

Aspects topologiques et chaotiques en mécanique quantique

Frédéric Faure

▶ **To cite this version:**

Frédéric Faure. Aspects topologiques et chaotiques en mécanique quantique. Physique mathématique [math-ph]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2006. tel-00383066

HAL Id: tel-00383066
https://theses.hal.science/tel-00383066

Submitted on 12 May 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Aspects topologiques et chaotiques en mécanique quantique

Thèse d'habilitation à diriger des recherches

Université Joseph Fourier, Grenoble

Frédéric Faure[1]

Soutenance : le mardi 17 octobre 2006

Jury :

Rapporteurs :
- **Yves Colin de Verdière** (Institut Fourier, Université Joseph Fourier, Grenoble)
- **Benoit Douçot** (Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies, Paris)
- **Steve Zelditch** (Dept. of Math., Johns Hopkins University, Baltimore)

Examinateurs :
- **Alain Joye** (Institut Fourier, Université Joseph Fourier, Grenoble)
- **San Vu-Ngoc** (Institut Fourier, Université Joseph Fourier, Grenoble)
- **Boris Zhilinskii** (Université du Littoral, Dunkerque)

[1]Institut Fourier 100, rue des Maths, BP.74 38402 St Martin d'Heres
email : frederic.faure@ujf-grenoble.fr
http ://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure

à ma mère,

Remerciements

Je remercie Yves Colin de Verdière, Benoit Douçot et Steve Zelditch pour avoir aimablement accepté d'être rapporteurs de ce manuscrit. Je les remercie ainsi que Alain Joye, San Vu-Ngoc et Boris Zhikinskii pour avoir accepté de participer au jury.

Merci à tous les membres de l'institut Fourier pour leur très bon accueil.

J'ai eu plaisir à cotoyer de nombreuses personnes dans le cadre professionnel de la recherche et de l'enseignement ces dernières années. Ce fut très enrichissant d'un point de vue scientifique et aussi humain. Sans les citer je les remercie toutes.

Particulièrement, je voudrais remercier Yves Colin de Verdière et Stéphane Nonnenmacher avec qui j'ai beaucoup appris, et qui m'ont encouragé en manifestant de l'intérêt pour mon travail de recherche.

Je remercie du fond du coeur Sonia, Nadia et Aline, ainsi que toute ma famille pour leur affection.

Table des matières

1 Introduction **7**

I Présentation des travaux de recherche **1**

2 Chaos quantique et ergodicité quantique **1**
2.1 Introduction 1
2.2 Application hyperbolique linéaire 3
2.3 L'ergodicité quantique 9
2.4 Évolution périodique d'un état cohérent et construction "d'états cicatrisés" . . . 12
2.5 Rôle des orbites homoclines 18
2.6 Conclusions et suggestions pour généraliser ces résultats 20

3 Systèmes quantiques adiabatiques et phénomènes topologiques **23**
3.1 Introduction 23
3.2 Modèle du couplage rotation-vibration d'une molécule 29
3.3 Modèle avec des bandes topologiquement couplées 34
3.4 Formes normales topologiques pour singularités contractibles 38
3.5 Conclusions 43

II Projets de recherche **44**

4 Chaos classique et chaos quantique **44**
4.1 Validité des formules semi-classiques au-delà du temps d'Ehrenfest 44
4.2 Résonances préquantiques et valeurs propres quantiques pour l'application chaotique du chat d'Arnold 49

5 Systèmes adiabatiques et problèmes à N corps **51**
5.1 Bifurcations topologiques et transitions d'états dans les spectres moléculaires . 51
5.2 Monodromie (entière ou fractionnaire) et systèmes adiabatiques 51
5.3 Description topologique pour les systèmes thermodynamiques ; bifurcations topologiques et transitions de phases 52

1 Introduction

Ce manuscrit présente deux principaux thèmes de mes recherches de ces dernières années : **le chaos quantique** d'une part et les **aspects topologiques** dans les systèmes quantiques adiabatiques d'autre part. Dans la première partie, ces deux thèmes sont développés et les résultats obtenus sont présentés. La deuxième partie présente des questions ouvertes qui me semblent intéressantes et que j'espère aborder dans la suite de mes recherches.

La **mécanique quantique** dans une de ses premières formulations, est une mécanique ondulatoire, où les objets physiques (les particules, les atomes, molécules...) sont décrits par des ondes qui interagissent entre elles et évoluent selon l'**équation de Schrödinger**. Ce qui est particulier et fondamental dans cette formulation est que l'équation de Schrödinger est **linéaire**. Cela permet d'approcher la compréhension des phénomènes quantiques de façon abstraite mais efficace avec l'aide de l'algèbre linéaire, de spectre d'opérateurs,..., où les ondes sont décrites par un point ψ dans un espace vectoriel $\mathcal{H}$ ($\mathcal{H}$ est l'espace des ondes possibles. L'aspect vectoriel traduit le principe de superposition). Une onde évolue d'après l'équation de Schrödinger qui peut s'écrire $i\hbar d\psi(t)/dt = \hat{H}\psi(t)$ où $\hat{H}$ est un opérateur que l'on s'efforce à diagonaliser pour comprendre l'évolution de l'onde $\psi(t)$. Cette même approche est utilisée pour d'autres domaines de la physique où apparaissent des ondes dans le régime linéaire (optique ondulatoire, ondes acoustiques, sismiques, ondes de surfaces ....).

La **complexité des phénomènes ondulatoires** qui peuvent se produire et qu'il faut décrire est liée à la dimension de l'espace vectoriel $\mathcal{H}$ qui entre en jeu. Par exemple pour décrire une onde de longueur d'onde $\sim l$ dans une cavité de taille L, (ce sera un électron piégé dans un atome, ou une onde à la surface d'un lac) la dimension de l'espace $\mathcal{H}$ est de l'ordre de $(L/l)^d$, où d est la dimension de la cavité. S'il y a plusieurs ondes en interaction (i.e. plusieurs électrons et noyaux dans une molécule), la fonction d'onde totale est fonction de chaque position, donc l'espace vectoriel à considérer est le produit des espaces individuels, et sa dimension est le produit des dimensions. Ainsi, la description de l'évolution des ondes peut devenir un problème d'une grande complexité dès que le nombre de particules augmente et/ou (L/l) augmente. La résolution exacte du comportement d'une petite molécule contenant quelques noyaux et électrons est déjà hors de portée des ordinateurs les plus performants.

Pour aborder de tels problèmes à priori complexes, il faudra essayer de déceler "un ordre", des **"lois effectives" qui peuvent "émerger" de cette complexité** et rendre la compréhension des phénomènes plus simple. Dans beaucoup de domaines de la physique, des comportements aux lois simples et compréhensibles peuvent émerger de phénomènes qui paraissent complexes et inabordables à priori. Un exemple bien connu est le comportement désordonné et complexe des particules d'un gaz, duquel émergent les lois simples du comportement collectif du gaz, la thermodynamique.

Pour notre propos, **la loi émergente est la mécanique classique** : dans la limite où la longueur d'onde l est très petite devant la taille L de la cavité où l'onde évolue (ou devant la taille typique de variation du potentiel), la complexité du problème ondulatoire croît, mais on montre que l'évolution d'une onde se décrit bien à l'aide des lois de la mécanique Hamiltonienne classique (i.e. mécanique des particules) dans le même domaine (ou même potentiel), voir [54], ou [24]. Cette approche s'appelle l'**analyse semi-classique**, et le **"régime semi-classique"** est caractérisé par une valeur du **paramètre sans dimension**[2] $\tilde{h} \stackrel{\text{def}}{=} l/L$ très petite devant 1.

[2]Il est important en physique de travailler sur des modèles adimensionés pour mettre en valeur les phénomènes pertinants et leur universalité. **Dans ce manuscrit nous considérons toujours de modèles**

Dans ce régime, partant de la description ondulatoire qui est linéaire et se place dans un espace de grande dimension, il apparaît des lois d'évolution non linéaires mais dans un espace de phase de dimension considérablement plus petite (de dimension $2d$ dans les notations précédentes). Par exemple, **la formule de Van-Vleck** (1928 [92]) exprime l'évolution temporelle d'une onde comme l'onde initiale transportée le long de plusieurs trajectoires classiques. L'analyse semi-classique est un outil mathématique important qui trouve des **applications dans de nombreux domaines de la physique où les ondes sont présentes** (ondes acoustiques, sismiques, électromagnétiques, quantiques,...).

Il y a deux remarques à faire : premièrement d'un point de vue historique, les physiciens ont découvert les lois effectives apparentes avant les lois microscopiques qui sont à leur origine. Par exemple l'optique géométrique (Newton 1700) avant l'optique ondulatoire (Fresnel 1814), la mécanique classique (Newton 1700, Lagrange 1760) avant la mécanique quantique ondulatoire (Heisenberg 1925, Shrödinger 1926), la thermodynamique (Carnot 1824) avant la physique statistique (Maxwell 1860) etc.. Deuxièmement, et c'est toute la richesse de la physique, il y a des exemples où la limite classique effective n'est pas évidente à priori (contrairement au cas de l'équation de Schrödinger sur l'espace des fonctions $L^2\left(\mathbb{R}^3\right)$ qui donne la mécanique classique sur l'espace de phase $T^*\mathbb{R}^3$). Nous verrons en section 3.3 un exemple en physique moléculaire où, à cause de symétries approximatives, l'espace de phase effectif est $\mathbb{C}P^2$. Le domaine de la matière condensée est riche de tels exemples où des phases surprenantes de la matière apparaissent selon les paramètres de l'environnement.

Contenu du manuscrit : nous présentons des travaux dans deux domaines de recherche et d'applications particuliers qui utilisent l'approche semi-classique. Le premier appelé "**le chaos quantique**", est relié au fait suivant : que la mécanique classique Hamiltonienne et ses lois d'évolution apparaissent dans la limite semi-classique ne résout pas pour autant le problème de la description de l'évolution des ondes. En effet, depuis H. Poincaré et à la suite de nombreux travaux au cours du XX ème siècle, il est apparu que des lois simples d'évolution, peuvent engendrer des comportements complexes voire imprévisibles. Cela porte le nom de **chaos déterministe**, et est essentiellement relié au fait que les trajectoires engendrées par ces lois d'évolutions peuvent diverger les unes des autres à un taux exponentiel (comme $e^{\lambda t}$ où λ est appelé exposant de Lyapounov), amplifiant, par-là même la moindre incertitude. De plus, ce phénomène est assez générique, et peut naturellement être présent dans les lois de mécanique classique issues d'un problème ondulatoire. La présence de ce chaos déterministe classique se manifeste, dans le comportement ondulatoire, par une apparente complexité de l'évolution des ondes, avec des phénomènes d'interférences parfois surprenants, comme nous

---

adimensionés comme modèles de départ. Nous rappelons la procédure pour adimensioner un modèle. Prenons l'exemple d'**un électron piégé dans une cavité de taille** $L \simeq 500$Å (un "quantum dot", voir [81]). L'équation de Shrödinger dimensionée s'écrit $i\hbar\left(d\psi/dt\right) = \hat{H}\psi$, avec $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2$, $\hat{p} = -i\hbar\bigtriangledown_x$, où la fonction ψ est contrainte de s'annuller sur les bords de la cavité. Si l'on s'intéresse au comportement des ondes ayant une longueur d'onde $\sim l \simeq 20$Å donnée, on choisira l'impulsion de référence $p_0 = \hbar 2\pi/l$, l'énergie de référence $E_0 = p_0^2/(2m)$, le temps de référence $t_0 = \hbar/\left(E_0\tilde{\hbar}\right)$ avec $\tilde{h} \stackrel{\text{def}}{=} l/L$, $\tilde{\hbar} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{h}/(2\pi)$. On définit des grandeurs sans dimension : $\tilde{p} \stackrel{\text{def}}{=} p/p_0$, $\tilde{H} \stackrel{\text{def}}{=} H/E_0$, $\tilde{t} \stackrel{\text{def}}{=} t/t_0$, $\tilde{x} \stackrel{\text{def}}{=} x/L$, $\tilde{\psi} \stackrel{\text{def}}{=} \psi L^{3/2}$ (d'après $1 = \int |\psi|^2 d^3x = \int \left|\tilde{\psi}\right|^2 d^3\tilde{x}$). On obtient **une équation de Schrödinger adimensionée** : $i\tilde{\hbar}\left(d\tilde{\psi}/d\tilde{t}\right) = \tilde{H}\tilde{\psi}$, avec $\tilde{H} = \tilde{p}^2$, et $\tilde{p} = -i\tilde{\hbar}\bigtriangledown_{\tilde{x}}$. Le petit paramètre est ici $\tilde{h} = l/L \simeq 0.04$. A une toute autre échelle, l'étude d'une onde sismique de longueur d'onde $l \simeq 400$m dans le bassin Grenoblois de taille $L \simeq 10$km, donnerait aussi $\tilde{h} = l/L \simeq 0.04$, et donc des phénomènes comparables (en supposant l'absorption, les polarisations et les effets non linéaires négligeables).

le verrons, et une complexité du spectre de l'opérateur d'évolution. Les difficultés qu'il y a à décrire l'évolution temporelle d'une onde, ou le spectre d'énergie (valeurs propres de l'opérateur d'évolution) sont reliées d'après la relation[3] $\Delta E\,\Delta t \simeq \tilde{h}$, qui signifie qu'une compréhension de la dynamique sur une échelle de temps $\leq \Delta t$ équivaut à une compréhension du spectre sur une échelle d'énergie $\geq \Delta E \simeq \tilde{h}/\Delta t$. La présence de chaos limite cette échelle de temps à un temps assez court appelé **temps d'Ehrenfest** t_E, qui est le temps après lequel un détail de l'ordre de la longueur d'onde l est amplifié à l'échelle "macroscopique" de la cavité L. Cela donne $le^{\lambda t_E} \simeq L \Leftrightarrow t_E \simeq \frac{1}{\lambda}\log\left(1/\tilde{h}\right)$ avec $\tilde{h} = l/L$. Nous verrons à plusieurs reprises l'importance de ce temps caractéristique en chaos quantique en particulier dans la deuxième partie de ce manuscrit, section 4. Le résultat principal que nous obtenons est le suivant : dans un exemple très particulier mais révélateur de système chaotique nous observerons qu'un paquet d'onde initialement localisé se comporte d'une étrange façon. Il se disperse très rapidement, remplit la cavité chaotique à la date $t = t_E$, et ensuite tout semble s'inverser. **Le paquet d'onde se reforme complètement à la date** $t = 2t_E$. Nous expliquerons ce phénomène en termes d'interférences collectivement constructives entre plusieurs trajectoires (dans une description de type "chemins de Feynmann" ou "formule de Van-Vleck"). Une conséquence directe de ce phénomène est l'**existence d'ondes stationnaires appelées** "**scars**" qui ne sont pas équidistribuées dans la cavité chaotique mais au contraire **partiellement localisées sur l'orbite classique instable** du paquet d'onde (si cette orbite est périodique). Voir figure 1.

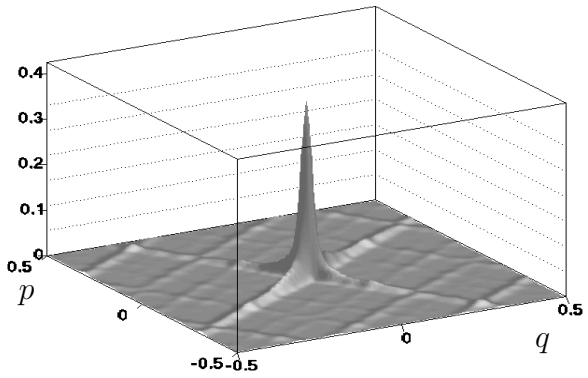


FIG. 1 – Onde stationnaire dans le modèle chaotique du "chat d'Arnold" présenté page 4. Cette onde appelée "scars", est partiellement localisée sur un point fixe instable de la dynamique.

Dans la deuxième partie, section 3, nous étudierons des **systèmes quantiques "mixtes"** qui contiennent deux sous parties. Une partie du système est dans un régime semi-classique, couplée à une autre partie qui est dans un régime purement quantique (décrite par un nombre restreint de niveaux quantiques). Cette situation mixte équivaut à un **régime adiabatique** où la partie semi-classique est une dynamique lente *comparativement* à la partie quantique qui

[3]Pour l'équation adimensionée

sera la dynamique rapide[4]. Cette situation où des dynamiques quantiques ayant des échelles de temps différentes sont couplées entre elles est très courante en physique, notamment dans les molécules, où par exemple la dynamique des noyaux est lente comparativement à la dynamique des électrons plus légers. Pour décrire ces situations que nous qualifierons de **dynamiques lente-rapide couplées**, nous nous contenterons d'une description à des échelles d'énergie finie (par rapport à $\tilde{\hbar}$) où déjà des phénomènes particuliers se produisent : les niveaux d'énergie se regroupent en bandes d'énergie. Cela correspond par exemple aux bandes vibrationnelles ou rotationnelles bien connues en physique moléculaire. Le résultat particulier que nous obtenons est que **le nombre de niveaux dans une bande est un nombre topologique**, qui caractérise la topologie du couplage entre les systèmes dynamiques rapide et lent : si le couplage est assez fort, **les dynamiques lente et rapide peuvent être comme "nouées ensemble"**, et possèdent une topologie non triviale. Expérimentalement on observe le phénomène suivant [84] : si on modifie un paramètre extérieur qui a pour effet d'augmenter le couplage, alors à des valeurs particulières du paramètre, des niveaux quantiques transitent d'une bande à une autre. Ces valeurs particulières s'interprètent comme des lieux où la topologie des bandes bifurque. Voir figure 2.

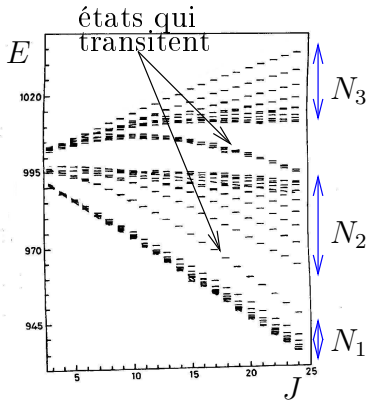


FIG. 2 – Spectre expérimental ro-vibrationnel de la molécule CD_4 en fonction du moment angulaire total J. On observe que les niveaux sont regroupés en trois bandes, et que le nombre de niveaux N_i dans chaque bande varie à cause d'états qui transitent d'une bande à une autre.

Plus précisément, la description du couplage du mouvement rapide par rapport à la dynamique lente dans une approche adiabatique "à la Born-Oppenheimer" fait intervenir un fibré vectoriel (la fibre est l'espace quantique formé décrit par l'état stationnaire rapide, et la base est l'espace de phase où l'on décrit le mouvement lent), fibré qui peut avoir une topologie non triviale. Le nombre de niveaux dans une bande est donné par une **formule de l'indice d'Atiyah-Singer** faisant intervenir la topologie de ce fibré. Cette formule remarquable établie dans les années 60 a une grande importance en mathématiques car elle établie des liens entre l'analyse et la topologie. Il est remarquable que ces liens se manifestent de façon assez évidente dans les spectres expérimentaux des petites molécules.

[4]Cette équivalence s'explique schématiquement de la façon suivante. On note $\psi = (\psi_1, \psi_2)$ la fonction d'onde totale constituée des sous parties 1 et 2, et évoluant d'après $id\psi/dt = \hat{H}\psi$ (équation adimensionée !). Si la partie 1 est en régime semi-classique avec un paramètre $\tilde{h}_1 \ll 1$, son évolution est mieux décrite par $i\tilde{h}_1 d\psi_1/dt_1 = \hat{H}\psi_1$ (qui possède une limite classique), ce qui demande de poser $t_1 = \tilde{h}_1 t$, soit une échelle de temps "lente" par rapport à t.

Dans ce manuscrit on ne parlera pas de travaux effectués sur **l'effet Hall quantique** [34, 37, 36], effectués pendant et après ma thèse, mais qui ont inspiré les travaux reliés à la topologie décrits dans la section 3.

Première partie

Présentation des travaux de recherche

2 Chaos quantique et ergodicité quantique

2.1 Introduction

La mécanique classique de Hamilton permet de décrire le comportement des ondes dans **la limite de petite longueur d'onde**, i.e. limite semi-classique. Pour certains systèmes ondulatoires, il arrive que dans cette limite, la dynamique classique soit chaotique, c'est-à-dire qu'il y ait **une forte sensibilité aux conditions initiales**. Le comportement des ondes est alors très affecté par ce chaos. On parle de chaos ondulatoire ou chaos quantique. En physique, de nombreux exemples de chaos ondulatoire sont connus, pour des systèmes quantiques, mais aussi pour des ondes acoustiques, sismiques, électromagnétiques... En mathématiques, l'objet d'étude par excellence est l'équation d'onde (ou le spectre du Laplacien) sur les variétés Riemanniennes à courbure négative.

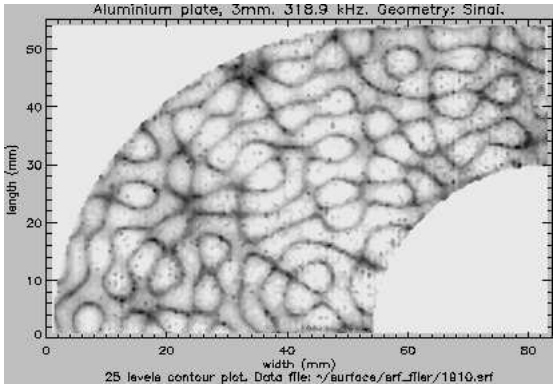


FIG. 3 – **Onde acoustique stationnaire** de longueur d'onde $l \sim 8mm$, sur une plaque d'aluminium de taille $L \sim 10cm$ (Travail de C. Ellegaard et al.). C'est un billard chaotique : cette plaque a une forme telle que les trajectoires classiques ont une instabilité hyperbolique . Les lignes nodales qui apparaissent ont une allure complexe, et sont décrites dans une approche statistique (voir [54] section 15.5).

Il y a un **temps caractéristique** important en chaos quantique qui est **le temps d'Ehrenfest** t_E, qui est "très court", et qui correspond à la durée après laquelle des détails à l'échelle de la longueur d'onde sont amplifiés à une échelle macroscopique. Avant ce temps, l'évolution d'un paquet d'onde est bien décrite par la théorie semi-classique ; après, des interférences "complexes" se produisent, et seule une approche statistique semble adaptée[5]. A ces deux intervalles temporels correspondent respectivement **la théorie des orbites périodiques**, et **la théorie des matrices aléatoires** avec son aspect "universel" (mais à qui il manque encore une assise mathématique rigoureuse) .

[5]Pour une illustration de ces propos on pourra lire la section 4.1.1, page 45, qui décrit une expérience numérique.

Les **questions importantes en chaos quantique** concernent le comportement des ondes au cours du temps, la description des phénomènes complexes d'interférences qui se produisent rapidement. Les questions portent aussi sur les ondes stationnaires (fonctions propres), leur distribution dans l'espace de phase, ainsi que la distribution des fréquences propres (valeurs propres). Un résultat important est le **théorème d'ergodicité Quantique de Schnirelman** qui précise que pour une dynamique classique ergodique[6], dans la limite semi-classique, *presque toutes* les fonctions propres sont équidistribuées sur l'espace de phase i.e. leur **mesure semi-classique** est la mesure de Liouville, mais il pourrait y avoir des exceptions, comme semble le suggérer la figure 4.

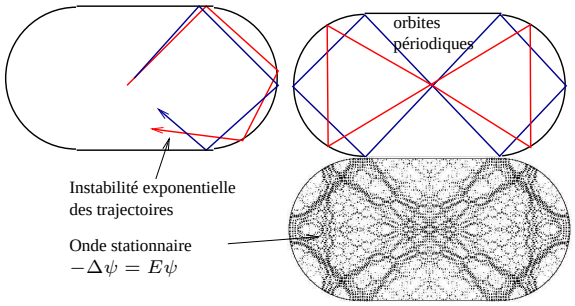


FIG. 4 – **Onde stationnaire** ψ dans une cavité, solution de l'équation $-\Delta\psi = E\psi$ avec les conditions de Dirichlet au bord, et une longueur d'onde petite (i.e. énergie E élevée). Dans cette cavité, la dynamique classique est hyperbolique (chaotique). Il apparaît que cette onde est répartie sur tout le stade, mais a une **intensité renforcée** sur des lignes qui correspondent à des **trajectoires périodiques instables** de la dynamique classique. Ce fait surprenant, qui n'est pas rare, a été découvert par E. Heller (1984, [62],[53]) et est appelé **"ondes avec cicatrices"** , "**scarred states**", ou **"scars"**.

Dans ce chapitre nous présenterons un **modèle mathématique très simple de chaos (quantique)** qui est une application linéaire hyperbolique sur le tore (quantifiée), appelée **"Application du chat d'Arnold"**[6]. Après avoir étudié l'évolution temporelle de paquets d'ondes, et introduit le temps caractéristique d'Ehrenfest t_E, nous construirons des **fonctions propres particulières "avec cicatrices"** pour lesquelles, curieusement, la mesure semi-classique associée est $1/2$ de la mesure de Liouville plus $1/2$ la mesure de Dirac sur une orbite périodique quelconque. D'après le théorème d'ergodicité quantique de Schnirelman, ce comportement est exceptionnel. En invoquant une expression semi-classique du propagateur, on interprétera leur existence comme résultant de multiples interférences collectivement constructives au temps $2t_E$ (à cette date et pour des systèmes très particuliers, un paquet d'onde se reforme de façon parfaite). Cet exemple semble être le premier exemple mathématique de "scars" pour une dynamique hyperbolique.

Pourquoi s'intéresser à ces états stationnaires particuliers ? Car la compréhension de leur existence est liée à la compréhension des phénomènes d'interférences complexes qui se produisent en chaos quantique au-delà du temps d'Ehrenfest. Dans le chapitre projets de recherche, nous discuterons quelques pistes de recherches en chaos quantique ouvertes par cette étude.

[6] Ergodique signifie que presque toutes les trajectoires explorent de façon uniforme toute la région de l'espace permise par la conservation de l'énergie. Le système chaotique qui nous intéresse dans ce chapitre est ergodique.

Nous mentionnerons que dans d'autres cas, l'**unique ergodicité quantique** a été montrée (i.e. toutes les mesures classiques sont la mesure de Liouville, sans exception, interdisant l'existence de "scars"). Finalement, nous discuterons le cas générique d'une dynamique hyperbolique *non linéaire* sur le tore. Nous montrerons dans la section 4.1, comment étendre et contrôler les formules semi-classiques (du propagateur et de sa trace) pour des temps $C.t_E$, i.e. multiples quelconques du temps d'Ehrenfest.

En résumé, ce chapitre aborde à travers un modèle simple, les deux questions importantes suivantes concernant les systèmes dynamiques hyperboliques (i.e. chaotique)

1. Est-il possible de comprendre la distribution des ondes stationnaires, dans l'espace de configuration ou dans l'espace de phase ?
   Sont elles *toutes* équidistribuées dans la limite $h = l/L \to 0$? (Cette propriété est appelée **l'Unique Ergodicité Quantique Q.U.E)**
2. Est-il possible de décrire l'évolution d'un paquet d'onde d'un point de vue semi-classique (l'étalement et les interférences après un temps d'évolution assez long), en termes de trajectoires classiques ?

Des Revues récentes sur les aspects mathématiques du chaos quantique sont proposées par Stephan DeBièvre *[27],[28]* ou par Steve Zelditch *[96][97]*. Une version plus détaillée de ce chapitre avec notamment toutes les preuves se trouvent dans le manuscrit [40].

2.2 Application hyperbolique linéaire

Le billard chaotique de la figure 4, est un système à deux degrés de liberté (espace de phase de dimension 4). Pour simplifier l'étude des trajectoires classiques, on peut n'étudier que les impacts de la trajectoire sur le bord. Chaque impact est caractérisé par sa coordonnée curviligne q et l'angle $\varphi \in \left]-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right[$ que fait la trajectoire incidente avec la normale au bord. On pose aussi $p = \sin\varphi$. Cette suite d'impacts $(q_0, p_0) \to (q_1, p_1) \to \ldots$, est un système dynamique P à temps discret défini sur l'espace de dimension deux (q, p) et appelé **section de Poincaré**, $(q_0, p_0) \to (q_1, p_1) = P(q_0, p_0)$ (l'application P conserve l'aire, autrement dit les variables (q, p) sont conjuguées). L'aspect chaotique de la dynamique vient du fait qu'un nuage de points dans la section de Poincaré est **étiré puis replié indéfiniment** sous l'effet de l'application P.

Le modèle présenté dans ce paragraphe est peut-être le modèle de dynamique hyperbolique (i.e. fortement chaotique) le plus simple que l'on puisse imaginer. Sa version quantique est aussi simple à exprimer. C'est par conséquent un modèle privilégié pour l'étude du chaos classique ou quantique. C'est un modèle artificiel d'un point de vue physique, mais il faut le penser comme l'équivalent d'une section de Poincaré. Sa construction est basée sur cette idée d'étirement-repliement.

2.2.1 L'application classique M

Considérons une matrice de déterminant 1, à coefficients entiers $M = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \in SL(2, \mathbb{Z})$, et hyperbolique ($\mathrm{Tr}M = A + D > 2$). On note $e^{+\lambda} > 1$, $e^{-\lambda} < 1$, les deux valeurs propres de M auxquelles correspondent une direction instable e_+ et stable e_- respectivement. Pour tout point $x \in \mathbb{R}^2$ et $n \in \mathbb{Z}^2$, on a

$$M(x + n) = M(x) + M(n) \equiv M(x) \bmod 1$$

donc M induit une application sur le tore $\mathbb{T}^2 = \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2$ aussi notée[7] M. Un exemple simple appelé "modèle du chat d'Arnold [6]" est :

$$\begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} q_1 \\ p_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix} \qquad \text{mod1} \tag{1}$$

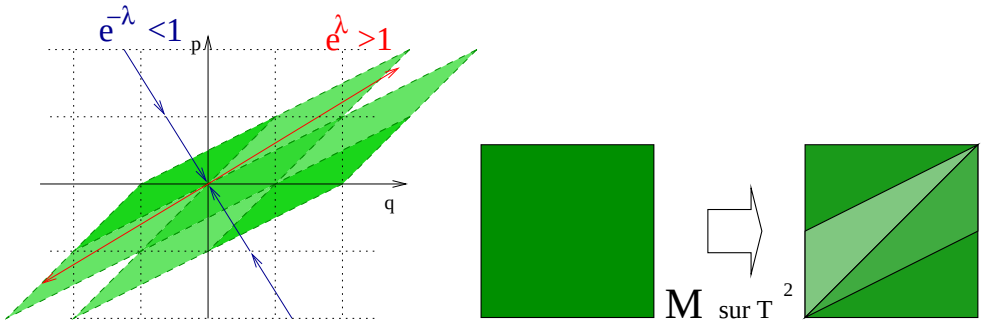


FIG. 5 – Evolution par l'application (1) du réseau $\mathbb{Z}^2$ sur le plan et sur le tore.

L'application M sur le tore est **Anosov** ou **uniformément hyperbolique** ce qui signifie que chaque trajectoire a une direction instable e_+ et une direction stable e_-. Cela implique que la dynamique a des **propriétés de chaos fort** comme le mélange, l'ergodicité, la décroissance des corrélations temporelles, le théorème central limite, etc.., voir [64] p. 154.

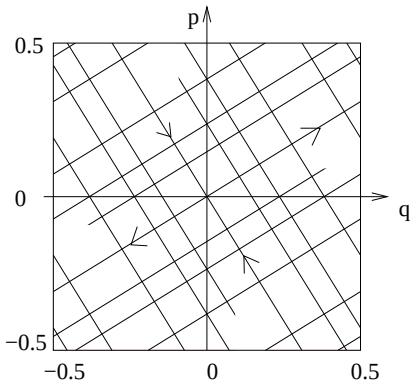


FIG. 6 – Les directions stables et instables $e_\pm$ de l'application M ont une pente irrationnelle sur $\mathbb{R}^2$. Par conséquent elles remplissent le tore de façon dense.

Sur le site web ([38], "Modèle du Chat d'Arnold"), on pourra observer un nuage de points (i.e. une distribution de probabilité régulière) qui évolue par cette application et remarquer qu'elle converge vers la mesure uniforme. C'est la **propriété de "mélange"**. On pourra aussi

[7] La direction instable crée le phénomène d'étirement, et la périodicité sur le tore crée le phénomène de repliement tous deux nécessaires pour avoir du chaos.

observer l'évolution temporelle d'une particule (de position initiale générique) et remarquer que son **mouvement semble totalement imprévisible**. C'est une conséquence de la propriété de mélange, et cela contraste avec la simplicité de la loi déterministe (1).

2.2.2 Espace quantique associé au tore $\mathbb{T}^2$

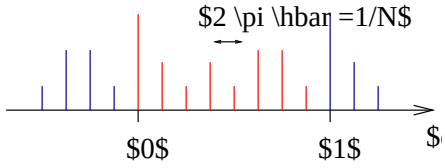
L'espace de Hilbert quantique associé à l'espace de phase $\mathbb{R}^2 \ni (q,p)$ est formé par les fonctions $\varphi(q) \in L^2(\mathbb{R})$, de la variable q seulement. On définit $\tilde{\varphi}(p) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dq\, \varphi(q)\, e^{-ipq/\hbar}$ la $\hbar$-transformée de Fourier, où on a introduit le paramètre $\hbar > 0$ et $h = 2\pi\hbar$, appelée **Constante de Planck**. D'après $e^{-ipq/\hbar} = e^{-i2\pi q/l}$ avec la longueur d'onde $l = h/p$, on voit que la limite $h \to 0$ nous permettra d'étudier la limite semi-classique des petites longueurs d'ondes.

L'espace de phase tore $\mathbb{T}^2 = \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2$ a été obtenu en introduisant la périodicité du réseau $\mathbb{Z}^2$ sur le plan $\mathbb{R}^2$. De la même façon on définit l'espace de Hilbert quantique associé au tore comme étant formé par les fonctions d'ondes périodiques en q et dont la transformée de Fourier est aussi périodique en p (ce sont plus précisément des distributions) :

$$\boxed{\mathcal{H}_N \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \varphi(q) \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}) \;/\; \varphi(q+1) = \varphi(q) \;\text{ et }\; \tilde{\varphi}(p+1) = \tilde{\varphi}(p)\,. \right\}}$$

Pour expliciter cet espace, remarquons que $\tilde{\varphi}(p)$ périodique implique $\varphi(q) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} a_n \delta(q - h\,n)$, avec $a_n \in \mathbb{C}$. Ensuite pour avoir $\varphi(q)$ périodique, **il faut supposer :**

$$\boxed{N = \frac{1}{h} \in \mathbb{N}^*}$$



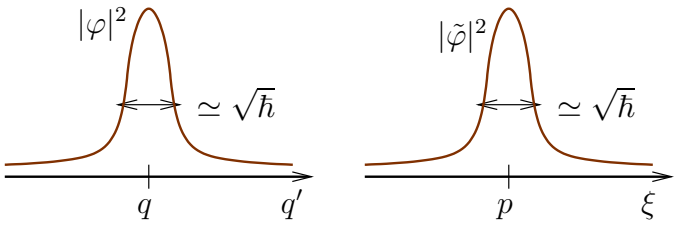
Nous supposerons cette condition dans la suite. Alors $\varphi(q)$ est déterminée par seulement N composantes $(a_n)_{n=1\to N}$. Donc

$$\boxed{\dim \mathcal{H}_N = N = \frac{1}{h}.}$$

2.2.3 Représentation d'un état quantique sur l'espace de phase. Distribution de Husimi, Mesures semi-classiques.

La dynamique classique de l'application M se passe sur l'espace de phase $\mathbb{T}^2$. Nous avons vu qu'un état quantique $\varphi \in \mathcal{H}_N$ est une fonction (distribution) de $q \in \mathbb{R}$ seulement. Afin d'étudier la limite semi-classique, il sera préférable de représenter les états quantiques comme des distributions sur l'espace de phase.

Pour cela, pour $(q,p) \in \mathbb{R}^2$ donné, on associe **un état cohérent** qui est la fonction d'onde Gaussienne $\varphi_{q,p} \in L^2(\mathbb{R})$: $\varphi_{q,p}(q') = \frac{1}{(\pi\hbar)^{1/4}} \exp\left(i\frac{pq'}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(q'-q)^2}{2(\sqrt{\hbar})^2}\right)$. Son module est "localisé près de q", avec une largeur $\Delta x \simeq \sqrt{\hbar}$ ($\to 0$ pour $\hbar \to 0$). Sa $\hbar$-transformée de Fourier est $\tilde{\varphi}_{q,p}(p') = \frac{1}{(\pi\hbar)^{1/4}} \exp\left(-i\frac{qp'}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(p'-p)^2}{2(\sqrt{\hbar})^2}\right)$, localisée de façon similaire près de p :



Pour un état quantique donné du tore $\psi \in \mathcal{H}_N$, on définit sa **distribution de Husimi** Hus_ψ comme étant la mesure de probabilité[8] sur le tore $\mathbb{T}^2$:

$$\boxed{\mathrm{Hus}_\psi(q,p) \overset{\text{def}}{=} \frac{1}{h}\left|\int_{\mathbb{R}} \overline{\varphi}_{q,p}(x)\,\psi(x)\,dx\right|^2},$$

On a en effet $\int_{\mathbb{T}^2} \mathrm{Hus}_\psi(q,p)\,dqdp = \|\psi\|^2 = 1$ si ψ est normalisé[9].

Comme on sera intéressé par l'étude des états quantiques dans la limite semi-classique $\hbar \to 0$, $N = 1/h \to \infty$, on introduit :

Définition 2.1. Pour **une suite** d'états quantiques $(\psi)_N \in \mathcal{H}_N$, $N = 1/h \to \infty$, la **mesure semi-classique** sur $\mathbb{T}^2$ est la limite $\mu \overset{\text{def}}{=} \lim\text{-faible}_{N\to\infty}\mathrm{Hus}_{\psi_N}$ au sens des distributions (si la limite existe).

Remarques :

- La limite faible signifie que les fluctuations des distributions de Husimi à l'échelle microscopique $\sqrt{h}$ (ou supérieure), sont effacées. Il ne reste que les variations à une échelle finie lorsque $\hbar \to 0$.
- **Cas particuliers que l'on pose en définitions :** une suite d'états est dite **localisée au point** $x \in \mathbb{T}^2$ si $\mu = \delta_x$, la mesure de Dirac au point x. Une suite d'états est dite **équidistribuée** sur le tore si au contraire $\mu = \mu_{Lebesgue} = dqdp$.
- Par exemple, pour $(q_0,p_0) \in \mathbb{R}^2$ fixé, la distribution de Husimi de l'état cohérent du tore[10] $\varphi_{Torus,(q_0,p_0)}$ est localisée près de (q_0,p_0) avec une largeur $\simeq \sqrt{h}$. Par conséquent, la mesure semi-classique de la suite d'états cohérents $\left(\varphi_{Torus,(q_0,p_0)}\right)_{h\to 0}$ est la distribution de Dirac $\mu = \delta_{(q_0,p_0)}$. Cette suite est donc localisée en (q_0,p_0). Voir figure 7.

[8] Cette définition est très intuitive : pour un point $x = (q,p)$ donné, une valeur importante de $Hus_\psi(x)$ signifie que l'état quantique a "une forte probabilité de présence" au point x de l'espace de phase.

[9] La **quantification géométrique** présente cela dans le cadre de la **géométrie complexe**, où $\mathcal{H}_N$ est l'espace des sections holomorphes de $L^{\otimes N} \to \mathbb{T}^2$, où $L \to \mathbb{T}^2$ est un fibré holomorphe Hermitien positif de degré 1. La distribution de Husimi $Hus_\psi(q,p)$ est le module carré de la section ψ. $\dim \mathcal{H}_N = N$ découle de la **formule de Riemann-Roch**.

[10] Un état cohérent du tore $\varphi_{Torus,(q_0,p_0)} \in \mathcal{H}_N$ est obtenu à partir de l'état cohérent $\varphi_{q_0,p_0} \in L^2(\mathbb{R})$ en le rendant périodique sur le plan, par $\varphi_{Torus,q_0,p_0} = \hat{P}\varphi_{q_0,p_0}$, avec l'opérateur

$$\hat{P} = \sum_{(n_1,n_2)\in\mathbb{Z}^2} \hat{T}_{(1,0)}^{n_1}\hat{T}_{(0,1)}^{n_2} : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \to \mathcal{H}_N \tag{2}$$

où $\left(\hat{T}_{(1,0)}\varphi\right)(q) = \varphi(q-1)$ translate selon q, et $\left(\hat{T}_{(0,1)}\tilde{\varphi}\right)(p) = \tilde{\varphi}(p-1)$ translate la Transformée de Fourier.

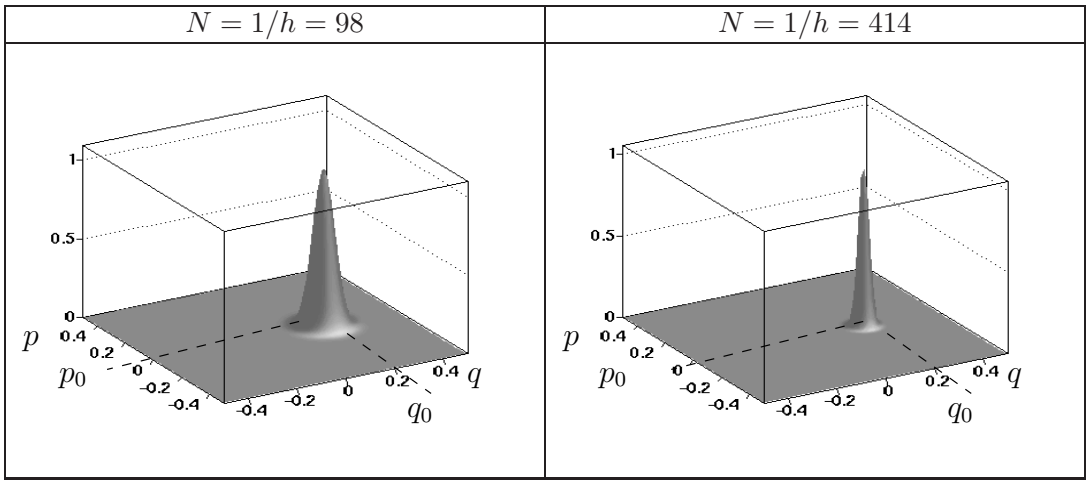


FIG. 7 – Distribution de Husimi **d'état cohérents** en $(q_0, p_0) = (0.2, 0)$.

2.2.4 Quantification de l'application M

Il y a des procédures standard pour quantifier un flot Hamiltonien mais pas une application. Afin d'étudier la version quantique de l'application M, nous devons donc l'exprimer au préalable comme la section de Poincaré d'un flot Hamiltonien.

Dynamique sur le plan : On considère le **Hamiltonien quadratique** suivant sur l'espace de phase $\mathbb{R}^2, \omega = dq \wedge dp$:

$$H(q,p) = \frac{1}{2}\alpha q^2 + \frac{1}{2}\beta p^2 + \gamma qp, \tag{3}$$

avec $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}$. D'après les équations de mouvement de Hamilton

$$\begin{cases} \frac{dq(t)}{dt} & = \frac{\partial H}{\partial p} = \gamma q + \beta p \\ \frac{dq(t)}{dt} & = -\frac{\partial H}{\partial q} = -\alpha q - \gamma p \end{cases}$$

H génère des trajectoires $x(t) = (q(t), p(t))$ sur $\mathbb{R}^2$, données par $x(t) = M(t)\, x(0)$ $(t \in \mathbb{R})$, où $M(t)$ est une matrice de déterminant 1 $(M(t) \in \mathrm{SL}(2,\mathbb{R}))$ et explicitement pour $t = 1$:

$$M(1) = \exp \begin{pmatrix} \gamma & \beta \\ -\alpha & -\gamma \end{pmatrix} \in \mathrm{SL}(2,\mathbb{R}), \tag{4}$$

On peut choisir les paramètres α, β, γ tels que $M(1) = M = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \in \mathrm{SL}(2,\mathbb{Z})$ considérée plus haut.

L'**espace de Hilbert quantique** associé à l'espace de phase plan $\mathbb{R}^2$ est $\mathcal{H}_{plan} = L^2(\mathbb{R})$. On rappelle les opérateurs de position et impulsion habituels agissant dans $L^2(\mathbb{R})$:

$$(\hat{q}\varphi)(q) \equiv q\varphi(q), \qquad (\hat{p}\varphi)(q) \equiv -i\hbar \frac{d\varphi}{dq}(q), \qquad [\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \hat{I}.$$

L'opérateur Hamiltonien $\hat{H}$ qui génère l'évolution d'une fonction d'onde est auto-adjoint, et s'obtient par la quantification de Weyl de H Eq.(3) :

$$\hat{H} = Op_{Weyl}(H) = \frac{\alpha}{2}\hat{q}^2 + \frac{\beta}{2}\hat{p}^2 + \frac{\gamma}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}),$$

L'équation de Schrödinger dans $\mathcal{H}_{plan} = L^2(\mathbb{R})$ gouverne l'évolution temporelle des états quantiques $\varphi(t) \in \mathcal{H}_{plan}$:

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varphi(t),$$

et génère un opérateur d'évolution unitaire noté $\hat{M}$ entre les temps $t = 0 \to 1$:

$$\varphi(1) = \hat{M}\varphi(0), \quad \hat{M} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right). \tag{5}$$

Dynamique sur le tore : Grâce au fait que l'application classique $M \in SL(2,\mathbb{Z})$ est une matrice à coefficients entiers, nous avons vu qu'elle induit une application sur le tore $\mathbb{T}^2 = \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2$. Il en est de même pour l'opérateur quantique $\hat{M}$.

Proposition 2.2. *Dans le cas où $N = 1/h$ est pair, l'opérateur $\hat{M}$ induit un opérateur unitaire dans l'espace quantique du tore $\mathcal{H}_N$ noté aussi :*

$$\hat{M} : \ \mathcal{H}_N \to \mathcal{H}_N \tag{6}$$

Cet opérateur (matrice $N \times N$) est "la quantification" de l'application $M : \mathbb{T}^2 \to \mathbb{T}^2$.

Démonstration. Pour $v = (v_q, v_p) \in \mathbb{R}^2$, $x = (q,p) \in \mathbb{R}^2$, posons

$$T_v : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2, \qquad T_v(x) = x + v \qquad \text{: translation classique} \tag{7}$$

qui est la **translation par v sur l'espace de phase**. L'application T_v peut être exprimée comme le flot en temps 1 généré par la fonction de Hamilton linéaire $f(q,p) = (v_1 q - v_2 p)$. L'opérateur quantique unitaire dans $\mathcal{H}_{plan} = L^2(\mathbb{R})$ correspondant est défini par :

$$\hat{T}_v \overset{\text{def}}{=} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(v_1\hat{p} - v_2\hat{q})\right). \qquad \text{: translation quantique} \tag{8}$$

Ces opérateurs de **translation quantique** satisfont les relations algébriques :

$$\hat{T}_v \hat{T}_{v'} = e^{-iS/\hbar}\hat{T}_{v+v'}, \tag{9}$$

avec $S = \frac{1}{2}(v_1 v_2' - v_2 v_1') = \frac{1}{2} v \wedge v'$. (Cela découle de $[\hat{q},\hat{p}] = i\hbar\hat{I}$. Les opérateurs $\hat{T}_v$ forment une représentation unitaire irréductible du **groupe d'Heisenberg**).

Pour une matrice $M \in SL(2,\mathbb{R})$, on a trivialement $M T_v = T_{Mv} M$ (car $M(x+v) = M(x) + M(v)$). Cette relation persiste au niveau quantique :

$$\boxed{\hat{M}\hat{T}_v = \hat{T}_{Mv}\hat{M}.} \tag{10}$$

Cette relation sera utilisée de façon cruciale dans la suite du chapitre. Elle repose sur le fait que M est une application *linéaire* et n'est bien sûr plus valable dans le cas non linéaire.

D'après la définition (2), $\hat{P} = \sum_{n\in\mathbb{Z}^2} \hat{T}_{(1,0)}^{n_1} \hat{T}_{(0,1)}^{n_2} = \sum_{n\in\mathbb{Z}^2} \hat{T}_n$. Cette dernière égalité découle de (9) et n'est valable que si N est pair. Avec (10) , on déduit $\hat{M}\,\hat{P} = \hat{P}\,\hat{M}$ ce qui se traduit par un diagramme commutatif :

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{S}(\mathbb{R}) & \xrightarrow{\hat{M}} & \mathcal{S}(\mathbb{R}) \\ \downarrow \hat{P} & & \downarrow \hat{P} \\ \mathcal{H}_N & \xrightarrow{\hat{M}} & \mathcal{H}_N \end{array}$$

On a donc un endomorphisme induit $\hat{M} :\ \mathcal{H}_N \to \mathcal{H}_N$.

□

Mesures semi-classiques invariantes : Les vecteurs propres de l'opérateur $\hat{M}$ sur $\mathcal{H}_N$ sont des états quantiques particuliers, car ils sont invariants par la dynamique quantique (on les appelle aussi ondes stationnaires). On va s'intéresser particulièrement à leur distribution sur l'espace de phase dans la limite semi-classique.

Définition 2.3. Si $|\psi_h\rangle_{h\to 0}$ est une suite d'états propres de $\hat{M}$ (i.e. $\hat{M}|\psi_h\rangle = e^{i\varphi_h}|\psi_h\rangle$), alors leur mesure semi-classique μ est appelée une **mesure semi-classique invariante.**

Une question importante en chaos quantique est de déterminer l'ensemble des mesures semi-classiques invariantes , noté $\mathcal{M}_{inv.semi-class.}$. Un premier résultat bien connu est :

Proposition 2.4. *Une mesure semi-classique invariante est invariante par la dynamique classique*

$$\mathcal{M}_{inv.semi-class} \subset \mathcal{M}_{inv.class}$$

L'ensemble des **mesures invariantes classiques** $\mathcal{M}_{inv.class}$ contient la mesure de Lebesgue, mais aussi des mesures de Dirac sur les orbites périodiques (et d'autres mesures singulières). Cette définition de mesure semi-classique nous permet donc de poser correctement la **question d'existence de "scars"** en chaos quantique. Il s'agit de savoir s'il existe des mesures semi-classiques invariantes qui sont des mesures de Dirac sur une orbite périodique, ou plus généralement qui sont différentes de la mesure de Lebesgue. Voir la figure 8.

2.3 L'ergodicité quantique

Le théorème d'ergodicité quantique est un résultat important dans le domaine du chaos quantique. Il donne une information importante sur les "scars" : il n'exclue pas leur existence mais affirme qu'ils sont rares. Références : *Schnirelman 1974 [86], Zelditch 1987 [94], Colin de Verdière 1985 [23], Helffer Martinez Robert 1987 [2], Bouzouina DeBièvre 1996 [1].*

Théorème 2.5. *Le* ***"théorème d'ergodicité quantique de Schnirelman"****. Pour une dynamique* ***ergodique, presque toutes*** *les* ***mesures semi-classiques invariantes*** μ *sont* ***équidistribuées****.*

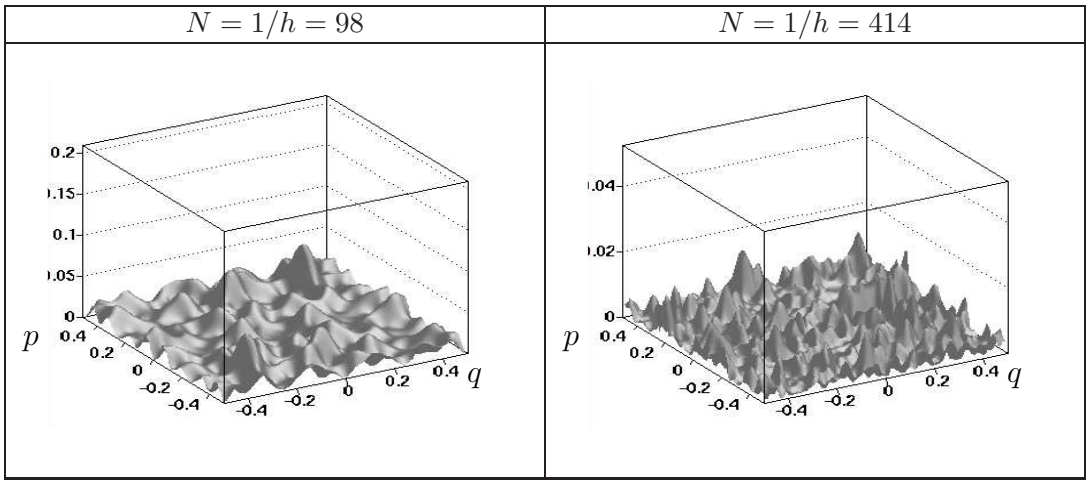


FIG. 8 – Distribution de Husimi de deux **états stationnaires** (états propres $\hat{M}|\psi_h\rangle = e^{i\phi_h}|\psi_h\rangle$), à deux valeurs différentes de h (le choix des valeurs propres est quelconque). On observe que ces états ne sont pas localisés sur le tore. Bien au contraire, **comme pour la plupart des états** on s'attend à ce qu'ils soient **équidistribués**, i.e. que leur distribution de Husimi tende (au sens des distributions) vers la mesure uniforme $\mu = \mu_{Lebesgue} = dqdp$.

Autrement dit, si $\psi_{j,N} \in \mathcal{H}_N$ est une base o.n., $N = 2, 4, \ldots, \infty$, $j \in [1, \ldots N]$, et $\hat{M}\psi_{j,N} = e^{i\phi_{j,N}}\psi_{j,N}$, alors pour tout N, il existe un ensemble d'indices $J_N \subset [1, \ldots N]$ tel que $(\#J_N/N) \to 1$ pour $N \to \infty$, et que toute suite d'états stationnaires $(\psi_{j,N},\, j \in J_N)_{N=1\to\infty}$, a pour mesure semi-classique la mesure de Lebesgue $\mu = \mu_{Lebesgue} = dqdp$.

Remarques :

- Ce théorème nécessite seulement la propriété d'ergodicité de la dynamique, et non pas le mélange qui est une propriété bien plus forte. Avec la propriété de mélange et plus précisément de dynamique hyperbolique, il y a des résultats plus précis portant sur la vitesse de convergence ("la variance quantique") [95],[33][97],[30][69][74].
- La preuve demande un contrôle de l'évolution semi-classique sur des échelles de temps fini par rapport à $\hbar$. Malgré l'apparence, ce théorème ne donne pas d'information sur les états stationnaires individuels, mais sur leur effet collectif. Le terme **"presque toutes" est important** et traduit cela.
- Le terme "presque toutes" n'exclut pas des suites exceptionnelles d'états stationnaires ayant une mesure semi-classique différente de la mesure de Lebesgue, comme des "scars". Il est naturel de poser **la question s'il est possible de trouver une mesure semi-classique invariante non équidistribuée** : $\mu \neq \mu_{Leb.}$? Par exemple une mesure semi-classique invariante localisée sur une orbite périodique comme $\mu = \delta_{\text{orbite périodique}}$? (cela correspondrait à une suite d'états stationnaires dont la distribution de Husimi se concentrerait sur une orbite périodique dans la limite semi-classique. Ces états ont été appelés des "**états cicatrisés**", "**scars**", par E. Heller [62], suite à des observations numériques). Intuitivement, l'existence d'une telle mesure est très incertaine car le principe d'incertitude $\Delta q \Delta p \geq h$, implique que à h fixé, une distribution de Husimi est une mesure lisse et ne peut pas être pas une distribution de Dirac sur l'espace de phase. Or la propriété

de mélange hyperbolique implique que toute mesure lisse converge faiblement vers la mesure de Lebesgue pour $t \to \infty$. Cependant ce raisonnement n'est pas valable car il consiste à fixer h, faire $t \to \infty$, puis $h \to 0$ ensuite. Or la validité de l'approche semi-classique habituelle n'est prouvée qu'en fixant t d'abord, puis faisant $\hbar \to 0$, puis $t \to \infty$ ensuite. En résumé, la question est difficile car les deux limites $h \to 0$ et $t \to +\infty$ **"ne commutent pas"**.[11]

- A l'autre extrême, on pourrait penser que *toute* mesure semi-classique invariante est égale à la mesure de Lebesgue $\mu_{Lebesgue} = dqdp$, i.e. $\mathcal{M}_{inv.semi-class.} = \{\mu_{Lebesgue}\}$ seulement, sans exception possible dans le théorème ergodique. Cela constitue la propriété **d'unique Ergodicité Quantique (Q.U.E.)**. Cette propriété a été conjecturée pour le spectre du Laplacien Δ sur une variété compacte de courbure négative par Z.Rudnick and P.Sarnak en 1994[82].

Des résultats récents sur l'unique Ergodicité Quantique et les "scars" :

- Pour les surfaces arithmétiques à courbure négative constante (qui constituent des systèmes particuliers), et avec l'hypothèse que le **spectre de Δ est non dégénéré**, E. Lindenstrauss a prouvé **Q.U.E.** en 2003 [72], (voir aussi le cours [9]). (Dans ce travail, Q.U.E. a été prouvé pour des états propres conjoints du Laplacien et d'opérateurs de Hecke).
- De façon similaire, P. Kurlberg and Z. Rudnick [67] ont prouvé **Q.U.E.** pour des applications linéaires hyperboliques sur le tore (modèle qui nous concerne) pour presque toute suite semi-classique extraite de la suite $N = 1, 2, \ldots \infty$. (i.e. ici l'ensemble $J_N = [1, \ldots N]$ dans le théorème 2.5). Ils utilisent aussi des états propres conjoints de $\hat{M}$ et d'opérateurs de Hecke, et montrent que le spectre de $\hat{M}$ est **non dégénéré** (ou suffisamment peu dégénéré) pour presque toutes valeurs de N.
- Le reste de ce chapitre consiste à montrer **un exemple de "scars", i.e. de "Non Unique Ergodicité Quantique"** obtenu en 2003 [44], avec l'opérateur $\hat{M}$, où la mesure semi-classique invariante est $\mu = \frac{1}{2}\delta_{orbite\,priodique} + \frac{1}{2}\mu_{Lebesgue}$ obtenue pour une suite particulière de valeurs de N et des états stationnaires particuliers. C'est le Théorème 2.10 page 16.
- Nalini Anantharaman a montré en 2004 [3] que les fonctions propres du Laplacien sur une variété de courbure négative ne peuvent pas se concentrer sur des ensembles de petite entropie topologique. Elle a conjecturé que l'entropie métrique d'une mesure semi-classique est supérieure à 1/2 l'entropie de la mesure de Liouville. Cela exclurait par exemple des mesures semi-classiques invariantes comme $\mu = \delta_{orbite-priodique}$ (qui a une entropie nulle).
- Pour une application linéaire hyperbolique sur le tore, F. Bonechi et S. DeBièvre[14] ont montré que si
$$\mu = \beta\delta_{\text{orbite périodique}} + (1-\beta)\,\nu$$
avec $\nu(0) = 0$, alors $\beta \leq 0.6$. (La borne a été améliorée à $\beta \leq 0.5$ dans [44]).
- Des résultats similaires ont été obtenus pour les applications non linéaires sur le tore par J.M. Bouclet, S. DeBièvre[17], et S. Nonnenmacher[33].

[11] L'argument est en fait correct, et des résultats rigoureux ont été obtenus récemment en utilisant le contrôle de l'évolution d'un état quantique jusqu'au temps d'Ehrenfest $t \leq t_E = \frac{1}{\lambda}\log(1/\hbar)$. Voir section discussion page 21.

2.4 Évolution périodique d'un état cohérent et construction "d'états cicatrisés"

2.4.1 Le phénomène de période quantique

La propriété de période quantique décrite ici est (à notre niveau de compréhension) le point clef pour obtenir le phénomène de **"résurrection du paquet d'onde"** décrit plus loin, et qui sera à l'origine de l'exemple de non unique ergodicité quantique décrit ensuite. Comme nous le verrons, ce phénomène est très particulier aux applications linéaires sur le tore que nous étudions.

Références : Etienne Ghys [52], ou Hannay-Berry (1980)[57].

Théorème 2.6. *Pour toute valeur de $h = 1/N$, il existe un temps $P = P(N) \in \mathbb{N}^*$ et une phase $\alpha_N \in \mathbb{R}$, tels que $\hat{M}^P = \hat{I}\, e^{i\alpha_N}$. On appelle P la* ***période quantique.***

Remarques :

- Cela signifie qu'après le temps d'évolution P, une onde quantique revient à son état initial à une phase près. Cela est très différent de la dynamique classique, où à cause de la propriété de mélange, une distribution régulière évolue invariablement vers la mesure de Liouville sur le tore. Voir le film sur la page web [38].
- Comme $\hat{M}$ est une matrice unitaire de dimension N, on s'attend en général à ce que l'évolution d'un état quantique présente des phénomènes de quasi-périodicité. La périodicité signifie ici que les valeurs propres de $\hat{M}$ sont régulièrement espacées sur le cercle, et qu'il y a précisément P groupes. Dans le cas où P est plus petit que N, cela implique des dégénérescences dans le spectre (ce modèle ne satisfait pas l'heuristique des matrices aléatoires en chaos quantique qui montre que les valeurs propres ont tendance à se repousser au contraire, [12]).

Démonstration. Une translation $\hat{T}_v$, $v \in \mathbb{R}^2$, laisse l'espace $\mathcal{H}_N$ invariant si $\hat{T}_v$ commute avec $\hat{T}_{(1,0)}, \hat{T}_{(0,1)}$ ou avec $\hat{T}_n$, $\forall n \in \mathbb{Z}^2$. De Eq.(9), on déduit $\hat{T}_v\hat{T}_n = \hat{T}_n\hat{T}_v \exp(-i2\pi Nv \wedge n)$, et le terme de phase $\exp(-i2\pi Nv \wedge n) = 1$ si $Nv \in \mathbb{Z}^2$, i.e. $v = \frac{k}{N}$, $\quad k \in \mathbb{Z}^2$. Ces translations sont donc :

$$\hat{T}_{k/N}, \qquad k \in \mathbb{Z}^2$$

Mais pour $k, m \in \mathbb{Z}^2$, $\hat{T}_{k/N+m}\hat{P} = \hat{T}_{k/N}\hat{T}_m \sum_{n\in\mathbb{Z}^2} \hat{T}_n = \hat{T}_{k/N} \sum_{n\in\mathbb{Z}^2} \hat{T}_{m+n} = \hat{T}_{k/N}\hat{P}$. Donc il y a une relation de périodicité $\left(\hat{T}_{k/N+m}\right)_{/\mathcal{H}_N} = \left(\hat{T}_{k/N}\right)_{/\mathcal{H}_N}$, $\forall m, k \in \mathbb{Z}^2$. L'espace $\mathcal{H}_N$ est irréductible pour le groupe formé par les opérateurs de translation $\hat{T}_{k/N}$. Utilisant (10), on a donc pour $P \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned}
\hat{M}^P \propto \hat{I} \quad &\Leftrightarrow \quad \left[\hat{M}^P, \hat{T}_{k/N}\right] = 0, \quad \forall k\, [1, N]^2\,, \\
&\Leftrightarrow \quad \hat{M}^P\hat{T}_{k/N}\hat{M}^{-P} = \hat{T}_{k/N} \Leftrightarrow \hat{T}_{M^Pk/N} = \hat{T}_{k/N} \\
&\Leftrightarrow \quad M^P\frac{k}{N} \equiv \frac{k}{N}\ [1]
\end{aligned}$$

Cette dernière relation a une solution :

$$P(N) = \min_P \left\{P \,/\, M^P \equiv I\ [N]\right\}$$

cette solution existe car M a des coefficients entiers. Son action préserve donc le réseau rationnel de composantes k/N sur le tore, et $P(N)$ est donné par le P.P.C.M. des périodes de cette action.

□

Théorème 2.7. *Voir figure 9.* ***Bornes générales*** *de la période quantique ([65],[52]) :*

$$\exists C, \forall N, \quad \frac{2}{\lambda}\log N - C \leq P(N) \leq 3N$$

Pour ***presque toutes les valeurs*** *de* $N \in \mathbb{N}$ *[68] :*

$$P(N) \geq \sqrt{N}$$

La ***borne inférieure*** *est atteinte par des suites extraites, comme :* $N = N_{i\in\mathbb{N}}$ *donné par*

$$N_0 = 0, \quad N_1 = 1, \quad N_{i+2} = Tr(M)\ N_{i+1} - N_i \tag{11}$$

et $P(N_i) = 2i$*, vérifiant*

$$P(N_i) = \frac{2}{\lambda}\log N_i - C + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right)$$

avec $C \in \mathbb{R}$.

Remarque : On vérifie facilement qu'il apparaît régulièrement des valeurs de $N = N_i$ paires, nécessaires pour la proposition 2.2.

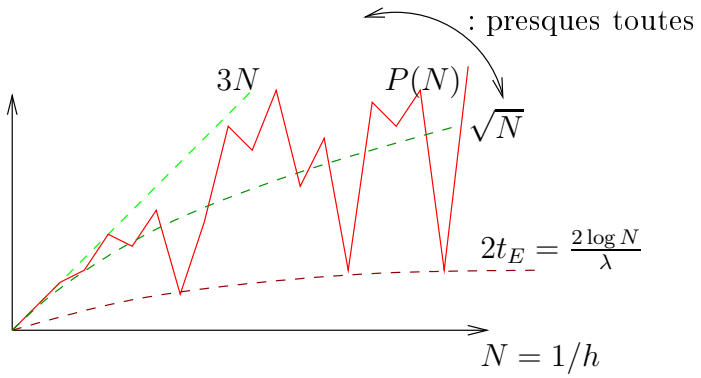


FIG. 9 – Allure de la fonction "Période quantique" $P = P(N)$ en fonction de $N = 1/h$.

2.4.2 Évolution d'un état cohérent

On considère à l'instant $t = 0$, l'état cohérent $\varphi_{0,0}$ qui est situé sur le tore au point fixe $x = 0$ de l'application M.[12] Son évolution sur le tore est définie par :

$$\psi(t) = \hat{M}^t \varphi_{0,0} \in \mathcal{H}_N$$

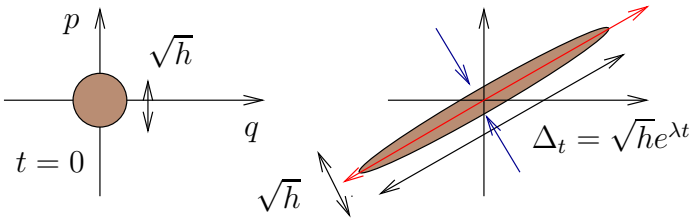


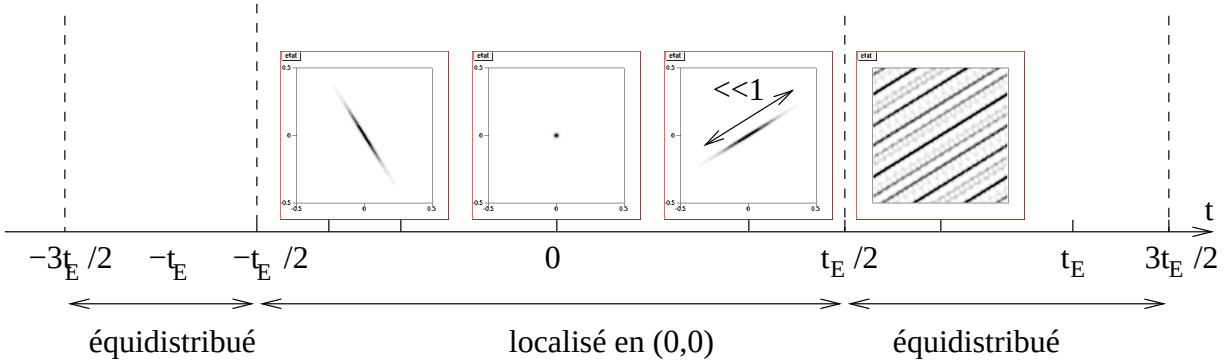
FIG. 10 – Evolution de la distribution de Husimi d'un état cohérent sur le plan.

Comme décrit en section 2.2.3, la distribution de Husimi de $\varphi_{0,0}$ a une largeur de l'ordre de $\Delta_0 \simeq \hbar^{1/2}$. Pour les temps t positifs, on montre que la distribution de Husimi de $\psi(t)$ s'étire le long de la variété instable à cause du facteur d'expansion $e^{\lambda t}$, et a une longueur $\Delta_t \simeq \hbar^{1/2} e^{\lambda t}$ (cette longueur est en fait mesurée sur $\mathbb{R}^2$, le recouvrement du tore), voir figure 10. Cette longueur est encore "microscopique", i.e. $\Delta_t \ll 1$ pour $\hbar \ll 1$, si $|t| \ll \frac{1}{2} t_E$ avec le **temps d'Ehrenfest** défini par :

$$\boxed{t_E \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\log N}{\lambda} = \frac{\log(1/h)}{\lambda}} \tag{12}$$

Autrement dit, pour $|t| \ll \frac{1}{2} t_E$, la suite d'état $(\psi(t))_\hbar$ est localisée en $(0,0)$ pour $\hbar \to 0$.

Pour $t \gg \frac{1}{2} t_E$, la distribution a une longueur plus grande que 1, et donc s'enroule sur le tore le long de la variété instable qui remplit le tore de façon dense. Les branches se rapprochent de plus en plus lorsque le temps augmente. Par conséquent on s'attend à ce que la suite d'états $(\psi(t))_\hbar$ soit équidistribuée sur le tore pour $\hbar \to 0$. Voir figure suivante, et films sur la page web [38]. C'est ce qu'énonce le théorème qui suit.



[12] Pour simplifier l'exposé, on considère le point fixe $(0,0)$ qui est une orbite périodique de période 1. On pourrait choisir n'importe quelle orbite périodique de période τ donnée. Tous les résultats de ce chapitre se généralisent.

Théorème 2.8. *([13], [45])*
(1) Pour tout $\varepsilon > 0$, et $|t_h| < \frac{1}{2} t_E (1-\varepsilon)$ la suite $(\psi(t_h))_\hbar$ est ***localisée*** *en 0 : $\mu = \delta_{(0,0)}$.*
(2) Pour $\frac{1}{2} t_E (1+\varepsilon) < |t_h| < \frac{3}{2} t_E (1-\varepsilon)$ la suite $(\psi(t_h))_\hbar$ est ***équidistribuée*** *: $\mu = \mu_{Lebesgue}$.*

(1) est assez évident d'après la description de la distribution de Husimi que nous avons donnée. Le théorème suivant est un résultat plus général qui montre que (2) est une conséquence de (1).

Théorème 2.9. *(version preprint-ArXiv de F. Bonechi-S. DeBièvre [13], et [44])*
Pour toute suite d'états initialement ***localisés*** *$(\psi_\hbar)_\hbar$ (i.e. $\mu = \delta_0$), la suite $\psi'_\hbar = \hat{M}^{t_E} \psi_h$ est* ***équidistribuée*** *(i.e. $\mu' = \mu_{Lebesgue}$) à la date $t = t_E$.*

La preuve qui suit repose sur la relation (10) qui est très spécifique au cas d'une application M linéaire.

Démonstration. Pour montrer que la mesure semi-classique μ' est Lebesgue, il faut montrer que pour tout mode de Fourier sur le tore $\mathbb{T}^2$, $f_n(q,p) = \exp(-i2\pi(n_1 p - n_2 q))$, avec $n \in \mathbb{Z}^2, n \neq 0$, on a :

$$\mu'_h(f_n) \to_{h\to 0} \int_{\mathbb{T}^2} \mathrm{d}x \, f_n = 0$$

D'abord on utilise le fait que [75],[24] $\mu'_\hbar(f_n) = \langle \psi'_\hbar | \hat{f}_n | \psi'_\hbar \rangle + \mathcal{O}(\hbar)$. Le membre de gauche est la mesure de Husimi, alors que le membre de droite est la mesure de Wigner de l'état normalisé ψ'. On calcule avec Eq.(10)

$$\begin{aligned} \mu'_h(f_n) + \mathcal{O}(\hbar) &= \langle \psi'_h | \exp(-i2\pi(n_1\hat{p} - n_2\hat{q})) | \psi'_h \rangle = \langle \psi_h | \hat{M}^{-t_E} \hat{T}_{hn} \hat{M}^{t_E} | \psi_h \rangle \\ &= \langle \psi_h | \hat{T}_{hM^{-t_E}n} | \psi_h \rangle \end{aligned}$$

Considérons la décomposition du vecteur $n = (n_u, n_s)$ dans le repère des directions instables/stables (e_+, e_-). Alors

$$hM^{-t_E} n \equiv h\left(e^{-\lambda t_E} n_u, e^{\lambda t_E} n_s\right) = \left(h^2 n_u, n_s\right) \simeq (0, n_s)$$

Or ψ_h est localisé au point 0, alors que $\hat{T}_{hM^{-t_E}n}\psi_h$ est localisé au point $(0, n_s) \neq (0,0)$, donc $\langle \psi_h | \hat{T}_{hM^{-t_E}n} | \psi_h \rangle \to 0$ pour $\hbar \to 0$.

□

2.4.3 Construction d'états cicatrisés, et exemple de non unique ergodicité quantique

Considérons la suite particulière $N_i = 1/h \to \infty$ pour $i \to \infty$, définie en (11), qui donne des **périodes quantiques courtes** $P = P_i$:

$$P_i \simeq \frac{2}{\lambda} \log N_i \simeq 2t_E$$

où t_E est le temps d'Ehrenfest défini en (12). $\hat{M}^P = e^{i\alpha}\hat{I}$, d'après (2.6). Soit $\varphi \in [0, 2\pi]$ tel que $P\varphi \equiv \alpha \, [2\pi]$. (Il y a P valeurs possibles pour φ, correspondant à chaque espace-propre possible de $\hat{M}$).

Posons :

$$\phi \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{t=-P/2+1}^{P/2} e^{-i\varphi t} \hat{M}^t \varphi_{0,0} \tag{13}$$

Utilisant la période P, on vérifie aisément que $\hat{M}\phi = e^{i\varphi}\phi$. D'après prop. (2.9), la moitié des termes intervenant dans la somme (13) est localisée, et l'autre moitié des termes est équidistribuée. Voir figure 11.

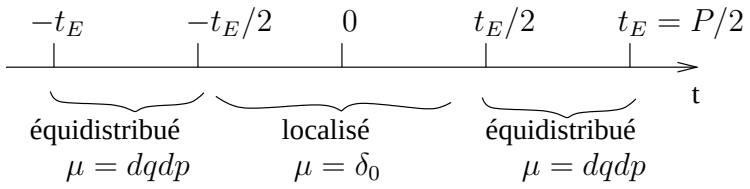


FIG. 11 – Echelle de temps intervant dans la somme (13).

Cela donne :

Théorème 2.10. *[45] ϕ est un état propre de $\hat{M}$:*

$$\hat{M}\phi = e^{i\varphi}\phi$$

Cette suite d'états propres $(\phi)_{\hbar\to 0}$ a une ***mesure semi-classique invariante non uniforme :***

$$\mu = \frac{1}{2}\delta_{(0,0)} + \frac{1}{2}\mu_{Lebesgue} \tag{14}$$

La somme partielle (la moitié)

$$\phi_{loc} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{t=-t_E/2}^{t_E/2} e^{-i\varphi t} \hat{M}^t \varphi_{0,0}$$

est ***localisée*** *(avec une mesure semi-classique $\mu = \delta_0$), alors que*

$$\phi_{equid.} = \phi - \phi_{loc}$$

est ***équidistribuée*** *(avec une mesure semi-classique $\mu = \mu_{Lebesgue}$).*

Remarques :

- Des états similaires peuvent être construits sur n'importe quelle orbite périodique donnée. La mesure semi-classique est encore $\mu = \frac{1}{2}\delta_{orbite} + \frac{1}{2}\mu_{Lebesgue}$. Par exemple sur une orbite de période 3, voir figure 13.

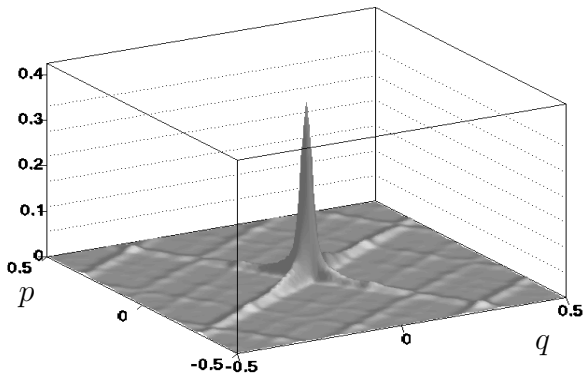


FIG. 12 – Distribution de Husimi de ϕ, Eq.(13) , état stationnaire partiellement localisé sur le point fixe instable 0.

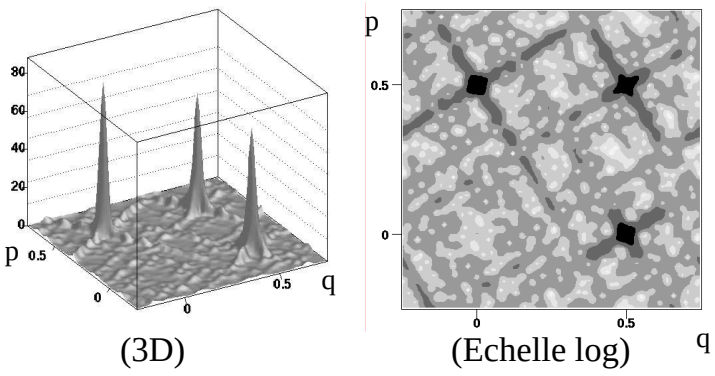


FIG. 13 – Distribution de Husimi d'un état stationnaire partiellement localisé sur une orbite de période 3.

– En considérant des périodes quantiques de la forme $P \simeq \frac{1}{\beta} t_E \geq 2t_E$, on peut aussi construire des mesures semi-classiques invariantes de la forme $\mu = \beta\delta_{orbite} + (1-\beta)\,\mu_{Lebesgue}$ avec $0 \leq \beta \leq 1/2$. On peut se demander s'il existe de telles mesures avec un facteur β plus grand que $1/2$? Le théorème suivant montre que non :

Théorème 2.11. *[14][44] Si ψ_h est une suite d'états propres ayant une mesure semi-classique μ telle que*

$$\mu = \beta\delta_{(0,0)} + (1-\beta)\,\nu$$

avec $\nu(0) = 0$, alors $\beta \leq 1/2$.

Remarque : la borne $\beta \leq 0.6$ obtenue dans [14] a été améliorée à $1/2$ dans [44].

Démonstration. (idée de la preuve) On décompose

$$\psi = \underbrace{\psi_0}_{\text{localisé: } \beta} + \underbrace{\psi_\nu}_{\text{équidistribué: } 1-\beta}$$

avec ψ_0 localisé, i.e. $\mu_{\psi_0} = \beta\delta_0$ et orthogonal à ψ_ν : $\langle\psi_0|\psi_\nu\rangle \to_{h\to 0} 0$.
Alors

$$\psi \propto \hat{M}^{t_E}\psi = \underbrace{\hat{M}^{t_E}\psi_0}_{\text{équidistribué: } \beta} + \hat{M}^{t_E}\psi_\nu$$

Du théorème (2.9), $\hat{M}^{t_E}\psi_0$ est équidistribué et a une probabilité totale β. Si on compare avec l'expression initiale de ψ, on déduit que $\hat{M}^{t_E}\psi_0$ doit être "une part" de ψ_ν, i.e. $\beta \leq \|\psi_\nu\|^2 \simeq 1-\beta$. On déduit $\beta \leq 1/2$.

□

2.5 Rôle des orbites homoclines

Les résultats décrits précédemment reposent sur l'existence d'une période très courte, i.e. $P \simeq 2t_E$. En fait, pour la construction de la mesure semi-classique (14) issue de (13), il suffit d'avoir la périodicité de l'évolution de l'état cohérent $\varphi_{0,0}$. C'est une hypothèse beaucoup moins forte. Définissons **la fonction d'auto-corrélation temporelle** $C(t) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\psi(0)\,|\psi(t)\rangle$ avec $\psi(t) = \hat{M}^t\varphi_{0,0}$. Tout repose sur le fait que $|C(2t_E)| = 1$ (ou à un temps équivalent à $2t_E$). Nous allons étudier cette fonction d'auto-corrélation et voir qu'elle s'exprime en terme des **orbites homoclines à l'orbite périodique** $(0,0)$.

Utilisant l'unitarité de l'évolution, on écrit

$$C(t) = \langle\psi(0)\,|\hat{M}^t|\psi(0)\rangle = \langle\psi(0)\,|\hat{M}^{t/2+t/2}|\psi(0)\rangle = \langle\psi(-t/2)|\psi(t/2)\rangle.$$

Nous avons décrit l'état $\psi(t/2)$ dans la section 2.4.2. Sa distribution de Husimi est étirée sur un segment de la variété instable, de longueur de l'ordre $\simeq \sqrt{\hbar}e^{\lambda t/2}$ (sur le plan, qui est le recouvrement du tore). De même la distribution de l'état $\psi(-t/2)$ est étirée le long de la variété stable et a une longueur $\simeq \sqrt{\hbar}e^{\lambda t/2}$. Ainsi le produit scalaire $\langle\psi(-t/2)|\psi(t/2)\rangle$

fait intervenir les intersections de ces deux segments, appelées **intersections homoclines**[13]. Cette remarque nous permet de majorer $|C(t)|$ (voir figure 14) :

- Si $|t| \ll t_E \Leftrightarrow \sqrt{h}e^{\lambda|t|/2} \ll 1$, seule l'intersection $(0,0)$ contribue de façon "significative", et à cause de l'étalement on estime $|C(t)| \simeq \sqrt{2}e^{-\lambda t/2}$ qui décroît.
- Si $|t| \gg t_E$, on estime qu'il y a $\mathcal{N}_t \simeq \left(\sqrt{h}e^{\lambda t/2}\right)^2 = he^{\lambda t}$ intersections homoclines "significatives", chacune donnant une contribution à $C(t)$ qui est un nombre complexe $C_n = A_n e^{iS_n/\hbar}$ ($A_n > 0$ est l'amplitude majorée par $A_n = \mathcal{O}\left(e^{-\lambda t/2}\right)$, et S_n est "l'action" de l'orbite). On déduit une majoration $|C(t)| = \mathcal{O}\left(\mathcal{N}_t e^{-\lambda t/2}\right) \simeq \mathcal{O}\left(he^{\lambda t/2}\right)$ qui croît.

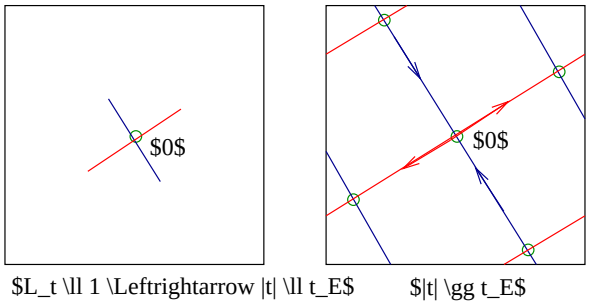


FIG. 14 – Intersections homoclines qui contribuent à la fonction d'auto-corrélation $C(t) = \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle$.

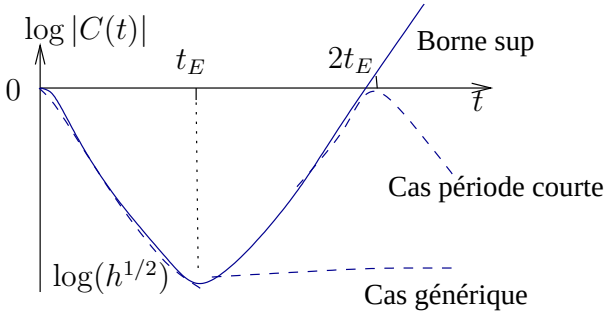


FIG. 15 – Comportement de la fonction d'auto-corrélation $C(t)$ en pointillés, échelle log. Majoration en ligne pleine.

Remarques :

- Noter la compétition entre $\mathcal{N}_t \simeq he^{\lambda t}$ qui croît exponentiellement à cause du nombre d'intersections homoclines grandissant, et pour chaque intersection $|C_n| = \mathcal{O}\left(e^{-\lambda t/2}\right)$ qui décroît à cause de l'étirement, mais plus lentement. A la date $t = 2t_E = \frac{2}{\lambda}\log(1/h)$, la majoration $|C(t)| \leq he^{\lambda t/2}$ atteint la valeur 1. Cela montre qu'une "résurrection" du paquet d'onde $|C(t)| = 1$ ne peut pas se produire avant cette date $t = 2t_E$. D'autre part,

[13] Une intersection homocline est un point p qui est à l'intersection des variétés stables et instables issues d'un autre point p'. Dans le passé *et* dans le futur, leur trajectoire se rapprochent : $|p(t) - p'(t)| \to 0$ pour $t \to \pm\infty$. (C'est une relation d'équivalence). On dit que les trajectoires sont homoclines.

après cette date, la majoration n'a plus d'intérêt car on sait à cause de l'unitarité de $\hat{M}$ que $|C(t)| \leq 1$. Cela montre que dans la somme en termes d'intersections homoclines, **des compensations dues aux phases sont nécessaires** pour que le produit scalaire reste de module inférieur à 1.

- Le temps d'Ehrenfest t_E a une signification importante pour la fonction d'auto-corrélation : pour $|t| \gg t_E$, $C(t)$ est la somme de plusieurs termes, et les phénomènes d'interférences commencent à se manifester. Or la même analyse peut se faire pour des temps négatifs. Il est donc plus correct de dire que **les phénomènes d'interférences sont absents dans la fonction d'auto-corrélation sur un intervalle de temps de longueur** $2t_E$ (c'est d'ailleurs l'intervalle maximal).
- La remarque suivante est heuristique. Pour $t \gg t_E$, nous supposons être dans **un cas générique** où les phases $S_n/\hbar$ sont "décorrélées" et se comportent comme des variables aléatoires indépendantes. $C(t) = \sum_n A_n e^{iS_n/\hbar}$ est alors une variable aléatoire avec une distribution Gaussienne, centrée en 0, et d'écart type $\langle |C(t)| \rangle \simeq \sqrt{\mathcal{N}_t} e^{-\lambda t/2} \simeq \sqrt{h}$, **indépendant de** t. On déduit que la distribution de Husimi au point $x = 0$ qui s'écrit $Hus_{\psi_t}(x) = \frac{1}{h} |\langle x|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{h} |C(t)|^2$ vaut en moyenne $\langle Hus_{\psi_t}(x=0) \rangle \simeq 1$. Une analyse similaire en d'autres points x, donnerait aussi $\langle Hus_{\psi_t}(x) \rangle \simeq 1, \forall x$, **égale à la mesure de Liouville,** comme le résultat de mélange pour l'évolution d'une distribution classique régulière. Un **enjeu principal en chaos quantique** est de rendre cette heuristique rigoureuse.
- A l'opposé, dans **le cas de périodes courtes**, $\hat{M}^P \propto \hat{Id}$, avec $P \simeq 2t_E$, les phases $\exp(iS_n/\hbar)$ s'ajoutent de façon constructive au temps $t = 2t_E$ (dans des cas spéciaux on montre qu'elles sont toutes proches de 1). Donc les nombres complexes C_n **s'ajoutent de façon constructive**. C'est aussi un enjeu que de savoir si ce phénomène surprenant est présent dans d'autres systèmes hyperboliques (parmi les applications hyperboliques obtenues en perturbant M, qui forment un ensemble ouvert).
- Une autre constatation est qu'à la date $P \simeq 2t_E$, $\mathrm{Tr}\left(\hat{M}^P\right) = \mathrm{Tr}\left(\hat{Id}\right) = N$ qui est la valeur maximale ($= \dim \mathcal{H}_N$). Or la formule des traces $\mathrm{Tr}\left(\hat{M}^t\right) = \sum_{o.p} \frac{1}{\sqrt{|\det(M^t - 1)|}} \exp(iA_{op}/\hbar)$ qui est exacte dans le cas linéaire [66], fait intervenir $\simeq e^{\lambda t}$ orbites périodiques pour $t \gg 1$, avec le facteur $\frac{1}{\sqrt{|\det(M^t-1)|}} \simeq e^{-\lambda t/2}$. On montre que dans certains cas de période courte, les actions des orbites périodiques sont telles que $\exp(iA_{op}/\hbar) = 1$ pour chacune, donnant **un phénomène collectif d'interférences constructives**.
- Au passage, nous avons montré le résultat suivant : pour tout $0 < \alpha < 2$, alors $|C(\alpha t_E)| \to 0$, pour $\hbar \to 0$, ce qui signifie que les états $\psi(0)$ et $\psi(\alpha t_E)$ deviennent orthogonaux entre eux. Ce résultat est important dans la preuve du théorème 2.10, car il montre que les termes de la somme exprimant ϕ se comportent comme des vecteurs orthogonaux.

2.6 Conclusions et suggestions pour généraliser ces résultats

Dans ce chapitre, nous avons considéré seulement *des applications linéaires hyperboliques* sur le tore. Il y a une propriété importante dans la théorie des systèmes dynamiques qui est que les applications hyperboliques sont **"structurellement stables"**, ce qui signifie que les propriétés hyperboliques (donc de mélange) sont conservées sous toute perturbation assez petite. Une application hyperbolique linéaire peut donc être considérée comme un système dynamique

particulier appartenant à une famille (un espace ouvert de dimension infinie) d'applications hyperboliques non linéaires sur le tore.

On a vu que pour les applications linéaires hyperboliques sur le tore, il existe des suites particulières d'états stationnaires qui possèdent une mesure semi-classique non uniforme : ils sont fortement "cicatrisés" sur une orbite périodique (1/2 de la mesure de Dirac), et cela donne **un exemple de non unique ergodicité quantique (Q.U.E)** pour les systèmes hyperboliques. D'après le théorème ergodique de tels états sont de toutes façons exceptionnels. Une première question naturelle est :

Question : "L'exemple donné de non Q.U.E (existence d'états cicatrisés) repose sur l'existence d'une période quantique courte $P \simeq 2t_E = \frac{2}{\lambda}\log N$, qui implique aussi de fortes multiplicités dans le spectre ($\simeq \frac{N}{\log N}$). Au contraire les exemples connus de Q.U.E correspondent à des situations où le spectre est non dégénéré. Est-ce que la conjecture correcte ne serait pas qu'il y a Q.U.E lorsque le spectre est simple ?"

A mon avis cela est peut-être vrai dans **les cas particuliers** des systèmes où ces réponses sont connues, à savoir les applications **linéaires** hyperboliques ou le flot géodésique sur une variété de **courbure constante.** Dans les deux cas, la preuve de Q.U.E repose sur des propriétés arithmétiques et l'utilisation d'opérateurs de Hecke. Dans le cas non linéaire c'est beaucoup moins clair. D'ailleurs il me semble important de rappeler d'après l'analyse faite en section 2.5, que l'existence d'états cicatrisés ne repose pas directement sur la période courte de l'opérateur $\hat{M}^t$, mais sur la périodicité de l'évolution d'un état cohérent $\hat{M}^t\varphi_{0,0}$, qui est une conséquence, et n'implique pas des dégénérescences dans le spectre de façon évidente.

$$\begin{array}{lcl} \Big(\text{Période courte } \hat{M}^P \propto \hat{Id},\, P \ll N\Big) & \Longrightarrow & \text{Dégénérescences} \\ \Downarrow & & \\ \Big(\text{Pour un état cohérent : } \hat{M}^P\varphi \propto \varphi\Big) & \Longrightarrow & \big(\text{Mesure } \mu = \beta\delta_{\text{o. p.}} + (1-\beta)\,\mu_{\text{Leb.}}\big) \end{array}$$

Question : "Est-ce que cet exemple d'états cicatrisés est unique ou pas, dans l'ensemble des applications non linéaires hyperboliques sur le tore ? Y a t-il d'autres exemples de "non Q.U.E" pour des applications non linéaires ? ou bien Q.U.E est-il vrai partout ailleurs ?"

A ma connaissance, il n'y a pas de réponse à cette question pour le moment. Comme nous l'avons dit, l'exemple que nous avons donné repose sur l'existence d'une période quantique courte, qui est due à des propriétés arithmétiques particulières de $M \in SL(2,\mathbb{Z})$. De ce point de vue, il semble difficile de généraliser notre construction dans le cas non linéaire. Mais comme nous l'avons remarqué, la construction d'états cicatrisés repose sur une condition beaucoup plus faible qui est qu'un état cohérent initialement sur une orbite périodique $\psi(0) = \varphi_{0,0}$, retourne après le temps $2t_E$ dans son état initial : $\psi(2t_E) \propto \psi(0)$. Dans la section (2.5) nous avons interprété cette résurrection en termes d'interférences constructives entre les orbites homoclines, et avons montré à partir d'une majoration de la fonction d'autocorrélation, que cette résurrection ne peut se produire avant la date $2t_E$. Cette interprétation est intéressante car d'après la stabilité structurelle, tous ces ingrédients (orbites homoclines, actions,...) existent encore dans le cas non linéaire, et l'étude peut être faite en ces termes.

1. Cette remarque montre qu'une première tâche serait de décrire **"l'évolution semi-classique"** des états quantiques pour des temps **au-delà du temps d'Ehrenfest** t_E, dans le cas non linéaire. Des temps longs comme $t \simeq C.t_E$, où $C > 0$ est une constante arbitraire, seraient suffisants pour cet objectif. Nous avons obtenu des résultats dans ce sens dans un travail [43], qui est présenté page 44.
2. Le théorème (2.11) ne nécessite pas un contrôle de l'évolution semi-classique pour des temps aussi longs. Comme le montre sa preuve, des temps d'évolution de l'ordre de t_E suffisent avant que "les phénomènes d'interférences" ne se produisent. Une généralisation de ce théorème dans le cas non linéaire ne permettrait certes pas de montrer Q.U.E ni l'existence d'états cicatrisés, mais pourrait contraindre les mesures semi-classiques possibles (Exclure par exemple les mesures de Dirac). Il y a des résultats récents dans cette direction pour les applications non linéaires ou les flots hyperboliques [17][3][33].

3 Systèmes quantiques adiabatiques et phénomènes topologiques

3.1 Introduction

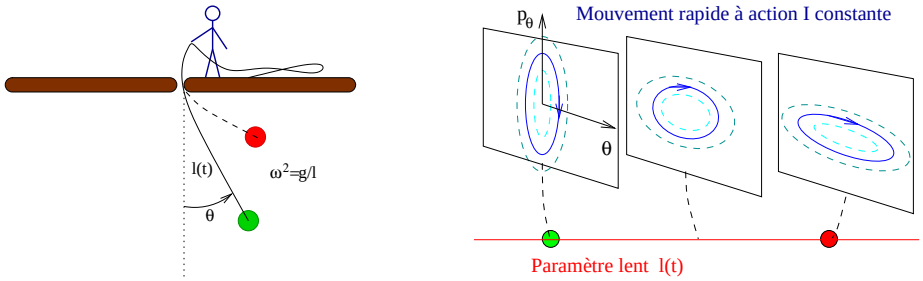
Dans ce chapitre nous montrons comment les techniques semi-classiques peuvent s'appliquer à des systèmes "mixtes" qui contiennent un sous-système lent couplé à un sous-système plus rapide. Nous qualifierons de tels systèmes de **"systèmes lent-rapide couplés"**. Le but de ces études est de montrer qu'il peut y avoir **un phénomène d'ordre topologique assez remarquable** dans de tels systèmes : lorsque le couplage est assez fort, les deux sous systèmes se retrouvent comme "noués". Si l'intensité ou la nature du couplage varie continûment, ce "noeud" persiste puis est brutalement modifié à un moment précis que nous qualifierons de "transition topologique". Ces aspects topologiques sont présents dans une description classique ou "semi-quantique" du système étudié, mais ont une manifestation assez directe sur les propriétés quantiques, comme nous le verrons à travers une formule du type **"formule de l'indice d'Atiyah-Singer"**.

Nous commençons par donner quelques exemples bien connus en physique de tels systèmes lent-rapide couplés pour montrer la portée assez grande du problème. Dans la suite nous développerons l'étude topologique pour des modèles spécifiques adaptés à la description de petites molécules.

3.1.1 Exemples de systèmes lent-rapide couplés dans le monde macroscopique

Le pendule ordinaire : dont la longueur d'attache $l(t)$ varie lentement. Voir figure. Pour une longueur l fixée, les trajectoires du pendule dans l'espace de phase (θ, p_θ) forment une famille de courbes fermées. Cette famille de déforme avec $l(t)$ qui varie. Le **théorème adiabatique classique** montre que la trajectoire que suit le pendule est telle que la surface de la courbe fermée dans l'espace de phase est conservée [4]. Si E est l'énergie et ω la fréquence, il découle que la quantité $I = E(t)/\omega(t)$ est conservée approximativement (plus précisément, si $dl/dt \sim \varepsilon \ll 1$, alors $|I(t) - I(0)| < C\varepsilon$ pour $t \in [0, T/\varepsilon]$). On dit que I est un **invariant adiabatique.**

[14]



Le pendule de Foucault : C'est un pendule de quelques mètres de haut, attaché au plafond d'un bâtiment, et on étudie la direction de ses oscillations (rapides) dans le plan horizontal après quelques heures (le temps que la Terre ait tourné sur elle-même lentement mais de façon significative). Voir figure 16 (a). Après une révolution (24h), la direction d'oscillation s'est décalée d'un angle φ_H appelé **angle de Hannay** [56, 76]. C'est **une phase géométrique**

[14] Remarque historique : Einstein pensait que $\hbar$ était une variable conservée adiabatique ; voir le livre de P. Lochak et al. page 6 et 187 [80].

(une holonomie) reliée à la latitude du lieu. En effet par raison d'inertie, la direction des oscillations du pendule suit le **transport parallèle** à la surface de la Terre[15]. Pour calculer l'angle φ_H, on observe que la collection des plans tangents au lieu géographique forment un cône, et que en applatissant ce cône, les directions d'oscillations sont parallèles. Si Ω est l'angle solide délimité par la trajectoire du lieu géographique, en observant la figure 24 (b), on déduit que

$$\varphi_H = \Omega = 2\pi\,(1 - \sin\,(latitude))$$

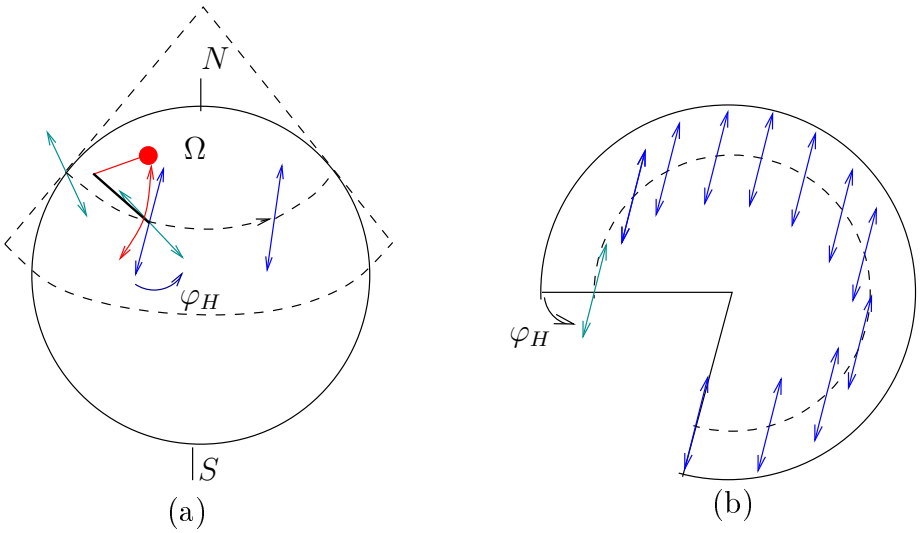


FIG. 16 – Les oscillations du pendule de Foucault.

Révolution et précession des planètes : C'est la première application historique de la méthode de la moyenne par Lagrange, Laplace et Gauss. Ils ont observé l'absence de variation séculaire pour les demi grands axes a des orbites planétaires. En d'autres termes, a est un invariant adiabatique (figure 17).

Systèmes en physique statistique : L'ergodicité sur la surface d'énergie donne la conservation du volume de l'espace de phase lors d'une transformation adiabatique (voir [80] p.239)$\mathcal{V}(E) = Vol\,\{(q,p),\ H(q,p) \leq E\}$, et implique **la conservation de l'entropie** $S(E) = k\log\,(\mathcal{V}(E)/h)$ (c'est un résultat important en physique statistique).

Systèmes biologiques : Par exemple, la dynamique rapide pourrait être le cycle de reproduction d'un système proies-prédateurs, alors que la dynamique lente serait l'évolution du climat, modifiée par la consommation végétale des "proies" et qui influerait en retour les populations (cf Thèse de Nils Berglund p.4 [10]).

[15]La conservation de l'action est ici celle du moment angulaire $I = L_z$ qui garantit que le pendule ne se met pas à tourner autour de l'axe vertical z.

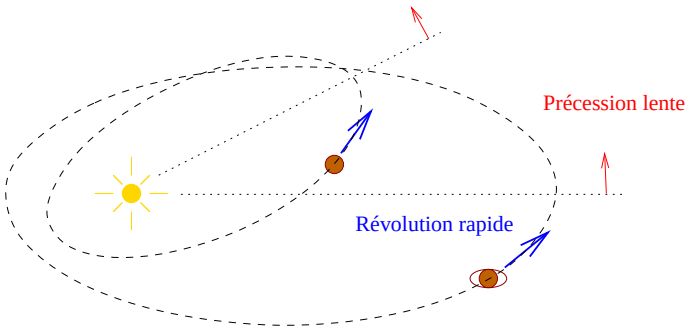
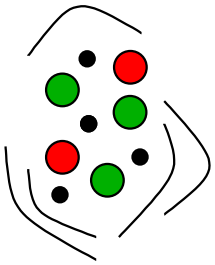


FIG. 17 – Différentes échelles de temps dans le système solaire.

3.1.2 Exemples de systèmes lent-rapide couplés dans le monde microscopique

Une petite molécule : C'est un système physique très riche pour observer et étudier des systèmes lent-rapide couplés. Ce sera le sujet d'étude dans la suite du chapitre. On y trouve [70]

- des électrons légers et donc rapides (période typique $\tau_e \simeq 10^{-15} \rightarrow 10^{-16} s.$),
- des noyaux plus lourds qui vibrent plus lentement ($\tau_v \simeq 10^{-14} \rightarrow 10^{-15} s.$,)
- la molécule qui tourne encore plus lentement sur elle-même ($\tau_{rot} \simeq 10^{-10} \rightarrow 10^{-12} s.$).



Précession du spin : considérons un neutron de spin 1/2 dans un champ magnétique externe $\vec{B}(t)$ qui varie lentement. Le théorème adiabatique montre que l'état du spin $|s(t)\rangle$ suit approximativement les états propres instantanés, parallèles/anti-parallèles à la direction de $\vec{B}(t)$, mais à une phase près. Si la variation de $\vec{B}(t)$ est périodique, alors après une période T, la phase finale est une phase dynamique $\theta_{Dyn.} = \frac{1}{\hbar}\int_0^T E(t)\,dt$ (où E est l'énergie) plus une phase géométrique $\theta_{Berry} = \frac{1}{2}\Omega$ appelée phase de Berry [11], où Ω est l'angle solide délimité par le chemin formé par la direction de $\vec{B}(t)$ sur la sphère des directions (voir figure 18).

L'effet Hall quantique : Pour des électrons dans une couche conductrice bi-dimensionnelle, soumis à un fort champ magnétique orthogonal, un potentiel périodique, et un faible champ électrique externe, il y a une hiérarchie des dynamiques (figure 19) :

- Mouvements cyclotron rapide sur des cercles à cause de B.
- Précession plus lente de ces cercles à cause de potentiel.
- Mouvement plus lent de la quasi-impulsion sur la zone de Brillouin à cause du faible champ E.

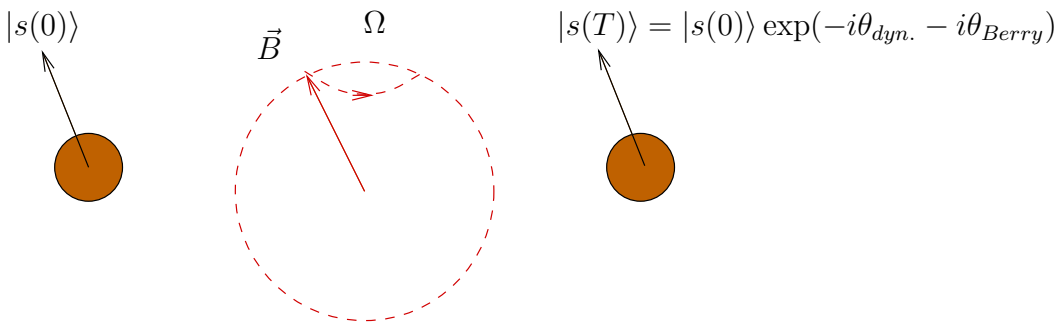


FIG. 18 –

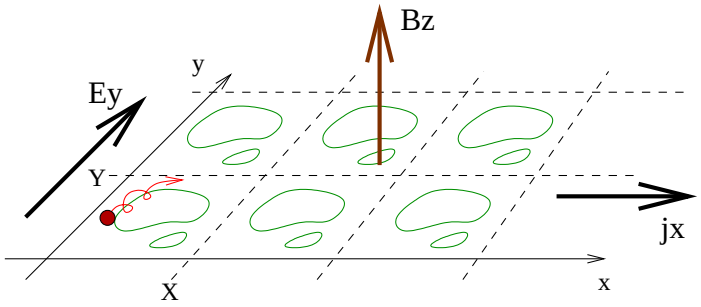


FIG. 19 – Mouvement schématique d'un électron dans un modèle pour l'effet Hall quantique.

Cette description adiabatique est à la base de la description topologique de l'effet Hall quantique [90, 22][79][34, 37, 36].

Remarque : dans les exemples précédents on peut distinguer deux classes de problèmes adiabatiques :

(A) les **"systèmes lent-rapide couplés"** où un système rapide est couplé à un système plus lent (il y a des influences réciproques).

(B) les **"systèmes adiabatiques temporels"** où un système (rapide) possède des paramètres externes qui varient plus lentement (les influences sont unidirectionnelles).
(B) est un cas particulier de (A).

3.1.3 Modèles classiques, quantiques ou semi-quantiques

Dans les exemples ci-dessus, les dynamiques lente et rapide peuvent parfois être considérées dans une description classique ou quantique indépendamment. On rappelle ici des propriétés bien connues.

Dynamique d'un système seul : En mécanique classique, l'état du système est décrit par un point $X(t) = (q(t), p(t)) \in P$ évoluant dans un espace de phase P (de dimension $2n$)

d'après les équations de mouvement de Hamilton :

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H(q,p)}{\partial p}$$
$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(q,p)}{\partial q}$$

En mécanique quantique, l'état du système est décrit par un état $\psi(t) \in \mathcal{H}$ évoluant dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ d'après l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = \hat{H}\psi(t)$$

Les **règles semi-classiques** relient ces deux descriptions dans la limite où $(\hbar/\text{Action}) \to 0$. En particulier se correspondent l'espace de phase P et l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Se correspondent la fonction de Hamilton H et l'opérateur $\hat{H}$.

Pour un système lent-rapide couplé : il y a donc 4 possibilités de description, représentées dans le tableau suivant avec les mêmes notations que ci-dessus :

Lent \ Rapide	Classique dans P_{rapide}	Quantique dans $\mathcal{H}_{rapide}$
Classique dans P_{lent}	Fonction $H_{total}(X_{lent}, X_{rapide})$ (***tout Classique***)	Symbole matriciel $X_{lent} \to \hat{H}_{rapide}(X_{lent})$ (***Semi-Quantique***)
Quantique dans $\mathcal{H}_{lent}$	Pas de sens ...(?)	$\hat{H}_{total}$ dans $\mathcal{H}_{lent} \otimes \mathcal{H}_{rapide}$ (***tout Quantique***)

TAB. 1 – Quatre descriptions d'un système lent-rapide couplé

Remarques

- Dans la description mixte "semi-quantique" la dynamique rapide est décrite par un opérateur $\hat{H}_{rapide} \in \text{Herm}(\mathcal{H}_{rapide})$ qui dépend de l'état classique du système lent X_{lent} (considéré comme "gelé" à l'échelle de temps rapide). Cela correspond à **l'approximation de "Born-Oppenheimer"**.
- D'après le principe de superposition en mécanique quantique, on ne peut pas traîter l'influence d'un système quantique sur un système classique. C'est pourquoi la description Quantique-Classique n'a pas de sens.

3.1.4 Aspects géométriques et topologiques

Dans la description "Semi-quantique" définie ci-dessus, les espaces propres de l'opérateur $\hat{H}_{rapide}(X_{lent})$ (l'onde stationnaire du système rapide) dépendent de l'état classique X_{lent} du système lent. Cela donne une collection continue d'espaces vectoriels au-dessus de l'espace de phase P_{lent}. En géométrie, cela s'appelle un **espace fibré vectoriel**. La dynamique totale évolue dans cet espace fibré. Voir figure 20. Lorsque l'on considère un espace fibré d'un point de vue global, on s'aperçoit que les fibres peuvent éventuellement faire des "tours", comme sur l'exemple bien connu du ruban de Moebius ci-dessous. C'est cet aspect topologique qui nous intéresse. Dans le cas du ruban de Moebius, la topologie est caractérisée par un nombre $SW = 0$ ou 1 (indice de Stiefel-Withney [60]). Voir figure 21.

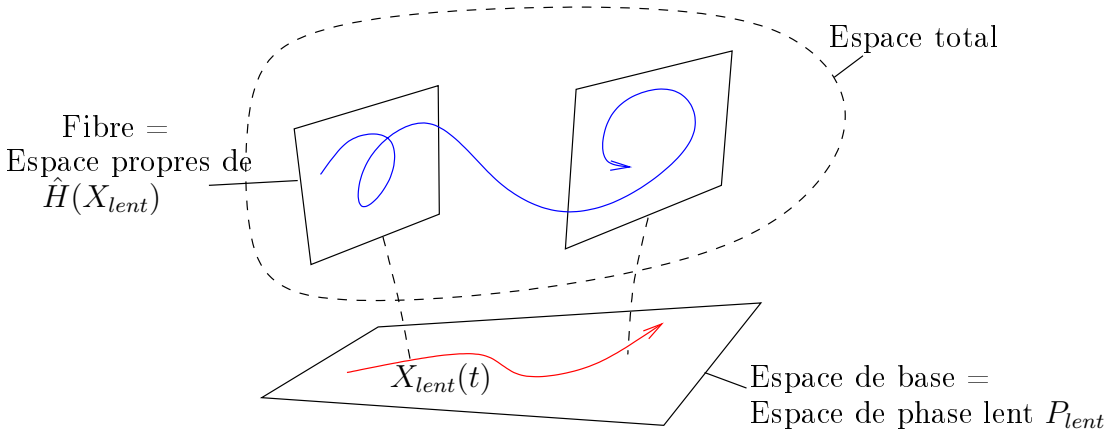


FIG. 20 – Schéma d'un espace fibré intervenant dans la description semi-quantique.

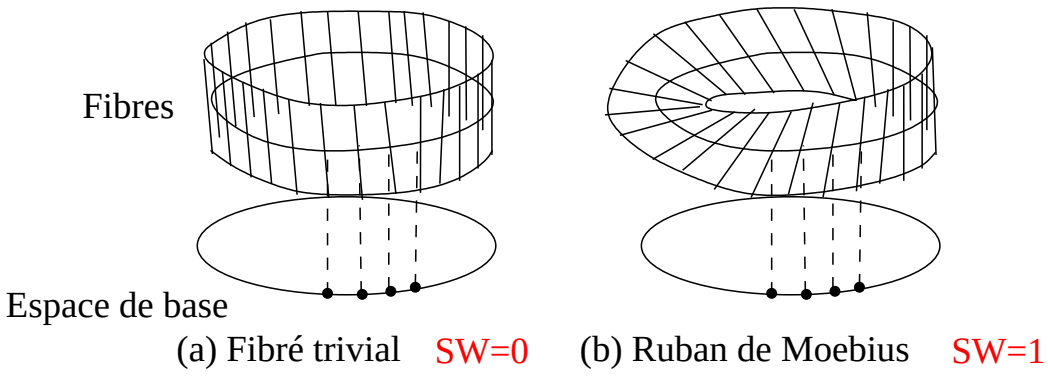


FIG. 21 – Exemples simples d'espaces fibrés vectoriels. L'espace de base est le cercle S^1, les fibres sont des droites $\equiv \mathbb{R}$. (a) le ruban trivial, et (b) le ruban de Möebius avec une topologie non triviale.

Dans la description "toute quantique", on s'intéresse au spectre de $\hat{H}_{tot}$, qui présente des niveaux discrets regroupés en "bandes d'énergie" (par exemple les bandes vibrationnelles ou rotationnelles bien connues en physique moléculaire), voir figure 22 (a). On verra que le **nombre de niveaux dans une bande** est donné à partir de la topologie du fibré vectoriel précédent, à l'aide de la formule de l'indice d'Atiyah-Singer. Un changement de topologie ("une bifurcation topologique") sera donc associé à une modification du nombre de niveaux. Cela ne peut se produire que par "le contact" de deux bandes consécutives qui échangent des niveaux d'énergie. Ce genre de phénomène est **bien observé expérimentalement**, voir figure 22 (b), ou figure 2 page 10.

Dans la suite du chapitre nous allons étudier et mettre au clair ces phénomènes topologiques dans divers exemples physiques simples (en compliquant au fur et à mesure), en spécifiant bien chaque fois la nature de dynamique rapide et la nature dynamique lente qui lui est couplée.

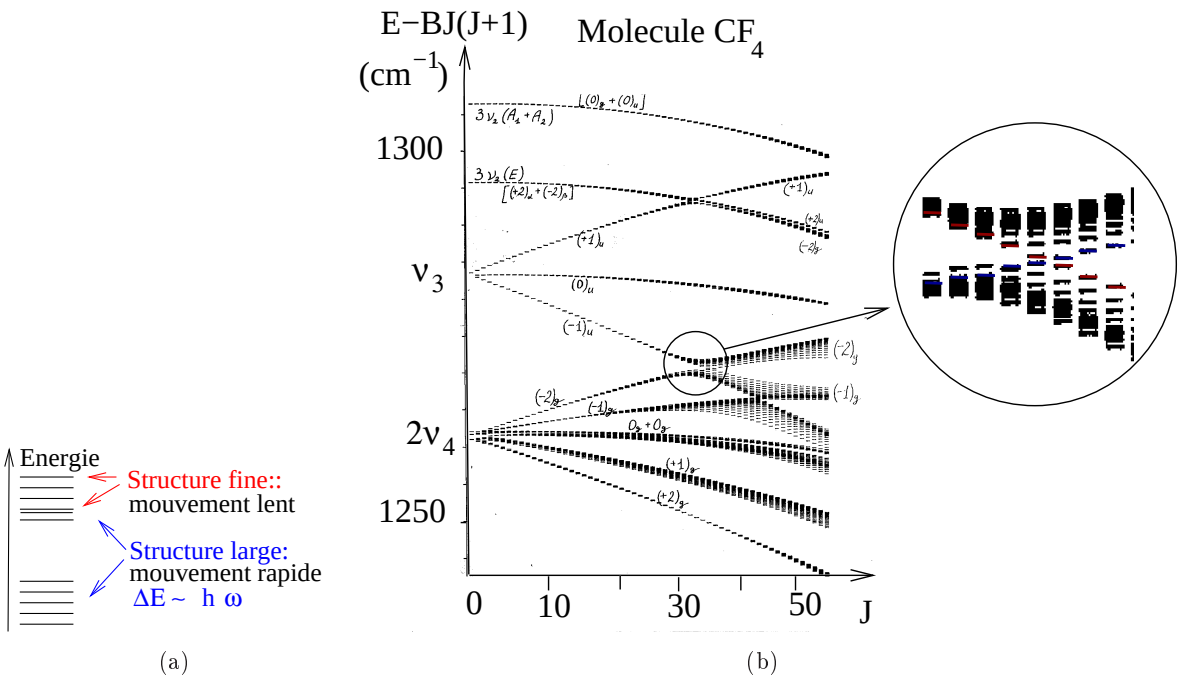


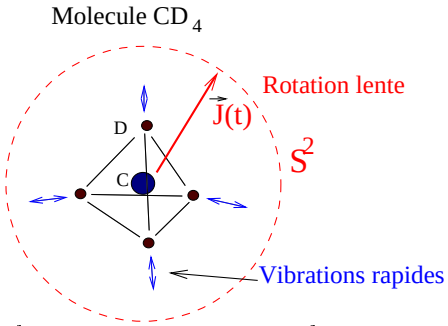
FIG. 22 – (b) Spectre expérimental ro-vibrationnel de la molécule CF_4 en fonction du moment angulaire total J. Lorsque des bandes sont en contact, il y a des échanges de niveaux (ici dans les deux sens). On donnera une **interprétation topologique** des ces phénomènes.

3.2 Modèle du couplage rotation-vibration d'une molécule

Le modèle le plus simple pour illustrer ce qui précède est la description de **deux états quantiques rapides** de vibration d'une molécule. L'espace de Hilbert est $\mathcal{H}_{rapide} = \mathbb{C}^2$ que l'on traitera comme un **spin** 1/2 **effectif**, et l'opérateur $\hat{H}_{rapide}$ est une matrice 2×2. Ces vibrations sont couplées à **la rotation plus lente** de la molécule. Ce modèle est le plus simple parmi de nombreux modèles effectifs utilisés en physique moléculaire [84, 70]. Il a permis de mettre en évidence la présence d'indices topologiques dans les spectres moléculaires [47].

3.2.1 Description semi-quantique et indices topologiques

Dans la **description semi-quantique** l'état de rotation est décrit par le vecteur moment angulaire total $\vec{J}(t)$ de longueur $J = \left|\vec{J}\right|$ fixe, mais dont la direction varie lentement sur la sphère (dans le référentiel attaché à la molécule, car dans un référentiel Galiléen, le vecteur $\vec{J}$ est fixe.). **L'espace de phase lent est donc** $P_{lent} = S^2$.



Comme modèle de couplage simple mais non trivial, qui nous permettra de comprendre des cas plus généraux, nous choisirons le modèle suivant de type **"spin-orbite"** décrit par un symbole matriciel :

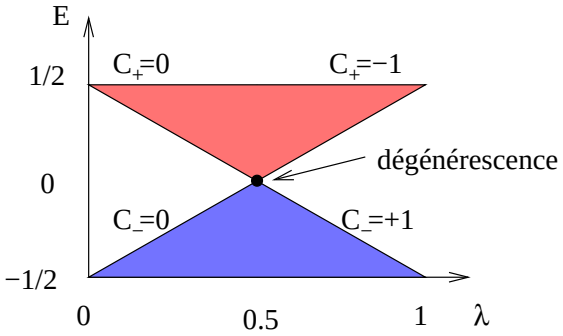
$$\boxed{\hat{H}_{rapide}\left(\vec{J}\right) = \frac{1-\lambda}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{\lambda}{2}\begin{pmatrix} J_z & J_x - iJ_y \\ J_x + iJ_y & -J_z \end{pmatrix} = (1-\lambda)\,\hat{S}_z + \lambda \vec{J}.\hat{\vec{S}}.} \quad (15)$$

avec les matrices de Pauli : $S_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix}, S_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, (générateurs de $su(2)$) et $\vec{J} \equiv (J_x, J_y, J_z) \in \mathbb{R}^3$. $\lambda \in [0,1]$ est un paramètre extérieur qui nous permettra d'observer une bifurcation topologique. Expérimentalement, il correspond à un paramètre qui changerait l'intensité du couplage, comme l'amplitude du moment cinétique $J = \left|\vec{J}\right|$ (en effet lorsque J augmente, le couplage rotation-vibration augmente à cause de la force de Coriolis [71]).

A $\vec{J} \in S^2$ fixé, la matrice $\hat{H}_{rapide}\left(\vec{J}\right)$ possède deux **valeurs propres** $E_-\left(\vec{J}\right) \leq E_+\left(\vec{J}\right)$ appelées bandes d'énergie. On calcule très simplement que :

- Pour $\lambda = 0$, $\hat{H}_{rapide}\left(\vec{J}\right) = \hat{S}_z$. $E_\pm\left(\vec{J}\right) = \pm 1/2$.
- Pour$\lambda = 1$, $\hat{H}_{rapide}\left(\vec{J}\right) = \vec{J}.\hat{\vec{S}}$. $E_\pm\left(\vec{J}\right) = \pm 1/2$.
- Pour $\lambda = 1/2$ et $\vec{J} = (0,0,-1)$, alors $\hat{H}_{rapide} = 0$. Il y a une **dégénérescence isolée**[a] entre les deux bandes. Partout ailleurs, $E_-\left(\vec{J}\right) < E_+\left(\vec{J}\right)$.

L'intervalle de variation des deux bandes d'énergie pour $\lambda = 0 \to 1$, est représenté sur la figure ci-contre.



[a] Pour une famille de matrice Hermitienne dépendant de 3 paramètres, les dégénérescences entre deux niveaux apparaissent génériquement en des points isolés dans l'espace des paramètres (phénomène de codimension 3).

On note $F_\pm\left(\vec{J}\right) = \mathrm{Ker}\left(\hat{H}(\vec{J}) - E_\pm\left(\vec{J}\right)\hat{I}\right) \subset \mathbb{C}^2$ les **espaces propres** de dimension 1 associés. Pour λ fixé, la collection d'espaces propres supérieurs $F_+\left(\vec{J}\right)$ définissent un espace fibré vectoriel complexe de dimension 1 au-dessus de la sphère (appelé fibré en droites). La topologie d'un tel espace fibré F_+ est caractérisée par un entier $C_+ \in \mathbb{Z}$ appelé **indice de Chern** [60] (ou première classe de Chern). La figure 23 tente de démontrer cette propriété de façon visuelle.

De même l'espace fibré F_- associé à la bande d'énergie inférieure a une topologie caractérisée par $C_- \in \mathbb{Z}$. Une règle d'additivité donne $C_+ + C_- = c_1(F_+) + c_1(F_-) = c_1(F_+ \oplus F_-) = c_1(\mathbb{C}^2) = 0$. Dans notre exemple, on peut facilement calculer ces indices topologiques : pour $\lambda = 0$, $\hat{H}_{fast}\left(\vec{J}\right) = \hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$ ne dépend pas de $\vec{J}$, **il n'y a pas de couplage**. Les espaces propres $F_\pm\left(\vec{J}\right)$ ne dépendent donc pas de $\vec{J}$, et les espaces fibrés sont triviaux : $C_\pm = 0$. Pour $\lambda = 1$, $\hat{H}_{fast}\left(\vec{J}\right) = \vec{J}.\hat{\vec{S}}$ il y a un couplage évident entre $\vec{J}$ et les vibrations

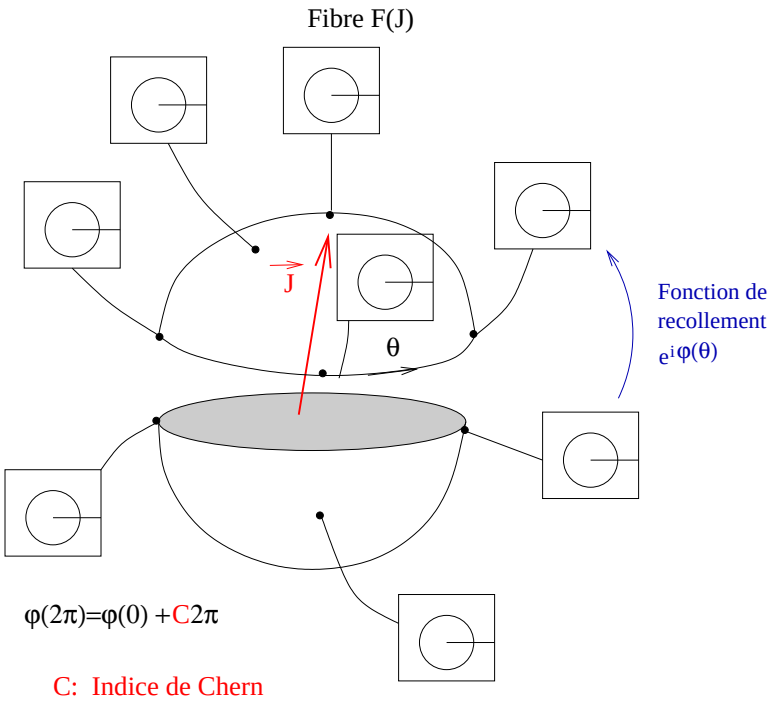


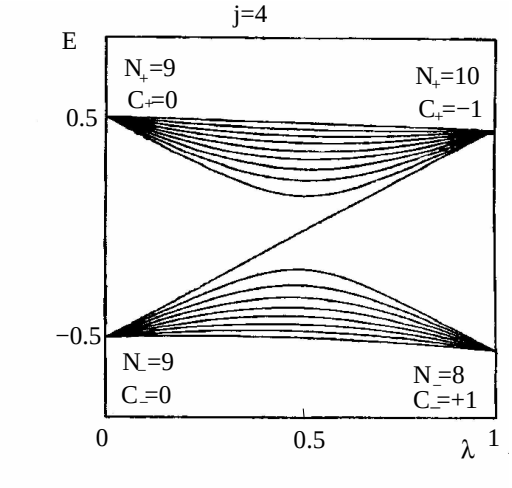
FIG. 23 – Un fibré en droites complexes sur la sphère a une topologie caractérisée par $C \in \mathbb{Z}$, qui s'interprète comme le nombre de rotation de la fonction qui sert à identifier les fibres de l'hémisphère nord et celles du sud.

$\vec{S}$, sous la forme du **couplage dit "spin-orbite"**. Les espaces propres sont respectivement "parallèles" et "anti-parallèles" à la direction de $\vec{J}$. Cela implique une topologie non triviale. On montre que $C_\pm = \mp 1$ [47, 48]. La topologie de $F_\pm$ a donc subit une bifurcation entre $\lambda = 0$ et $\lambda = 1$ qui n'a pu se produire qu'au lieu de dégénérescence $\lambda = 1/2$, $\vec{J} = (0, 0, -1)$ où les espaces propres ne sont plus définis.

3.2.2 Description quantique et formule de l'indice

Dans la description quantique, le mouvement de rotation est quantifié. Donc $\hat{\vec{J}}$ est un opérateur vectoriel qui agit dans $\mathcal{H}_{lent}$ qui est de dimension $(2j+1)$ (espace de représentation irréductible du groupe SU(2)). L'espace de Hilbert total est donc $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{lent} \otimes \mathbb{C}^2$ de dimension $2\,(2j+1)$. Le **Hamiltonien total** est $\hat{H}_{tot} = (1-\lambda)\,\hat{S}_z + \lambda \vec{J}.\hat{\vec{S}}$. Son spectre est facile à calculer au moins dans deux cas extrêmes :

- Pour $\lambda = 0$, $\hat{H} = \hat{S}_z$. Il y a deux valeurs propres $E_\pm = \pm 1/2$ de multiplicité respectives $\mathcal{N}_\pm = (2j+1)$.
- Pour $\lambda = 1$, $\hat{H} = \vec{J}.\vec{S}$, Hamiltonien de couplage "spin-orbite". On peut calculer son spectre à l'aide de la théorie des groupes (décomposition d'un produit tensoriel de représentations. irréductibles de SU(2) : $(2j+1) \otimes (2)$, aussi appelé "composition du moment angulaire" en physique). Il y a deux valeurs propres $E_\pm$, mais de multiplicités respectives $\mathcal{N}_\pm = (2j+1) \pm 1$.
- Pour λ variant entre 0 et 1, les dégénérescences sont levées, et un niveau transite de la bande inférieure vers la bande supérieure, comme le montre la figure ci-contre. On observe que les bandes d'énergie continues du modèle semi-quantique page 30 sont remplacées par des niveaux discrets. Le passage d'un niveau d'une bande à l'autre ne peut se faire qu'au lieu de contact.



En comparant cette figure du spectre quantique avec la figure des bandes du modèle semi-quantique et ses indices de Chern page 30, il apparaît clairement la relation suivante [47] qui relie l'indice topologique C_i d'une bande, et le nombre d'états quantiques qu'elle contient[16] :

$$\boxed{\mathcal{N}_i = (2j+1) - C_i \quad \Leftrightarrow \quad \Delta\mathcal{N}_i = -\Delta C_i : \quad \textbf{aux dégénérescences}} \tag{16}$$

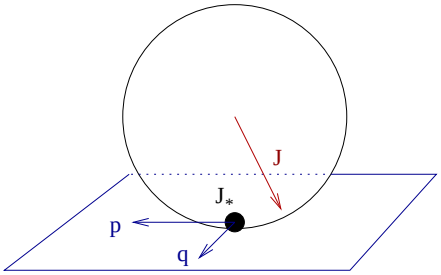
Dans [48], on démontre cette relation en grande généralité : pour un Hamiltonien quelconque qui couplerait le mouvement de rotation $\vec{J}(t)$ avec un autre degré de liberté quantique (rapide) comme des vibrations. L'idée de la preuve a deux parties : (1) lorsqu'il n'y a pas de contact, on montre que les niveaux quantiques sont associés de manière univoque à une bande continue du modèle semi-quantique. Pour cela on introduit un projecteur associé à chaque bande, formalisme développé par Emmrich-Weinstein [20]. (2) L'échange de niveau entre bande ne peut donc se faire qu'au contact entre bandes semi-quantiques. Dans une situation générique on se ramène toujours à un **modèle local de contact** appelé **forme normale topologique**, décrite ci-dessous. Ce modèle local donne une variation du nombre de niveaux d'une bande $\Delta\mathcal{N}$ et une variation de l'indice de Chern ΔC reliés par $\Delta\mathcal{N} = (\pm 1) = -\Delta C$. Sachant que dans un modèle sans couplage, on a simplement $C = 0$, et $\mathcal{N} = 2j+1$ niveaux de rotations, on déduit la formule ci-dessus par continuité.

En conclusion on a obtenu une compréhension qualitative (topologique) du spectre rotation-vibration de la molécule CF4, présenté page 29.

[16] Dans le cours [39], on montre que cette formule est un cas particulier de la formule de l'indice d'Atiyah-Singer.

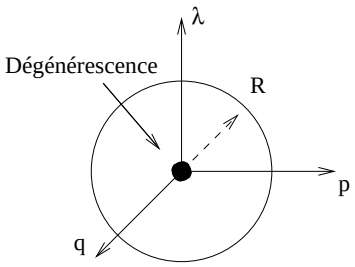
3.2.3 Modèle local. Forme normale topologique[17]

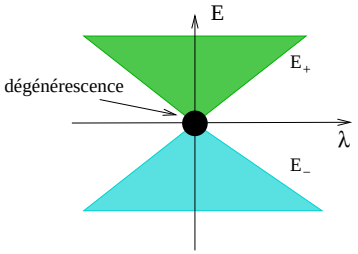
Reprenons le modèle précédent, et développons l'expression du Hamiltonien au voisinage du point de contact $\lambda = 1/2$, $\vec{J}_* = (0, 0, -1)$. Pour cela on utilise les coordonnées canoniques $(q, p) \in \mathbb{R}^2$, tangentes à la sphère de $\vec{J}$, au point $\vec{J}_*$, et on change $\lambda \to \lambda - 1/2$.
On obtient la **forme normale topologique** suivante pour le **Hamiltonien semi-quantique** (unique à un signe près) :



$$\boxed{\hat{H}_{fast,\lambda}(q,p) \simeq \lambda \hat{S}_z + q\hat{S}_x + p\hat{S}_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\lambda & q+ip \\ q-ip & +\lambda \end{pmatrix}} \qquad (17)$$

$$\text{valeurs propres : } E_\pm = \pm\frac{1}{2}\sqrt{\lambda^2+q^2+p^2} = \pm\frac{1}{2}R$$

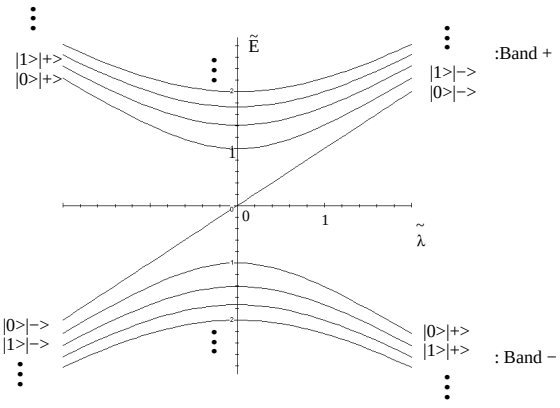




Dans ce modèle il y a une dégénérescence à l'origine de l'espace (q, p, λ) (on reconnaît l'expression du "monopole magnétique"), on calcule simplement que pour la bande supérieure $\Delta C = -1$, en considérant une sphère qui entoure cette dégénérescence. La quantification des variables lentes donne le **modèle quantique** :

$$\hat{H}_\lambda = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\lambda & \hat{q}+i\hat{p} \\ \hat{q}-i\hat{p} & +\lambda \end{pmatrix}, \qquad (18)$$

dont on calcule explicitement le spectre, et on observe un échange de niveaux $\Delta\mathcal{N} = +1$. On déduit donc que $\Delta\mathcal{N}_i = -\Delta C_i$ comme annoncé.



[17] Il ne s'agit pas de **forme normale symplectique** étudiée par Y. Colin de Verdière [25, 26]. Une forme normale symplectique donne le spectre correct. Notre forme normale topologique ne donne que le nombre correct de valeurs propres échangées et non leur position.

3.3 Modèle avec des bandes topologiquement couplées

3.3.1 Résonances 1 :1 :1 et espace de phase réduit $\mathbb{C}P^2$

Ce modèle simplifié décrit trois vibrations en résonance 1 :1 :1, c'est-à-dire modélisées par **trois oscillateurs harmoniques de même fréquence**. Dans les molécules, cette situation est assez fréquente à cause de symétries. Sur l'espace de phase $T^*\mathbb{R}^3 = \mathbb{R}^6$, le Hamiltonien est :

$$H_{vib} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{2}\left(p_i^2 + q_i^2\right) = \sum_{i=1}^{3} |Z_i|^2 = \|Z\|^2 \tag{19}$$

où l'on a utilisé des coordonnées complexes $Z_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_i + ip_i) \in \mathbb{C}, \quad Z = (Z_1, Z_2, Z_3) \in \mathbb{C}^3$.

Les équations de mouvement donnent en coordonnée complexe : $Z(t) = Z(0)e^{-it}$, autrement dit les trajectoires sont des cercles, et la phase de Z correspond au déplacement le long de la trajectoire. On déduit que **l'espace des trajectoires d'énergie fixée** (ce qui fixe le module $\|Z\|$), s'identifie à l'espace $\mathbb{C}^3$ des nombres Z auxquels on ôte le module et la phase. Cela donne $\mathbb{C}P^2 = \mathbb{C}^3/\sim$, avec l'identification $Z \sim \lambda Z$, si $\lambda \in \mathbb{C}$, appelé **espace projectif complexe** (qui est un espace compact de dimension réelle 4).

Dans la suite, nous allons coupler ces vibrations à une dynamique d'électrons. Sous l'effet de cette perturbation, la trajectoire circulaire va précesser lentement, autrement dit le point représentatif sur **l'espace de phase réduit** $[Z(t)] \in \mathbb{C}P^2$ va se déplacer lentement (comme la variation lente des paramètres des orbites planétaires page 25). Dans ce modèle, **l'espace de phase lent** est donc $P_{lent} = \mathbb{C}P^2$.

3.3.2 Couplage avec trois états électroniques. Description semi-quantique

Le mouvement lent de vibrations en résonances 1 :1 :1 décrit précédemment est couplé à "trois états quantiques électroniques", plus précisément à l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_{rapide} = \mathbb{C}^3$. On choisit un modèle effectif très simple (mais non trivial) où $\lambda = 0 \to 1$ **est un paramètre extérieur** (qui pourrait correspondre à un champ magnétique) et le symbole matriciel sur l'espace de phase lent $\mathbb{C}P^2$ (inspiré du modèle de spin-orbite Eq.(15)) est[18] :

$$\boxed{[Z] \in \mathbb{C}P^2 \to \hat{H}_\lambda([Z]) = (1-\lambda)\,\hat{H}_0 + \lambda\,\hat{H}_1([Z]) \qquad \in \mathrm{Herm}\left(\mathbb{C}^3\right)} \tag{20}$$

où pour $\lambda = 0$, $\hat{H}_0([Z]) = \begin{pmatrix} -1 & & \\ & 0 & \\ & & 1 \end{pmatrix}$ est diagonale et ne dépend pas de $[Z]$. Aux trois valeurs propres $E_1 = -1$, $E_2 = 0$, $E_3 = +1$ sont associées trois espaces propres fixes qui définissent des espaces fibrés de rang 1 sur $\mathbb{C}P^2$, de topologie triviale, notés T_1, T_2, T_3. Le cas $\lambda = 0$ est un cas sans couplage.

Pour $\lambda = 1$, $\hat{H}_1([Z]) \equiv |Z\rangle\langle Z| = \frac{1}{<Z|Z>}\left(\overline{Z_i}Z_j\right)_{i,j}$ dépend de $[Z]$. C'est le projecteur dans $\mathbb{C}^3$, sur la droite $[Z] \subset \mathbb{C}^3$. Ses valeurs propres sont donc respectivement $E_3 = 1$, avec un espace propre de dimension 1 noté $V_{droite}([Z]) = [Z]$ et la valeur propre $E_1 = E_2 = 0$, avec un espace propre orthogonal de dimension 2, noté $V_{orth}([Z])$. V_{droite} définit un espace fibré de

[18] Dans l'article [50], on discute l'intérêt physique de ce modèle pour modéliser des parties spécifiques du spectre de petites molécules.

rang 1 sur $\mathbb{C}P^2$, avec une topologie non triviale, appelée "le fibré canonique" [60] et V_{orth} est un fibré de rang 2 qui lui est orthogonal. (C'est l'analogue du couplage spin-orbite page 31, où $F_+\left(\vec{J}\right)$ est un espace propre parallèle à la direction $\vec{J}$, et $F_-\left(\vec{J}\right)$ lui est orthogonal).

Pour les valeurs intermédiaires $\lambda = 0 \rightarrow 1$, l'opérateur $\hat{H}_\lambda([Z])$ a trois valeurs propres $E_1(\lambda,[Z]) \leq E_2(\lambda,[Z]) \leq E_3(\lambda,[Z])$, qui dépendent de $[Z] \in \mathbb{C}P^2$. Leurs intervalles de variation définissent des bandes, représentées sur la figure suivante.

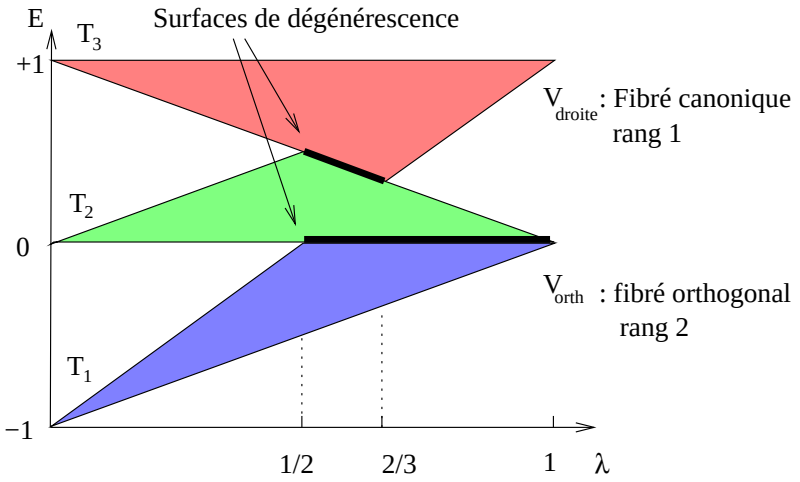


FIG. 24 – Spectre de $\hat{H}_\lambda([Z])$

Il apparaît des dégénérescences à partir de $\lambda \geq 1/2$, qui sont responsables du changement de topologie des fibrés vectoriels, et qui permettent une transition depuis la décomposition $T_1 \oplus T_2 \oplus T_3$ (décomposition du fibré trivial $\mathbb{C}P^2 \times \mathbb{C}^3$) jusqu'à la décomposition $V_{line} \oplus V_{orth}$. Nous reviendrons sur la description de ces surfaces de dégénérescence (sous variétés de $\mathbb{C}P^2 \times \mathbb{R}$ de co-dimension 3).

$\lambda < \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} < \lambda < \frac{2}{3}$	$\frac{2}{3} < \lambda$
$T_1 \oplus T_2 \oplus T_3$	$= \quad \mathbb{C}^3 \quad =$	$V_{line} \oplus V_{orth}$
Rang 1, triviaux	Rang 3, trivial	Rang 1 $\oplus$ Rang 2

3.3.3 Topologie d'un fibré vectoriel F sur $\mathbb{C}P^2$

Pour décrire précisément la topologie des fibrés V_{droite} et $V_{orth.}$ nous donnons quelques éléments issus de la "K-théorie" [60], qui permet de classifier certains fibrés vectoriels. Un fibré vectoriel de rang $r \in \mathbb{N}^*$ sur $\mathbb{C}P^2$, est une collection continue d'espaces vectoriels complexes de dimension r, paramétrés par le point $[Z] \in \mathbb{C}P^2$. Sa topologie est caractérisée par une classe de cohomologie entière $C(F) \in H^*(\mathbb{C}P^2, \mathbb{Z})$ appelée **classe de Chern** et représentée en pratique par un polynôme de degré deux à coefficients entiers (appelés aussi 1er et 2ème coefficient de Chern) :

$$C(F) = 1 + Ax + Bx^2, \qquad A, B \in \mathbb{Z}$$

avec la règle que si $r = 1$ alors $B = 0$. x est le générateur de $H^2\left(\mathbb{C}P^2, \mathbb{Z}\right)$. Pour un fibré T trivial, alors $C\left(T\right) = 1$. Pour deux fibrés F, F' on a la règle de composition suivante :

$$C(F \oplus F') = C(F) \wedge C(F') = 1 + \left(A + A'\right) x + \left(AA' + B + B'\right) x^2 \tag{21}$$

Dans notre modèle, V_{droite} est le fibré canonique et $C(V_{droite}) = 1 - x$. La relation de composition (21), donne alors $1 = C(\mathbb{C}^3) = C(V_{droite}) \wedge C(V_{Orth})$, de laquelle on déduit que $C(V_{Orth}) = 1 + x + x^2$.

Il est remarquable que ce polynôme ne se factorise pas avec des entiers A, A' :

$$C(V_{Orth}) = 1 + x + x^2 \neq \left(1 + A\, x\right) \wedge \left(1 + A'\, x\right) = 1 + \left(A + A'\right) x + \left(AA'\right) x^2$$

La conséquence topologique est que V_{orth} est un fibré de rang 2 **non décomposable** en fibrés de rang 1. **La signification physique de ce résultat** est que la bande d'énergie V_{orth} est composée de deux valeurs propres électroniques (représentées par deux couleurs sur la figure 24), mais il n'existe aucune perturbation qui puisse scinder cette bande en deux bandes séparées par un gap spectral. Autrement V_{orth} est composé de **deux bandes électroniques "nouées" topologiquement entre elles**. Il faut remarquer que cette conclusion n'est pas évidente sans l'utilisation de la théorie des fibrés vectoriels.

3.3.4 Description quantique du couplage

Nous décrivons maintenant les vibrations par la mécanique quantique. Le quantifié du Hamiltonien (19) est l'opérateur

$$\hat{H}_{vib} = \frac{1}{2}\left(\hat{p}_1^2 + \hat{q}_1^2\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{p}_2^2 + \hat{q}_2^2\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{p}_3^2 + \hat{q}_3^2\right)$$

agissant dans $L^2\left(\mathbb{R}^3\right)$. Son spectre est tout simplement :

$$E_N = \sum_{i=1}^{3}\left(n_i + \frac{1}{2}\right) = n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} = N + \frac{3}{2}, \qquad n_i \in \mathbb{N}$$

Le niveau $N \in \mathbb{N}$ est dégénéré avec une multiplicité $\frac{1}{2}\left(N+1\right)\left(N+2\right)$. L'espace propre associé, noté $\mathcal{H}_N$ s'appelle **une polyade**. Par rapport à la description générale du tableau (1), $\mathcal{H}_{lent} = \mathcal{H}_N$ joue le rôle de l'espace quantique "lent" (c'est la quantification de l'espace de phase classique $P_{lent} = \mathbb{C}P^2$). La limite semi-classique s'obtient pour les polyades élevées, $N \to \infty$ (on montre que $\hbar_{effectif} = 1/N$ est le paramètre semi-classique [16]).

Le couplage avec les états quantiques électroniques lève cette dégénérescence. On va s'intéresser à la dynamique effective dans une polyade, qui est décrite par l'opérateur quantifié du symbole matriciel (20). On obtient un opérateur noté $\hat{H}_{total}\left(\lambda\right)$ qui agit dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_{total} = \mathcal{H}_N \otimes \mathbb{C}^3$ (et dépend toujours du paramètre $\lambda \in [0,1]$). La quantification, correspond à remplacer les variables $Z = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q + ip\right)$ par l'opérateur $\hat{Z} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{q} + i\hat{p}\right)$. La figure suivante montre le spectre de $\hat{H}_{total}\left(\lambda\right)$ obtenu pour le choix de polyade $N = 4$.

Pour λ variant de 0 à 1, on observe une structure à trois bandes, qui se modifie en une structure à 2 bandes. Il y a un échange d'un groupe de $\Delta\mathcal{N} = N + 2 = 6$ niveaux vers la bande supérieure.

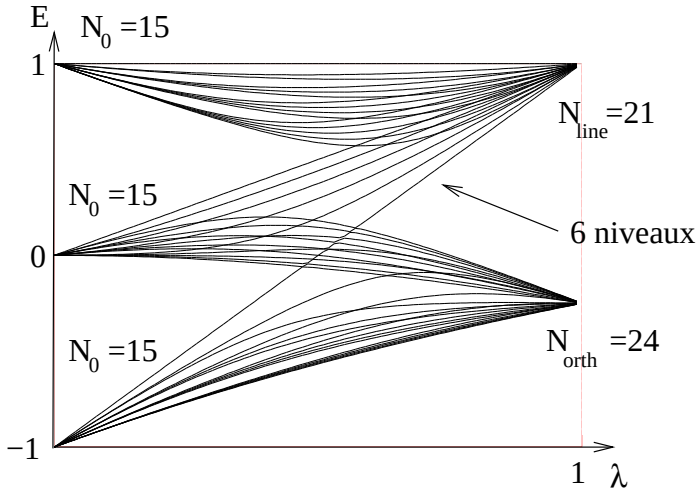


FIG. 25 – Spectre de $\hat{H}_{total}(\lambda)$ pour $N = 4$.

Remarques :

- Une analyse plus approfondie montre que ces $\Delta\mathcal{N} = 6$ états quantiques sont localisés sur **la surface de dégénérescence qui est une surface non contractible** homéomorphe à une sphère, et que le nombre $\Delta\mathcal{N} = (N+1)+1$ s'explique comme $(N+1)$ états qui quantifient cette sphère, plus 1 état lié à la topologie de l'espace de dégénérescence au dessus de cette sphère (d'après une formule analogue à (16)).
- Si on compare les figures 24 et 25, il apparaît clairement une correspondance entre les fibrés vectoriels représentés par des bandes continues sur la figure (24) et les groupes de niveaux de la figure (25). Cette correspondance a un sens précis d'après un théorème de Weinstein [20], qui introduit un projecteur et son symbole associé à chaque bande .
- Appelons $\mathcal{N}_F$ le nombre de niveaux dans une "bande quantique" associée à un fibré vectoriel F. Les valeurs de $\mathcal{N}_F$ sont indiquées sur la figure, et à λ fixé, leur somme est naturellement égale à $\dim(\mathcal{H}_{total}) = \frac{3}{2}(N+1)(N+2) = 45$. De même que Eq.(16) donne la relation entre le nombre de niveaux et la topologie d'un fibré dans le cas du couplage rotation-vibration (fibrés sur la sphères S^2), cette relation est ici donnée par une formule d'apparence plus complexe, et qui correspond à une application de la célèbre **formule de l'indice d'Atiyah-Singer** (1965) :

$$\boxed{\mathcal{N}_F = \left[\mathrm{Ch}(F^*) \wedge \mathrm{Ch}(Polyad_N) \wedge \mathrm{Todd}(T\mathbb{C}P^2)\right]_{/\text{coef de } x^2}}$$

où le terme de droite est obtenu en faisant le produit de trois polynômes, et conservant le coefficient devant x^2. Ces trois polynômes sont respectivement : $\mathrm{Ch}(F^*) = r - Ax + \frac{1}{2}\left(A^2 + 2B\right)x^2$ (la classe de Chern qui caractérise la topologie du fibré F), $\mathrm{Ch}(Polyad_N) = \exp(Nx) = 1 + Nx + \frac{1}{2}N^2x^2$ (la classe de Chern qui caractérise le fibré quantifiant de $\mathbb{C}P^2$ dans le cadre de la quantification géométrique, voir [16],[35]), et $\mathrm{Todd}(T\mathbb{C}P^2) = 1 + \frac{3}{2}x + x^2$ qui est la classe de Todd du fibré tangent à l'espace de phase lent $\mathbb{C}P^2$[32]. Avant de commenter cette formule, voici son application dans notre problème. Elle donne le nombre de niveaux quantiques dans les bandes associées aux

deux fibrés non triviaux qui apparaissent pour $\lambda > 2/3$:

$$\mathcal{N}_{droite} = \left[\left(1 + x + \frac{x^2}{2}\right) \wedge \left(1 + Nx + \frac{(Nx)^2}{2}\right) \wedge \left(1 + \frac{3}{2}x + x^2\right)\right]_{/x^2} = \frac{1}{2}(N+3)(N+2)$$

$$\mathcal{N}_{orth.} = \left[\left(2 - x - \frac{x^2}{2}\right) \wedge \left(1 + Nx + \frac{(Nx)^2}{2}\right) \wedge \left(1 + \frac{3}{2}x + x^2\right)\right]_{/x^2} = N(N+2)$$

(conformément aux calculs numériques de la figure 25).

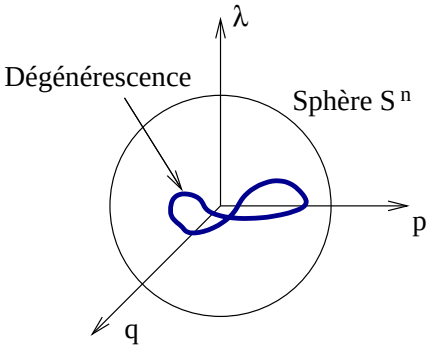
- La **formule d'Atiyah-Singer est très célèbre en mathématique** pour une raison qui est apparente ici : elle relie deux domaines très vastes qui sont la topologie (membre de droite de l'équation) et l'analyse spectrale (membre de gauche). Dans la version physique que nous considérons, elle relie les phénomènes topologiques qui apparaissent dans une description classique (semi-quantique) de "systèmes adiabatiques lent-rapide couplés" et les propriétés spectrales qui apparaissent dans une description quantique du système, mesurables par une expérience de spectroscopie. Notre travail a consisté à montrer cette application en physique moléculaire [47, 49, 48, 50]. Les **théories mathématiques** sur lesquelles reposent les modèles physiques développés ici sont en particulier les travaux de Emmrich-Weinstein [20], L. Boutet de Monvel [18], et Fedosov [7, 51].
- Cette formule de l'indice donne en fait plus d'information que seulement le nombre total de niveaux dans une bande : tous les fibrés que nous considérons sont munis de connexion (connexion "de Chern" ou "de Berry"), et d'après la théorie des classes caractéristiques de Chern [77, 32], $\mu = \left[\mathrm{Ch}(F^*) \wedge \mathrm{Ch}(Polyad_N) \wedge \mathrm{Todd}(T\mathbb{C}P^2)\right]_{/\mathrm{Vol}}$ est une forme volume sur l'espace de phase qui est justement la **densité locale d'états** (on peut déduire la densité d'états en énergie et en particulier le nombre d'états dans une bande par $\mathcal{N}_F = \int_{\mathbb{C}P^2} \mu$). Dans la limite semi-classique l'expansion de μ en fonction de $h_{eff} = 1/N \to 0$ correspond à la formule de Weyl qui donne la densité d'états.

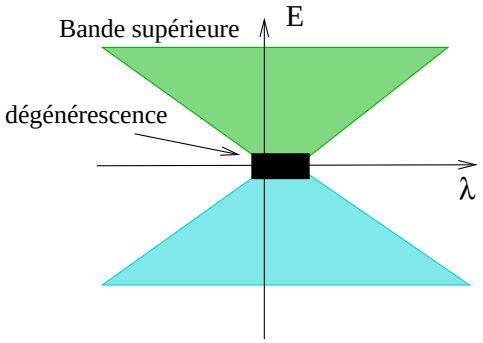
3.4 Formes normales topologiques pour singularités contractibles

Au regard du modèle sur $\mathbb{C}P^2$ et du modèle précédent sur S^2, il est tentant de s'intéresser en particulier aux **lieux de dégénérescences**, qui sont responsables de la transition de niveaux quantiques entre les bandes. Il serait intéressant d'obtenir une **classification de toutes les transitions possibles** (et déduire une preuve de la formule de l'indice), comme nous l'avons obtenu dans le cas de la sphère en section 3.2.3. Cette section est une réponse partielle à cette question. Nous montrons comment obtenir une classification topologique de toutes les transitions liées à des **lieux de dégénérescences qui sont contractibles** dans l'espace des paramètres. Ce modèle généralise donc le modèle (17), mais par contre il ne contient pas le cas de la surface de dégénérescence rencontrée dans la figure 24 entre les bandes 2 et 3.

Nous allons obtenir des **formes normales topologiques** en dimensions plus grandes. Nous allons voir des phénomènes topologiques (et physiques ?) nouveaux, issus de la théorie de l'homotopie. Considérons un **espace de paramètres** $(z, \lambda) \in \mathbb{R}^{n+1}$ où $z \equiv (q, p)$ décrit un **espace de phase lent** $\mathbb{R}^n$ de dimension n (pair) qui sera quantifié par la suite, et $\lambda \in \mathbb{R}$ est un **"paramètre extérieur"**.

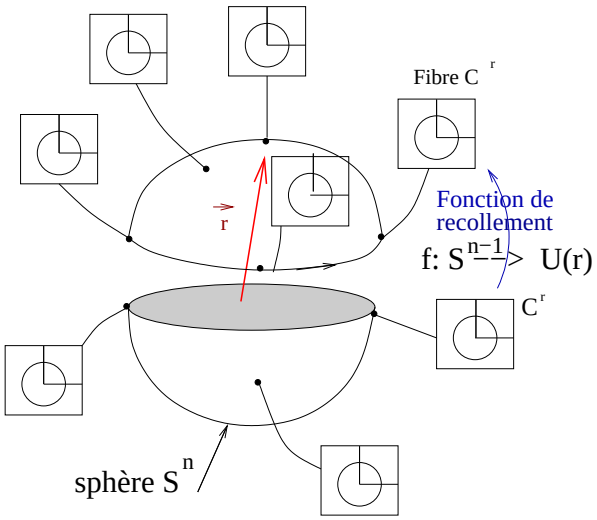
Supposons un modèle où **deux bandes soient en contact** sur un lieu de dégénérescence près de l'origine $0 \in \mathbb{R}^{n+1}$. On entoure ce lieu de dégénérescence par une sphère $S^n \subset \mathbb{R}^{n+1}$. L'hypothèse importante dans cette section est que ce lieu de dégénérescence est contractible.





3.4.1 Caractérisation topologique du modèle

Supposons que la **bande supérieure contienne** r **états quantiques rapides** (localement c'est l'espace $\mathbb{C}^r$). Ces états quantiques au-dessus des paramètres de la sphère, définissent **un fibré vectoriel de rang** r, noté $F \rightarrow S^n$. S'il n'y avait pas de lieu de dégénérescence dans la sphère, on pourrait continûment transformer ce fibré en un fibré trivial, en réduisant le rayon à 0. Par conséquent, la topologie de ce fibré $F \rightarrow S^n$ est une **obstruction pour enlever le lieu de dégénérescence** (i.e. le contact entre les bandes) à l'aide d'une perturbation continue du modèle. Comme nous l'avons déjà vu dans le cas S^2 page 31, la topologie du fibré $F \rightarrow S^n$, est définie par une **fonction de recollement** $f : S^{n-1} \rightarrow U(r)$ (groupe unitaire), sur l'équateur de la sphère S^n.



Autrement dit, l'espace des classes d'isomorphismes des fibrés de rang r sur S^n est isomorphe aux groupes d'homotopie du groupe unitaire :

$$\boxed{Vect^r_{\mathbb{C}}(S^n) \equiv \left[S^{n-1}, U(r)\right] = \pi_{n-1}(U(r))}$$

Or ces groupes d'homotopie sont en partie connus [59], voir la table 2. Dans cette table, on distingue deux parties. **Le domaine stable** où $\dim_{\mathbb{R}}(Fibre) = 2r \geq \dim_{\mathbb{R}} Base = n$, et le complémentaire appelé **domaine instable.** Le domaine stable est bien compris à l'aide de la **K-théorie**, qui montre que $\tilde{K}(S^n) \stackrel{\text{def}}{=} Vect^r(S^n)$ **ne dépend pas de** r (car on peut facilement ajouter ou soustraire un fibré en droite trivial, de façon unique). Le **théorème de périodicité de Bott** montre que dans ce domaine stable, $\tilde{K}\left(S^{n+2}\right) = \tilde{K}(S^n) = \mathbb{Z}$ ou 0 (c'est un résultat important avec une preuve assez sophistiquée, voir [60]). Rappel : on ne s'intéresse qu'au cas n pair. Le domaine instable au contraire n'est pas entièrement connu.

$Vect^r \setminus S^n$	S^2	S^3	S^4	S^5	S^6	S^7	...
$Vect^1$	$\boxed{\mathbb{Z}}$	0	0	0	0	0	
$Vect^2$	$\mathbb{Z}$	$\boxed{0}$	$\boxed{\mathbb{Z}}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_{12}$	
$Vect^3$	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	$\boxed{0}$	$\boxed{\mathbb{Z}}$	$\mathbb{Z}_6$	
$Vect^4$	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	$\boxed{0}$	
$Vect^5$	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	
$\tilde{K}(S^n)$	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	

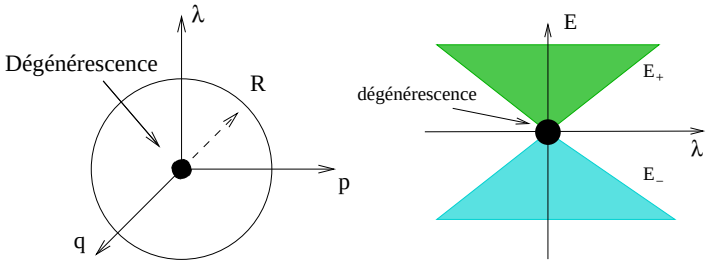
TAB. 2 – Classes d'isomorphismes des fibrés vectoriels complexes de rang r sur la sphère S^n.

3.4.2 Forme Normale Semi-quantique

On étend la fonction de recollement $f : S^{n-1} \to U(r)$, à $f : \mathbb{R}^n \to L(\mathbb{C}, r)$, par homothétie : $f(z) = |z| f\left(\frac{z}{|z|}\right)$ avec $z = (q, p)$. Cela permet de définir un symbole matriciel sur $(z, \lambda) \in \mathbb{R}^{n+1}$ qui est une **"forme normale topologique"** pour le lieu de dégénérescence considéré :

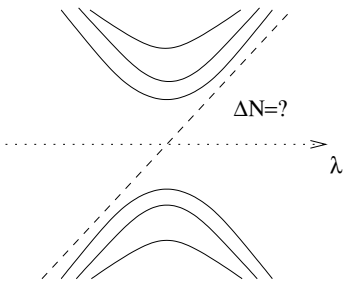
$$\boxed{H(z,\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda I_r & f(z) \\ f^+(z) & -\lambda I_r \end{pmatrix} \quad : 2r \times 2r \text{ symbole matriciel}}$$

Les valeurs propres sont $E_\pm(z,\lambda) = \pm\sqrt{\lambda^2 + |z|^2} = \pm R$, ayant chacune la multiplicité r. Elles forment deux "bandes". Par construction, le fibré de rang r au dessus de la sphère S^n défini par l'espace propre de H associé à la valeur propre E_+, est isomorphe au fibré F. Il y a une dégénérescence au point $(0,0)$, et remarquons qu'une perturbation Hermitienne générique du symbole H créerait un lieu de dégénérescence de codimension 3 mais localisé près de l'origine.



3.4.3 Forme normale quantique

On quantifie le mouvement lent par le principe de correspondance $z = (x, p) \in \mathbb{R}^n \to (\hat{x}, \hat{p})$ qui donne un opérateur auto-adjoint $\hat{H}(\lambda)$ agissant dans $L^2\left(\mathbb{R}^{n/2}\right) \otimes \mathbb{C}^r$. Son spectre est discret. Soit $\Delta\mathcal{N}(F_f) \in \mathbb{Z}$ le **nombre de valeurs propres qui transitent** de la bande inférieure à la bande supérieure en $\lambda = 0$.



$\Delta\mathcal{N}(F_f)$ est un invariant topologique qui dépend de la classe d'isomorphismes $[F] \in Vect^r(S^n)$, et que l'on cherche à déterminer maintenant. Avant de donner le résultat général,

on va considérer d'abord quelques exemples issus de la table (2).

Exemple de $Vect_{\mathbb{C}}^{r=1}\left(S^2\right) \equiv \mathbb{Z}$ qui est dans le domaine stable : On considère une sphère $S^2 \subset \mathbb{R}^3$ =(Espace de phase lent $\mathbb{R}^2$×paramètre $\lambda \in \mathbb{R}$). On a $Vect_{\mathbb{C}}^{r=1}\left(S^2\right) \equiv \left[S^1, U(1)\right] = \pi_1\left(S^1\right) = \mathbb{Z}$ qui est généré par la fonction de recollement $f(z) = z = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip)$ (l'identité). Ainsi le symbole matriciel est

$$H(x, p, \lambda) = \begin{pmatrix} \lambda & z \\ \overline{z} & -\lambda \end{pmatrix},$$

déjà considéré en Eq. (17). La quantification, Eq.(18), avait montré qu'il y a $\Delta\mathcal{N} = -1$ état qui transite.

Exemple de $Vect_{\mathbb{C}}^{r=2}\left(S^4\right) \equiv \mathbb{Z}$ dans le domaine stable : On considère une sphère $S^4 \subset \mathbb{R}^5$ =Espace de phase lent $\mathbb{R}^4$×paramètre $\lambda \in \mathbb{R}$. On a $Vect_{\mathbb{C}}^{r=2}\left(S^4\right) \equiv \left[S^3, SU(2)\right] = \pi_3\left(S^3\right) = \mathbb{Z}$ qui est généré par la fonction de recollement

$$f:\ z = (z_1, z_2) \in S^3 \subset \mathbb{C}^2 \rightarrow f(z) = \begin{pmatrix} \overline{z}_2 & z_1 \\ -\overline{z}_1 & z_2 \end{pmatrix} \in SU(2)$$

avec $z_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_i + ip_i)$. **La quantification** $q_i, p_i \rightarrow \hat{q}_i, \hat{p}_i$ donne $\hat{H}(\lambda)$ qui agit dans $L^2\left(\mathbb{R}^2\right) \otimes \mathbb{C}^4$. On peut calculer le spectre explicitement et on obtient la transition d'un état $\Delta\mathcal{N} = -1$.

Exemple de $Vect_{\mathbb{C}}^{r}(S^n) \equiv \mathbb{Z}$ qui est dans le domaine stable : Les deux exemples précédents se généralisent de la façon suivante : on suppose n pair et le rang $r = 2^{n/2-1}$ (i.e fibré de rang 1 sur S^2, ou rang 2 sur S^4, rang 4 sur S^6,...). On note $(\lambda \equiv x_0, x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^{n+1}$, et $S^n \subset \mathbb{R}^{n+1}$. Par récurrence sur n, on construit un symbole matriciel $(2r \times 2r)$([15] p.228) :

$$\boxed{H(x) = \sum_{i=0}^{n} x_i \lambda_i}$$

avec les matrices $(2r \times 2r)$ de Pauli-Dirac $\lambda_i,\ i = 0 \rightarrow n$, vérifiant l'algèbre de Clifford $\lambda_i\lambda_j + \lambda_j\lambda_i = 2\delta_{ij}$. Alors $H^2 = \sum_i x_i^2 = R^2$. Les valeurs propres de H sont donc $E_{\pm} = \pm R$. Ce modèle correspond à l'élément 1 dans la classe $Vect_{\mathbb{C}}^{r}(S^n) \equiv \mathbb{Z}$. La **quantification** de $H(x)$ donne un opérateur $\hat{H}(\lambda)$ et on calcule explicitement son spectre, donnant $\Delta\mathcal{N} = -1$.

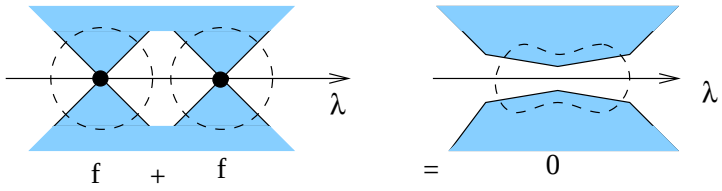
Exemple de $Vect_{\mathbb{C}}^{r=2}\left(S^6\right) \equiv \mathbb{Z}_2 = \{0, 1\}$ dans le domaine instable : On considère la sphère $S^6 \subset \mathbb{R}^7$ =Espace de phase lent $\mathbb{R}^6$×paramètre $\lambda \in \mathbb{R}$. On a $Vect_{\mathbb{C}}^{r=2}\left(S^6\right) \equiv \left[S^5, SU(2)\right] = \pi_5\left(S^3\right) = \mathbb{Z}_2 = \{0, 1\}$ qui est généré par une fonction[19]

$$f:\ S^5 \rightarrow S^3$$

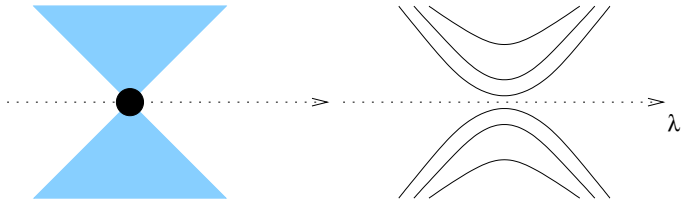
[19]Cette fonction f est obtenue explicitement en plusieurs étapes. D'une part **l'application de Hopf** η : $S^3 \rightarrow S^2$ (qui génère $\pi_3\left(S^2\right) = \mathbb{Z}$) est donnée par :

$$\eta : \left\{ \begin{array}{ccc} S^3 & \rightarrow & S^2 \\ z = (z_1, z_2) \in S^3 \subset \mathbb{C}^2 & \mapsto & [z] \in P\left(\mathbb{C}^2\right) \equiv S^2 \end{array} \right. \quad : \text{ Hopf Map}$$

Par conséquent $f + f \equiv 0$. Dans le contexte physique qui nous intéresse, cela signifie que si deux contacts inter-bandes sont successifs et décrits par le même modèle local, associés au fibré F_f, alors par perturbation continue du modèle, on peut **rapprocher ces deux contacts et les faire disparaître (annihilation)**.



On déduit en particulier que le nombre d'états échangés à chaque contact $\Delta\mathcal{N}$ vérifie $2\Delta\mathcal{N} = 0$, et donc $\Delta\mathcal{N} = 0$. Il n'y a donc **pas d'état échangé malgré un "contact topologique" entre les bandes :**



Conséquence physique : dans le spectre quantique, il n'y a pas d'état échangé mais **aucune perturbation ne pourra élargir le gap** entre les deux bandes au delà de $\sqrt{\hbar}$ (car il y a un "contact topologique" non destructible au niveau du symbole principal).

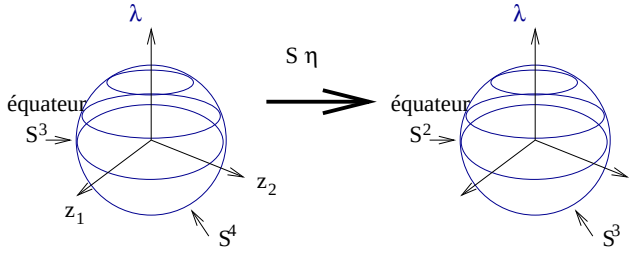
Cas général : On observe les propriétés générales suivantes (avec les mêmes notations que ci-dessus)

(a) Le fibré $F_f \oplus F_{f'}$ est modélisé par le symbole $H_{f+f'} = \begin{pmatrix} H_f & 0 \\ 0 & H_{f'} \end{pmatrix}$. On déduit que $\Delta\mathcal{N}\left(F_f \oplus F_{f'}\right) = \Delta\mathcal{N}\left(F_f\right) + \Delta\mathcal{N}\left(F_{f'}\right)$.

En termes physique, pour un spin 1/2 normalisé $|s\rangle = z_1|+\rangle + z_2|-\rangle \in \mathbb{C}^2$ l'application de Hopf donne sa direction $\vec{s} = \frac{\langle s|\hat{\vec{S}}|s\rangle}{\langle s|s\rangle} \in S^2$ dans l'espace ordinaire :

$$s_x = \frac{1}{|z|^2}\left(\overline{z}_1 z_2 + \overline{z}_2 z_1\right), \qquad s_y = \frac{1}{|z|^2} i\left(\overline{z}_2 z_1 - \overline{z}_1 z_2\right), \qquad s_z = \frac{1}{|z|^2}\left(\overline{z}_1 z_1 - \overline{z}_2 z_2\right)$$

Ensuite **la suspension :** $S\eta$: $\quad (z,\lambda) \in S^4 \to (\eta z, \lambda) \in S^3$ (qui génère $\pi_4\left(S^3\right) = \mathbb{Z}_2$)



et de façon similaire la double suspension $S^2\eta : S^5 \to S^4$ (qui génère $\pi_5\left(S^4\right) = \mathbb{Z}_2$). On a finalement $f = (S\eta)\left(S^2\eta\right) : S^5 \to S^3$ qui génère $\pi_5\left(S^3\right) = \mathbb{Z}_2$.

(b) L'ajout d'un fibré trivial $(F_f + Trivial)$ est modélisé par le symbole $H = \begin{pmatrix} H_f & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, donc $\Delta\mathcal{N}(F_f + Trivial) = \Delta\mathcal{N}(F_f)$.

(c) On note l'application $k : F_f \to k(F) \in \tilde{K}(S^n) \equiv \mathbb{Z}$ obtenue en ajoutant des fibrés triviaux si nécessaire pour stabiliser. Alors d'après (a) on déduit que $\Delta\mathcal{N}(F) \in \mathbb{Z}$ ne dépend que de $k(F) \in \tilde{K}(S^n) \equiv \mathbb{Z}$. Ensuite avec (b) et les exemples ci-dessus, on déduit la "formule de l'indice" dans ce cas précis :

$$\boxed{\Delta\mathcal{N}(F) = -k(F) \in \mathbb{Z}}$$

3.5 Conclusions

Nous avons vu que dans les systèmes dynamiques (classiques et quantiques) où la dynamique totale se sépare en sous-parties lente et rapide (relativement les unes par rapport aux autres), une description géométrique de cette situation en terme d'espace fibré est très naturelle. La dynamique lente se décrit sur l'espace de base du fibré, alors que la dynamique rapide se décrit dans les fibres (espace associé à une configuration de l'état lent à un instant donné). De même il est très général que cet espace fibré possède une connexion naturelle.

Dans le cas d'une description en mécanique quantique, il s'agit de la connexion "de Berry", alors que dans une description classique, où la dynamique rapide est supposée intégrable, il s'agit de la "connexion de Hannay"[76], dont nous n'avons pas parlé (voir [39]). Si il n'y a pas d'interaction entre la dynamique lente et rapide (ces deux dynamiques s'ignorent en quelque sorte) le fibré est plat et trivial. Par contre si l'interaction entre ces deux sous-systèmes est assez forte, la topologie du fibré peut ne pas être triviale, comme nous l'avons vu dans des exemples simples.

Cette description en terme d'espace fibré apparaît lorsque la dynamique lente est décrite par la mécanique classique. Dans une description quantique du système total (par un opérateur d'évolution dans un espace de Hilbert), l'espace fibré n'apparaît plus de façon immédiate mais indirecte sur le spectre (niveaux d'énergie) de l'opérateur : le spectre est regroupé en groupes de niveaux appelées "bandes" et la formule de l'indice d'Atiyah-Singer donne précisément le nombre de niveaux dans chaque bande à partir des informations topologiques sur l'espace fibré (Cette même formule donne plus précisément la densité de niveaux dans chaque bande).

Nous avons étudié des modèles non triviaux, mais cependant assez simples où des phénomènes topologiques "sophistiqués" se produisent, comme les bandes couplées topologiquement dans le paragraphe 3.3, et des phénomènes de bifurcations topologiques donnant des redistributions d'états entre les bandes. Sans cette description topologique empruntée aux mathématiques de la fin du XX-ème siècle (i.e. la topologie algébrique, la K-théorie, et les théorèmes d'indice), une description qualitative (structure en bandes,etc..) du spectre n'aurait pas été possible.

La conclusion est que dans les systèmes physiques en interaction, qui apparaissent complexes au premier abord à cause du grand nombre de degrés de liberté mis en jeu, une compréhension qualitative peut être faite dans certains cas, à l'aide de ces approches topologiques. Noter que cette **approche qualitative et topologique,** quand elle est possible, serait même **indispensable avant toute description plus fine** et plus quantitative de la dynamique. L'hypothèse pour cela est l'existence d'une séparation adiabatique entre des parties lentes et rapides, qui semble assez générale ou "générique" en physique. Les petites molécules sont pour cela un bon exemple. Leur observation par spectroscopie donne des milliers de niveaux

d'énergie qu'il est très souvent impossible à interpréter. Dans les cas pas trop complexes, les calculs numériques ab-initio permettent de reproduire ces résultats, mais sans fournir beaucoup plus d'interprétation. Or une compréhension qualitative de la dynamique des atomes et électrons qui intéragissent dans une molécule est importante, par exemple, pour prévoir les réactions chimiques possibles. Il nous semble que les descriptions topologiques obtenues dans ces travaux vont dans ce sens.

Nous avons montré que ces phénomènes sont présents dans les molécules. Il serait intéressant de **les découvrir aussi dans d'autres systèmes physiques**[20]. Nous discutons un projet de ce type dans le dernier chapitre.

Deuxième partie
Projets de recherche

Cette partie présente quelques projets de recherche qui font suite aux travaux présentés précédemment. Certains de ces projets sont déjà bien avancés. D'autres sont encore au stade spéculatif.

4 Chaos classique et chaos quantique

Les projets décrits dans cette section font suite aux résultats décrits dans la partie 2.

4.1 Validité des formules semi-classiques au-delà du temps d'Ehrenfest

Comme expliqué dans la section 2.6, le temps d'Ehrenfest $t_E \simeq \frac{1}{\lambda}\log(1/\hbar)$ est un temps caractéristique important en chaos quantique (λ est le coefficient de Lyapounov qui mesure le taux de divergence exponentiel des trajectoires classiques). L'étude faite dans la section 2 portait sur le modèle d'une **application linéaire hyperbolique** et est sur beaucoup de points très particulière. Le phénomène de périodes courtes sur lequel est basée la construction d'états cicatrisés ne peut se faire que dans ce modèle particulier, et ne semble donc pas être transposable dans d'autres modèles de chaos quantique à priori. Pour ouvrir l'étude, il est donc important de travailler avec des modèles d'**applications non linéaires hyperboliques** sur le tore. D'après la propriété de **stabilité structurelle**[5], les perturbations non linéaires de l'application linéaire M sur $\mathbb{T}^2$ étudiée dans la section 2, sont encore hyperboliques si la perturbation n'est pas trop forte. Ces modèles forment donc un ensemble ouvert de systèmes dynamiques hyperboliques (chaotiques), de dimension infinie. Le but serait par exemple de savoir si parmi eux il y a d'**autres exemples de non unique ergodicité quantique**, ou au contraire de montrer la propriété d'**unique ergodicité quantique** presque partout...de montrer l'**heuristique des matrices aléatoires génériquement**, etc..

Tout cela nécessite une **compréhension de la dynamique au delà du temps d'Ehrenfest**.

[20] La formule de l'indice intervient en théorie quantique des champs, plus précisement pour décrire le rôle des instantons en théorie de Jauge ou la théorie des cordes. Il y a une grande littérature sur ces sujets. Mais il faut noter que contrairement à la physique moléculaire, la validité physique des ces théories est encore très spéculative.

4.1.1 Observation de l'évolution d'un paquet d'onde et échelles de temps caractéristiques en chaos quantique

Un des objectifs dans l'étude du chaos quantique est de traîter ensemble la limite des temps longs $t \to \infty$ et la limite semi-classique $\hbar \to 0$. Les résultats semi-classiques habituels, comme le théorème d'Egorov concernent $\hbar \to 0$ d'abord puis $t \to \infty$ ensuite. Un challenge serait d'inverser cette limite (pour obtenir des informations sur les fonctions d'ondes stationnaires et leurs valeurs propres), ou plus modestement de **faire dépendre t de $\hbar$.**

Pour avoir une intuition sur les **échelles de temps caractéristiques** en chaos quantique, comprendre les résultats connus et les difficultés, nous discutons maintenant l'**évolution d'un paquet d'onde illustré par un calcul numérique**. Le paquet d'onde, qui est un état cohérent φ_{x_0} à l'instant initial $t = 0$, **évolue par une application hyperbolique non linéaire** M quantifiée sur le tore. La figure (26) montre la distribution de Husimi (représentation sur l'espace de phase $\mathbb{T}^2$) de l'état évolué $\psi(t) = \hat{M}^t \varphi_{x_0}$ à différents temps $t \in \mathbb{N}$. Nous rappelons que la distribution de Husimi de l'état initial φ_{x_0} a une largeur typique $\Delta_0 \simeq \sqrt{\hbar}$, (à cause du principe d'incertitude $\Delta x \Delta p \simeq \hbar$, et du choix $\Delta x = \Delta p = \Delta_0 \simeq \sqrt{\hbar}$). Durant l'évolution, le centre du paquet d'onde se déplace, sa distribution s'étale à cause de l'instabilité hyperbolique des trajectoires. La figure 27 résume les effets principaux que nous discutons maintenant.

Régime à temps fini, sans "dispersion" : Considérons tout d'abord une valeur fixée $t = Cste$, et $\hbar \to 0$ (bien sûr t peut être arbitrairement grand en principe). L'état évolué $\psi(t)$ est localisé à la position classique $x(t) = M^t x_0$. En termes plus précis, la mesure semi-classique de $\psi(t)$ est une distribution de Dirac en $x(t) = M^t x_0$. L'état évolué $\psi(t)$ s'étale, mais sa largeur est $\Delta_t \simeq e^{\lambda t} \Delta_0 \simeq \sqrt{\hbar}$, toujours d'ordre $\hbar^{1/2}$ [63][61][73]. Comme t peut être choisi arbitrairement grand à priori, la nature ergodique de la dynamique peut avoir de l'importance si $x(t)$ suit une trajectoire dense par exemple. Des résultats semi-classiques bien connus comme le **théorème d'Egorov**, la **formule des traces semi-classiques** (aussi appelée la **théorie des orbites périodiques**), le théorème d'**ergodicité quantique de Schnirelman** (énoncé page 9) utilisent cette compréhension en temps finis [23][94].

Régime de dispersion linéaire : Des résultats récents et très généraux [21][8][55][19] décrivent l'évolution de l'état quantique $\psi(t)$ dans le régime de dispersion linéaire, ce qui signifie que les **effets non linéaires** sur la dispersion du paquet d'onde sont supposés être **encore négligeables**. Comme les premiers effets non linéaires correspondent aux termes cubiques dans le Hamiltonien, cela impose $\Delta_t^3 \ll \hbar$, soit $e^{\lambda t} \hbar^{1/2} \ll \hbar^{1/3}$, ou $t \ll \frac{1}{6} t_E$. Dans notre exemple numérique $\frac{1}{6} t_E = 1.2$ est bien petit.

Régime localisé : Après ce temps, l'état quantique s'étale de plus en plus. Mais sa largeur est encore de taille microscopique si $\Delta_t \ll 1$, i.e. $t \ll \frac{1}{2} t_E$. En termes plus précis, la mesure semi-classique de $\psi(t)$ est un Dirac en $x(t)$ dans cette fenêtre temporelle. Dans notre exemple, $\frac{1}{2} t_E = 3.6$. Vers le temps $t \simeq \frac{1}{2} t_E$, l'état quantique atteint une taille de l'ordre de $\simeq 1$ (macroscopique), et peut être décrit par un "état Lagrangien W.K.B." [33].

Régime d'équidistribution : Pour des temps t plus grands que $\frac{1}{2} t_E$, le paquet d'onde s'étale et "s'enroule" sur le tore, le long des variétés instables, comme une mesure de probabilité classique. A cause de la propriété de mélange, une distribution régulière de probabilité

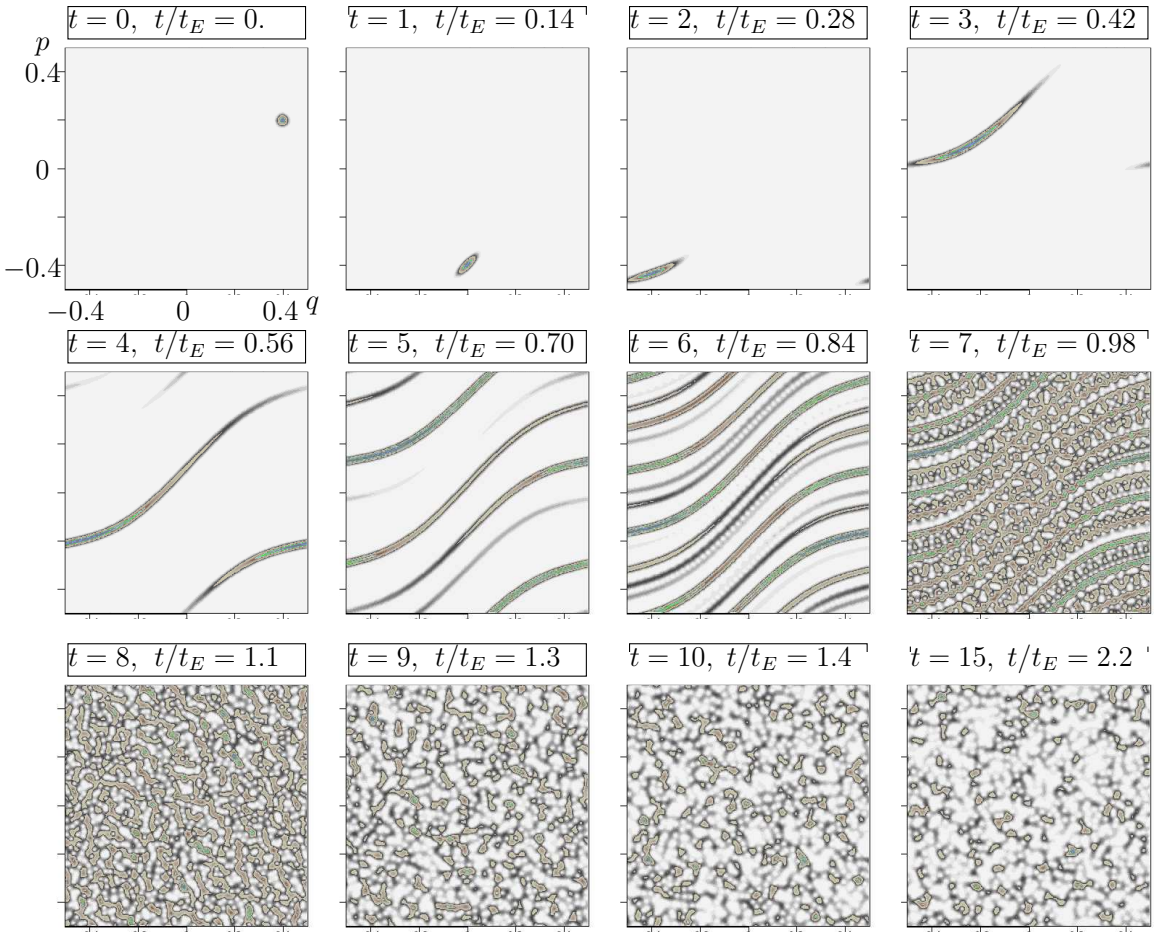


FIG. 26 – Distribution de Husimi sur le tore de l'évolution d'un paquet d'onde (générique) à la position initiale $x_0 = (0.4, 0.2)$, pour les temps $t = 0, 1, 2, \ldots$ et le choix $h = 10^{-3}$. Voir site web ([38], rubrique "Chat perturbé").

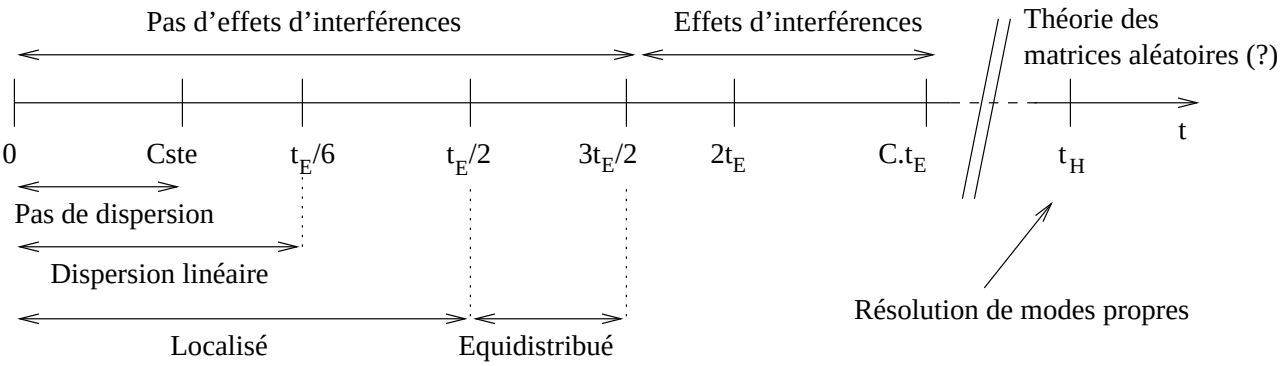


FIG. 27 – Temps caractéristiques qui apparaissent dans la limite semi-classique $h \to 0$, pour l'évolution d'un paquet d'onde. $t_E = \frac{1}{\lambda} \log(1/h)$ est le temps d'Ehrenfest, très petit "en pratique" comparativement au temps d'Heisenberg $t_H = 1/h$.

classique converge faiblement vers la mesure uniforme de Lebesgue en temps infini. On s'attend donc à ce que la distribution de Husimi se comporte aussi comme une mesure classique et s'équidistribue, si les différentes branches de la distribution n'interfèrent pas entre elles. Après le temps $\frac{1}{2}t_E$, on peut évaluer que la distance entre deux branches consécutives devient de plus en plus petite comme $d \sim e^{-\lambda(t-t_E/2)}$et atteint la distance critique $\hbar$ au temps $t = \frac{1}{2}t_E + t_E = \frac{3}{2}t_E$. C'est en effet un temps critique, car si $d \gg \hbar$, on peut encore "insérer" un état (déformé) localisé entre deux branches consécutives, ce qui signifie que les branches n'interfèrent pas. Conformément à cette description, Bonechi-DeBièvre dans [14] montrent que pour une application hyperbolique *linéaire,* la mesure semi-classique de $\psi(t)$ converge vers la mesure de Liouville, dans l'intervalle de temps $\frac{1}{2}t_E \ll t \ll \frac{3}{2}t_E$. J.M. Bouclet et S. DeBièvre dans [17] obtiennent un résultat similaire pour une application *non linéaire* hyperbolique mais pour $t \ll \frac{2}{3}t_E$. S. Nonnenmacher dans [33] atteint le temps $t \ll \frac{3}{2}t_E$. Dans [87], R. Schubert décrit l'évolution d'un état initialement Lagrangien par un flot hyperbolique. Il obtient des résultats similaires, c'est-à-dire qu'il montre l'équidistribution pour $t \ll t_E$. Ce résultat est en effet similaire car comme expliqué ci-dessus, un état cohérent devient un état Lagrangien à la date $\frac{1}{2}t_E$.

Temps plus longs et phénomènes d'interférences : Pour les temps plus longs, **c'est un peu l'inconnu**. Des observations numériques étayées d'arguments heuristiques [91] suggèrent que les formules semi-classiques s'appliquent pour ces temps plus longs. Dans un preprint récent [43] on montre que dans l'intervalle de temps $t \in [0, C.t_E]$, où C est une constante arbitraire, l'état évolué $\psi(t)$, sa distribution de Husimi $Hus(x) = |\langle x|\psi(t)\rangle|^2$, ou sa distribution de Bargmann $\langle x|\psi(t)\rangle$, peuvent s'exprimer en général, comme dans **la formule semi-classique de Van-Vleck**, par une somme finie ($\simeq he^{\lambda t}$ termes) sur des trajectoires classiques qui démarrent dans un voisinage (de taille $\simeq \sqrt{\hbar}$) du point initial x_0, et se terminent dans un voisinage du point final x après le temps t. La somme sur ces trajectoires donne des effets d'interférences inévitables pour les temps $t \geq \frac{3}{2}t_E$. Si les interférences sont constructives, une reformation complète du paquet d'onde pourrait se produire à la date $t \simeq 2t_E$ (cela n'est pas prouvé), mais de façon générique on s'attend à ce que les contributions des différentes trajectoires soient décorrélées et qu'en conséquence l'état $\psi(t)$ soit équidistribué sur l'espace de phase, comme on peut l'observer sur la figure 26.

Un autre temps caractéristique important qui n'est pas discuté ici, car il est **largement hors d'atteinte des approches semi-classiques actuelles** est le **temps d'Heisenberg** $t_H = 1/h$ ($= 1000$ dans notre exemple). Ce temps est relié avec la séparation moyenne entre les valeurs propres de $\hat{M}$. Des effets importants du chaos quantique sont observés numériquement à ce temps, et expliqués par la **théorie des matrices aléatoires** [12]. Noter que contrairement aux travaux mathématiques qui sont "stoppés" par le temps d'Ehrenfest, le temps d'Heisenberg est très discuté dans la littérature physique, essentiellement avec la théorie des matrices aléatoires qui est conjecturée être valable pour "presque tous les modèles chaotiques" ou avec la formule de Gutzwiller qui est aussi conjecturée. Cela permet de décrire de façon statistique les propriétés des fonctions d'ondes stationnaires individuelles et des valeurs propres de $\hat{M}$.

4.1.2 Formules semi-classiques au delà du temps d'Ehrenfest

Motivé par les observations du paragraphe précédent, nous avons entamé une étude de "l'évolution d'un état quantique en temps longs" pour une dynamique non linéaire hyperbolique

sur le tore [43]. Temps longs signifie ici $t \simeq Ct_E$, avec $C > 0$ quelconque, et $t_E = \frac{1}{\lambda} \log(1/\hbar)$, $\hbar \to 0$, i.e. t peut être plus grand que le temps d'Ehrenfest t_E qui est le temps frontière après lequel les phénomènes d'interférences se produisent. On présente ici quelques résultats obtenus. Le premier objectif de ce travail est de tenter de répondre aux questions soulevées page 21. On pense que le même type d'analyse et de résultats pourraient se généraliser à d'autres dynamiques hyperboliques comme les flots géodésiques sur variété à courbure négative. On pense aussi qu'une généralisation pourrait se faire pour des ensembles hyperboliques maximaux comme ceux qui apparaissent par intersection homoclines de trajectoires hyperboliques.

Nous présentons une version de la **formule semi-classique de Gutzwiller** qui exprime $\mathrm{Tr}\left(\hat{M}^t\right)$ en termes d'orbites périodiques de période t. (La même approche donne aussi les éléments de matrice du propagateur entre états cohérents $\langle \varphi_{x'} | \hat{M}^t | \varphi_x \rangle$, "à la Van-Vleck").

Théorème 4.1. *[43]*Pour tout $K > 0$, $C > 0$, $|t| < C\frac{1}{\lambda}\log(1/\hbar)$,

$$\mathrm{Tr}\left(\hat{M}^t\right) = T_{semi,t,J} + \mathcal{O}\left(\hbar^K\right) \tag{22}$$

avec

$$T_{semi,t,J} = \sum_{x=M^t x} \exp\left(-i\frac{\mathcal{A}_{x,t}}{\hbar}\right) \frac{1}{2\sinh\left(\frac{\lambda_{x,t}t}{2}\right)} \left(1 + \hbar E_{1,x,t} + \ldots \hbar^J E_{J,x,t}\right) \tag{23}$$

où x est un point fixe de M^t sur $\mathbb{T}^2$ (une orbite périodique de M), $\mathcal{A}_{x,t}$ est son action classique, $\lambda_{x,t}$ son exposant de Lyapounov. Chaque terme $E_{j,x,t}$ s'exprime à partir des coefficients de la forme normale semiclassique de l'orbite, à l'ordre $J > 2(K + C)$.

De façon plus précise, $T_{semi,t,J}$ s'exprime uniquement à partir de **cocycles semi-classiques** [21] sur le tore (sauf l'action $\mathcal{A}_n$).

4.1.3 Remarques :

- Pour obtenir ce résultat, on établit l'exitence de **formes normales semi-classiques,** en adaptant les résultats de David Delattes [29] au cas semi-classique, et en s'inspirant fortement des travaux de Sjöstrand [88, 89].
- Noter que au temps $t \simeq Ct_E$, le nombre de points fixes x_n est $\mathcal{N}_t \simeq e^{\lambda t} = (1/h)^C$, qui doit être comparé au nombre de cellules de Planck sur l'espace de phase ($\simeq 1/h$) qui est bien moindre si $C > 1$.
- Chaque correction semi-classique est bornée $\left|S_{(j)}\right| < C_j t$, uniformément sur les trajectoires et le temps. La majoration de l'erreur obtenue dans (22) peut se comprendre naïvement (si les modules des erreurs s'ajoutent) par la condition $\mathcal{N}_t e^{-\lambda_{min} t/2}\left(\hbar^{J/2} t C_{J/2}\right) <$

[21] Pour une fonction continue $\varphi : \mathbb{T}^2 \to \mathbb{R}$, on peut construire la moyenne temporelle de Birkhoff partant du point x :

$$\varphi_t(x) = \sum_{t'=1}^{t} \varphi\left(M^{t'} x\right)$$

La classe de cohomologie ou **cocyle** de φ est caractérisée par les valeurs de $\varphi_t(x)$ sur chaque orbite périodique x de période t [64]. Par exemple si $\varphi(x)$ est le taux d'expansion de $x \to Mx$ le long de la variété instable, la classe de cohomologie associée est la collection des exposants de Lyapounov (sur toutes les orbites périodiques), appelé **cocyle de Lyapounov**. Comme conséquence immédiate, utile pour nous, $t \min\varphi \leq \varphi_t(x) \leq t \max\varphi$.

$\mathcal{O}\left(\hbar^K\right)$, impliquée par $J > 2\left(K + C\right)$. La figure (28), montre des résultats numériques, où l'**erreur véritable semble beaucoup plus petite**. Cela est dû au fait que les nombres complexes se compensent entre eux, **phénomène fondamental que nous ne contrôlons pas** de façon satisfaisante.

A l'issue de ce travail, deux pistes différentes et intéressantes apparaissent :

1. Utiliser ces résultats pour le but annoncé : essayer de construire un phénomène de résurrection du paquet d'onde au temps $t = 2t_E$, qui est à l'origine de l'existence d'états cicatrisés, et de la non unique ergodicité quantique, comme dans le cas linéaire. J'espère pouvoir explorer cette piste prochainement.
2. Comprendre pourquoi la formule de Gutzwiller et autres formules semi-classiques sans correction semi-classique semblent être valables aux temps longs. C'est à dire comprendre pourquoi et comment les sommes de grand nombre d'amplitudes se compensent. Pour comprendre cette question, il nous semble qu'il faut exploiter au mieux la compréhension de la dynamique classique du problème et en particulier **ses propriétés de mélange** qui sont le mieux traduites par la théorie **"thermodynamique de Ruelle"** avec les résonances de Ruelle-Pollicott [31], que nous avons spécifiquement étudiées dans un travail récent [46]. Pour être plus précis, il existe **"des formules des traces classiques" qui sont exactes** et très similaires à la formule de Gutzwiller, et donnant la trace d'un "opérateur de Transfert classique". Par ailleurs cette trace s'exprime comme somme sur les résonances de Ruelle-Pollicott. L'espoir est de **trouver un opérateur de transfert dont la formule des traces exacte serait précisément la formule semi-classique de Gutzwiller**. Il resterait alors à comparer cet opérateur avec l'opérateur d'évolution quantique. Cet objectif a été atteint dans le travail [42] dans le cas linéaire, décrit dans la section suivante, où nous calculons les résonances de Ruelle-Pollicott pour une dynamique linéaire hyperbolique sur le tore **préquantique**.

4.2 Résonances préquantiques et valeurs propres quantiques pour l'application chaotique du chat d'Arnold

Ce paragraphe résume un travail récent [42]. La dynamique préquantique introduite dans les années 70' par Kostant-Souriau-Kirillov est un intermédiaire entre la dynamique classique et la dynamique quantique. Comme la dynamique classique, elle transporte des fonctions sur l'espace de phase, mais en plus elle rajoute des phases (phase géométrique de l'action et phase dynamique de l'énergie) qui interviennent dans les phénomènes d'interférences quantiques. Dans le cas de systèmes dynamiques hyperboliques (chaotiques), on espère que son étude permettra de mieux comprendre les phénomènes d'interférences quantiques en temps longs et leurs propriétés statistiques. On considère une application linéaire M dans $SL\left(2,\mathbb{Z}\right)$ hyperbolique sur le tore $\mathbb{T}^2$. Cela génère une dynamique fortement chaotique (Anosov). Cette dynamique est relevée sur le fibré préquantifiant, qui est un fibré Hermitien avec connexion en droites complexes sur le tore, de courbure constante. Cette dynamique relevée est partiellement hyperbolique et définit un opérateur préquantique $\tilde{M}$ qui agit dans l'espace des sections L^2 de ce fibré. Cet opérateur est unitaire mais admet des résonances que l'on calcule. On montre que ce spectre de résonances est directement lié au spectre de valeurs propres de l'opérateur $\hat{M}$ quantifié de M. On établit des formules de traces. On discute les perspectives prometteuses de cette approche dans le cas non linéaire.

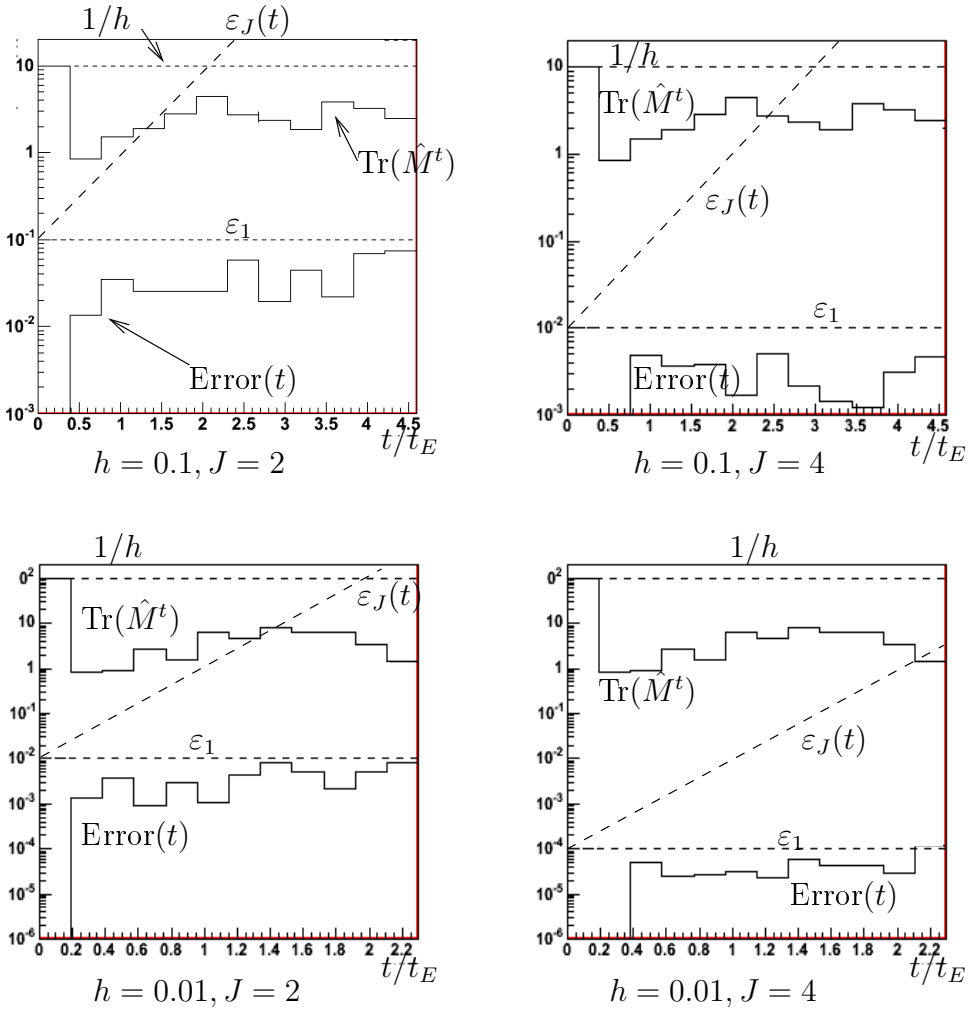


FIG. 28 – Comparaison de $\mathrm{Tr}\left(\hat{M}^t\right)$ calculé numériquement avec la formule semi-classique $T_{semi,t,J}$. On représente $\left|\mathrm{Tr}\left(\hat{M}^t\right)\right|$ et $\mathrm{Error}\,(t) = \left|\mathrm{Tr}\left(\hat{M}^t\right) - T_{semi,t,J}\right|$, pour $t = 0, 1 \ldots, 11$ (il y a jusqu'à 39601 points périodiques). On représente la majoration $N = 1/h$ de la trace, la majoration de l'erreur $|\mathrm{Error}\,(t)| \leq \varepsilon_{t,J} = h^{\frac{1}{2}(J - t/t_E)}$, et $\varepsilon_1 = h^{J/2}$. On a choisi la constante de Planck $h = 0.1$ puis $h = 0.01$, et calculé les formes normales semi-classiques des orbites périodiques jusqu'à l'ordre $J = 2$ et $J = 4$. On observe le **fait étonnant** que $\mathrm{Error}\,(t) < \varepsilon_1$, bien que seulement $\mathrm{Error} < \varepsilon_{t,J}$ soit prouvé.

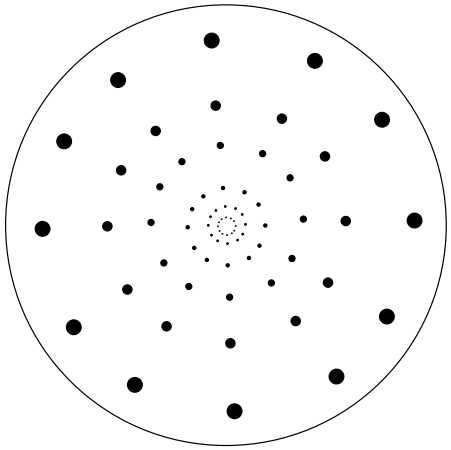


FIG. 29 – Résonances de la dynamique préquantique du "chat d'Arnold". On montre qu'elles sont égales à $e^{i\varphi_k}e^{-\lambda(n+1/2)}$, avec $e^{i\varphi_k}$ valeurs propres quantiques, $k = 1, \ldots, N$, et λ coefficient de Lyapounov, $n \in \mathbb{N}$.

5 Systèmes adiabatiques et problèmes à N corps

5.1 Bifurcations topologiques et transitions d'états dans les spectres moléculaires

Comme expliqué dans la section 3, lorsqu'un système dynamique possède des degrés de liberté lent et rapide fortement couplés, (ce qui est fréquent dans les molécules), le couplage possède une caractérisation topologique en terme de fibrés vectoriels, et cela se manifeste dans le nombre exact de niveaux d'énergie dans les bandes du spectre, grâce à la formule de l'indice d'Atiyah-Singer.

Dans quelques exemples, nous avons étudié ce qui se passe lorsqu'il y a des bifurcations de cette topologie, à cause de la variation d'un paramètre extérieur (comme la vitesse de rotation de la molécule ou le champ magnétique extérieur ...). Cela se traduit par des échanges de niveaux entre les bandes. En termes semi-classiques cet échange d'états quantiques se fait localement dans l'espace de phase, sur un lieu de dégénérescence entre bandes consécutives. D'un point de vue global et qualitatif, il serait intéressant aussi de comprendre les contraintes globales et **classifier d'un point de vue topologique les transitions "élémentaires" possibles de groupes d'états**. Ce projet est commencé dans [41] décrit en section 3.4. Un intérêt de ce travail est aussi de montrer des réalisations concrètes dans des modèles simples de mécanique quantique, de phénomènes de topologie algébrique assez sophistiqués à priori.

5.2 Monodromie (entière ou fractionnaire) et systèmes adiabatiques

Deux phénomènes topologiques apparemment différents sont actuellement observés dans les spectres quantiques de systèmes adiabatiques lent-rapide couplés. Le **premier phénomène** expliqué plus haut, est que le couplage possède une caractérisation topologique en terme de fibrés vectoriels, et que cela se manifeste dans le nombre exact de niveaux d'énergie dans les bandes du spectre, grâce à la formule de l'indice d'Atiyah-Singer. Il y a parfois des **bifurcations de la topologie qui se traduisent par des échanges de niveaux entre les bandes**.

Le **deuxième phénomène** apparaît dans le cas particulier où la dynamique globale est **intégrable**. Il peut y avoir alors des singularités dans le feuilletage en Tore Lagrangiens de ce système intégrable. Ce type de singularité, appelé **Monodromie classique ou quantique**, est bien étudiée depuis une vingtaine d'années ; en particulier par San Vu-Ngoc [93]. Récemment un nouveau type de Monodromie a été observé et étudié : la Monodromie fractionnaire [78].

Dans quelques exemples de systèmes, il a été observé que ces deux phénomènes de singularités ou bifurcations topologiques apparaissent simultanément dans les systèmes quasi-intégrables adiabatiques[85],[39]. Il paraît évident qu'il y aurait une **relation étroite entre eux**. Il serait donc très intéressant de mettre au clair cette relation en énonçant une théorie générale. Ce travail est déjà commencé avec [58].

5.3 Description topologique pour les systèmes thermodynamiques ; bifurcations topologiques et transitions de phases

Il a été montré dans la section 3 qu'un système quantique, ayant des degrés de liberté lent et rapide couplés, possède un spectre d'énergie en bandes avec une caractérisation topologique. Des bandes d'énergie similaires sont également observées numériquement dans d'autres systèmes à plusieurs particules couplés : N particules en interaction sur un réseau, ou en théorie quantique des champs (avec un nombre très grand ou infini de degrés de liberté). Dans ces systèmes, la bande fondamentale ("bande 0") représente le "vide", la première bande correspond à la dynamique d'une quasi-particule, la deuxième bande à deux quasi-particules en interaction, etc...La nature même des quasi-particules ainsi que leur espace de phase classique n'a rien d'évident à priori et dépend des paramètres du modèle. **Une modification de la structure en bandes semble coïncider avec une transition de phase**, dans la limite thermodynamique N infini. Le projet est d'explorer plus avant ces phénomènes qui sont basés pour le moment sur des observations numériques[22], et de déterminer si une interprétation topologique des bandes est possible dans ces systèmes, et si une **bifurcation de la topologie peut en effet être reliée à une transition de phase**. Ce projet est assez ambitieux et pour le moment plus spéculatif que les précédents, mais un tel résultat ouvrirait un nouveau point de vue (topologique, donc qualitatif) pour les systèmes fortement couplés à nombre infini de degrés de liberté, qui sont des problèmes encore mal compris en physique mathématique. Dans un travail récent, nous avons découvert quelques pistes prometteuses dans un modèle très simple pour commencer. Voir figure 30.

[22] Communication de Grégoire Misguish.

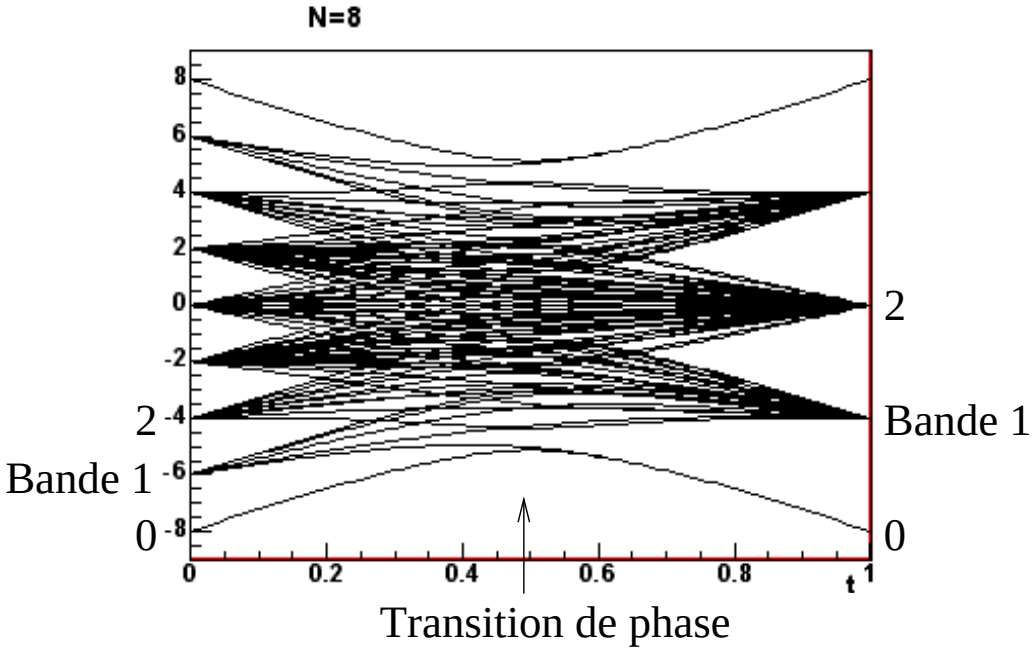


FIG. 30 – Spectre quantique du modèle"d'Ising en champ transverse" à 1dim., en fonction du champ extérieur t. Il y a une transition de phase quantique à $t = 1/2$, voir [83]. Or à ce point précis, on observe une redistribution des bandes d'énergie, comme dans les transitions topologiques de modèles adiabatiques, fig. 25, page 37.

Références

[1] A. Bouzouina and S. DeBièvre. Equipartition of the eigenfunctions of quantized ergodic maps on the torus. *Commun. Math. Phys.* , 178(1) :83–105, 1996.

[2] B. Hellfer an A. Martinez and D. Robert. Ergodicité et limite semi-classique. *Comm. Math. Phys.*, 109 :313–326, 1987.

[3] N. Anantharaman. The eigenfunctions of the laplacian do not concentrate on sets of small topological entropy. *preprint*, 2004.

[4] V.I. Arnold. *Les méthodes mathématiques de la mécanique classique.* 1976.

[5] V.I. Arnold. *Geometrical methods in the theory of ordinary differential equations.* Springer Verlag, 1988.

[6] V.I. Arnold and A. Avez. *Méthodes ergodiques de la mécanique classique.* 1967.

[7] B. Fedosov. The Atiyah-Bott-Patodi Method in deformation quantization. *Commun. Math. Phys.*, 209 :691–728, 2000.

[8] D. Bambusi, S. Graffi, and T. Paul. Long time semiclassical approximation of quantum flows : A proof of the Ehrenfest time. *Asymptotic Anal.*, 21(2) :149–160, 1999.

[9] N. Bergeron. Spectre des surfaces hyperboliques. *lecture notes for IHP trimester "Time at work", http ://www.math.jussieu.fr/˜baladi/ihp.html*, 2005.

[10] N. Berglund. *Adiabatic dynamical systems and hysteresis.* Thèse EPFL, no 1800 (1998), Département de physique. Dir. : H. Kunz, 1998.

[11] M.V. Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proc. Roy. Soc. Lond.*, 45 :392, 1984.

[12] O. Bohigas. Random matrix theories and chaotic dynamics. *Chaos and Quantum Physics, Proceedings of the Les Houches Summer School (1989)*, 45 :87–199, 1991.

[13] F. Bonechi and S. DeBièvre. Exponential mixing and ln(h) timescales in quantized hyperbolic maps on the torus. *Comm. Math. Phys.*, 211 :659–686, 2000.

[14] F. Bonechi and S. DeBièvre. Controlling strong scarring for quantized ergodic toral automorphisms. *Duke Math. J.*, 117(3) :571–587, 2003.

[15] B. Booss and D.D. Bleecker. *Topology and analysis. The Atiyah-Singer index formula and gauge- theoretic physics. Transl. from the German by D. D. Bleecker and A. Mader.* Universitext. New York etc. : Springer-Verlag. XVI, 451, 1985.

[16] D. Borthwick. Introduction to Kähler quantization. *Contemp. Math.*, 260 :91–132, 2000.

[17] J.M. Bouclet and S. De Bièvre. Long time propagation and control on scarring for perturbated quantized hyperbolic toral automorphisms. *Ann. H. Poincaré*, 6 :885–913, 2005.

[18] L. Boutet de Monvel and V. Guillemin. *The spectral theory of Toeplitz operators.* Annals of Mathematics Studies, No.99. Princeton, New Jersey : Princeton University Press ;, 1981.

[19] A. Bouzouina and D. Robert. Uniform semiclassical estimates for the propagation of quantum observables. *Duke Math. J.*, 111(2) :223–252, 2002.

[20] C. Emmrich and A. Weinstein. Geometry of the transport equation in multicomponent WKB approximations. *Commun. Math. Phys.*, 3(176) :701–711, 1996.

[21] M. Combescure and D. Robert. Semiclassical spreading of quantum wave packets and applications near unstable fixed points of the classical flow. *Asymptotic Anal.*, 14(4) :377–404, 1997.

[22] D. Thouless. Topological interpretations of quantum Hall conductance. *J. Math. Phys.*, 35 (10) :5362–5372, 1994.

[23] Y. Colin de Verdière. Ergodicité et fonctions propres du laplacien. (Ergodicity and eigenfunctions of the Laplacian). *Commun. Math. Phys.*, 102 :497–502, 1985.

[24] Y. Colin de Verdière. *Méthodes semi-classiques et théorie spectrale. Book in progress. http ://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~ycolver/.* 2002.

[25] Y. Colin de Verdière. The level crossing problem in semi-classical analysis i. the symmetric case. *Annales de l'Institut Fourier. Actes du colloque en l'honneur de Frédéric Pham*, 53 :1023–1054, 2003.

[26] Y. Colin de Verdière. The level crossing problem in semi-classical analysis ii. the hermitian case. *Annales de l'Institut Fourier, volume en l'honneur de Louis Boutet de Monvel.*, 2003.

[27] S. DeBièvre. Quantum chaos : a brief first visit. *Contemporary mathematics*, 2000.

[28] S. DeBièvre. Recent results on quantum map eigenstates. *Proceedings of Workshop QMath 9*, 2004.

[29] D. DeLatte. Nonstationnary normal forms and cocycle invariants. *Random and Computational dynamics*, 1 :229–259, 1992.

[30] B. Eckhardt, S. Fishman, J. Keating, O. Agam, J. Main, and K. Müller. Approach to ergodicity in quantum wave functions. *Phys. Rev. E*, 52 :5893–5903, 1995.

[31] J.P. Eckmann and D. Ruelle. Ergodic theory of chaos and strange attractors. *Rev. Mod. Phys.*, 57(3) :617–656, 1985.

[32] T. Eguchi, P.B. Gilkey, and A.J. Hanson. Gravitation, gauge theories and differential geometry. *Phys. Rep.*, 66 :213–393, 1980.

[33] M. Degli Esposti, S. Nonnenmacher, and B. Winn. Quantum Variance and Ergodicity for the baker's map. *Commun. Math. Phys.*, 263 :325–352, 2006.

[34] F. Faure. Generic description of the degeneracies in Harper-like models. *J. Phys. A, Math. Gen.*, 27 (22) :7519–7532, 1994.

[35] F. Faure. Exposé sur la quantification géométrique. *http ://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure*, pages 1–12, 2000.

[36] F. Faure. Topological properties of quantum periodic Hamiltonians. *J. Phys. A, Math. Gen.*, 33 :531–555, 2000.

[37] F. Faure and B. Parisse. Semiclassical study of the quantized Hall effect. *Journal of Mathematical physics*, 41 :62–75, 2000.

[38] F. Faure. Films d'animations d'ondes quantiques. *http ://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure/enseignement/meca_q/animations.*

[39] F. Faure. Geometric and topological aspects of slow and fast coupled dynamical systems in quantum and classical dynamics. *Lectures given in :Saclay. Spth. and M.A.S.I.E. Spring School, Warwick, march 2002. http ://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure*, 2002.

[40] F. Faure. Long time semiclassical evolution of wave packets in quantum chaos. example of non quantum unique ergodicity with hyperbolic maps. *Lecture notes for I.H.P. School, june 2005. http ://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~faure/articles*, 2005.

[41] F. Faure. Models of topological bifurcations for quantum adiabatic dynamics. *redaction en cours*, 2005.

[42] F. Faure. Prequantum chaos : Resonances of the prequantum cat map. *preprint :nlin.CD/0606063*, 2006.

[43] F. Faure. Semiclassical formula beyond the ehrenfest time in quantum chaos. (i) trace formula. *preprint :nlin.CD/0610004*, 2006.

[44] F. Faure and S. Nonnenmacher. On the maximal scarring for quantum cat map eigenstates. *Communications in Mathematical Physics*, 245 :201–214, 2004.

[45] F. Faure, S. Nonnenmacher, and S. DeBièvre. Scarred eigenstates for quantum cat maps of minimal periods. *Communications in Mathematical Physics*, 239 :449–492, 2003.

[46] F. Faure and N. Roy. Ruelle-pollicott resonances for real analytic hyperbolic map. *Nonlinearity*, 19 :1233–1252, 2006.

[47] F. Faure and B. Zhilinskii. Topological Chern indices in molecular spectra. *Phys. Rev.Lett.*, 85(5) :960–963, 2000.

[48] F. Faure and B. Zhilinskii. "Topological properties of the Born-Oppenheimer approximation and implications for the exact spectrum". *Lett. in Math. Phys.*, 55 :219–238, 2001.

[49] F. Faure and B. Zhilinskii. Qualitative features of intra-molecular dynamics. what can be learned from symmetry and topology. *Acta Appl. Math.*, 70 :265–282, 2002.

[50] F. Faure and B. Zhilinskii. Topologically coupled energy bands in molecules. *Phys. Lett., A*, 302(5-6) :242–252, 2002.

[51] B. Fedosov. *Deformation Quantization and Index Theory.* 1996.

[52] E. Ghys. Variations autour du théorème de récurrence de poincaré. *Le journal de maths des élèves*, 1 :3–11, 1994.

[53] M.J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin, editors. *Chaos and Quantum Physics.* Les Houches Session LII 1989 (Elsevier, Amsterdam), 1991.

[54] M. Gutzwiller. *Chaos in classical and quantum mechanics.* Springer-Verlag, 1991.

[55] G.A. Hagedorn and A. Joye. Exponentially acurrate semiclassical dynamics : Propagation, localization, ehrenfest times, scattering, and more general states. *Ann. Henri Poincaré*, 1 :837–883, 2000.

[56] J.H. Hannay. Angle variable holonomy in adiabatic excursion of an integrable hamiltonian. *J. Phys.A*, 18 :221–230, 1985.

[57] J.H. Hannay and M. Berry. Quantization of linear maps-fresnel diffraction by a periodic grating. *Physica D*, 1 :267–290, 1980.

[58] M. Hansen, F. Faure, and B. Zhilinskii. Adiabatically coupled systems and fractionnal monodromy. *redaction en cours*, 2005.

[59] A. Hatcher. *Algebraic topology.* http ://www.math.cornell.edu/~hatcher/, 1998.

[60] A. Hatcher. *Vector Bundles and K-Theory.* http ://www.math.cornell.edu/~hatcher/, 1998.

[61] E.J. Heller. Time dependant approach to semiclassical dynamics. *J. Chem. Phys.*, 62 :1544–1555, 1975.

[62] E.J. Heller. Bound state eigenfunctions of classically chaotic hamiltonian systems : scars of periodic orbits. *Phys. Rev. Lett.*, 53 :1515–1518, 1984.

[63] K. Hepp. The classical limit of quantum mechanical correlation funtions. *Comm. Math. Phys.*, 35 :265–277, 1974.

[64] A. Katok and B. Hasselblatt. *Introduction to the Modern Theory of Dynamical Systems.* Cambridge University Press, 1995.

[65] J.P. Keating. Asymptotic properties of the periodic orbits of the cat maps. *Nonlinearity*, 4 :277–307, 1991.

[66] J.P. Keating. The cat maps : quantum mechanics and classical motion. *Nonlinearity*, 4 :309–341, 1991.

[67] P. Kurlberg and Z. Rudnick. Hecke theory and equidistribution for the quantization of linear maps of the torus. *Duke Math. J.*, 103 :47–77, 2000.

[68] P. Kurlberg and Z. Rudnick. On quantum ergodicity for linear maps of the torus. *Comm. Math. Phys.*, 222 :201–227, 2001.

[69] P. Kurlberg and Z. Rudnick. On the distribution of matrix elements for the quantum cat map. *Annals of Maths*, 161 :489–507, 2005.

[70] L. Michel and B. I. Zhilinskii. Symmetry, Invariants, and Topology'. *Physics Reports*, 341, 2001.

[71] E.M. Lifshitz L.D. Landau. *Quantum Mechanics.* 1965.

[72] E. Lindenstrauss. Invariant measures and arithmetic quantum unique ergodicity. *preprint*, pages 1–54, 2003.

[73] R.G. Littlejohn. "the semiclassical evolution of wave-packets". *Phys. Rep.*, 138 :4–5, 1986.

[74] W. Luo and P. Sarnak. Quantum variance for hecke eigenforms. *Ann. Sci. Ecole Norm. Sup.*, 37 :769–799, 2004.

[75] A. Martinez. *An Introduction to Semiclassical and Microlocal Analysis.* Universitext. New York, NY : Springer, 2002.

[76] R. Montgomery. The connection whose holonomy is the classical adiabatic angles of hannay and berry and its generalization to the non integrable case. *Comm. in Math. Phys.*, 120 :269–294, 1988.

[77] M. Nakahara. *Geometry, topology and physics.* Institute of Physics Publishing, 2003.

[78] D. A. Sadovskiĭ Nikolaí N. Nekhoroshev and Boris I. Zhilinskiĭ. Fractional monodromy of resonant classical and quantum oscillators. *Comptes Rendus Acad. Sci. Paris*, Ser I 335 :985–88, 2002.

[79] Gianluca Panati, Herbert Spohn, and Stefan Teufel. Effective dynamics for Bloch electrons : Peierls substitution and beyond. *Commun. Math. Phys.*, 242(3) :547–478, 2003.

[80] P.Lochak and C.Meunier. *Multiphase Averaging for Classical Systems.* Springer Verlag, 1988.

[81] M. A. Reed. Quantum dots. *Scientific American Inc.*, pages 118–123, 1993.

[82] Z. Rudnick and P. Sarnak. The behaviour eigenstates of arithmetic hyperbolic manifolds. *Comm. Math. Phys.*, 161 :195–231, 1994.

[83] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2000.

[84] D.A. Sadovskii and B.I. Zhilinskii. Qualitative analysis of vibration-rotation hamiltonians for spherical top molecules. *Molecular Physics*, 65 :109–128, 1988.

[85] D.A. Sadovskii and B.I. Zhilinskii. Monodromy, diabolic points, and angular momentum coupling. *Physics Letter A*, 256 :235–244, 1999.

[86] A. Schnirelman. Ergodic properties of eigenfunctions. *Usp. Math. Nauk.*, 29 :181–182, 1974.

[87] R. Schubert. Semi-classical behaviour of expectation values in time evolved lagrangian states for large times. *Commun. Math. Phys.*, 256 :239–254, 2005.

[88] J. Sjöstrand. Resonances associated to a closed hyperbolic trajectory in dimension 2. *Asymptotic Anal.*, 36(2) :93–113, 2003.

[89] J. Sjöstrand and M. Zworski. Quantum monodromy and semi-classical trace formulae. *J. Math. Pures Appl.*, 1 :1–33, 2002.

[90] D. J. Thouless, M. Khomoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49 :405, 1982.

[91] S. Tomsovic and E.J. Heller. Long-time semi-classical dynamics of chaos : the stadium billard. *Physical Review E*, 47 :282, 1993.

[92] J.H. Van Vleck. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 14 :178, 1928.

[93] S. VuNgoc. Quantum monodromy in integrable systems. *Comm. Math. Phys.*, 203(2) :465–479, 1999.

[94] S. Zelditch. Uniform distribution of the eigenfunctions on compact hyperbolic surfaces. *Duke Math. J*, 55 :919–941, 1987.

[95] S. Zelditch. On the rate of quantum ergodicity. I : Upper bounds. *Commun. Math. Phys.*, 160(1) :81–92, 1994.

[96] S. Zelditch. Quantum dynamics from the semi-classical viewpoint. *Lectures at I.H.P. http ://mathnt.mat.jhu.edu/zelditch*, 1996.

[97] S. Zelditch. Quantum ergodicity and mixing of eigenfunctions. *Elsevier Encyclopedia of Math. Phys.*, 2005.