termes quantiques, fondés sur un traitement similaire à celui que nous avons présenté ci-dessus : la polarisation correspond au spin du photon et l'expérience – même si elle est menée avec un grand nombre de photons préparés dans un état cohérent – révèle cette phase quantique. Certains auteurs comme Haldane (1987) ont contesté cette interprétation quantique, en insistant sur le fait qu'il s'agissait d'un simple effet lié à la géométrie différentielle (voir également la réponse de Chiao & Tomita (1987)). Une synthèse instructive de ce débat a été faite par Berry (1990) qui souligne deux points :

- On peut montrer explicitement à partir des équations de Maxwell que la propagation de la lumière dans une fibre se fait en suivant les lois du transport parallèle pour la polarisation de la lumière (Berry 1987). Le lien avec la phase géométrique classique en découle naturellement.
- La question de savoir s'il s'agit d'un phénomène classique ou quantique est selon Berry un « pseudo-problème » et il appuie cette conclusion en citant Feynman : *The photon equation is just the same as Maxwell's equations*. En d'autres termes, pour les processus en jeu ici, les équations classiques et quantiques sont les mêmes et le débat n'a pas lieu d'être.

4 Approche à la Born–Oppenheimer

Nous avons jusqu'ici considéré deux types de variables pour paramétrer notre système. D'une part, nous avons décrit de manière quantique une partie de la dynamique de ce système, les variables associées étant par exemple l'opérateur moment magnétique $\hat{\mu}$ dans (3.55). D'autre part, nous avons supposé l'existence de variables extérieures au système, traitées ici comme des paramètres classiques, et regroupées sous la dénomination générique λ .

Nous allons dans la suite de ce cours nous intéresser à des situations où ces variables λ sont elles-mêmes quantiques. L'exemple prototype est le suivant : considérons un atome susceptible de bouger dans un champ lumineux. On peut s'intéresser à un traitement classique du mouvement du centre de masse de l'atome, en lui assignant une position $\mathbf{r}$ (i.e. $\lambda \equiv \mathbf{r}$). L'évolution des variables internes de l'atome, c'est-à-dire la dynamique de son cortège électronique, est alors décrite par un hamiltonien $\hat{H}_{\text{int}}(\mathbf{r})$ décrivant le couplage de l'atome au point $\mathbf{r}$ avec le champ lumineux. Mais on peut également avoir besoin d'une description quantique du mouvement du centre de masse des atomes, par exemple lorsque ces derniers sont suffisamment froids pour que le caractère ondulatoire de leur mouvement joue un rôle important dans la dynamique considérée. La position $\mathbf{r}$ devient alors un opérateur, $\hat{\mathbf{r}}$, conjugué à l'opérateur position $\hat{\mathbf{p}}$.

La question qu'il nous faut alors aborder est la suivante : comment les résultats précédents, comme l'existence d'une courbure de Berry, se transposent-ils au cas d'une description quantique ? Nous allons voir que cette transposition est en faite très directe, et que l'on aboutit à un hamiltonien en parfaite analogie avec celui d'une particule chargée en mouvement dans un champ magnétique (Berry 1989; Mead & Truhlar 1979; Moody et al. 1989): la phase de Berry fournit bien un moyen de générer un champ magnétique artificiel.

4-1 Traitement quantique des « variables lentes »

Nous allons considérer dans ce qui suit une particule de masse M , d'opérateurs position et impulsion $\hat{\mathbf{r}}$ et $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$, dotée d'une dynamique interne décrite par l'hamiltonien $\hat{H}_{\text{int}}(\mathbf{r})$. La dépendance en $\mathbf{r}$ de cet hamiltonien interne est due au fait que la particule peut posséder un dipôle électrique ou magnétique (permanent ou induit), et que ce dipôle peut interagir avec des champs électromagnétiques imposés de l'extérieur. L'hamiltonien total décrivant le mouvement de cette particule est donc

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} \otimes \hat{\mathbf{1}}_{\text{int}} + \hat{H}_{\text{int}}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (3.80)$$

Le point de départ de notre traitement va être similaire à ce qui précède. Nous supposons qu'en tout point $\mathbf{r}$ de l'espace, nous pouvons diagonaliser

l'hamiltonien interne $\hat{H}_{\text{int}}$:

$$\hat{H}_{\text{int}}(\mathbf{r})|\psi_n(\mathbf{r})\rangle = E_n(\mathbf{r}) |\psi_n(\mathbf{r})\rangle. \quad (3.81)$$

En tout point $\mathbf{r}$, l'ensemble $\{|\psi_n(\mathbf{r})\rangle\}$ forme une base orthonormée de l'espace de Hilbert associé aux degrés de liberté internes de la particule. En pratique, cet espace de Hilbert sera de dimension finie : dimension 2 dans le cas de la modélisation la plus simple d'un « atome à deux niveaux », dimension $(2J_g + 1) + (2J_e + 1)$ dans le cas plus réaliste d'une transition entre un niveau fondamental de moment cinétique J_g couplé par un champ lumineux à un niveau excité de moment cinétique J_e . Notons que pour simplifier, nous supposons que l'hamiltonien interne $\hat{H}_{\text{int}}$ est indépendant du temps. Les états propres $|\psi_n(\mathbf{r})\rangle$ et les énergies associées sont donc également indépendants du temps.

L'état quantique *total* de la particule à un instant t , caractérisant à la fois ses degrés de liberté internes et externes peut s'écrire :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n \phi_n(\mathbf{r}, t) |\psi_n(\mathbf{r})\rangle. \quad (3.82)$$

La caractérisation de la dynamique de l'atome se ramène alors à la détermination des amplitudes de probabilité $\phi_n(\mathbf{r}, t)$ pour trouver la particule au point $\mathbf{r}$ dans l'état interne $|\psi_n(\mathbf{r})\rangle$.

Commençons par injecter cette expression dans l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}_{\text{tot}} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + \hat{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.83)$$

et projetons cette équation sur un état interne donné en la multipliant par $\langle \psi_n |$:

$$i\hbar \frac{\partial \phi_n}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{\ell} \langle \psi_n | [\Delta (\phi_{\ell} |\psi_{\ell}\rangle)] + E_n \phi_n \quad (3.84)$$

où nous avons omis les dépendances explicites en $\mathbf{r}$ et t pour simplifier l'écriture. À ce stade, aucune approximation n'a été faite et la résolution du système d'équations aux dérivées partielles (3.84) permet en principe d'extraire la dynamique complète de la particule.

4-2 Équation de Schrödinger effective

Supposons maintenant que la particule est préparée initialement dans un des états internes ψ_ℓ et que la dynamique de cette particule soit telle que l'on peut supposer en bonne approximation que seul ce état ψ_ℓ reste appréciablement occupé au cours de temps :

$$\forall t : \int |\phi_n(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r \ll 1 \quad \text{si } n \neq \ell. \quad (3.85)$$

Il s'agit de l'équivalent de l'approximation adiabatique utilisée plus haut. La validité de cette approximation dépend à la fois de l'état initial $\phi_\ell(\mathbf{r}, t = 0)$ (les vitesses correspondantes sont-elles suffisamment basses ?) et de la structure de l'hamiltonien $\hat{H}_{\text{int}}$ (le niveau ℓ ne devient-il pas quasi dégénéré, les accélérations possibles ne sont-elles pas trop fortes ?). Si cette approximation est correcte, ce que nous allons supposer, nous pouvons conserver uniquement le terme $n = \ell$ dans le système d'équations (3.84) :

$$i\hbar \frac{\partial \phi_\ell}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \langle \psi_\ell | [\Delta (\phi_\ell | \psi_\ell)] \rangle + E_\ell \phi_\ell \quad (3.86)$$

Il reste à expliciter l'action de l'opérateur laplacien :

$$\Delta (\phi_\ell | \psi_\ell) = (\Delta \phi_\ell) | \psi_\ell \rangle + 2 \nabla \phi_\ell \cdot | \nabla \psi_\ell \rangle + \phi_\ell (\Delta | \psi_\ell \rangle), \quad (3.87)$$

quantité qu'on multiplie par le bra $\langle \psi_\ell |$. Le premier terme du membre de droite donne simplement $\Delta \phi_\ell$ et le deuxième terme fait apparaître la connexion de Berry :

$$\mathcal{A}_\ell(\mathbf{r}) = i\hbar \langle \psi_\ell | \nabla \psi_\ell \rangle. \quad (3.88)$$

En utilisant $\hat{p} = -i\hbar \nabla$, le deuxième terme de (3.87) s'écrit

$$2 \nabla \phi_\ell \cdot \langle \psi_\ell | \nabla \psi_\ell \rangle = \frac{2}{\hbar^2} (\mathcal{A}_\ell \cdot \hat{p}) \phi_\ell. \quad (3.89)$$

Finalement, l'équation du mouvement pour l'amplitude de probabilité $\phi_\ell(\mathbf{r}, t)$ peut se mettre sous la forme d'une équation de Schrödinger effective :

$$i\hbar \frac{\partial \phi_\ell}{\partial t} = \left[\frac{(\hat{p} - \mathcal{A}_\ell(\mathbf{r}))^2}{2M} + E_\ell(\mathbf{r}) + \mathcal{V}_\ell(\mathbf{r}) \right] \phi_\ell(\mathbf{r}, t), \quad (3.90)$$

où on a introduit le *potentiel scalaire* $\mathcal{V}_\ell$ qui regroupe tous les termes fonction de $\mathbf{r}$ venant multiplier $\phi_\ell(\mathbf{r}, t)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_\ell(\mathbf{r}) &= -i\frac{\hbar}{2M} \nabla \cdot \mathcal{A}_\ell - \frac{\mathcal{A}_\ell^2(\mathbf{r})}{2M} - \frac{\hbar^2}{2M} \langle \psi_\ell | (\Delta | \psi_\ell \rangle) \\ &= \frac{\hbar^2}{2M} (\langle \nabla \psi_\ell | \cdot | \nabla \psi_\ell \rangle - \langle \nabla \psi_\ell | \psi_\ell \rangle \cdot \langle \psi_\ell | \nabla \psi_\ell \rangle) \\ &= \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{n \neq \ell} |\langle \nabla \psi_\ell | \psi_n \rangle|^2 \end{aligned} \quad (3.91)$$

La forme (3.90) pour l'équation du mouvement de $\phi_\ell(\mathbf{r}, t)$ est très suggestive. Elle est identique à celle régissant le mouvement d'une particule chargée évoluant dans un champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ dérivant du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Plus précisément, la connexion de Berry $\mathcal{A}_\ell(\mathbf{r})$ joue le rôle du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ si on donne par convention une charge $q = 1$ à la particule. Ceci vient confirmer l'analogie déjà pressentie entre la phase $\Phi^{\text{A-B}}$ de Aharonov–Bohm et la phase géométrique de Berry

$$\Phi^{\text{A-B}}(\mathcal{C}) = \frac{q}{\hbar} \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad \longleftrightarrow \quad \Phi_\ell^{\text{Berry}}(\mathcal{C}) = \frac{1}{\hbar} \oint_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_\ell(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (3.92)$$

En plus du magnétisme orbital artificiel qui apparaît dans (3.90), deux termes viennent contribuer à la dynamique de la particule. Le premier est simplement l'énergie $E_\ell(\mathbf{r})$, associée à l'état interne $|\psi_\ell\rangle$ de la particule. L'origine de ce terme, qui était également à l'origine de la phase dynamique (3.33), est bien claire et nous ne la commenterons pas. L'origine du potentiel scalaire $\mathcal{V}(\mathbf{r})$ est plus subtile et mérite d'être explorée, ce que nous allons faire dans le paragraphe qui suit.

4-3 Interprétation physique du potentiel scalaire

Pour comprendre l'origine du potentiel scalaire $\mathcal{V}_\ell(\mathbf{r})$ apparaissant dans (3.90), nous allons revenir au formalisme semi-classique, qui consiste à traiter quantiquement les degrés de liberté internes de la particule, mais classiquement ses degrés de liberté externes (position $\mathbf{r}$ et impulsion $\mathbf{p}$ du centre de masse).

Commençons par définir l'opérateur force $\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r})$ déduit de l'hamiltonien initial :

$$\hat{\mathbf{F}} = -\nabla_{\mathbf{r}} \left(\hat{H}_{\text{tot}} \right) = -\nabla_{\mathbf{r}} \left(\hat{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}) \right). \quad (3.93)$$

Nous remarquons qu'une particule préparée dans l'état interne ψ_ℓ est dans un état propre de $\hat{H}_{\text{int}}$, mais pas dans un état propre de $\hat{\mathbf{F}}$. En d'autres termes :

$$\langle \hat{\mathbf{F}}^2 \rangle \neq \langle \hat{\mathbf{F}} \rangle^2, \quad (3.94)$$

ce qui signifie que la force agissant sur l'atome subit des fluctuations quantiques autour de sa valeur moyenne. Nous allons voir que ces fluctuations se produisent aux fréquences de Bohr $\omega_{j\ell} = (E_j - E_\ell)/\hbar$ du mouvement quantique interne. L'approximation adiabatique tire parti du fait que ces fréquences sont beaucoup plus élevées que les fréquences caractéristiques du mouvement du centre de masse. Par conséquent, les fluctuations quantiques de la force créent un micro-mouvement de la particule, semblable à celui qui se produit pour des particules chargées dans un piège de Paul. L'énergie cinétique de ce micro-mouvement joue le rôle d'une énergie potentielle pour le mouvement du centre de masse, qui est à l'origine du potentiel scalaire $\mathcal{V}(\mathbf{r})$ (Aharonov & Stern 1992; Cheneau et al. 2008).

Opérateur force. Partant de l'expression suivante pour $\hat{H}_{\text{int}}(\mathbf{r})$

$$\hat{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}) = \sum_n E_n(\mathbf{r}) \hat{P}_n(\mathbf{r}) \quad \text{avec} \quad \hat{P}_n(\mathbf{r}) = |\psi_n(\mathbf{r})\rangle\langle\psi_n(\mathbf{r})|, \quad (3.95)$$

on obtient l'expression de l'opérateur force :

$$\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r}) = \sum_n (\nabla E_n) \hat{P}_n + E_n (\nabla \hat{P}_n) \quad (3.96)$$

avec

$$\nabla \hat{P}_n = |\nabla \psi_n\rangle\langle\psi_n| + |\psi_n\rangle\langle\nabla \psi_n|. \quad (3.97)$$

Force moyenne. Il est simple de calculer la valeur moyenne de $\hat{\mathbf{F}}$ quand la particule est dans l'état ψ_ℓ . Le fait que

$$\langle \psi_\ell | \psi_\ell \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \langle \nabla \psi_\ell | \psi_\ell \rangle + \langle \psi_\ell | \nabla \psi_\ell \rangle = 0 \quad (3.98)$$

entraîne que la contribution du terme en $\nabla \hat{P}_n$ dans (3.96) s'annule et on obtient simplement

$$\langle \psi_\ell | \hat{\mathbf{F}} | \psi_\ell \rangle = -\nabla E_\ell. \quad (3.99)$$

Ce résultat est facilement interprétable : la particule se trouvant sur un niveau interne d'énergie $E_\ell(\mathbf{r})$, son centre de masse subit le champ de force dérivant de cette énergie. On retrouve d'ailleurs cette contribution sous forme d'énergie potentielle dans (3.90).

Fluctuations de la force. Les fluctuations de l'opérateur force quand la particule est préparée dans l'état interne ψ_ℓ sont caractérisées par la fonction de corrélation

$$C(t, t') = \frac{1}{2} \langle \delta \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t) \cdot \delta \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t') + \delta \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t') \cdot \delta \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (3.100)$$

où on pose $\delta \hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{F}} - \langle \hat{\mathbf{F}} \rangle$ et où les opérateurs dans (3.100) sont calculés en point de vue de Heisenberg. Rappelons ce point de vue ; les opérateurs tels que

$$\hat{Q}_{n,\ell}(\mathbf{r}) = |\psi_n(\mathbf{r})\rangle\langle\psi_\ell(\mathbf{r})| \quad (3.101)$$

dépendent du temps selon l'équation

$$i\hbar \dot{\hat{Q}} = [\hat{Q}, \hat{H}] \quad (3.102)$$

ce qui donne

$$\hat{Q}_{n,\ell}(\mathbf{r}, t) = \hat{Q}_{n,\ell}(\mathbf{r}, 0) e^{i\omega_{n\ell}t}. \quad (3.103)$$

Un calcul relativement long, mais sans difficulté conduit alors à :

$$C(\tau) = \sum_{n \neq \ell} C_n \cos(\omega_{n\ell}\tau), \quad (3.104)$$

où on a posé $\tau = t - t'$ et

$$C_n = \hbar^2 \omega_{n\ell}^2 |\langle \psi_\ell | \nabla \psi_n \rangle|^2. \quad (3.105)$$

Micro-mouvement. Pour analyser les conséquences des fluctuations quantiques de la force, considérons le problème classique équivalent ; supposons qu'une particule classique est soumise à une force stochastique $\mathbf{F}(t)$ telle que :

$$\overline{\mathbf{F}(t)} = 0, \quad \overline{\mathbf{F}(t) \cdot \mathbf{F}(t')} = C(t - t'). \quad (3.106)$$

La transformée de Fourier $\mathbf{f}(\omega)$ de $\mathbf{F}(t)$ est telle que

$$\overline{\mathbf{f}(\omega)} = 0, \quad \overline{\mathbf{f}^*(\omega) \cdot \mathbf{f}(\omega')} = \delta(\omega - \omega') B(\omega) \quad (3.107)$$

où

$$B(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{n \neq \ell} C_n [\delta(\omega + \omega_{n\ell}) + \delta(\omega - \omega_{n\ell})] \quad (3.108)$$

est la transformée de Fourier $C(\tau)$. La solution de l'équation du mouvement $\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F}$ est

$$\mathbf{p}(t) = \int \frac{\mathbf{f}(\omega)}{i\omega} e^{i\omega t} d\omega \quad (3.109)$$

ce qui correspond à une impulsion moyenne nulle. En revanche, l'énergie cinétique moyenne associée est strictement positive et égale à

$$\frac{\overline{\mathbf{p}^2}}{2M} = \int \frac{B(\omega)}{2M\omega^2} d\omega = \frac{1}{2M} \sum_{n \neq \ell} \frac{C_n}{\omega_{n\ell}^2} \quad (3.110)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{n \neq \ell} |\langle \psi_\ell | \nabla \psi_n \rangle|^2 = \mathcal{V}_\ell(\mathbf{r}). \quad (3.111)$$

Dans le calcul explicite de (3.111), la contribution du dénominateur en ω^{-2} se compense avec les termes $\omega_{n\ell}$ qui apparaissent dans l'expression (3.105) de C_n . Finalement, on retrouve exactement le résultat (3.91) pour le potentiel scalaire, ce qui justifie l'interprétation de ce potentiel comme une énergie cinétique associée au micro-mouvement.

En conclusion, aussi bien le potentiel vecteur $\mathcal{A}_\ell$ que le potentiel scalaire $\mathcal{V}_\ell$ peuvent être compris comme des signatures de l'existence d'un espace de Hilbert interne associé à la particule. Quand on fait l'approximation adiabatique et que l'on considère que la particule suit le niveau ψ_ℓ , on pourrait naïvement croire que la seule chose importante est le profil d'énergie $E_\ell(\mathbf{r})$. Ce n'est pas le cas : l'existence des autres états internes ψ_n ,

même s'ils ne sont pas peuplés, se manifeste au travers de ces deux potentiels, en venant donner une phase quantique non nulle sur une trajectoire fermée reliée au flux de la courbure de Berry $\mathcal{B}_\ell$ (3.47) et en modifiant le profil énergétique par l'intermédiaire du potentiel scalaire $\mathcal{V}_\ell$ (3.91).

5 Références

- Aharonov, Yakir & Ady Stern (1992), « Origin of the geometric forces accompanying Berry's geometric potentials », in *Phys. Rev. Lett.* 69.25, pp. 3593–3597.
- Berry, M. V. (1984), « Quantal phase factors accompanying adiabatic changes », in *Proc. Roy. Soc. London A* 392, pp. 45–57.
- (1987), « Interpreting the anholonomy of coiled light », in *Nature* 326, p. 277.
- (1989), « The Quantum Phase, Five Years After », in *Geometric Phases in Physics*, ed. by A. Shapere & F. Wilczek, Singapore: World Scientific, , pp. 7–28.
- (1990), « Quantum adiabatic anholonomy », in *Anomalies, phases, defects*, ed. by G. Marmo U. M. Bregola & G. Morandi, Bibliopolis, Naples, , pp. 125–181.
- Bitter, T. & D. Dubbers (1987), « Manifestation of Berry's topological phase in neutron spin rotation », in *Phys. Rev. Lett.* 59 (3), pp. 251–254.
- Cheneau, M., S. P. Rath, T. Yefsah, K. J. Gunter, G. Juzeliunas & J. Dalibard (2008), « Geometric potentials in quantum optics : A semi-classical interpretation », in *Europhys. Lett.* 83.6, p. 60001.
- Chiao, Raymond Y. & Akira Tomita (1987), « Tomita and Chiao reply », in *Phys. Rev. Lett.* 59 (15), pp. 1789–1789.
- Haldane, F. D. M. (1987), « Comment on "Observation of Berry's topological phase by use of an optical fiber" », in *Phys. Rev. Lett.* 59 (15), pp. 1788–1788.
- Hannay, J. H. (1985), « Angle variable Holonomy in the adiabatic excursion of an integrable Hamiltonian », in *Journal of Physics A* 18.2, pp. 221–230.
- Mead, C. Alden (1992), « The geometric phase in molecular systems », in *Rev. Mod. Phys.* 64 (1), pp. 51–85.
- Mead, C. Alden & Donald G. Truhlar (1979), « On the determination of Born–Oppenheimer nuclear motion wave functions including complica-

- tions due to conical intersections and identical nuclei », in *J. Chem. Phys.* 70.5, pp. 2284–2296.
- Messiah, A. (2003), *Mécanique Quantique*, Dunod.
- Miniatura, Ch., J. Robert, O. Gorceix, V. Lorent, S. Le Boiteux, J. Reinhardt & J. Baudon (1992), « Atomic interferences and the topological phase », in *Phys. Rev. Lett.* 69 (2), pp. 261–264.
- Moody, J., A. Shapere & F. Wilczek (1989), « Adiabatic Effective Lagrangians », in *Geometric Phases in Physics*, ed. by A. Shapere & F. Wilczek, Singapore: World Scientific, pp. 160–183.
- Pancharatnam, S. (1956), « Generalized Theory of Interference, and Its Applications. Part I. Coherent Pencils », in *Proc. Indian Acad. Sci. A* 44, pp. 247–262.
- Tomita, Akira & Raymond Y. Chiao (1986), « Observation of Berry's Topological Phase by Use of an Optical Fiber », in *Phys. Rev. Lett.* 57 (8), pp. 937–940.