

Champ moyen et théories effectives

Dans ce chapitre, on considère le problème de N corps en interaction que l'on traite à l'approximation du champ moyen. On va donc utiliser des théories effectives, soit en les dérivant de manière rigoureuse à partir d'un hamiltonien décrivant N corps en interaction (c'est l'exemple de l'approximation de Hartree-Fock pour des électrons en interaction ou du traitement par Bogoliubov du gaz de bosons), soit en utilisant des modèles phénoménologiques justifiés seulement par notre intuition et par leur capacité à décrire le système que l'on considère (exemple des oscillations Josephson dans les condensat de Bose).

1 Méthode du champ moyen

On considère N particules identiques placées dans un champ extérieur $V_{\text{ext}}(\vec{r})$. Les particules interagissent selon un potentiel U (penser par exemple aux électrons d'un atome placés dans le champ du noyau). Dans une approche simpliste on pense que chaque particule est décrite par une fonction d'onde $\varphi_i(\vec{r})$ ($i \in \{1, \dots, N\}$) avec

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\varphi_i + \{V_{\text{ext}}(\vec{r}) + V_{\text{H}}(\vec{r})\}\varphi_i = \varepsilon_i\varphi_i, \quad (1)$$

où $V_{\text{H}}(\vec{r})$ est le champ moyen (dit de Hartree) vu par la particule i :

$$V_{\text{H}}(\vec{r}) = \sum_{j \neq i} \int d^3r' |\varphi_j(\vec{r}')|^2 U(|\vec{r}' - \vec{r}|). \quad (2)$$

1.1 Gaz de bosons

Le cas d'un gaz dilué de bosons placés dans un piège harmonique à température nulle est un excellent exemple de l'efficacité de cette approche. Le mot "dilué" signifie que l'on est dans une limite où la distance inter-particules est grande devant la portée du potentiel U . Il est alors légitime de penser que l'on peut remplacer le potentiel U dans (2) par :

$$U(\vec{r}) \rightarrow g\delta(\vec{r}). \quad (3)$$

On pourrait imaginer fixer la constante g comme valant l'intégrale spatiale de U . Mais cette intégrale diverge. On fixe donc g en imposant que le potentiel effectif (3) ait les mêmes propriétés de diffusion que le potentiel exact. Ce n'est pas possible dans toute la gamme d'énergie, mais seules nous importent les configurations où l'énergie relative de deux atomes est faible. On se place donc dans ce cas, et alors le problème de diffusion de deux atomes est complètement caractérisé par la longueur de diffusion dans l'onde s (soit a) et $g = 4\pi\hbar^2 a/m^1$.

Comme on est à température nulle, il est naturel de se placer dans le cas de la condensation de Bose-Einstein, c'est à dire de supposer que les particules occupent toutes la même fonction d'onde φ et que le système est décrit par $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \varphi(\vec{r}_1) \times \dots \times \varphi(\vec{r}_N)$.

¹Cette présentation est trop schématique, et en toute rigueur, on doit utiliser des pseudo-potentiels plus élaborés que (3) (cf. par exemple [1]) mais cela n'a pas d'importance pour notre discussion.

Alors, l'équation (1) se met sous la forme dite de Gross-Pitaevskii :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\varphi + \{V_{\text{ext}}(\vec{r}) + (N-1)g|\varphi|^2\}\varphi = \mu\varphi. \quad (4)$$

Cette équation permet de très bien décrire les profils de densité observés dans les pièges harmoniques $V_{\text{ext}}(\vec{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2r^2$, comme le montre la figure ci-contre (tirée de la réf. [2]). Les points avec des barres d'erreurs sont expérimentaux. La courbe en trait plein est la solution de (4). Noter que bien que l'on soit dans la limite diluée, les interactions jouent un rôle considérable, comme le montre la comparaison avec le profil qu'aurait un gaz sans interaction (en tirets sur la figure).

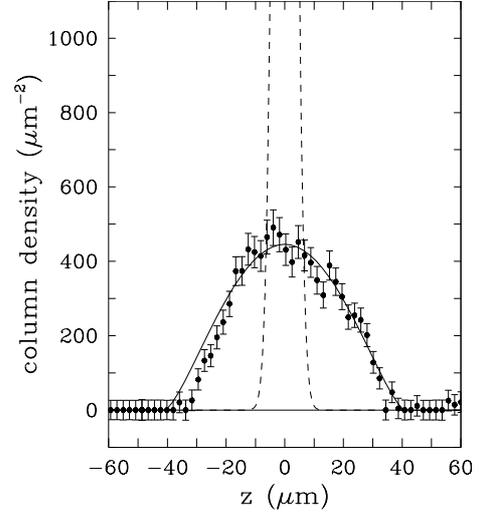


FIG. 1 – Profil de densité d'un condensat de 80000 atomes de sodium dans un piège avec $\omega_z = 170 \text{ rad.s}^{-1}$.

L'équation (4) décrit également de manière très précise les caractéristiques énergétiques du système, et en particulier l'évolution du potentiel chimique μ avec N .

1.2 Approche variationnelle

Dans le cas des bosons, on peut obtenir l'équation (4) selon un raisonnement dont le point de départ est plus solide que l'équation intuitive (1). On se limite à un espace variationnel où la fonction d'onde du système est de la forme $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \varphi(\vec{r}_1) \times \dots \times \varphi(\vec{r}_N)$ et on extrémise l'énergie avec la contrainte de normalisation de Ψ (imposée grâce à un multiplicateur de Lagrange λ) :

$$\delta \left\{ \langle \Psi | H | \Psi \rangle - \lambda \left[\langle \Psi | \Psi \rangle - 1 \right] \right\} = 0, \quad (5)$$

où

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} g \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j). \quad (6)$$

La démonstration ne pose aucun problème technique. Il suffit de voir que

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = N \int d^3r \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\varphi|^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}) |\varphi(\vec{r})|^2 + g \frac{N-1}{2} |\varphi(\vec{r})|^4 \right\}.$$

Et de faire la variation fonctionnelle $\varphi \rightarrow \varphi + \delta\varphi$. On pose à la fin $\lambda = \mu$.

Dans le cas de fermions, l'équation de Hartree est obtenue en prenant $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \varphi_1(\vec{r}_1) \times \dots \times \varphi_N(\vec{r}_N)$ [qui obéit au principe d'exclusion : $\varphi_i \neq \varphi_j$ pour $i \neq j$]. Cela donne des résultats raisonnables, mais la vraie fonction d'onde du système doit être antisymétrique, par exemple un déterminant de Slater de la forme

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = C^{\text{ste}} \sum_{\sigma \in S_N} \varepsilon_{\sigma} \varphi_{\sigma(1)}(\vec{r}_1) \times \dots \times \varphi_{\sigma(N)}(\vec{r}_N), \quad (7)$$

où S_N est l'ensemble des permutations de N indices et $\varepsilon_\sigma = \pm 1$ suivant si la permutation σ est paire ou impaire. Cela correspond à l'approximation de Hartree-Fock. Le calcul donne (cf. par exemple [3], chap. XVIII-10)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \varphi_i + \{V_{\text{ext}}(\vec{r}) + V_{\text{H}}(\vec{r})\} \varphi_i - \int d^3r' V_{\text{éch}}(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_i(\vec{r}') = \varepsilon_i \varphi_i, \quad (8)$$

Le terme supplémentaire par rapport à (1) est appelé terme de Fock, ou terme d'échange. C'est un terme non local, dû à l'antisymétrisation de la fonction d'onde :

$$V_{\text{éch}}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{j \neq i} \varphi_j(\vec{r}) \varphi_j^*(\vec{r}') U(|\vec{r}' - \vec{r}|). \quad (9)$$

Le système d'équations (8) est un système d'équations intégral-différentielles qui peut-être résolu numériquement par itération (l'effort est plus important que pour l'équation de Hartree (1) mais cela reste raisonnable). Cela permet par exemple de traiter le problème des atomes à plusieurs électrons (références...).

Mais, si on a des potentiels avec un cœur dur trop répulsif (plus que $1/r^2$) la méthode ne peut pas s'appliquer : l'approximation de Hartree-Fock ignore la déformation des fonctions d'ondes lorsque 2 particules sont proches, un déterminant de Slater n'ayant pas de corrélations autres que celles imposées par la statistique de Fermi-Dirac.

1.3 Fonctionnelle de la densité

Hohenberg et Kohn [4] ont montré, pour un type fixé de particules avec une interaction fixée, qu'il existe une fonctionnelle $E[n]$ qui détermine l'énergie du système en fonction de la densité $n(\vec{r})$ du fondamental (la démonstration est simple et jolie, cf. par exemple la réf. [5]). L'expression exacte de cette fonctionnelle est bien-sûr inconnue, mais en prenant une forme approchée réaliste on peut obtenir de bons résultats. Une forme naturelle pour cette fonctionnelle est la suivante:

$$E[n] = T[n] + \int d^3r V_{\text{ext}}(\vec{r}) n(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' U(|\vec{r}' - \vec{r}|) n(\vec{r}) n(\vec{r}') + E_{XC}[n]. \quad (10)$$

où $T[n]$ et $E_{XC}[n]$ sont des fonctionnelles a priori inconnues décrivant la contribution du terme cinétique et du terme d'échange et de corrélation à l'énergie du système. Typiquement E_{XC} est fixé empiriquement à partir de la forme du résultat analytique (approché) $\epsilon_{xc}(n)$ pour l'énergie d'échange et de corrélation par particule du système infini et homogène :

$$E_{XC}[n] = \int d^3r n(\vec{r}) \epsilon_{xc}(n(\vec{r}))$$

Cette approximation est dite "de densité locale". Elle est valable lorsque $n(\vec{r})$ varie suffisamment lentement avec la position. Dans le même esprit, on peut écrire la partie cinétique pour un système de fermions sous la forme -dite de Thomas-Fermi- qui correspond également à une approximation de densité locale :

$$T[n] = \frac{3\hbar^2}{10m} (3\pi^2)^{2/3} \int d^3r [n(\vec{r})]^{5/3}.$$

La minimisation de la fonctionnelle résultante conduit à des résultats très acceptables (cf. l'article de revue [6]). Mais on peut améliorer le traitement en suivant l'astuce de Kohn et Sham [7] qui introduisent des fonctions d'ondes effectives $\varphi_i(\vec{r})$ telles que (comme dans le cas des fermions sans interaction)

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\vec{r})|^2 \quad \text{et} \quad T = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i | \vec{\nabla}^2 | \varphi_i \rangle \quad \text{avec} \quad \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{i,j}. \quad (11)$$

Et alors on doit extrémiser la quantité $E - \varepsilon_i \{1 - \int d^3r |\varphi_i|^2\}$ par rapport aux variations de φ_i . Cela conduit à des équations du type

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}) + \int d^3r' U(|\vec{r} - \vec{r}'|) n(\vec{r}') + V_{XC}[n(\vec{r})] \right\} \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i, \quad (12)$$

Attention cependant: les φ_i sont des intermédiaires de calcul, et pas les fonctions d'onde physiques. Pourtant on fait souvent l'identification (abusive) entre les deux quantités... Une discussion claire et pertinente de la méthode peut être trouvée dans la référence [5]. À partir des solutions de (12) on peut construire la densité $n(\vec{r})$ et l'énergie fondamentale du système $E[n(\vec{r})]$ [éq. (10)].

C'est ce qu'à fait Ekardt [8] pour décrire des agrégats métalliques. Ce sont de petites particules (moins de 10^3 atomes, taille 10 ou 20 Å) métalliques (typiquement des alcalins). Le fond positif est modélisé par une distribution sphérique continue (le "jellium") dans lequel se déplacent des électrons de conduction.

Il est intéressant de remarquer que, comme le profil de densité électronique n'est pas très différent de celui du jellium, les contributions de V_{ext} (qui correspond à l'attraction de jellium) et du terme de Hartree dans (12) sont très voisines, mais de signe opposé. Elles se compensent donc presque complètement et c'est surtout le terme d'échange (et de corrélation) qui explique la stabilité des agrégats.

Les calculs permettent d'expliquer l'occurrence des nombres magiques observés pour la première fois par l'équipe de Knight [9] (cf. figure 3A ci-dessous). Les nombres magiques correspondent à une plus grande stabilité de certains agrégats : ceux dont les couches électroniques sont fermées, comme l'illustre la figure 3B ci-dessous qui reproduit les potentiels d'ionisation obtenus à partir d'une méthode de fonctionnelle de la densité pour des agrégats de sodium et potassium.

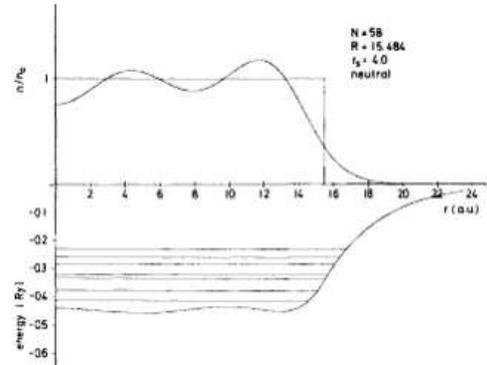


FIG. 2 – Profil de densité et énergie des orbitales Kohn-Sham calculés par Ekardt [8] pour un agrégat de 58 atomes de sodium.

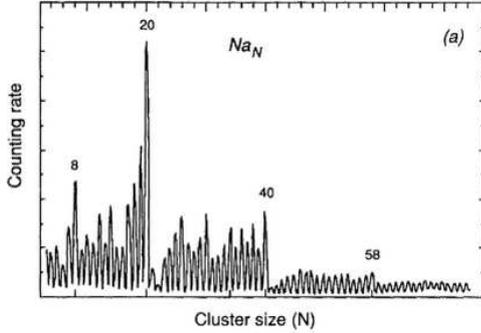


FIG. 3A –Taux de comptage dans un faisceau d’agrégats de sodium mesuré par l’équipe de Knight [9].

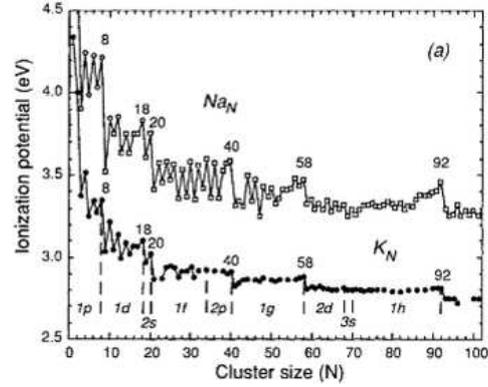


FIG. 3B –Potentiels d’ionisation d’agrégats de sodium et de potassium calculés par W. Homer et al. et reproduits dans [10].

Les méthodes de fonctionnelle de la densité se sont révélées très fructueuses dans de nombreux autres domaines où l’on étudie un “fluide quantique” : chimie quantique, physique atomique et moléculaire (structure des molécules complexes) où l’on considère un gaz d’électrons en interaction, physique nucléaire (structure du noyau atomique) où le fluide en question est “la matière nucléaire” (fluide de nucléons), étude phénoménologique de l’hélium liquide à basse température (^4He qui est un boson et ^3He qui est un fermion), condensation de Bose-Einstein des gaz dilués...

2 Effet Josephson

Dans cette section nous changeons de philosophie : au lieu de construire un champ moyen à partir d’un hamiltonien exact (comme on le faisait par exemple avec la méthode de Hartree-Fock); on va, sur l’exemple de l’effet Josephson, prédire des effets physiques précis et subtils à l’aide d’un modèle très simple et en ignorant presque tout du hamiltonien exact qui régit la dynamique du système.

Il faut tout d’abord dire deux mots sur la supraconductivité. Très grossièrement, les vibrations du réseau cristallin induisent une faible attraction entre les électrons, qui, sans former de vrais états liés, constituent tout de même des “paires”. Ces paires se comportent comme des bosons qui condensent toutes dans le même état à basse température (condensation de Bose-Einstein).

En fait, la physique de ce phénomène est beaucoup plus subtile, et n’a été comprise qu’en 57 (par Bardeen, Cooper et Schrieffer) alors que la supraconductivité fut observée pour la première fois par Kamerlingh Onnes en 1911. Une théorie effective de la supraconductivité avait auparavant été obtenue dès 50 par Ginsburg et Landau. On utilisera ici une approche encore plus primitive due à London (~ 1940) où la phase supraconductrice est décrite par une fonction d’onde unique $\psi(\vec{r})$. Quitte à renormaliser la fonction d’onde selon $\int d^3r |\psi|^2 = N$ on identifie $|\psi(\vec{r})|^2$ à la densité supraconductrice.

2.1 Description phénoménologique

On considère la configuration illustrée figure 4 ci-contre: deux supra-conducteurs sont séparés par une fine paroi isolante. On note $|\alpha\rangle$ l'état propre décrivant le supra-conducteur α isolé ($\alpha = 1$ ou 2). Le système est décrit par

$$|\psi(t)\rangle = \psi_1(t) |1\rangle + \psi_2(t) |2\rangle .$$

Avec notre convention de normalisation, $|\psi_\alpha(t)|^2$ est le nombre de paires présentes du côté α , on note cette quantité $N_\alpha(t)$, et

$$\psi_\alpha(t) = \sqrt{N_\alpha(t)} \exp\{i\theta_\alpha(t)\} .$$

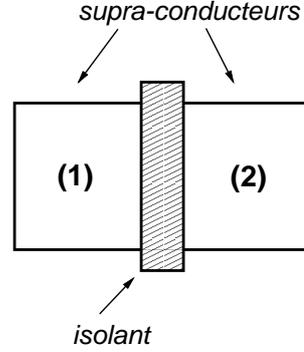


FIG. 4 –Représentation schématique d'une jonction Josephson.

On modélise la dynamique du système en supposant qu'elle est régie par le hamiltonien

$$H = \begin{pmatrix} U_1 & W \\ W & U_2 \end{pmatrix} . \quad (13)$$

On obtient facilement les équations du mouvement :

$$\begin{aligned} \hbar \dot{N}_1 &= 2W \sqrt{N_1 N_2} \sin(\theta_2 - \theta_1) , \\ \hbar \dot{N}_2 &= -2W \sqrt{N_1 N_2} \sin(\theta_2 - \theta_1) , \\ -\hbar \dot{\theta}_1 &= U_1 + W \sqrt{N_2/N_1} \cos(\theta_2 - \theta_1) , \\ -\hbar \dot{\theta}_2 &= U_2 + W \sqrt{N_1/N_2} \cos(\theta_2 - \theta_1) . \end{aligned} \quad (14)$$

Comme on s'y attend $N = N_1(t) + N_2(t)$ est une constante, c'est le nombre total de paires dans le système.

- Si $W = 0$ alors $\dot{N}_1 = \dot{N}_2 = 0$ et $\psi_\alpha(t) = \sqrt{N_\alpha(0)} \exp\{-iU_\alpha t/\hbar\}$. Les phases des deux supraconducteurs évoluent de manière indépendante. La phase relative croît linéairement avec le temps. On peut tester ce comportement avec un condensat de Bose-Einstein [11].

- Si $W \neq 0$. On pose $\phi(t) = \theta_1(t) - \theta_2(t)$ et $n(t) = N_2(t) - N_1(t)$ (on a $N_1 = (N - n)/2$ et $N_2 = (N + n)/2$). On se place dans la limite $|n| \ll N$. Alors les équations pour ϕ et n s'écrivent à l'ordre dominant :

$$\dot{n} = \frac{2WN}{\hbar} \sin(\phi) , \quad \dot{\phi} = \frac{U_2 - U_1}{\hbar} . \quad (15)$$

Les solutions de (15) sont

$$\phi(t) = \frac{U_2 - U_1}{\hbar} t + \phi(0) \quad \text{et} \quad n(t) = -\frac{2WN}{U_2 - U_1} \{\cos \phi(t) - \cos \phi(0)\} + n(0) .$$

On a donc un courant

$$I(t) = q \dot{N}_1(t) = -\frac{q}{2} \dot{n}(t) = -\frac{qW}{\hbar} N \sin \left[\frac{U_2 - U_1}{\hbar} t + \phi(0) \right] , \quad (16)$$

où, attention, $q = 2e$ car on considère des paires ! La différence $U_2 - U_1$ peut être pilotée par une source de courant continue entre les deux supraconducteurs (cf. figure 4). Si on impose que cette différence soit nulle (en mettant le système en court circuit) l'équation (16) nous montre que dans une jonction Josephson on peut avoir un courant continu sans différence de potentiel. Si la différence de potentiel est finie $U_2 - U_1 = qV_0$ on voit qu'avec une d.d.p. fixe on crée un courant oscillant de pulsation $2eV_0/\hbar$. C'est de cette manière que l'on définit actuellement le volt. Lorsque $V_0 = 1$ mV, la fréquence $f = 2eV_0/h = 483,6$ GHz et surtout $|\Delta f_{\text{mes}}/f_{\text{mes}}| < 10^{-16}$.

2.2 Effet Josephson dans les condensats de Bose

On réalise une configuration comparable à celle de la figure 4 en utilisant un potentiel à double puits. Dans ce cas, le système peut toujours être décrit schématiquement par une matrice 2×2 mais le rôle des éléments U_α est joué par le potentiel chimique μ_α du puits α . La configuration d'équilibre correspond (lorsque les puits sont symétriques) à $N_1 = N_2 = N/2$ et $\mu_1 = \mu_2$. À cause de l'interaction entre les particules, μ_α dépend de N_α , d'une manière que l'on peut écrire (lorsque les puits sont symétriques) sous la forme $\mu_\alpha(N_\alpha) = \mu(N_\alpha)$ et on peut écrire au premier ordre :

$$\mu(N_{1/2}) = \mu\left(\frac{N - (\pm)n}{2}\right) \simeq \mu\left(\frac{N}{2}\right) - (\pm)\frac{n}{2} \frac{\partial\mu}{\partial N}\Big|_{N/2}.$$

Donc le système des équations (15) devient (en notant $E_J = -2WN/\hbar$ et $E_C = \hbar^{-1}\partial\mu/\partial N$)²

$$\dot{n} = -E_J \sin(\phi), \quad \dot{\phi} = E_C n. \quad (17)$$

Le système (17) correspond formellement à un pendule pesant classique gouverné par le hamiltonien $H_{\text{eff}} = \frac{1}{2}E_C n^2 - E_J \cos \phi$ dont le portrait de phase est représenté figure ci-contre. On distingue des mouvements de "libration" autour de l'origine (au cours desquel n et ϕ ont un comportement oscillant) et des mouvements de rotation où n varie faiblement au cours du temps, et ϕ croît indéfiniment.

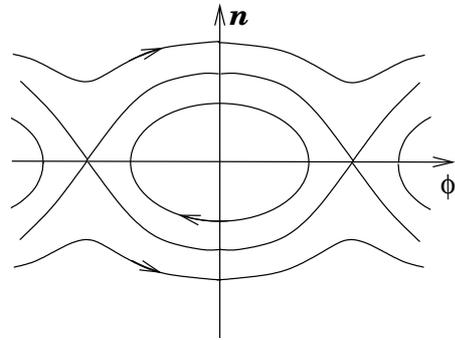


FIG. 5 –Portrait de phase du pendule simple.

Ces deux types de comportement ont été observés par le groupe d'Oberthaler à Heidelberg [12] comme l'illustre la figure ci-dessous.

²Il est clair que $E_C > 0$ car l'interaction entre particules est répulsive. E_J est également positive car $W = \langle 1|H|2 \rangle < 0$. En effet en appelant $|\varphi_+\rangle$ et le fondamental (pair, double-bosse) de H et $|\varphi_-\rangle$ le premier excité (impair, double-bosse également), on a $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_+\rangle + |\varphi_-\rangle)$ et $|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_+\rangle - |\varphi_-\rangle)$. Il est alors clair que $\langle 1|H|2\rangle = \frac{1}{2}\langle \varphi_+|H|\varphi_+\rangle - \frac{1}{2}\langle \varphi_-|H|\varphi_-\rangle < 0$.

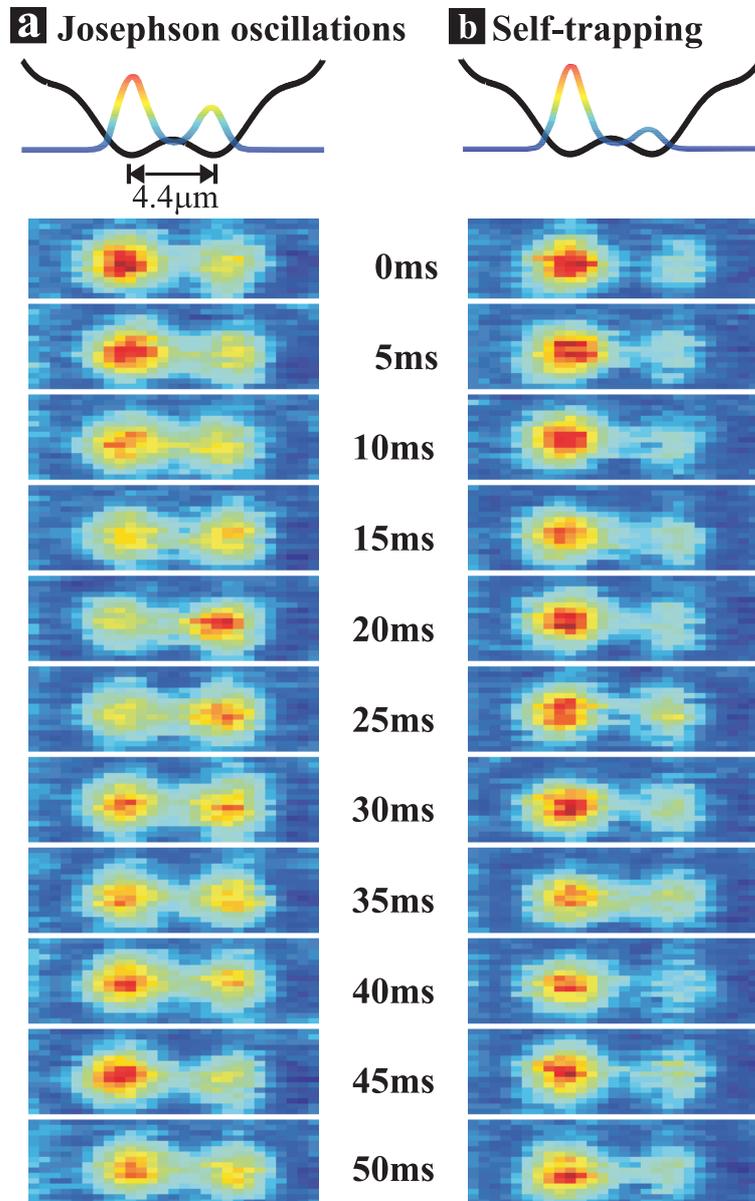


FIG. 6 – Oscillations de Josephson (analogue du mouvement de libration de la figure 5) et “self-trapping” (analogue du mouvement de rotation de la figure 5) pour un condensat de Bose-Einstein dans un double puits. Tiré de la référence [12].

Chaos hamiltonien et mécanique quantique

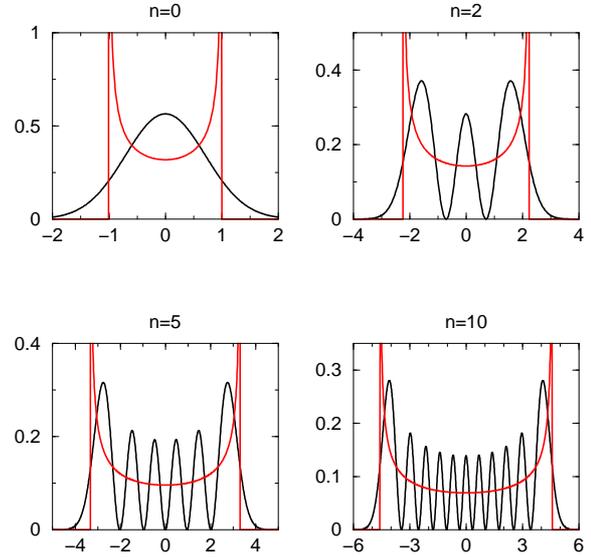
1 Cas unidimensionnel

1.1 Ergodicité

On considère un système unidimensionnel décrit par $H(p, q)$. Pour simplifier on considère que toutes les trajectoires sont bornées dans l'espace q . Dans l'espace des phases la densité $\rho(p, q, E) = C_{cl}\delta(H(p, q) - E)$ correspond à l'hypothèse ergodique. Dans notre cas unidimensionnel on peut démontrer cette hypothèse: le système passe un temps $dt \propto dq/|\dot{q}|$ dans l'intervalle $[q, q + dq]$ et il est facile de vérifier que c'est bien la description qui correspond à $\rho(q, E) = \int dp \rho(q, p)$.

La figure ci-contre illustre la situation pour l'oscillateur harmonique $H = p^2/(2m) + \frac{1}{2}m\omega^2q^2$. Dans ce cas $\rho(q) = \frac{1}{\pi}(Q^2 - q^2)^{-1/2}$ où $Q(E)$ est défini par $E = \frac{1}{2}m\omega^2Q^2$. Sur la figure on a représenté également le module au carré des fonction d'ondes propres de H aux énergies $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ avec $n = 0, 2, 5$ et 10 .

FIG. 1 – Probabilité de présence classique (en rouge) et quantique (en noir) dans l'oscillateur harmonique. q (axe des abscisses) est représenté en unités de $\sqrt{\hbar/m\omega}$. Dans ces unités $Q(E_n) = (2n + 1)^{1/2}$. L'ordonnée représente $\rho(q) \times \sqrt{\hbar/m\omega}$.



1.2 Terme de Thomas-Fermi

• Préliminaire: Soit \hat{A} un opérateur qui correspond classiquement à $A(\underline{q}, \underline{p})$. Si \hbar est la constante de Planck, on montre que pour un système à ℓ degrés de liberté

$$\text{Tr } \hat{A} \rightarrow \frac{1}{\hbar^\ell} \int d^\ell q d^\ell p A(\underline{q}, \underline{p}) \quad \text{lorsque} \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (1)$$

Démonstration de la formule (1) : Pour simplifier on se place à $\ell = 1$. On met le système dans une grande boîte ($x \in [-L/2, L/2]$) et on impose des conditions aux limites périodiques de sorte qu'on peut former une base de l'espace de Hilbert avec les $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\{ip_n x/\hbar\}$ où $p_n = 2\pi n\hbar/L = nh/L$ et $n \in \mathbb{Z}$.

On a

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \langle \psi_n | \hat{A} | \psi_n \rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-ip_n x/\hbar} \hat{A} e^{ip_n x/\hbar},$$

où, puisqu'on s'est placé en représentation x pour calculer l'intégrale, $\hat{A}(x, p) = A(x, \frac{\hbar}{i} \partial_x)$. Alors, il est clair que

$$\hat{A}(x, p) e^{ip_n x/\hbar} = A(x, p_n) e^{ip_n x/\hbar} + \mathcal{O}(\hbar).$$

Donc, comme lorsque $L \rightarrow \infty$ on a $\frac{\hbar}{L} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \rightarrow \int_{\mathbb{R}} dp$ cela donne:

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx A(x, p_n) + \mathcal{O}(\hbar) \underset{L \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^2} dx dp A(x, p) + \mathcal{O}(\hbar).$$

• En mécanique quantique $\rho(E) = \sum_n \delta(E_n - E)$. On définit l'opérateur $\hat{D}(E) = \mathcal{J} \mathcal{L}(\hat{H} - E)$ avec

$$\mathcal{J} \mathcal{L}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in [0, \delta E], \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2)$$

Il est clair que $\text{Tr } \hat{D}(E) = \rho(E) \delta E$. La trace de \hat{D} peut être déterminée (lorsque $\hbar \rightarrow 0$) à partir d'un calcul dans l'espace des phases classique¹: la relation (1) conduit alors à l'approximation de la densité de niveau :

$$\rho(E) \delta E \simeq \rho_{\text{T.F.}}(E) \delta E = \frac{1}{\hbar^\ell} \int_{E < H(q,p) < E + \delta E} d^\ell q d^\ell p \quad \text{lorsque } \hbar \rightarrow 0. \quad (3)$$

1.3 Espace des phases. Variables action-angle

On considère un système à un degré de liberté décrit par le hamiltonien $H(q, p)$. L'espace des phase est bi-dimensionnel. Pour un hamiltonien $H = p^2/(2m) + V(q)$ où V a l'allure illustrée sur la figure 2 ci-dessous, les trajectoires dans l'espace des phases sont :

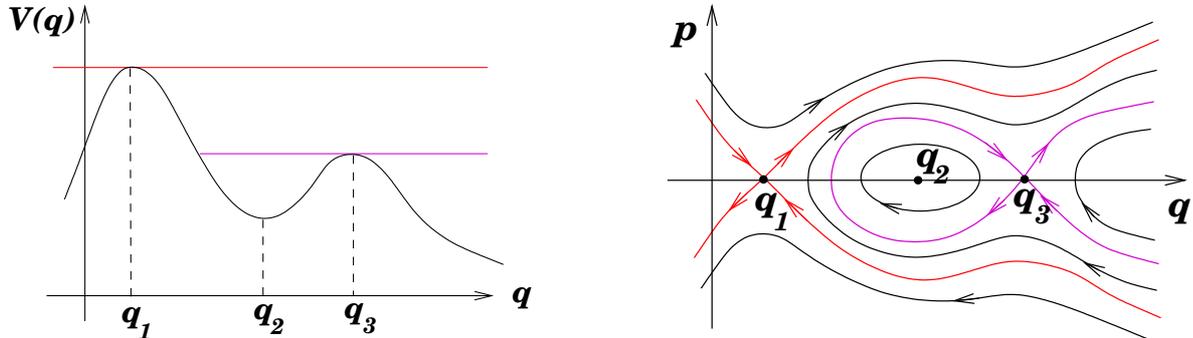


FIG. 2 –Potentiel arbitraire et portrait de phase associé. q_1 et q_3 sont des points hyperboliques. q_2 est un point elliptique. Chaque séparatrice est marquée d'une couleur qui correspond à l'énergie repérée sur le graphe de gauche par une ligne horizontale.

Pour simplifier la discussion, on ne présentera par la suite que les résultats au voisinage d'un point fixe stable (avec en tête l'exemple de l'oscillateur harmonique). On définit l'action

$$S(q, E) = \int_{\text{traj}}^q p(q', E) dq', \quad (4)$$

où l'indice “traj” sur le signe somme rappelle que l'on intègre le long d'une trajectoire, le point initial étant arbitraire. Dans l'exemple d'un hamiltonien $H = p^2/(2m) + V(q)$, $p(q', E) = \pm[2m(E -$

¹D'où l'appellation “semi-classique”: on détermine (de manière approchée) des quantités purement quantiques [comme $\rho(E)$] en utilisant seulement des informations tirées de l'espace des phases classique.

$V(q')^{1/2}$ où le signe est positif ou négatif suivant où l'on se place sur la trajectoire. On définit alors deux nouvelles variables I et θ par

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint p dq = I(E), \quad (5)$$

où l'intégration se fait le long d'une trajectoire fermée de l'espace des phases. En inversant (5), on peut, dans (4), considérer S comme une fonction $S(q, I)$ et on définit

$$\theta = \frac{\partial S(q, I)}{\partial I}. \quad (6)$$

Alors on peut montrer que le couple (I, θ) constitue un jeu de coordonnées canoniques solution de $\dot{I} = -\partial_\theta H = 0$ et $\dot{\theta} = \partial_I H$.

En effet il est clair que $\dot{I} = 0$. On a alors d'après (6) : $\dot{\theta} = \dot{q} \partial_{Iq} S$. Or, d'après (4), $\partial_q S = p(q, E)$, donc $\partial_{Iq} S = \partial_H p \times \partial_I H$. on obtient la formule pour $\dot{\theta}$ en utilisant l'équation de Hamilton $\dot{q} = \partial_p H = (\partial_H p)^{-1}$.

Les équations du mouvement ont pour solutions immédiates :

$$I = C^{\text{ste}} = I(E) \quad \text{et} \quad \theta = \omega(I) t + C^{\text{ste}} \quad \text{où} \quad \omega(I) \equiv \frac{dH}{dI}. \quad (7)$$

Il est utile d'illustrer les concepts d'action-angle sur l'exemple de l'oscillateur harmonique. Dans ce cas, une trajectoire à énergie E oscille dans l'espace réel entre X et $-X$ avec $E = \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$. Alors

$$I(E) = \frac{1}{2\pi} \oint p(q', E) dq' = \frac{m\omega}{\pi} \int_{-X}^X \sqrt{X^2 - q'^2} dq' = \frac{E}{\omega}. \quad (8)$$

On peut alors donner la valeur de la variable angle :

$$\theta = \frac{\partial S}{\partial I} = \int^q \frac{\partial p(q', E)}{\partial I} dq' = \omega \int^q \frac{m dq'}{p(q', E)} = \omega t + C^{\text{ste}}$$

Et dans l'espace des phases (q, p) où l'on connaît bien sûr la loi horaire, $q(t) = X \cos(\omega t + C^{\text{ste}})$ et $p(t) = -m\omega X \sin(\omega t + C^{\text{ste}})$. D'où la construction ci-contre :

$q = \sqrt{\frac{2I}{m\omega}} \cos \theta$ et $p = -\sqrt{2m\omega I} \sin \theta$. Les cercles de rayon $\sqrt{\frac{2I}{m\omega}}$ et $\sqrt{2m\omega I}$ sont des intermédiaires pour la construction géométrique, ils sont respectivement tracés en violet et bleu sur la figure 3. La trajectoire est l'ellipse tracée en noir.

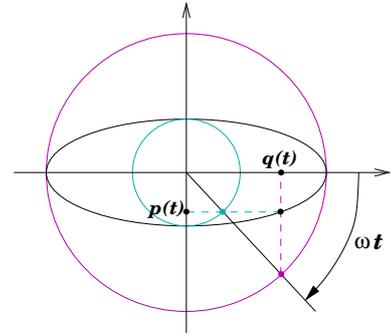


FIG. 3 – Lien entre les variables action-angles I, θ et les variables usuelles q et p pour l'oscillateur harmonique.

1.4 Méthode WKB

• L'exemple du puits carré unidimensionnel avec des conditions au bord de Dirichlet est éclairant: on doit résoudre $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E\psi$, ce qui conduit à $\psi = A \exp\{ipx/\hbar\} - B \exp\{-ipx/\hbar\}$ [en notant $E = p^2/(2m)$]. Les conditions aux bords [$\psi(0) = \psi(L) = 0$] imposent $A = B$ et

$$pL/\hbar = (n+1)\pi \quad , \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{N}. \quad (9)$$

- Le cas générique

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (10)$$

peut être traité selon le même esprit lorsque la longueur d'onde de de Broglie ($\lambda = h/\sqrt{2mE}$) est très petite devant l'échelle typique de variation de $V(x)$. On cherche alors la fonction d'onde sous la forme $\psi = A(x) \exp\{iS(x)/\hbar\}$ qui généralise le comportement que l'on aurait si le potentiel était constant. En reportant dans (10) cela donne (à l'ordre dominant)

$$\frac{S'^2}{2m} + V(x) = E \quad \text{et} \quad 2A'S' + AS'' = 0 \quad (11)$$

La première de ces équations impose (dans une région où $E > V(x)$) que

$$S'(x) = \pm p(x) \quad \text{où} \quad p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}, \quad (12)$$

et la seconde s'écrit $\frac{d}{dx}(A^2 S') = 0$ soit $A(x) = C^{\text{ste}}/\sqrt{p(x)}$ (la constante pouvant être complexe).

Cela donne pour ψ la forme

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left\{ A e^{i \int_0^x p(x') dx'} + B e^{-i \int_0^x p(x') dx'} \right\}. \quad (13)$$

Dans le cas (trop) simple illustré ci-contre on a $\psi(0) = \psi(L) = 0$ et donc $A = B$ et

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^L p(x') dx' = (n + 1)\pi, \quad (14)$$

à comparer avec (9).

Dans le cas plus réaliste d'un potentiel à bords "moux", la fonction d'onde se comporte dans la région classiquement interdite comme $C^{\text{ste}}|p|^{-1/2} \exp\{-\int^x |p(x')| dx'\}$ et un traitement précis du raccordement de ce comportement avec (13) (que l'on peut trouver par exemple dans [13]) conduit à une condition de quantification qui généralise (14) :

$$\oint \vec{p} \cdot d\vec{x} = (n + \frac{\alpha}{4})\hbar, \quad \text{soit} \quad I(E) = (n + \frac{\alpha}{4})\hbar. \quad (15)$$

où α est un entier appelé indice de Maslov et dont la valeur dépend de l'allure de $V(x)$ aux points tournants (typiquement α augmente de 1 pour chaque rebond sur un mur mou et de 2 pour chaque rebond sur un mur infini).

- Exemple de l'oscillateur harmonique unidimensionnel. L'expression (8) de l'action I , combinée avec (15) conduit immédiatement à $E = \hbar\omega(n + 1/2)$: la condition de quantification semiclassique (15) est exacte pour l'oscillateur harmonique.

- Remarques:

(a) la fonction d'onde WKB (13) n'est pas valable près des points tournants "moux" (lorsque $p(x) \rightarrow 0$) et d'ailleurs le traitement près des points tournants est délicat [13]. Mais ailleurs, le

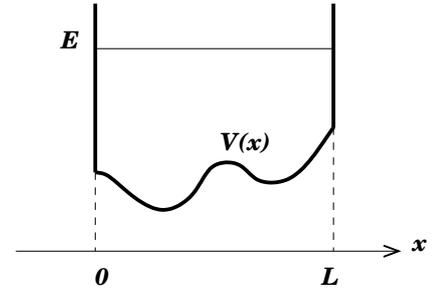


FIG. 4 – Cas schématique : un potentiel régulier pour $x \in]0, L[$ en infini ailleurs.

facteur $1/\sqrt{p(x)}$ est tout à fait naturel: si $p(x)$ augmente, cela veut dire que la vitesse locale augmente également, et il est donc naturel que la probabilité de présence associée soit faible.

(b) La fonction d'onde WKB (13) est non analytique dans le paramètre \hbar dans la limite $\hbar \rightarrow 0$. C'est ce qui fait la difficulté (et la richesse) des méthodes semiclassiques: on est dans une configuration où il faut inventer une méthode plus élaborée qu'un simple traitement perturbatif.

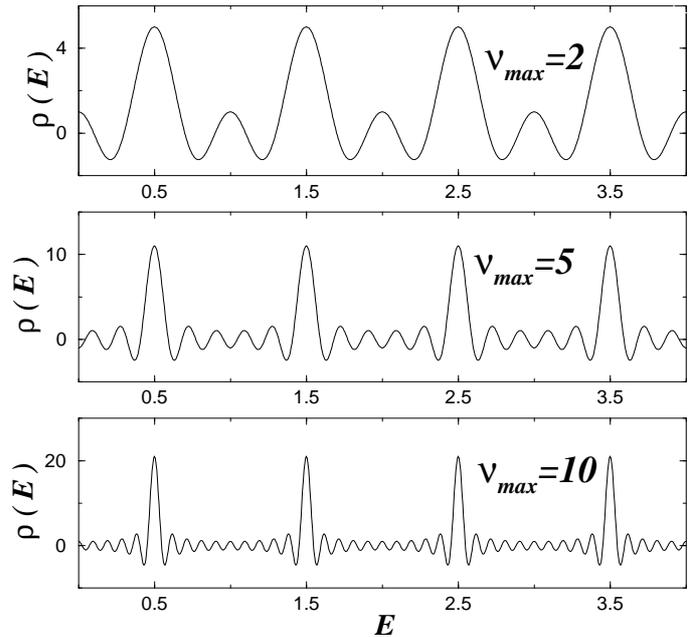
1.5 Formule des traces à 1D

On va considérer l'exemple déjà traité de l'oscillateur harmonique. Les niveaux propres sont de la forme $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ avec $n \in \mathbb{N}$. La densité d'état quantique se met sous la forme (pour $E > 0$)

$$\rho(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \delta(E - E_n) = \frac{1}{\hbar\omega} + \frac{2}{\hbar\omega} \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^\nu \cos\left(2\pi\nu \frac{E}{\hbar\omega}\right), \quad (16)$$

L'égalité de droite dans la formule (16) vient de l'utilisation du lemme de Poisson (25) (en prenant $X = E - \hbar\omega/2$). On peut tester cette formule numériquement en tronquant la somme sur ν dans (16) à une valeur ν_{\max} de plus en plus élevée. C'est ce qui a été fait sur la figure 5 ci-dessous.

FIG. 5 – Densité d'état $\rho(E)$ pour l'oscillateur harmonique unidimensionnel (avec des unités telles que $\hbar\omega = 1$). Les figures correspondent à l'utilisation de la formule (16) tronquée à différentes valeurs de ν_{\max} . Pour ce qui va suivre (section 2.2), il est utile de noter que l'argument des cosinus dans (16) peut se mettre sous la forme $S_\nu(E)/\hbar$ où $S_\nu = \nu \times (2\pi E/\omega)$ est l'action d'une trajectoire fermée de ν boucles.



À première vue nous avons ici beaucoup compliqué le problème en décrivant une densité d'états très simple (un peigne de Dirac) comme une somme de cosinus qui interfèrent pour construire la distribution piquée sur les niveaux propres. On verra dans ce qui suit que c'est la seule stratégie possible lorsque le hamiltonien devient chaotique (auquel cas la méthode WKB ne peut pas s'appliquer).

2 Dimension $N > 1$

2.1 Structure de l'espace des phases

Si le système est séparable en N systèmes à un degré de liberté, on est dans une configuration relativement simple. Les trajectoires dans l'espace des phases ont lieu sur une hypersurface qui est la combinaison de plusieurs boucles de la forme de celle qu'on observe à une dimension. Cette surface a donc la topologie d'un tore. L'espace des phases a une dimension $2N$ et le tore sur lequel on se déplace étant la combinaison de N boucles à une dimension est de dimension N . Une autre manière de voir cela est de se rendre compte que le système a N constantes du mouvement indépendantes (les énergies des N systèmes à un degré de liberté) et qu'une trajectoire vit donc sur une surface de dimension $2N - N$.

En fait, l'espace des phases a la même structure dans des hypothèse plus générales (correspondant à ce que l'on appelle un système intégrable) : les trajectoires de l'espace des phases ont lieu sur des tores lorsqu'il existe N constantes du mouvement (l'une d'entre elles est bien sûr l'énergie) indépendantes et en involution (c'est à dire dont le crochet de Poisson est nul). On pourra trouver une démonstration de cette propriété dans la monographie [14] et une discussion physique plus abordable dans la revue [15] (résumée dans la section 4 ci-dessous).

Donc, dans le cas intégrable, la structure de l'espace des phases est relativement simple. Sur chacune des boucles fermées indépendantes du le tore (c'est à dire pour chaque degré de liberté) on peut définir un couple de variables action-angle. On pourra alors, dans le cas séparable, imposer une quantification semi-classique à la WKB pour chaque couple de variables. Dans le cas intégrable générique c'est un peu plus subtil et on parle de quantification EBK (cf. appendice 5). Même si la mise en œuvre de ce protocole peut être délicate, on ne rencontre pas de problème fondamental.

Si le système n'est pas intégrable, on dit qu'il subit une transition vers le chaos. Il y a une gradation d'intégrable à complètement chaotique (que les mathématiciens ont raffinée), et nous allons illustrer la situation sur un exemple à deux degrés de liberté. Dans ce cas l'espace des phases est de dimension 4, la surface d'énergie $H(q, p) = C^{\text{ste}}$ est de dimension 3. Faisons-en une coupe (par exemple $q_2 = C^{\text{ste}}$). Cela donne une "section de Poincaré" de dimension 2. L'intersection de la trajectoire avec cette section renseigne sur le type de dynamique (intégrable ou chaotique) qui régit l'évolution du système.

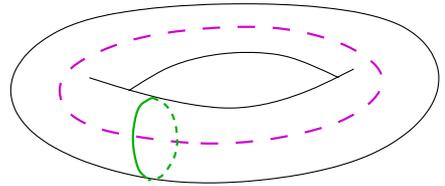
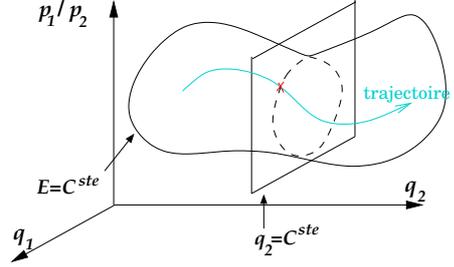


FIG. 6 – *Contours indépendants pour un tore à deux dimensions.*

FIG. 7 –Schéma dans l'espace des phases. Attention la surface $E = C^{ste}$ est en réalité une variété à 3D alors que ce dessin représente une surface à 2D dans un espace à 3D. De même, l'intersection de la surface d'énergie avec $q_2 = C^{ste}$ (qui est marquée par une courbe en pointillés sur la figure ci-contre) est en réalité bidimensionnelle.



La surface d'énergie est 3D. Son empreinte sur la section de Poincaré est une surface à 2D. Donc si le système est intégrable (par exemple s'il est séparable en 2 systèmes à 1 degré de liberté) alors on aura deux constantes du mouvement indépendantes (l'énergie selon q_1 et celle selon q_2 par exemple) et on verra plutôt ce qui est représenté schématiquement ci-contre à droite. Par contre si le système est chaotique on verra ce qui est illustré ci-contre (à gauche).

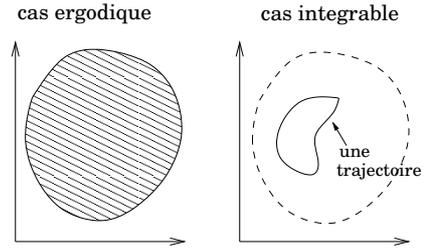


FIG. 8 –Sections de Poincaré.

Ceci peut-être illustré sur le hamiltonien modèle de l'oscillateur quartique: $H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + q_1^4 + q_2^4 + 2\lambda q_1^2 q_2^2$. Ce hamiltonien est intégrable pour $\lambda = 0$ et devient chaotique lorsque λ décroît jusqu'à la valeur -0.8 .

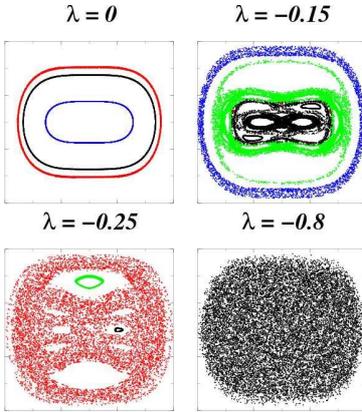


FIG. 9A –Sections de Poincaré correspondant à $q_2 = 0$. Chaque couleur correspond à une seule trajectoire. L'axe des abscisses représente q_1 et celui des ordonnées p_1 .

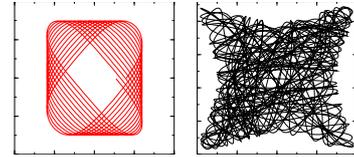


FIG. 9B –Trajectoires dans l'espace réel (q_1, q_2) dans les cas $\lambda = 0$ (intégrable, à gauche) et $\lambda = -0.8$ (chaotique, à droite).

On comprend que dans le régime chaotique on ne peut pas définir de variable action-angle et on ne peut pas utiliser la règle de quantification semi-classique EBK.

2.2 Formule des traces

C'est une formule due à Gutzwiller [16] et Balian et Bloch [17]. Elle repose sur une analyse semi-classique subtile (on en trouvera une démonstration dans le cours de M. Gutzwiller dans la Réf. [18]). On va juste ici donner la forme générique qui en résulte pour la densité d'états (formule valable *mutatis mutandis* pour un système intégrable ou chaotique) :

$$\rho(E) = \sum_{n=0}^{+\infty} \delta(E - E_n) = \rho_{TF}(E) + \rho_{osc}(E), \quad (17)$$

où $\rho_{\text{TF}}(E)$ est une fonction régulière “sans accident” de l’énergie que l’on appelle terme de Thomas-Fermi (ou développement de Weyl dans le cas d’un billard), cf. section 1.2. À l’ordre dominant, $\rho_{\text{TF}}(E)$ correspond simplement au comptage d’états sur la surface d’énergie et s’écrit [cf. (3)] :

$$\rho_{\text{TF}}(E) = \int \frac{d^N p d^N q}{(2\pi\hbar)^N} \delta(E - H(\underline{p}, \underline{q})) + \dots \quad (18)$$

Les termes suivants dans l’expression de ρ_{TF} correspondent à des corrections de bord dans le potentiel et sont sous-dominants en \hbar . Le terme $1/(\hbar\omega)$ dans le membre de droite de (16) est l’analogie de (18) dans le cas de l’oscillateur harmonique.

Le terme oscillant de la formule (17) s’écrit lui dans le cas général :

$$\rho_{\text{osc}}(E) = \text{Re} \left\{ \sum_{\nu=\text{OP}} C_{\nu}(E) e^{iS_{\nu}(E)/\hbar} + \dots \right\} \quad (19)$$

où la somme est effectuée sur toutes les orbites périodiques (OPs) qui existent à énergie E dans le système (elles sont repérées par l’indice ν). La formule (19) est une somme de termes qui oscillent rapidement (\hbar est petit devant l’action S_{ν}) multipliés par des amplitudes (a priori complexes) $C_{\nu}(E)$ qui dépendent peu de l’énergie. $S_{\nu}(E) = \oint_{\nu} \underline{p} \cdot d\underline{q}$ est l’action le long de l’OP considérée. C’est la formule (19) qui est appelée formule des traces. Une version très simplifiée de (19) est donnée par la formule (16) : dans ce cas $C_{\nu}(E) = (-)^{\nu} (2/\hbar\omega)$ et $S_{\nu}(E) = 2\pi\nu E/\omega$ [pour l’oscillateur harmonique, $S_1(E) = 2\pi I(E) = 2\pi E/\omega$, comme on l’a vu formule (8)]. Il n’y a ici qu’une orbite à énergie E , elle est périodique, et ν repère seulement ses répétitions.

2.3 Billard sphérique. Couches et supercouches

C’est un exemple d’utilisation de (17) dans un cas intégrable: l’étude du spectre du Laplacien dans un billard tridimensionnel sphérique. Selon la formule (17) on écrit la densité de niveaux dans la sphère comme la somme d’un terme de Thomas-Fermi et d’un terme oscillant. Le terme de Thomas-Fermi dans la sphère est connu depuis longtemps et a la forme :

$$\rho_{\text{TF}}(k) = \frac{2}{3\pi} R^3 k^2 - \frac{1}{2} R^2 k + \frac{2}{3\pi} R + \dots, \quad (20)$$

où k est le vecteur d’onde $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$.

Le terme oscillant a été déterminé pour la première fois par Balian et Bloch [17]. Les orbites périodiques de la sphère sont des polygones plans caractérisés par 2 indices n et t : n est le nombre de rebonds de l’OP sur la frontière et t le nombre de tours que l’OP effectue autour de l’origine ($n \geq 2t$). Les orbites périodiques les plus courtes sont représentées sur la figure 10 ci-dessous. Une orbite caractérisée par les indices (n, t) a une longueur $L_{n,t} = 2nR \sin(\pi t/n)$. Ainsi le triangle et le carré ont des longueurs $L_{3,1} = 3\sqrt{3} R \simeq 5.20 R$ et $L_{4,1} = 4\sqrt{2} R \simeq 5.66 R$.

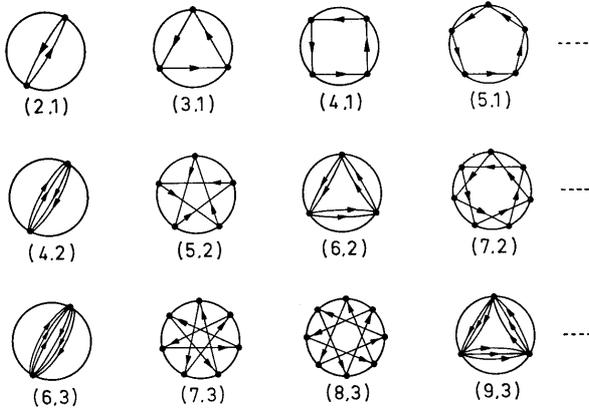


FIG. 10 – Quelques unes des OPs les plus courtes dans la sphère (d’après la réf. [17]). En dessous de chaque OP sont reproduits ses indices (n, t) (cf. texte).

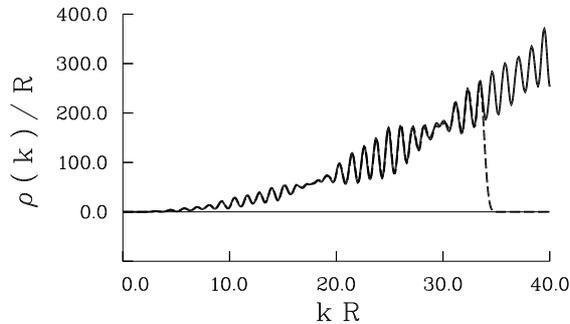


FIG. 11 – Densité de niveaux $\rho(k)$ de la sphère en fonction de k (en unités adimensionnées). La courbe en tirets est la densité de niveaux exacte ; on s’est arrêté au 135^{ème} niveau, soit 2500 états quantiques et c’est la raison pour laquelle cette courbe s’annule aux grandes valeurs de k . La courbe en trait plein est l’approximation semiclassique. Les densités de niveaux ont été convoluées avec une gaussienne de variance $\sigma = 0.3/R$.

Le billard sphérique peut être pris comme modèle d’un agrégat métallique. Dans ce cas, on a N électrons sans interaction qui évoluent dans une sphère de rayon $R = r_s N^{1/3}$. Cette dépendance du rayon selon N assure que la densité moyenne de l’agrégat est indépendante de sa taille, propriété naturelle qui est observée dans des modèles plus élaborés. Soit $E_{el} = \int_0^{E_F} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon$ l’énergie électronique totale et E_{shell} sa partie oscillante (la notation est consacrée, elle réfère au concept d’énergie de couche). Les minima de E_{shell} correspondent aux nombres magiques. On voit sur la figure ci-dessous que la “magie” diminue avec la taille de l’agrégat puis augmente à nouveau lorsque N dépasse environ 700. Cette modulation a été mise en évidence la première fois par l’équipe de Bjørnholm à Copenhague [19].

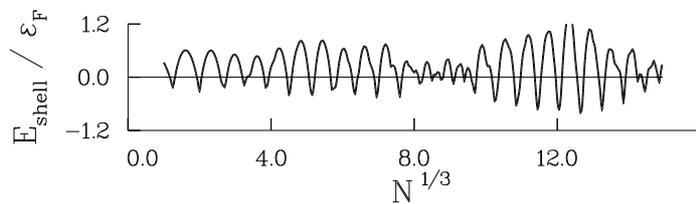


FIG. 12 – Partie oscillante E_{shell} de l’énergie électronique totale en fonction de la taille N de l’agrégat. E_{shell} est exprimée en unités de l’énergie de Fermi ϵ_F du système infini. Les valeurs de N correspondant aux minima de E_{shell} sont les nombres magiques de la sphère.

2.4 L'atome d'hydrogène en champ magnétique

Dans cette section nous allons étudier un cas chaotique. Le mouvement électronique de l'atome d'hydrogène dans un champ magnétique est décrit par le hamiltonien (en négligeant le spin, les effets relativistes etc..)

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}) \right)^2 - \frac{e^2}{r}, \quad (21)$$

où $e^2 = q^2/(4\pi\epsilon_0)$ et m est la masse réduite du système "électron + proton". Ce système ne peut devenir chaotique que lorsque la force de Lorentz devient comparable à la force de Coulomb :

$$q \frac{d\vec{r}}{dt} \wedge \vec{B} \simeq -\frac{e^2\vec{r}}{r^3}.$$

Pour un électron sur la première orbite de Bohr, cela correspond à $|\vec{B}| \simeq B_c = m^2 e^4 / (|q| \hbar^3) = 2,35 \times 10^5 \text{ T}$, qui est colossal. On ne peut atteindre la région chaotique expérimentalement qu'en se plaçant dans des conditions où la force de Coulomb est réduite : en considérant des états de Rydberg (lorsque le nombre quantique principal $n = 50$ le champ critique devient de l'ordre de 2 T).

En utilisant un champ magnétique statique et la jauge $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \wedge \vec{r}$ le hamiltonien (21) devient

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{qB}{2m} L_z + \frac{q^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2), \quad (22)$$

L_z commute avec H et pour simplifier, par la suite on considère les états dont le nombre quantique magnétique est nul et on peut donc se ramener à un système à deux degrés de liberté : z et ρ . En passant en unité atomiques $m = |q| = 4\pi\epsilon_0 = \hbar = 1$ et en posant $\gamma = B/B_c$, on obtient

$$H = \frac{1}{2} (p_z^2 + p_\rho^2) + \frac{\gamma^2}{8} \rho^2 - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}}. \quad (23)$$

Les équations du mouvement sont invariantes sous la transformation d'échelle $\vec{r} \rightarrow \lambda \vec{r}$, $\vec{p} \rightarrow \lambda^{-1/2} \vec{p}$, $t \rightarrow \lambda^{1/2} t$, $\gamma \rightarrow \lambda^{-3/2} \gamma$ et $H \rightarrow \lambda^{-1} H$. Donc, la dynamique classique, au lieu de dépendre séparément de γ et E dépend seulement de l'énergie "rescalée" $\epsilon = E\gamma^{-2/3}$. Le régime purement coulombien correspond à $\epsilon \rightarrow -\infty$ et le régime purement magnétique à $\epsilon \rightarrow +\infty$. La région chaotique correspond à $|\epsilon| \simeq 1$.

Wintgen [20] a comparé les résultats de la solution exacte de l'équation de Schrödinger avec ceux de la formule des traces :

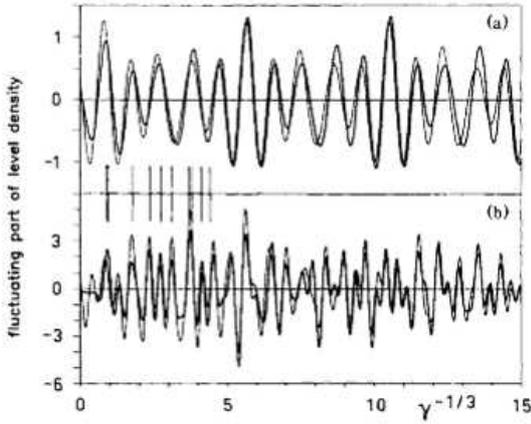
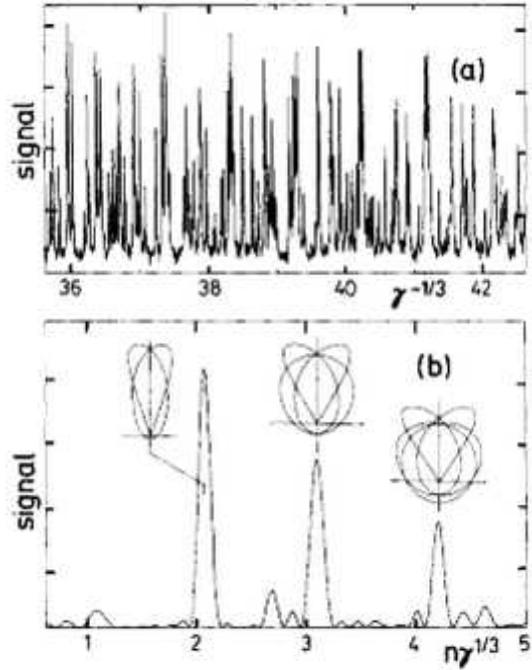


FIG. 13 –Densité d'état convoluée. Courbe en traits épais : résultat numérique exact. Courbe en trait plein : semiclassique. (a) lissage fort et inclusion de seulement deux orbites. (b) lissage moins fort. inclusion de 13 orbites. Les nombres quantiques les plus bas sont représentés par des barres verticales.

Une confirmation expérimentale de l'intérêt de l'analyse en orbites périodiques a été faite par Holle *et al.* [21] qui ont analysé des spectres de ce système.

FIG. 14 –Spectre expérimental (a) et sa transformée de Fourier (b) qui fait apparaître la contribution des orbites périodiques (L'orbite pertinente est représentée à côté de chaque pic).



3 Appendice : Lemme de Poisson

Soit $f(x)$ une fonction qui a une transformée de Fourier $\hat{f}(q) = \int_{\mathbb{R}} dx f(x) \exp(-iqx)$. Soit a un réel positif et $F(x)$ la fonction définie par $F(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} f(x - na)$. F est clairement périodique de période a , elle peut donc être développée en série de Fourier :

$$F(x) = \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} F_{\nu} e^{2i\pi\nu x/a} \quad \text{où} \quad F_{\nu} = \frac{1}{a} \int_0^a dx F(x) e^{-2i\pi\nu x/a} = \frac{1}{a} \hat{f}\left(\frac{2\nu\pi}{a}\right).$$

Cette formule est connue sous le nom de lemme sommatoire de Poisson :

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} f(x - na) = \frac{1}{a} \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} \hat{f}\left(\frac{2\nu\pi}{a}\right) e^{2i\pi\nu x/a}. \quad (24)$$

Elle donne immédiatement (en prenant $f(x) = \delta(x)$ et $\hat{f}(q) = 1$)

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(x - na) = \frac{1}{a} \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} e^{2i\pi\nu x/a}. \quad (25)$$

4 Appendice : Structure de l'espace des phases d'un système intégrable

On reproduit ici les grandes lignes de la justification de la structure en tores de l'espace des phases d'un système intégrable.

• Définition: On dit qu'un système à f degrés de libertés est intégrable s'il existe f constantes du mouvement indépendantes en involution (c'est à dire dont les crochets de Poisson sont nuls). Dans ce cas, ses trajectoires dans l'espace des phases restent dans un sous-espace de la couche d'énergie qui a la topologie d'un tore de dimension f .

On ne va pas démontrer ces propriétés, mais discuter un peu la situation typique à laquelle elles correspondent. Soit $(\underline{p}, \underline{q}) = (p_1, \dots, p_f, q_1, \dots, q_f)$ un point de l'espace des phases. Un système hamiltonien a toujours au moins une constante de mouvement : $H(\underline{p}, \underline{q})$. On suppose qu'il en existe $f - 1$ autres : $F_1(\underline{p}, \underline{q}), \dots, F_{f-1}(\underline{p}, \underline{q})$, en on note $F_f = H$. On a $\{F_i, F_j\} = 0$, où on rappelle que $\{A, B\} = \sum_{i=1}^f (\partial_{p_i} A \partial_{q_i} B - \partial_{p_i} B \partial_{q_i} A)$. Il est alors clair que chaque F_i est une constante du mouvement. Donc, le mouvement a lieu sur une surface de dimension f dans l'espace des phases (qui a lui une dimension $2f$). Le fait que $\{F_i, F_j\} = 0$ entraîne en outre que cette surface est un tore. Grossièrement, la raison en est que l'on peut définir, à partir des F_i , f champs vectoriels non singuliers et tangents à la surface de dimension f sur laquelle vit la trajectoire.

Discussion (un peu) moins superficielle.
On définit f champs vectoriels

$$\underline{V}_\alpha = (\partial_{p_1} F_\alpha, \dots, \partial_{p_f} F_\alpha, -\partial_{q_1} F_\alpha, \dots, -\partial_{q_f} F_\alpha) = \left(\frac{\partial F_\alpha}{\partial \underline{p}}, -\frac{\partial F_\alpha}{\partial \underline{q}} \right).$$

\underline{V}_α est orthogonal à toute surface $F_\beta = C^{\text{ste}}$. En effet, il est perpendiculaire à la normale à cette surface :

$$\underline{V}_\alpha \cdot \left(\frac{\partial F_\beta}{\partial \underline{q}}, \frac{\partial F_\beta}{\partial \underline{p}} \right) = \{F_\alpha, F_\beta\} = 0.$$

Donc, sur la surface définie par $F_1 = C^{\text{ste}}, \dots, F_f = C^{\text{ste}}$ on a f champs vectoriels tangents, non singuliers et indépendants (parce que les F_α sont bien-sûr indépendants). On se restreint à des mouvements bornés, donc cette surface est compacte. Il existe un théorème de topologie qui dit que cette surface est un tore (le théorème de Poincaré-Hopf).

5 Appendice : Quantification par les tores (ou EBK)

On considère un système intégrable en dimension f , pour généraliser l'approche de la section 1.4 on est tenté de chercher la fonction d'onde sous la forme

$$\psi(\underline{q}) = A(\underline{q}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(\underline{q}) \right\}. \quad (26)$$

En reportant dans l'équation de Schrödinger, on aura toujours à l'ordre dominant $\frac{1}{2m}[\nabla_{\underline{q}}S]^2 + V(\underline{q}) = E$ donc

$$\nabla_{\underline{q}}S = \pm \underline{p}(\underline{q}) \quad \text{où} \quad \underline{p} \cdot \underline{p} = \sqrt{2m[E - V(\underline{q})]} . \quad (27)$$

Attention, comme illustré sur la figure ci-contre, lorsqu'on considère la dynamique classique d'un système intégrable, lorsqu'on se déplace sur un tore invariant (correspondant aux f constantes du mouvement en involution, cf. la discussion de l'appendice 4) on a plusieurs \underline{p} pour un seul \underline{q} et donc au lieu de (26) il faut plutôt écrire

$$\psi(\underline{q}) = \sum_{r=1}^R A_r(\underline{q}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_r(\underline{q}) \right\} . \quad (28)$$

La fonction (28) doit être univaluée lorsqu'on fait parcourir à \underline{q} un chemin fermé sur le tore invariant. Cela conduit à la condition de quantification dite de EBK :

$$\oint_{\mathcal{C}_i} \underline{p} \cdot d\underline{q} = (n_i + \frac{\alpha_i}{4})h , \quad (29)$$

où \mathcal{C}_i est un des f contours fermés indépendants sur le tore, n_i est un entier positif ou nul et α_i est un indice de Maslov dont la valeur est déterminée par le type de trajectoire.

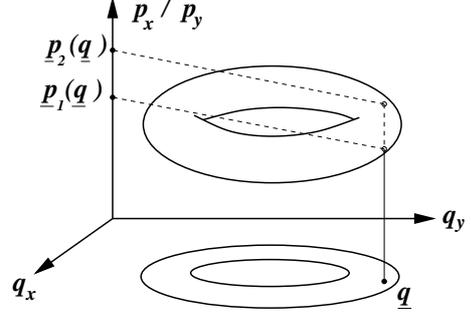


FIG. 15 –Tore invariant d'un système intégrable. Les différentes valeurs de l'impulsion pour une valeur \underline{q} donnée sont notées \underline{p}_1 et \underline{p}_2 .

References

- [1] C. Cohen Tannoudji, Cours du collège de France 1998-1999, disponible en ligne : <http://www.phys.ens.fr/cours/college-de-france/1998-99/1998-99.htm>
- [2] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
- [3] A. Messiah, “Mécanique Quantique” Tome 2, Dunod (Paris, 1995).
- [4] P. Hohenberg et W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
- [5] W. Kohn, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1998).
- [6] N.H. March, *Adv. Physics* **6**, 1 (1957).
- [7] W. Kohn et L. J. Sham, *Phys Rev.* **140**, A1133 (1965).
- [8] W. Ekardt, *Phys. Rev. B* **29**, 1558 (1984).
- [9] W. D. Knight *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 2141 (1984).
- [10] W.A. de Heer, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 611 (1993).
- [11] Y. Shin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 050405 (2004).
- [12] M. Albiez *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 010402 (2005).
- [13] L. Landau et E. Lifchitz, “Cours de Physique Théorique”, vol. 3, Mécanique Quantique (Éditions Mir, Moscou, 1988).
- [14] V. I. Arnold, “Mathematical methods of classical mechanics”, Springer, Berlin, 1978.
- [15] M. V. Berry, “Regular and Irregular Motion” in *Topics in Nonlinear Mechanics*, ed. S Jorna, *Am.Inst.Ph.Conf.Proc No.46*, 16-120. Disponible en ligne sur la page : http://www.phy.bris.ac.uk/people/berry_mv/publications.html
- [16] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **12**, 343 (1971).
- [17] R. Balian and C. Bloch, *Ann. Phys. (N.Y.)* **69**, 76 (1972).
- [18] *Chaos and quantum mechanics*, M.-J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin eds., Les Houches Summer-School Lectures LII, 1989 (North Holland, Amsterdam, 1991).
- [19] J. Pedersen *et al.*, *Nature (London)* **353**, 733 (1991).
- [20] D. Wintgen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1803 (1988).
- [21] A. Holle, J. Main, G. Wiebusch, H. Rottke, and K. H. Welge, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 161 (1988).