

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMERI TIZI-OUZOU

FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

THÈSE DE DOCTORAT

SPECIALITÉ : Physique

OPTION : Physique Des Matériaux

Présentée par :

BOUMRAR Hocine

Sujet : Étude de la phase de Berry dans le cadre de la mécanique
quantique non-commutative

Devant le Jury d'examen composé de:

Omar LAMROUS	Professeur	UMMTO	Président
Ferhat MENAS	Professeur	UMMTO et ENPEI	Rapporteur
Alain BERARD	Professeur	Université de Lorraine-Metz	Co-Rapporteur
Abdelhamid ZIANE	Professeur	UMMTO	Examineur
Yves GRANDATI	Maitre de Conférences HDR	Université de Lorraine-Metz	Examineur
Yazid KASRI	Maitre de Conférences A	Université A. MIRA Béjaia	Examineur

Soutenue le 17 /12/2015

REMERCIEMENTS

Ce travail de thèse a été réalisé dans le cadre d'une collaboration entre l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (Algérie) et l'université de Lorraine (France), sous la direction conjointe du professeur Ferhat Menas du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou et le professeur Alain Bérard Institut de Chimie, Physique et des Matériaux, Université de Lorraine, France.

Je tiens, avant tout, à exprimer ma profonde gratitude au Directeur de thèse Ferhat Menas, professeur à l'université de Tizi-Ouzou et à l'Ecole Nationale Préparatoire aux études d'Ingéniorat de Rouiba, pour ses conseils précieux, ses encouragements, son suivi permanent ainsi que la confiance et l'aide qu'il m'a accordé tout au long de mes années de thèse.

Je tiens particulièrement à remercier mon co-directeur de thèse le professeur Alain Bérard de l'université de Lorraine pour avoir accepté de m'accueillir dans son équipe et pour les moyens nécessaires mis à ma disposition. Par sa grande compétence, ses conseils et sa disposition, il a joué un rôle déterminant dans le développement de mes recherches.

Je remercie les membres de jury qui ont accepté de juger ce travail et d'y apporter leur caution :

Monsieur Omar LAMROUS, professeur à l'université de Tizi-Ouzou, qui me fait le grand honneur d'accepter la présidence du jury.

Messieurs, Abdelhamid Ziane, Yves GRANDATI et Yazid KASRI, pour l'honneur qu'ils me font en acceptant de participer à ce jury.

J'adresse mes vifs remerciements à tous les chercheurs, membres du LPCQ.

Table des matières

Introduction	3
1 Phase de Berry	7
1.1 Transport parallèle et la notion d'holonomie	8
1.2 Phase de Berry	13
1.2.1 Evolution adiabatique	13
1.2.2 Evolution cyclique et phase de Berry	18
1.2.3 Courbure de Berry	21
1.2.4 Anticipation et généralisation de la phase de Berry	24
1.3 Effet de la phase de Berry dans un solide	27
1.3.1 La phase de Berry et les bandes de Bloch	28
1.3.2 Polarisation électrique	31
1.3.3 Magnétisation orbitale	34
1.3.4 L'effet Hall anormal	37
1.3.5 Effet Hall quantique	42
2 La mécanique quantique non-commutative	46
2.1 Introduction	46
2.2 L'électromagnétisme selon Feynman	51
2.2.1 Les propositions de Feynman	51
2.2.2 Les résultats de Feynman	53
2.2.3 Démonstration des résultats	53
2.3 L'algèbre du groupe $SO(3)$ et le moment de Poincaré	56
2.3.1 Le monopôle magnétique de Dirac	56
2.3.2 L'algèbre du groupe $SO(3)$	58

2.4	Mécanique quantique non-commutative (MQNC)	60
2.4.1	Mise en évidence expérimentale du monopôle magnétique en impulsion	60
2.4.2	L'algèbre $SO(3)$ et la MQNC	62
2.5	Lien entre la phase de Berry et la MQNC	68
2.5.1	Représentation de Foldy-Wouthuysen	70
2.5.2	Hamiltonien pour une particule massive	71
2.5.3	Opérateur de position	72
2.5.4	Courbure de Berry non abélienne	73
2.5.5	Particule non massive	74
2.5.6	Applications physiques	76
3	La phase de Berry et les électrons de Bloch	79
3.1	Introduction	79
3.2	Modèle semi-classique des électrons de Bloch	82
3.3	Formulation lagrangienne :	85
3.4	La méthode de diagonalisation	90
3.4.1	La formulation	91
3.4.2	L'approximation semi-classique	95
3.4.3	Application 1 : l'électron de Dirac	97
3.4.4	Application 2 : électron de Bloch	99
3.5	La substitution de Peierls généralisée	102
3.5.1	La substitution de Peierls classique (1933)	103
3.5.2	La substitution de Peierls généralisée et les équations du mouvement	105
3.5.3	Les variables canoniques	110
3.6	Quantification de Bohr-Sommerfeld :	113
	Conclusion	123
	Bibliographie	126

Introduction

En 1984, Michael Berry a écrit un article qui a suscité un immense intérêt dans différents domaines de la physique [1]. Ceci porte sur le rôle des phases dans les systèmes faisant intervenir deux échelles de temps différentes en mettant en évidence une lacune dans la formulation traditionnelle du théorème adiabatique : quand un vecteur propre d'un hamiltonien H est transporté le long d'un circuit fermé en faisant varier lentement les paramètres de l'environnement extérieur $\mathbf{R}$ dont dépend H , il peut acquérir, contrairement à ce qu'on avait cru jusqu'alors, un facteur de phase géométrique dépendant du circuit parcouru, en plus du facteur de phase dynamique habituel. Cette phase géométrique qui a été négligée pendant plus d'un demi-siècle est maintenant devenue un concept central d'unification dans la mécanique quantique, avec des applications dans plusieurs domaines de la physique et implique divers effets observables, particulièrement en physique de la matière condensée [2].

L'introduction de concept de la phase de Berry dans les solides cristallins a été introduite par Zak [3] qui a montré que la courbure de Berry est une propriété intrinsèque de la structure de bande. Ceci a apporté un grand succès pour l'étude des matériaux diélectriques et ferroélectriques. En effet, la vision traditionnelle de la polarisation électrique et l'aimantation orbitale basées sur l'image des charges et des densités des courants restent mal exprimées jusqu'à 1992 où une formulation générale de la polarisation électrique a été développée [4, 5] en la reliant au phénomène de transport de charge adiabatique et l'exprimer en termes de phase de Berry à travers la zone de Brillouin. Par contre L'aimantation orbitale est développée récemment par Thonhauser [6] en se basant sur une dérivation de la représentation du Wannier, montrant qu'elle ne consiste pas seulement à définir des moments orbitaux des quasi-particules, mais contient également une contribution due à la courbure du Berry d'origine topologique.

L'influence éventuelle de la phase de Berry sur les équations du mouvement n'a été envisagée que très récemment. En fait, ces dernières années un réexamen des équations du mouvement de particules quantiques dans la limite semi-classique a été au centre de nombreux travaux. L'analyse la plus approfondie dans ce contexte est due à Sundaram et Niu [7]. Ces auteurs ont développé un outil puissant pour décrire la dynamique d'un paquet d'ondes représentant le mouvement des électrons dans des cristaux perturbés. Ils ont construit un paquet d'ondes en se basant sur les états de Bloch appartenant à une bande simple décrits par un hamiltonien local. En dérivant sa dynamique sous une forme générale, basée sur un principe de variation dépendant du temps, ils ont introduit les nouvelles équations du mouvement suivantes en présence d'un champ électromagnétique :

$$\dot{\mathbf{r}}_c = \frac{\partial \mathcal{E}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}_c} - \dot{\mathbf{k}} \times \Omega_n(\mathbf{k}_c) \quad (1)$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

L'une des modifications majeures dans ces équations est la présence du terme supplémentaire $\dot{\mathbf{k}} \times \Omega_n(\mathbf{k}_c)$ qui est du à la courbure de Berry. Ce terme a des significations physiques directes sur les phénomènes de transport comme l'effet hall anormal et l'effet hall de spin démontrés par de nombreuses applications ces dernières années [8, 9]. Cette méthode est importante pour décrire le mouvement des électrons de Bloch mais, elle a été construite à partir d'un modèle semi-classique en se basant sur un formalisme Lagrangien et la dérivation d'un hamiltonien semi-classique, elle présente des difficultés en présence des termes de phase de Berry [10]. En fait, les variables de centre de masse $\mathbf{r}_c$ et $\mathbf{k}_c$ décrivant la dynamique semi-classiques ne sont pas des variables canoniques à cause de la courbure de Berry qui rend l'algèbre des coordonnées non-commutative [11]. D'autre part le caractère non-canonique qui apparaît dans les équations du mouvement avec des corrections dues à la phase de Berry a mené Xiao [10] à conclure que le volume naïf de l'espace de phase n'est pas conservé en présence d'une phase de Berry et d'un champ magnétique, ce qui viole le théorème de Liouville. Un autre inconvénient apparaît pour la quantification de Bohr Sommerfeld, l'application des équations (1) et (2) n'explique pas la valeur de l'indice de Maslov.

Motivé par une proposition récente sur la possibilité d'observer un monopôle dans la

structure de bande, et par un intérêt croissant pour le rôle de phase de Berry en spintronique, nous présentons dans cette thèse une approche alternative de la quantification semi-classique, basée sur une méthode de diagonalisation des hamiltoniens quantiques à valeur matricielle qui a été développé par nos collaborateurs [12, 13]. Cette méthode aboutit à un hamiltonien effectif diagonal en termes de coordonnées non-commutatives. les variables dynamiques qui résultent dans les équations du mouvement ne sont pas les opérateurs canoniques habituels, mais de nouveaux opérateurs covariants qui incluent des potentiels de jauge de Berry. D’ailleurs, ce formalisme qui est plus pratique et puissant pourrait toujours être appliqué à plusieurs autres systèmes en physique de la matière condensée ou en physique des particules. Nous montrons qu’une substitution du Peierls généralisée, qui contient un terme dû à la phase de Berry, doit être envisagée pour le traitement semi-classique des électrons dans un champ extérieur. Cette substitution est un élément essentiel pour la détermination correcte des équations du mouvement semi-classique ainsi que pour la condition de quantification de Bohr-Sommerfeld des niveaux d’énergie dans un champ magnétique. Une fois reformulée en termes de substitution de Peierls généralisée, nous étudions la pertinence de ce nouveau concept au niveau de la quantification semi-classique des niveaux d’énergie pour un mouvement d’un électron dans un champ magnétique uniforme. En particulier, cette reformulation conduit à une modification des règles de quantification semi-classiques et généralise une formule qui a été dérivée par Roth et Fal’kovski [14–16].

D’autre part, nous étendons l’idée de Feynman sur l’électromagnétisme à l’espace des impulsions en tenant compte de la mécanique quantique non-commutative. Dans ce contexte, nous montrons que la non commutativité des coordonnées est responsable d’un nouveau effet appelé effet Hall de spin et mène à l’introduction d’un monopôle dual de Dirac dans l’espace des impulsions [17, 18]. Ce dernier a été mis en évidence expérimentalement très récemment lors de l’étude de l’effet Hall anormal dans l’espace des impulsions d’un cristal ferromagnétique [19]. Nous avons alors suggéré un lien entre ce champ non commutatif et la courbure de Berry exprimée dans l’espace des impulsions qui est à l’origine de l’effet Hall anormal. Plus généralement, nous mentionnons les efforts actuels menés dans le but de mieux comprendre la relation étroite existant entre la géométrie non-commutative et la phase de Berry.

Cette thèse comporte trois parties :

Dans le premier chapitre, nous présentons la notion de la phase de Berry où on va tout d'abord donner un exemple classique de la géométrie pour lequel il est possible de distinguer la phase dynamique de la phase géométrique. Ensuite, nous rappelons comment elle a été élaborée dans le cas d'une évolution adiabatique. Son analogie avec l'électromagnétisme nous permet de définir sa connexion et sa courbure. L'influence éventuelle de cette phase sur les propriétés de la matière condensée est exposée tel que la polarisation électrique, l'aimantation orbitale et l'effet hall anormal.

Le deuxième chapitre est consacré aux coordonnées non-commutatives. Une fois qu'on résume la façon dont le nom de la mécanique quantique non-commutative a commencé à apparaître, nous étendons l'idée de Feynman sur l'électromagnétisme à l'espace des impulsions. Dans ce contexte, nous montrons que la non commutativité des coordonnées est responsable de l'apparition d'un monopôle qui a été observé expérimentalement. Nous examinons ensuite l'évolution adiabatique de l'équation de Dirac afin de clarifier la relation qui existe entre ce monopôle et la courbure de Berry dans l'espace des impulsions.

Dans le dernier chapitre, nous résumons une approche alternative de la quantification semi-classique, basée sur une méthode de diagonalisation des hamiltoniens quantiques. Cette méthode aboutit à un hamiltonien effectif diagonal en termes de coordonnées non-commutatives. On montre alors qu'une substitution de Peierls généralisée, qui remplace le moment cristallin usuel par un autre covariant, est nécessaire pour l'établissement des équations complètes du mouvement . Nous montrons ainsi que les variables dynamiques ne sont pas des opérateurs canoniques habituels, mais de nouveaux opérateurs covariants qui incluent des potentiels de jauge de Berry. Nous étudions ensuite la pertinence de ce nouveau concept au niveau de la quantification des niveaux d'énergie pour un mouvement d'électron de Bloch et de Dirac dans un champ magnétique uniforme.

Nous terminons enfin par une conclusion générale, qui résume les résultats les plus apparents de cette thèse.

Chapitre 1

Phase de Berry

Aujourd'hui la mécanique quantique constitue une partie importante pour la compréhension des phénomènes physiques. Un système quantique est décrit mathématiquement en termes de certains espaces vectoriels et d'opérateurs linéaires agissant sur ces espaces. La dynamique de ce système est déterminée par l'équation de Schrödinger ou les équations de Heisenberg, qui impliquent un opérateur linéaire appelé hamiltonien. L'opérateur hamiltonien décrit l'évolution des états du système physique dans le temps. Les ouvrages standards sur la mécanique quantique discutent presque exclusivement des propriétés qui ne dépendent pas du temps. Cependant, dans de nombreuses situations pratiques, les paramètres physiques qui apparaissent dans l'expression de l'hamiltonien sont déterminés par des facteurs d'environnement extérieur dépendant du temps. L'étude de ces Hamiltoniens est donc très importante dans la modélisation des systèmes physiques réels. L'un des aspects les plus intéressants d'un système quantique avec un hamiltonien dépendant du temps est l'apparition de la phase géométrique. La phase géométrique avait été ignorée dans la mécanique quantique pendant plus d'un demi-siècle. On ne l'avait pas oubliée, mais elle était considérée sans importance. En 1928, Fock [20] a montré qu'une telle phase pouvait être éliminée par une simple redéfinition de la phase initiale. Bien que la preuve de Fock a été limitée aux évolutions non-cycliques, sa conclusion a été acceptée jusqu'aux années 80 où Mead et Truhlar [21] et surtout Berry [1] ont reconsidéré les évolutions cycliques. En 1983, Berry a fait la découverte étonnante qu'un système quantique évoluant d'une façon adiabatique autour d'un circuit fermé C dans l'espace des paramètres externes, acquiert en plus d'une phase dynamique familière, une phase dite géométrique

supplémentaire et non-intégrable dépendant seulement de la géométrie de circuit [1]. On interprète la phase dynamique comme étant le souvenir du temps écoulé, alors que la phase géométrique s'interprète comme étant le souvenir du chemin parcouru. Cette phase qui a été négligée pendant plus d'un demi-siècle nous amène une signification très profonde de la mécanique quantique et de plus implique divers effets observables. La phase de Berry se limite à l'approximation adiabatique et aux évolutions cycliques non dégénérées. Par conséquent, elle ne peut être qu'une approximation de la vraie phase géométrique quantique. Pour remédier à cette approche, Wilczek et Zee [22] ont considéré le cas non abélien (dégénéré), Aharonov et Anandan [23] généralisent le cas non adiabatique et Samuel et Bhandari [24] prouvent que l'hypothèse de l'évolution cyclique peut être évitée.

1.1 Transport parallèle et la notion d'holonomie

Les phases géométriques surgissent en raison d'un phénomène qui peut être en tant que « changement global sans changement local ». Afin d'avoir une idée intuitive des phases géométriques, il est donc approprié de commencer par une introduction du concept fondamental du transport parallèle dans un contexte purement géométrique ; Un exemple classique intuitif d'une telle situation [25] est le transport parallèle d'un vecteur le long d'une boucle sur une sphère.

Considérons une surface S (par exemple, un plan, une sphère, un cône, etc.) et un vecteur contraint à se déplacer partout dans le plan tangent sur la surface. Après, nous souhaitons transporter ce vecteur sur cette surface, (sans le tourner autour de l'axe normale à la surface), comme illustré dans la figure (1-1).

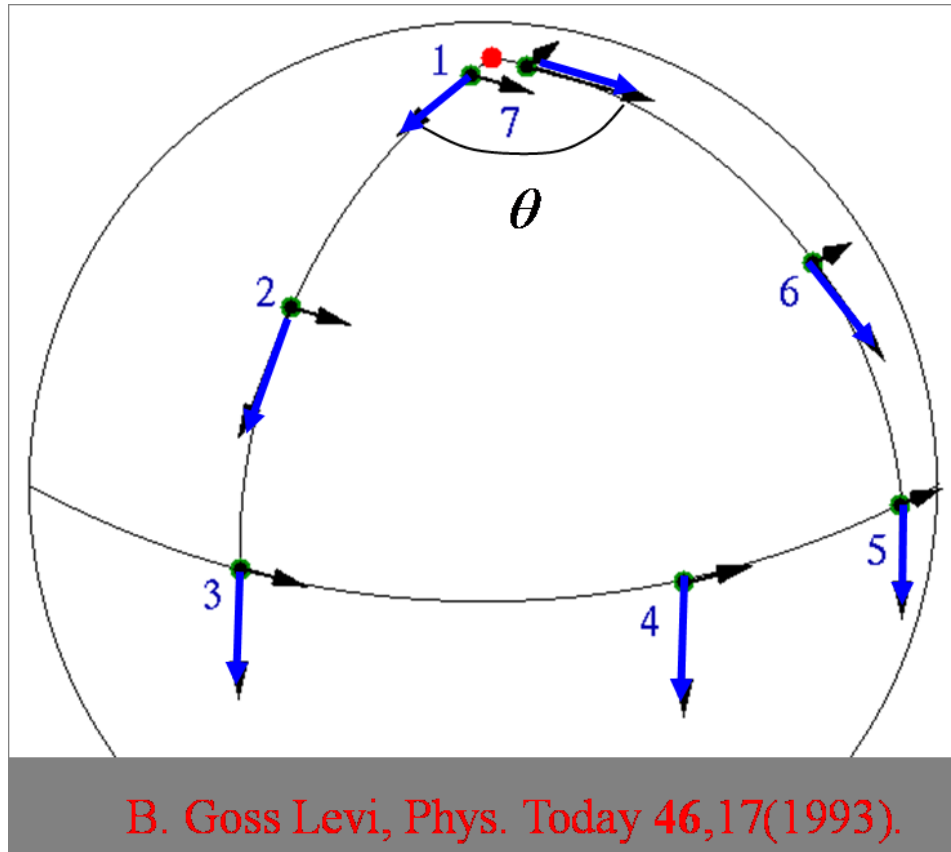


Fig1-1 (Transport parallèle d'un vecteur le long d'une boucle sur une sphère)

Nous sommes intéressés, en particulier dans le cas, dans lequel la flèche est transportée autour d'un circuit fermé C ($1 \rightarrow 2 \dots \rightarrow 6 \rightarrow 7$). Nous pouvons rencontrer deux situations différentes : (i) si la surface est plate, alors il est clair que dans ce cas la flèche reste toujours parallèle à son orientation originale, elle est donc inchangée à la fin du circuit C ; (ii) si, cependant, la surface est courbée comme sur la figure (1), la flèche, étant contraint à se situer dans le plan de la tangente locale, ne peut pas rester parallèle à son orientation originale, et à la fin du circuit C , on voit clairement qu'elle a été tournée d'un angle α . Ce phénomène est appelé (holonomie) .

Nous allons maintenant formaliser ce procédé. La flèche est représentée par un vecteur unitaire $\mathbf{e}_1$ tangent à la surface. On définit un autre vecteur $\mathbf{e}_2$ tangent à la surface et qui reste perpendiculaire à $\mathbf{e}_1$. Soit $n(r)$ un autre vecteur qui est normale à la surface au point r . Ces trois vecteurs forment un repère orthonormé. Pendant que $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ sont transportés sur la surface le long d'un circuit (C) , ils doivent tourner avec une pulsation ω qui peut être déterminée si la surface n'est pas plate (elle est nulle si la surface est

plate). L'équation du mouvement qui décrit les vecteurs $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ est donnée par :

$$\dot{\mathbf{e}}^r = \omega \times \mathbf{e}^r \quad , \quad r = 1, 2 \quad , \quad (1.1)$$

où le point indique la dérivé par rapport au temps. La vitesse angulaire ω s'écrit d'une manière générale :

$$\omega = a\mathbf{n} + b\dot{\mathbf{n}} + c(\mathbf{n} \times \dot{\mathbf{n}}) \quad . \quad (1.2)$$

Afin de remplir la condition que $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ restent des vecteurs unitaires tangents à la surface on doit avoir

$$\mathbf{e}^r \cdot \mathbf{n} = 0 \quad , \quad r = 1, 2 \quad . \quad (1.3)$$

De la même manière, le transport parallèle exige que les vecteurs $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ ne tournent jamais autour de $\mathbf{n}$ c.a.d :

$$\omega \cdot \mathbf{n} = 0 \quad . \quad (1.4)$$

En remplaçant les équation (1.3) et (1.4) dans (1.2) nous trouvons finalement que la vitesse angulaire ω s'écrit :

$$\omega = \mathbf{n} \times \dot{\mathbf{n}} \quad . \quad (1.5)$$

La loi qui décrit le transport parallèle des vecteur $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ est alors :

$$\dot{\mathbf{e}}^r = (\mathbf{n} \times \dot{\mathbf{n}}) \times \mathbf{e}^r = -(\mathbf{e}^r \cdot \dot{\mathbf{n}}) \mathbf{n} \quad . \quad (1.6)$$

Cette loi peut exprimer sous une autre forme plus approprié à la généralisation de transport parallèle au cas de la mécanique quantique, on définissant le vecteur complexe

$$\Phi = \frac{\mathbf{e}_1 + i\mathbf{e}_2}{\sqrt{2}} \quad ,$$

avec la condition de normalisation :

$$\Phi^* \cdot \dot{\Phi} = 1 \quad .$$

Les conditions indiquées par les équations (1.1) , (1.4) et (1.5) peuvent être exprimées en

termes de Φ et sa dérivé par rapport au temps $\dot{\Phi}$ en écrivant :

$$\begin{aligned}\Phi^* \cdot \dot{\Phi} &= \frac{1}{2} (\mathbf{e}_1 - i\mathbf{e}_2) \cdot (\dot{\mathbf{e}}_1 + i\dot{\mathbf{e}}_2) \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{e}_1 \cdot \dot{\mathbf{e}}_1 + \mathbf{e}_2 \cdot \dot{\mathbf{e}}_2 + i(\mathbf{e}_1 \cdot \dot{\mathbf{e}}_2 - \mathbf{e}_2 \cdot \dot{\mathbf{e}}_1)) .\end{aligned}\tag{1.7}$$

Les termes $\mathbf{e}_1 \cdot \dot{\mathbf{e}}_1$ et $\mathbf{e}_2 \cdot \dot{\mathbf{e}}_2$ disparaissent parce que $\mathbf{e}_1$ et $\dot{\mathbf{e}}_1$ sont orthogonales (même chose pour $\mathbf{e}_2$ et $\dot{\mathbf{e}}_2$) . Comme $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ sont réels, la partie imaginaire de $\Phi^* \cdot \dot{\Phi}$ est $\frac{1}{2} (\mathbf{e}_1 \cdot \dot{\mathbf{e}}_2 - \mathbf{e}_2 \cdot \dot{\mathbf{e}}_1)$ et ceci s'annule également, parce que $\dot{\mathbf{e}}_1$ et $\dot{\mathbf{e}}_2$ sont chacun perpendiculaires à la tangente de plan qui contient $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$. Ce qui conduit à la loi de transport parallèle qui s'écrit :

$$\Phi^* \cdot \dot{\Phi} = 0.\tag{1.8}$$

L'équation (1.8) peut également être écrite sous la forme :

$$\text{Im}(\Phi^* \cdot \nabla \Phi) = 0 .\tag{1.9}$$

Afin d'exprimer la rotation des vecteurs unitaires $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ qui se déplacent sur un contour fermé C , nous devons choisir un repère orthonormé local et fixe $(\mathbf{n}, \mathbf{u}, \mathbf{v})$ sur la surface. Le vecteur unitaire normal est bien sûr uniquement déterminé par la surface, mais nous avons une infinité de choix possibles pour $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$. Nous imposons simplement qu'ils se déplacent sur la surface de la sphère sous la contrainte de transport parallèle, ce qui correspond à une liberté de jauge. Une fois que nous avons fait un choix pour $\mathbf{u}$, alors $\mathbf{v}$ est bien sûr déterminé d'une façon unique. D'une manière analogue au vecteur unitaire complexe Φ , qui est une combinaison des vecteurs unitaires réel $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$, on introduit le vecteur complexe Ψ :

$$\Psi = \frac{\mathbf{u} + i\mathbf{v}}{\sqrt{2}} .\tag{1.10}$$

La relation entre le transport parallèle et celui qui est fixe est exprimé par

$$\Phi(t) = e^{[-i\alpha(t)]} \Psi(t) ,\tag{1.11}$$

où $\alpha(t)$ est l'angle dont $(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ doit être tourné afin de coïncider avec $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$. On obtient

l'équation satisfaite par $\alpha(t)$ par l'insertion de (1.11) dans (1.8)

$$\Phi^* \cdot \dot{\Phi} = -i \dot{\theta} \left(\Psi^* \cdot \Psi + \Psi^* \cdot \dot{\Psi} \right) = 0 . \quad (1.12)$$

Comme $\Psi^* \cdot \Psi = 1$ et $\Psi^* \cdot \dot{\Psi}$ est imaginaire alors

$$\dot{\alpha} = \text{Im}(\Psi^* \cdot \dot{\Psi}) . \quad (1.13)$$

Si le chemin C est fermé, un simple calcul de la géométrie différentielle montre que la phase accumulée $\alpha(C)$ est donnée par

$$\alpha(C) = \text{Im} \oint_C \Psi^* \cdot d\Psi . \quad (1.14)$$

Dans le cas de la sphère, on peut choisir les coordonnées sphériques de tel sorte que $\mathbf{u} = (\cos\theta\cos\varphi, \cos\theta\sin\varphi, -\sin\theta d\theta d\varphi)$ et $\mathbf{v} = (-\sin\varphi, \cos\varphi, 0)$. Il est facile de montrer, dans ce cas, que la fonction à intégrer dans l'équation (1.11) est $\sin\theta d\theta d\varphi$. Par conséquent, $\alpha(C)$ est simplement l'angle solide délimitée par le contour C . Il est intuitif que le résultat donné par l'équation (1.14) ne dépend pas du choix de la base. S'il dépendait de cette base, il n'aurait pas une signification physique. Pour voir cette indépendance mathématiquement, on change la base en utilisant la transformation :

$$\Psi \longrightarrow \Psi e^{i\eta(r)} . \quad (1.15)$$

Dans ce cas, le conjugué complexe Ψ^* est $\Psi^* e^{-i\eta(r)}$ et $d\Psi$ devient $e^{i\eta(r)} d\Psi + i\Psi e^{i\eta(r)} d\eta(r)$. Ceci nous permet d'établir l'angle $\alpha(C)$ dans la nouvelle base

$$\alpha(C) = \text{Im} \oint_C \Psi^* e^{-i\eta(r)} \cdot e^{i\eta(r)} d\Psi + i\Psi e^{i\eta(r)} d\eta(r) \quad (1.16)$$

$$= \text{Im} \oint_C \Psi^* \cdot d\Psi + \text{Im} \oint_C i\Psi^* \cdot \Psi d\eta(r) \quad (1.17)$$

$$= \text{Im} \oint_C \Psi^* \cdot d\Psi + \text{Im} \oint_C d\eta(r) . \quad (1.18)$$

En allant de l'équation (1.17) à l'équation (1.18), on a utilisé le fait que $\oint_C \Psi^* \cdot \Psi$ et $\eta(r)$ est réel. L'intégrale de $d\eta(r)$ dans l'équation (1.11) disparaît puisque il est un scalaire qui est continue le long du trajet. Ainsi, il n'y a aucun changement dans la base locale à la fin d'un chemin fermé, à savoir, la base est la même au début et à la fin du chemin fermé. Nous voyons que la transformation de jauge locale qui tourne la base n'a aucun effet sur la phase géométrique.

En resumé, nous avons démontré qu'à partir d'une construction géométrique simple que la phase géométrique $\alpha(C)$ qui est égal à l'angle solide délimitée par le contour C est indépendamment de la forme de la trajectoire. Ce résultat est le fondement de la phase géométrique quantique.

1.2 Phase de Berry

1.2.1 Evolution adiabatique

Dans la description quantique d'un système physique, on a un espace d'Hilbert de dimension finie ou infinie des vecteurs d'état et un ensemble d'opérateurs linéaires agissant sur ces vecteurs. Les opérateurs linéaires sont interprétées comme les observables. Si un système quantique n'est pas isolé de son environnement, les observables sont décrits par des opérateurs qui dépendent d'un ensemble de paramètres, $\mathbf{R} = (\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_n)$. Chaque valeur de $\mathbf{R}$ caractérise une configuration particulière de l'environnement.

On considère dans ce paragraphe un système quantique décrit par un hamiltonien $H(\mathbf{R})$. Le paramètre $\mathbf{R}$ peut être le champ magnétique ou électrique appliqué ou encore toute autre quantité qui peut être contrôlée de l'extérieur. Pour chaque valeur de R , on suppose connus les états propres $|\Psi_n(R)\rangle$ de $H(R)$ et leurs énergies associées $E_n(\mathbf{R})$. Pour calculer l'évolution de l'état quantique $|\Psi(t)\rangle$, nous supposons d'une part qu'il est possible de définir une base de vecteurs propres $|n, \mathbf{R}\rangle$ de $H(\mathbf{R}(t))$ définie implicitement en chaque instant t :

$$H(\mathbf{R})|n, \mathbf{R}\rangle = E_n(\mathbf{R})|n, \mathbf{R}\rangle, \quad (1.19)$$

avec

$$\langle n, \mathbf{R} | m, \mathbf{R} \rangle = \delta_{nm}, \quad (1.20)$$

où n et m sont des nombres quantiques permettant de classer les états propres de $H(\mathbf{R})$ en chaque point $\mathbf{R}$. Nous supposons d'autre part que le spectre énergétique est discret et non dégénéré en chaque point $\mathbf{R}$. Enfin, les observables dépendantes de $\mathbf{R}$ sont prises univaluées ; ce qui veut dire que si une même valeur de $\mathbf{R}$ est rencontrée plusieurs fois en des temps différents au cours du processus d'évolution, alors les observables sont identiques pour chaque occurrence. On va chercher à déterminer l'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ du système quand le paramètre R dépend lui-même du temps. Les solutions $|\Psi(t)\rangle$ de l'équation de Schrödinger dépendant du temps vérifient :

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H(\mathbf{R}(t))|\Psi(t)\rangle . \quad (1.21)$$

A chaque instant t , on décompose le vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ sur la base des états propres instantanés de l'hamiltonien $H[\mathbf{R}(\mathbf{t})]$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n, \mathbf{R}(\mathbf{t})\rangle . \quad (1.22)$$

Les vecteurs propres $|n, \mathbf{R}(\mathbf{t})\rangle$ sont définis à un facteur de phase près, et il n'a, a priori, aucun rapport particulier entre les états propres correspondant à différentes valeurs du paramètre $\mathbf{R}$. Il peut arriver que les états propres que nous avons choisis ne soient pas des fonctions uniques de $\mathbf{R}$. Si cela se produit, une attention particulière doit être accordée à ce point.

La résolution de l'équation de Schrödinger, en tenant compte a priori de tous les coefficients $c_n(t)$, s'avère être très compliquée en pratique. Nous considérons alors une approximation moins restrictive, appelée approximation adiabatique et nous supposons que les paramètres d'environnement $\mathbf{R}$ varient lentement au cours de temps (évolution adiabatique). Dans ce cas, si le système est préparé à l'instant initial $t = 0$ dans un état propre $|m, \mathbf{R}(0)\rangle$ c.a.d.

$$c_m(0) = 1 \quad \text{et} \quad c_n(0) = 0 \quad \text{pour} \quad n \neq m , \quad (1.23)$$

selon le théorème adiabatique [26, 27], il reste indéfiniment dans le même état à chaque instant ultérieur t . Géométriquement, cela signifie que l'état propre subit un transport parallèle dans l'espace des paramètres : lorsque les paramètres R varient au cours du

temps, l'état du système change mais n'acquiert jamais de composante suivant les états de valeur propre $E_{n \neq m}$.

Afin de faire apparaître le critère de validité de l'approximation adiabatique, il semble utile de décomposer $|\Psi(t)\rangle$ sur la base des vecteurs propres de $|n, \mathbf{R}(\mathbf{t})\rangle$ en considérant d'abord tous les états $n \neq m$ et nous introduisons ensuite la condition (1.23) pour assurer l'approximation adiabatique. Alors $|\Psi(t)\rangle$ est donné par :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n, \mathbf{R}(\mathbf{t})\rangle . \quad (1.24)$$

Après avoir remplacé l'équation (1.22) dans l'équation (1.21), puis projeté sur les vecteurs $|m, \mathbf{R}(\mathbf{t})\rangle$, nous trouvons que les coefficients $c_n(t)$ sont solutions d'un système d'équations différentielles couplées :

$$i\dot{c}_m(t) = \frac{E_m(\mathbf{R}(t))}{\hbar} c_m(t) + i \sum_n c_n(t) A_{mn}(t), \quad (1.25)$$

avec

$$A_{mn}(t) = i \langle m, \mathbf{R}(t) | \frac{d}{dt} | n, \mathbf{R}(\mathbf{t}) \rangle . \quad (1.26)$$

La quantité $A_{mn}(t)$ caractérise la vitesse à laquelle tournent les vecteurs propres de $H(\mathbf{R})$. Elle peut s'exprimer à l'aide de la dérivée par rapport au temps de l'hamiltonien lui-même :

$$A_{mn}(t) = \frac{\langle m, \mathbf{R}(t) | \frac{dH(t)}{dt} | n, \mathbf{R}(\mathbf{t}) \rangle}{\hbar \omega_{n,m}(t)}, \quad (1.27)$$

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

$$\hbar \omega_{n,m}(t) = E_n[R(t)] - E_m[R(t)] . \quad (1.28)$$

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

$$n \neq m : \quad \frac{A_n}{\omega_n} = \frac{\text{vitesse angulaire maximum de } |n, R\rangle}{\text{pulsation de Bohr minimum associée à } |n, R\rangle} \ll 1 \quad (1.29)$$

Notons que cette condition exclut le cas où l'état initialement occupé $|n, R\rangle$ devient mo-

mentanément dégénéré avec un autre état $|m, R\rangle$. Quand la condition (1.29) est remplie, on peut donc supposer en bonne approximation que le système suit adiabatiquement l'état $|n, R\rangle$, c'est-à-dire qu'il reste avec une probabilité voisine de 1 dans cet état. Physiquement, l'hypothèse adiabatique signifie que la vitesse de transition entre états propres A_{mn} est petit par rapport à la fréquence de Bohr $\omega_{n,m}$. Autrement dit, les transitions entre états propres différents sont donc infiniment lentes, et en fait elles n'auront pas lieu. Dans ce cas, l'équation (1.25) se réduit à :

$$i\dot{c}_m(t) = -i \left(\frac{E_m(\mathbf{R}(t))}{\hbar} + \langle m, \mathbf{R}(t) | \frac{d}{dt} | m, \mathbf{R}(t) \rangle \right) c_m(t) . \quad (1.30)$$

L'évolution de la composante $c_n(t) = \langle n, \mathbf{R}(t) | \Psi(t) \rangle$ est donnée par l'équation (1.30) et les solutions s'écrivent :

$$c_n(t) = e^{-i \int_0^t E_n(R(t)) dt} e^{i\gamma_n(t)} . \quad (1.31)$$

En remplaçant l'équation (1.30) dans (1.24) nous trouvons finalement que

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i \int_0^t \frac{E_n(\mathbf{R}(t))}{\hbar} dt} e^{i\gamma_n(t)} |n, \mathbf{R}(0)\rangle, \quad (1.32)$$

avec

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle n, \mathbf{R}(t) | \frac{d}{dt} | n, \mathbf{R}(t) \rangle dt . \quad (1.33)$$

L'état $|\Psi(t)\rangle$ a accumulé lors de son évolution adiabatique un facteur de phase en plus de la phase dynamique habituelle $-\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t) dt$ qui apparaît même pour un système indépendant du temps (responsable du mouvement en mécanique quantique) un terme supplémentaire $\gamma_n(t)$ qui à première vue, ne semble pas physiquement pertinent et traditionnellement l'on éliminait en redéfinissant une nouvelle base de vecteurs propres en appliquant la transformation de phase $|n, \mathbf{R}\rangle \longrightarrow \widetilde{|n, \mathbf{R}\rangle} = e^{i\gamma_n(t)} |n, \mathbf{R}\rangle$. Cependant, nous allons voir par la suite, que cette phase donne lieu à des effets physiques si on fait varier les paramètres le long d'un contour fermé C dans l'espace des paramètres.

Afin de comprendre comment cette phase a été négligée pendant plus de cinquante ans, nous exposons un argument qui est donné par Fock à ce sujet : Dans une publication qui date de 1928, Fock [20] discute des fonctions propres d'un opérateur qui décrit une

quantité conservée. Il explique comment choisir leurs phases pour que leurs oscillations avec le temps doivent être minimisées. Son but est alors de minimiser l'expression suivante :

$$\left\langle \frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} \middle| \frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} \right\rangle = \min. \quad (1.34)$$

Si nous faisons une transformation de jauge de genre :

$$|\varphi_n(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} |\chi_n(t)\rangle, \quad (1.35)$$

alors, ceci conduit à

$$\left\langle \frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} \middle| \frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} \right\rangle = \dot{\gamma}^2(t) - 2i\dot{\gamma}(t) \langle \chi_n(t) | \frac{\partial \chi_n(t)}{\partial t} \rangle + \left\langle \frac{\partial \chi_n(t)}{\partial t} \middle| \frac{\partial \chi_n(t)}{\partial t} \right\rangle. \quad (1.36)$$

La conclusion de Fock est que si $|\chi_n(t)\rangle$ obéit à la condition

$$\langle \chi_n(t) | \frac{\partial \chi_n(t)}{\partial t} \rangle = 0, \quad (1.37)$$

à chaque instant t , l'équation (1.36) s'écrit :

$$\left\langle \frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} \middle| \frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} \right\rangle = \dot{\gamma}^2(t) + \left\langle \frac{\partial \chi_n(t)}{\partial t} \middle| \frac{\partial \chi_n(t)}{\partial t} \right\rangle. \quad (1.38)$$

Ici, le côté gauche de l'équation (1.38) est minimum lorsqu'il est constant dans le temps. Ainsi, si la fonction d'onde satisfait à (1.37), elle minimise l'expression (1.34) parce que, selon la dernière équation toute transformation de jauge peut être choisie. Pour une fonction d'onde arbitraire $|\varphi_n(t)\rangle$, Fock montre qu'on peut effectuer la transformation de jauge (1.35) de telle sorte que $\gamma(t)$ satisfait à

$$\dot{\gamma}(t) = -i \langle \varphi_n(t) | \frac{\partial \varphi_n(t)}{\partial t} \rangle, \quad (1.39)$$

qui à son tour garantit (1.37). Ce résultat pourrait conduire à la conclusion que la phase de la fonction d'onde dans un problème en fonction du temps peut être éliminée par la transformation donnée ci-dessus. La phase géométrique ne semble donc pas avoir de signification physique. C'était à peu près ce que tout le monde pensait depuis les travaux de Fock en 1928. Son argument a été universellement accepté et le facteur de phase

supplémentaire a été considérée sans importance. Cette erreur est probablement l'une des principales raisons pour lesquelles un tel aspect important de la mécanique quantique est resté caché pour une si longue période, jusqu'à ce que Berry [1] remarque que si l'évolution des paramètres se fait sur un cycle fermé alors la phase ne peut plus être éliminée de la même manière.

1.2.2 Evolution cyclique et phase de Berry

Nous avons montré dans la section précédente qu'il n'est pas interdit par le théorème adiabatique et l'équation de Schrödinger d'ajouter un autre facteur de phase en plus du facteur de phase dynamique habituelle. On s'intéresse maintenant à ce facteur de phase en considérant le cas particulier où les paramètres $\mathbf{R}(t)$ de l'environnement extérieur évoluent cycliquement ($\mathbf{R}$ décrit un chemin fermé C dans l'espace des paramètres) avec une période T . Nous allons d'abord tenter d'éliminer ce fameux facteur de phase et de montrer ensuite que, en général, cela est impossible. Ce terme supplémentaire peut être déterminé en insérant l'équation (1.32) dans l'équation de Schrödinger (1.21). On obtient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t}|n, \mathbf{R}(t)\rangle + i \frac{d}{dt}\gamma_n(t)|n, \mathbf{R}(t)\rangle = 0. \quad (1.40)$$

Après qu'on projette sur les vecteurs propres $\langle n, \mathbf{R}|$ (qui devrait être normalisés) nous obtenons

$$\frac{d}{dt}\gamma_n(t) = i \langle n, \mathbf{R}(t)| \frac{\partial}{\partial t} |n, \mathbf{R}(t)\rangle, \quad (1.41)$$

et après l'intégration on a

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle n, \mathbf{R}(t)| \frac{\partial}{\partial t} |n, \mathbf{R}(t)\rangle dt. \quad (1.42)$$

Pour voir l'analogie avec le problème de transport parallèle sur une surface, nous exprimons maintenant l'état transporté $|\Phi_n(t)\rangle$ en termes des états propres fixes $|n, \mathbf{R}(t)\rangle$

$$|\Phi_n(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)}|n, \mathbf{R}(t)\rangle. \quad (1.43)$$

L'état $|\Psi(t)\rangle$ donné par l'équation (1.32) devient

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i \int_0^t \frac{E_n(\mathbf{R}(t))}{\hbar} dt} |\Phi_n(t)\rangle, \quad (1.44)$$

où la phase $\gamma_n(t)$ joue le même rôle que l'angle $\alpha(t)$ pour le problème du transport sur une surface parallèle. L'utilisation de l'équation de Schrödinger (1.21), et la projection sur $\langle n, \mathbf{R} |$, nous donne

$$\langle \Psi(t) | \left(H(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) | \Psi(t) \rangle = \langle \Phi_n(t) | \dot{\Phi}_n(t) \rangle = 0, \quad (1.45)$$

où nous avons utilisé la relation $\langle \Psi(t) | H(t) | \Psi(t) \rangle = E_n(t)$ qui résulte du théorème adiabatique. L'équation (1.45) montre que la fonction d'onde $|\Phi_n(t)\rangle$ obéit à un analogue de la mécanique quantique pour la loi de transport parallèle (1.8). De même, L'équation du mouvement pour $\gamma_n(t)$ (1.42) est semblable à celle de l'angle $\alpha(t)$ donné par (1.13).

Si nous considérons maintenant une évolution cyclique autour d'un circuit fermé C pendant une période T tel que $R(0) = R(T)$, alors la phase de Berry qui est donnée par l'équation (1.42) ressemble à l'expression suivante :

$$\gamma_n(t) = i \int_0^T \langle n, \mathbf{R}(t) | \frac{d}{dt} | n, \mathbf{R}(t) \rangle dt. \quad (1.46)$$

qui peut s'écrire, compte tenu de fait que la dépendance temporelle du ket $|n, \mathbf{R}(t)\rangle$ est contenue uniquement dans le terme de vitesse $\frac{d\mathbf{R}(t)}{dt}$ et non dans la dépendance des vecteurs de bases $|n, \mathbf{R}\rangle$ par rapport à $\mathbf{R}$:

$$\gamma_n(t) = i \int_0^T \langle n, \mathbf{R}(t) | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n, \mathbf{R}(t) \rangle \frac{d\mathbf{R}}{dt} dt \quad (1.47)$$

$$= i \int_{\mathbf{R}(o)}^{\mathbf{R}(T)} \langle n, \mathbf{R}(t) | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n, \mathbf{R}(t) \rangle . d\mathbf{R} \quad (1.48)$$

$$= i \oint_C \langle n, \mathbf{R} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle . d\mathbf{R} . \quad (1.49)$$

Il est approprié pour des discussions ultérieurs et pour les considérations géométriques de reformuler cette phase. Cela peut être fait de la façon suivante :

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) . d\mathbf{R} \quad (1.50)$$

où $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ est le potentiel de la jauge donné par $\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i\langle n, \mathbf{R} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle$. Le choix du terme $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ n'est pas l'effet du hasard : la phase $\gamma_n(t)$ fait penser à la phase qu'acquiert une particule chargée se déplaçant dans un potentiel vecteur électromagnétique (effet Aharonov-Bohm) [28]. La quantité $\gamma_n(C)$ est la fameuse phase de Berry et pour l'appeler une phase, nous devons nous assurer qu'elle est un nombre réel. En effet, la normalisation de $|n, \mathbf{R}\rangle$ nous permet d'écrire :

$$\nabla_R \langle n | n \rangle = \langle \nabla_R n | n \rangle + \langle n | \nabla_R n \rangle \quad (1.51)$$

$$= \langle n | \nabla_R n \rangle^* + \langle n | \nabla_R n \rangle \quad (1.52)$$

$$= 2 \cdot \text{Re} \langle n | \nabla_R n \rangle = 0 . \quad (1.53)$$

Nous voyons alors que $\langle n | \nabla_R n \rangle$ est purement imaginaire parce que la partie réelle est égale à zéro. Par conséquent $\gamma_n(C)$ doit être réel.

La phase de Berry $\gamma_n(C)$ ne peut pas être exprimée comme une fonction de du paramètre $\mathbf{R}$, elle est donc non intégrable : Cette quantité dépend de la géométrie de la surface engendrée par la courbe dans l'espace des paramètres, mais pas de la façon dont le circuit est parcouru et elle est indépendante de la vitesse avec laquelle le traverse. Étant donné que le chemin est parcouru à une vitesse suffisamment lente pour assurer la condition de l'adiabaticité, alors la dynamique de l'évolution de ces paramètres est sans importance. Cette propriété est exactement ce que Fock n'a pas eu à l'esprit. Nous pouvons voir ceci comme une propriété géométrique du système ou de l'espace des paramètres sous-jacent et pouvons le décrire comme étant la courbure d'une connexion ou par la géométrie différentielle comme l'holonomie de transport parallèle des états propres. C'est en ce sens que la phase de Berry $\gamma_n(C)$ est d'origine purement géométrique par opposition à la phase dynamique.

Maintenant, on peut se demander si la phase de Berry est indépendante de la façon dont nous avons choisi les fonctions d'onde de référence. S'il est toujours possible d'annuler $\gamma_n(t)$ le long d'un trajet ouvert en choisissant la fonction $|n, \mathbf{R}\rangle$ de façon appropriée, il n'en va pas de même pour un circuit fermé. Pour le voir, il suffit de changer la base des états propres $|n, \mathbf{R}\rangle$ de la manière suivante :

$$\widetilde{|n, \mathbf{R}\rangle} \longmapsto e^{i\eta_n(R)} |n, \mathbf{R}(\mathbf{t})\rangle \quad (1.54)$$

où $\eta_n(\mathbf{R})$ est fonction continue univaluée de R . La connexion de Berry est alors modifiée par le gradient d'un scalaire : $\widetilde{\mathbf{A}^n(\mathbf{R})} = i\widetilde{\langle n, \mathbf{R} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle} = \mathbf{A}(\mathbf{R}) - \frac{\partial \eta_n(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}}$. Dans une intégrale sur un circuit fermé, la contribution du terme additionnel $\oint_C \frac{\partial \eta_n(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}}$ est nulle ce qui assure l'invariance de jauge de $\gamma_n(C)$. Ceci est similaire à la transformation de jauge en électromagnétisme sauf que dans notre cas, il s'agit d'un déplacement dans l'espace des paramètres $\mathbf{R}$: on peut choisir différentes jauges pour les potentiels, mais les champs ne sont pas modifiés. La phase de Berry $\gamma_n(C)$, définie modulo 2π , est une quantité invariante par rapport à tout changement de jauge, ce qui n'est pas le cas du potentiel de jauge $\mathbf{A}^n(\mathbf{R})$. Pour une évolution cyclique, on ne peut pas trouver une autre base pour éliminer la phase géométrique, ce qui a donné beaucoup d'importance à ce fameux facteur de phase [1]. Elle est donc une quantité physique intrinsèque du système et de son histoire, qui répond à la question (Par où est passé le système lors de son voyage) alors que la phase dynamique (elle aussi invariante de jauge puisqu'elle ne dépend que des valeurs propres, mais pas des états propres) fournit la réponse à l'autre question (Combien de temps a duré ce voyage).

1.2.3 Courbure de Berry

La formule donnée par (1.49) n'est pas forcément la plus pratique pour le calcul de $\gamma(C)$ parce qu'elle impose de construire en premier lieu une base $|n, \mathbf{R}\rangle$ monovaluée dans l'espace des paramètres. Comme pour le transport parallèle géométrique sur des surfaces, Berry a montré qu'on peut obtenir une expression invariante de jauge et plus transparente et contourner cette difficulté en utilisant le théorème de Stokes pour remplacer l'intégrale de ligne par une intégrale de surface $\mathbf{S}$, où $\mathbf{S}$ est une surface arbitraire ayant C pour contour. Dans ce cas, l'équation (1.49) nous permet d'écrire :

$$\gamma_n(C) = i \oint_C \langle n, \mathbf{R} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle \cdot d\mathbf{R} \quad (1.55)$$

$$= \iint_S \nabla_R \times \langle n, \mathbf{R} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle \cdot d\mathbf{S} \quad (1.56)$$

$$= \iint_S \nabla_R \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S} , \quad (1.57)$$

où $\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = \langle n, \mathbf{R} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle$ est la connexion de Berry et $\Omega_n(\mathbf{R}) = \nabla_R \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ qui est la courbure de Berry.

En physique, la connexion et la courbure sont des concepts liés, qui peut être consulté, respectivement, comme un potentiel de jauge local et un champ de jauge associée à une charge se déplaçant dans un champ magnétique. Pour les calculs explicites, il peut être utile de disposer d'une expression de $\Omega_n(\mathbf{R})$ pour laquelle l'invariance de jauge se manifeste. Pour cela, repartons de l'expression (1.55) et introduisons la relation de fermeture nous obtenons :

$$\Omega_n(\mathbf{R}) = \sum_{m \neq n} \nabla_{\mathbf{R}} \langle n, \mathbf{R} | m, \mathbf{R} \rangle \times \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle \quad (1.58)$$

la restriction sur la somme provenant du fait que l'état intermédiaire $m = n$ n'apporte aucune contribution puisque $\langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle$ est un imaginaire pur. Par ailleurs, l'équation aux valeurs propres $H|m, \mathbf{R}\rangle = E_m|m, \mathbf{R}\rangle$ nous permet d'avoir :

$$\langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle = \frac{\langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) | n, \mathbf{R} \rangle}{E_n(\mathbf{R}) - E_m(\mathbf{R})} \quad (1.59)$$

et de la même manière :

$$\nabla_{\mathbf{R}} \langle n, \mathbf{R} | m, \mathbf{R} \rangle = \frac{\langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) | n, \mathbf{R} \rangle}{E_m(\mathbf{R}) - E_n(\mathbf{R})} \quad (1.60)$$

En reportant les équations (1.59) et (1.60) dans (1.58) , alors la courbure de Berry $\Omega_n(\mathbf{R})$ a la forme suivante :

$$\Omega_n(\mathbf{R}) = \sum_{m \neq n} \frac{\langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) | m, \mathbf{R} \rangle \times \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) | n, \mathbf{R} \rangle}{[E_m(\mathbf{R}) - E_n(\mathbf{R})]^2} \quad (1.61)$$

Sous cette forme, l'invariance de jauge est manifeste puisque chaque terme de la somme est inchangé quand on modifie la phase d'un ou plusieurs états propres $|n, \mathbf{R}\rangle$. Cette expression a l'avantage qu'aucune différenciation sur la fonction d'onde n'est impliquée, par conséquent, elle peut être évaluée dans le choix de la jauge. Cette propriété est particulièrement utile pour les calculs numériques, dans lequel la condition d'un choix de phase des états propres n'est pas nécessaire dans les algorithmes de diagonalisation standard. Elle a été utilisé pour évaluer la courbure de Berry dans les cristaux avec les fonctions propres fournis à partir des calculs de premiers principes [19, 38].

L'équation (1.61) propose, en outre, un aperçu sur l'origine de la courbure de Berry.

L'approximation adiabatique est essentiellement une opération de projection, à savoir, la dynamique du système est limitée au nième niveau de l'énergie. Compte tenu de l'équation (1.61), la courbure de Berry peut être considérée comme le résultat de l'interaction résiduelle de ces niveaux d'énergie prévus au départ. En fait, si tous les niveaux d'énergie sont inclus, il résulte de l'équation (1.61) que la courbure totale de Berry disparaît pour chaque valeur de $\mathbf{R}$,

$$\sum_n \Omega_n(\mathbf{R}) = 0. \quad (1.62)$$

C'est la loi de la conservation locale de la courbure de Berry [39]. L'équation (1.61) montre également que $\Omega_n(\mathbf{R})$ devient singulière si un niveau d'énergie $\varepsilon_n(\mathbf{R})$ se rapproche de celle d'un autre niveau $\varepsilon'_n(\mathbf{R})$ pour une certaine valeur de $\mathbf{R}$. Ce point correspond à une dégénérescence d'un monopôle dans l'espace des paramètres. Lorsqu'on étudie la forme du champ autour d'une dégénérescence double c'est-à-dire si on a deux états propres $|n, \mathbf{R}\rangle$ et $|n+1, \mathbf{R}\rangle$ ayant la même énergie au point $\mathbf{R}$, on obtient [1, 40] :

$$\Omega_{n+1}(\mathbf{R}) = \frac{\mathbf{R}}{2\mathbf{R}^3} = -\Omega_n(\mathbf{R}) \quad (1.63)$$

Ce qui est bien le champ magnétique d'un monopôle de charge $-\frac{1}{2}$ dans l'espace des paramètres. Dans ce cas, la phase de Berry a deux valeurs de signes opposés également, et est donnée par l'angle solide du circuit fermé C vu par le monopôle situé en $\mathbf{R} = \mathbf{0}$: Si la phase de Berry entre dans l'expression d'une amplitude de probabilité et que l'on désire un résultat unique pour des raisons de cohérence quantique, alors on obtient une condition de quantification de Dirac.

Jusqu'ici, nous avons discuté de la situation où un seul niveau d'énergie peut être séparé dans l'évolution adiabatique. Toutefois, si les niveaux d'énergie sont dégénérés, alors la dynamique doit être projetée sur un sous-espace engendré par tous les états propres dégénérés. Wilczek [22] a montré que, dans cette situation, qu'une courbure de Berry non-abélienne s'émerge naturellement. Culcer [41] et Shindou [42] ont discuté de cette courbure dans le contexte des bandes de Bloch dégénérées.

Contrairement à la phase de Berry qui est toujours associée à une trajectoire fermée, la courbure de Berry est vraiment une quantité locale. Il fournit une description locale des propriétés géométriques de l'espace des paramètres et elle est devenue un ingrédient

physique essentiel pour comprendre une variété de propriétés électroniques. Dans ce sens, la courbure de Berry est une quantité plus fondamentale que la phase de Berry.

1.2.4 Anticipation et généralisation de la phase de Berry

Berry n'a pas été le premier à observer l'apparition d'une phase géométrique en considérant les boucles fermées dans l'espace des paramètres. En 1956 Pancharatnam [29] a découvert la phase géométrique dans le contexte de la polarisation optique. Il a discuté de l'interférence de deux faisceaux polarisés, l'un d'eux ayant été transportés autour d'une boucle fermée sur la sphère de Poincaré (l'espace des états de polarisation) par rapport à l'autre. En outre, il a été en mesure d'exprimer le résultat en termes de l'angle solide décrit par le vecteur normal le long de la boucle.

Trois ans plus tard Aharonov et Bohm [28] ont réalisé que les potentiels scalaire et vecteur électromagnétiques, qui ont été introduits dans l'électrodynamique classique pour raison de commodité seulement, sont physiquement significative dans la mécanique quantique. En revanche, la mécanique quantique repose sur le formalisme canonique, qui introduit inévitablement des potentiels dans les équations fondamentales. Bien sûr, des quantités mesurables ne peuvent pas dépendre des potentiels directement parce qu'ils sont soumis à une liberté de jauge. Aharonov et Bohm ont découvert que la fonction d'onde électronique acquiert un changement mesurable (géométrique) de phase lorsqu'elle est transportée le long d'un circuit entourée d'une ligne de flux magnétique. En termes de géométrie, le potentiel vecteur et le champ magnétique dans l'effet Aharonov-Bohm correspondent à la connexion et de la courbure, respectivement.

Dans le même temps, la phase géométrique est apparue d'une manière différente plus subtile à l'étude de l'effet Jahn-Teller dans les systèmes moléculaires. Elle se manifeste par un changement de signe de la fonction d'onde électronique au cours d'une évolution cyclique des coordonnées nucléaires autour d'une intersection conique des surfaces d'énergie potentielle. L'idée originale de Longuet-Higgins et ses collègues [30–32] a été limitée aux systèmes où les fonctions d'onde pourrait être choisi comme réelles. Par conséquent, l'interprétation d'un changement de signe d'une fonction d'onde réelle est un cas particulier d'un changement de phase d'une fonction d'onde complexe qui n'était pas évident, et la phase géométrique qui à l'origine du problème n'a pas été identifié. Il a fallu attendre

la publication de Mead et Truhlar [21] en 1979, lorsque la fonction d'onde électronique causée par le changement de signe a été résolue par l'introduction d'un potentiel vecteur. Ce potentiel vecteur semblait provenir d'une ligne de flux magnétique fictif à l'emplacement de l'intersection conique de deux niveaux d'énergie dans l'espace des paramètres de coordonnées nucléaires. En raison de cette analogie, ce phénomène est appelé l'effet Aharonov Bohm moléculaire. En fait, cette méthode introduit les phases géométriques comme une généralisation de l'approximation de Born Oppenheimer dans les molécules si l'on tient compte que les noyaux se déplacent lentement.

Berry [1] a le mérite d'avoir apprécié pleinement l'importance universelle au facteur de phase, pour montrer que chaque fois qu'une approximation adiabatique est appliquée, nous pouvons nous attendre à une phase géométrique qui se manifeste. Il a étudié la phase géométrique en posant certaines hypothèses : les états propres, qui sont non dégénérés, évoluent de manière adiabatique sur un cycle fermé dans l'espace des paramètres. Mais l'intérêt de la phase de Berry ne se limite pas à ces approximations.

Immédiatement, Simon a donné une interprétation géométrique simple de la phase de Berry en terme d'holonomie [33] ; en effet, l'évolution adiabatique du système le long de la courbe fermée est analogue à un transport parallèle d'un vecteur d'état le long de la sphère. Après une période, le vecteur revient à son point de départ mais déphasé par rapport au vecteur initial. Ce déphasage est proportionnel à l'angle solide enfermé par la courbe fermée. La phase de Berry qui résulte est alors une conséquence de la courbure sur une connexion.

Toutefois, lorsque l'état est dégénéré au cours complet de son évolution, le système n'a pas besoin de revenir à l'état propre d'origine, mais seulement à l'un des états dégénérés. Wilczek et Zee [22] ont observé que la phase accumulée pour le cas d'une dégénérescence globale, c'est-à-dire que l'état étudié est N fois dégénéré tout au long de son évolution, après un tour il finira dans un de ces états dégénérés. La phase accumulée est alors une matrice $U(N)$, et on parle de phase de Berry non abélienne.

Une autre importante généralisation de la phase de Berry, ce qui a récemment provoqué un grand intérêt, est la phase d'Aharonov et Anandan [23]. Ils ont généralisé les résultats de Berry en abandonnant l'hypothèse de l'adiabaticité. Ainsi, l'ingrédient essentiel nécessaire pour définir une phase géométrique est le chemin fermé dans des paramètres R . L'adiabaticité qui garantit l'existence d'un tel trajet est la condition suffisante mais

pas nécessaire. Cependant, il est possible de calculer et détecter la phase d’Aharonov-Anandan. Un modèle simple pour le calcul de la phase, dans le cas non adiabatique, est le comportement d’un moment magnétique quantique dans une précession de champ magnétique autour d’un axe fixé [34]. Ceci a été résolu exactement et mesuré directement dans des expériences de résonance magnétique [35]. La découverte de cette phase a permis de prolonger le champ d’application de la phase de Berry [1] ; elle peut montrer, par exemple, le lien qui existe avec l’effet d’Aharonov-Bohm même que celui-ci devrait émerger de la phase de Berry indépendamment de l’approximation adiabatique [23].

Samuel et Bhandari [24] montrent même l’importance des phases géométriques dans le cas de chemin ouverts. Ils soulignent qu’il y a un moyen naturel de fermer un chemin ouvert en rejoignant les extrémités avec des géodésiques si on donne une métrique invariante de jauge sur l’espace de Hilbert projectif. La phase géométrique obtenue est indépendante du choix de géodésique. Il a une belle interprétation physique : quand les états initiaux et finaux sont en phase, alors la norme de la somme des deux états atteint un maximum. Cela rappelle fortement la connexion de Pancharatnam, qui permet de comparer les phases relatives des faisceaux de lumière en très différents états de polarisation, et pas seulement ceux à proximité. Il est alors, difficile d’imaginer quelque chose de plus général que la phase géométrique de Samuel et Bhandari, qui s’applique à tout type d’une évolution quantique.

Mais l’intérêt de la phase de Berry ne se limite pas à la mécanique quantique. Il existe un analogue en mécanique classique [36] , appelé angle de Hannay [37]. Cette correspondance classique de la phase de Berry peut apparaître dans n’importe quel système classique décrit par des variables action-angle, en réponse à la variation adiabatique de l’hamiltonien. Pour les systèmes intégrables, l’angle de Hannay n’est qu’un décalage supplémentaire pris par les variables d’angle du système classique quand les paramètres de ce dernier subissent une modification adiabatique le long d’un circuit fermé dans l’espace des paramètres.

1.3 Effet de la phase de Berry dans un solide

La notion de la phase du Berry est maintenant devenu un concept central d'unification dans la mécanique quantique, avec des applications dans plusieurs domaines et particulièrement en physique de la matière condensée [7, 8, 19, 38, 43–45]. Un des premiers résultats dans cette direction est dû à Zak [3] qui a noté que certaines phases non-Intégrables de la fonction d'onde de Bloch pourraient être identifiées comme phase géométrique.

Les deux propriétés électromagnétiques de base pour les solides sont la polarisation électrique et l'aimantation orbitale, qui peut exister en l'absence de champs électriques et magnétiques dans les matériaux ferroélectriques et ferromagnétiques. Ces deux quantités ne peuvent pas être déterminées à partir de la charge et des densités de courant dans un cristal. Une percée sur la polarisation électrique a été faite dans les années 90 en la reliant avec le phénomène de transport de charge adiabatique et de l'exprimer en termes de phase de Berry à travers la zone de Brillouin [4, 5]. Sur la base de la formule de la phase de Berry, on peut maintenant calculer systématiquement les propriétés de polarisation en utilisant des procédés de premiers principes, avec une grande précision en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité [46, 47]. Par contre l'interprétation de l'aimantation orbitale s'est développée récemment, montrant qu'elle ne consiste pas seulement à définir des moments orbitaux des quasi-particules, mais contient également une contribution due à la courbure du Berry d'origine topologique [6, 10, 48]. Elle a été aussi plus tard employée pour développer une méthode pratique pour calculer les propriétés piézoélectriques, ferroélectriques et diélectriques.

Les phases géométriques pour des ondes de Bloch peuvent également affecter la dynamique semi-classique des électrons dans les métaux et les semi-conducteurs [7, 49] et avoir des applications importantes comme dans la théorie de l'effet Hall de spin et de l'effet Hall anormal [8, 44]. Plus spectaculairement, la quantification de la conductibilité de Hall découverte dans les systèmes d'électrons bidimensionnels peut être identifiée comme la manifestation de certaines phases géométriques [50–52]. Un exemple classique est la vitesse anormale qui peut aussi être comprise comme étant due à la courbure du Berry des états de Bloch, qui existe en l'absence de champs extérieurs. Lorsqu'un champ électrique est appliqué au système, la théorie semi-classique peut expliquer le courant de Hall et la quantification de la conductivité du Hall [53, 54]. Au cours des dernières années, il a aidé à

résoudre le mystère de l'effet Hall anormal dans les matériaux ferromagnétiques [8,9]. Dans les systèmes optiques, la courbure de Berry est liée à un décalage transversal d'un faisceau lumineux reflété par une interface [55–57]. Sa direction dépend de la polarisation circulaire du rayon incident. Ceci s'appelle effect Hall optique, ou l'effet Imbert-Federov [58,59]. Une étude plus détaillée du transport optique impliquant la notion de la phase du Berry peut être trouvée dans les références [60–62]. Au niveau microscopique, le formalisme a été reproduit pour le transport de la lumière dans les cristaux photoniques, où les effets de la phase de Berry associés sont largement exposés dans des expériences [63]. La courbure de Berry est une propriété intrinsèque des états électroniques. Elle apparaît non seulement au niveau quantique, mais également dans la théorie semi-classique de la dynamique des électrons du Bloch qui est l'objet de troisième chapitre. Nous verrons que la plupart de ces effets peuvent être compris dans un langage unifié de cette théorie semi-classique.

1.3.1 La phase de Berry et les bandes de Bloch

Nous allons introduire le concept de base de la phase de Berry dans les solides cristallins qui a été mis en application, pour la première fois, par Zak [3]. Dans l'approximation des électrons indépendants, la structure de bande d'un cristal est déterminée par l'hamiltonien pour un seul électron :

$$\left[\frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.64)$$

où $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ est le potentiel périodique et $\mathbf{R}$ le paramètre du réseau de Bravais. On appliquant le théorème de Bloch, la fonction d'onde $\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ pour un seul électron peut s'écrire

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.65)$$

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.66)$$

Les états propres satisfont la condition aux limites suivantes :

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \exp^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.67)$$

où n est l'indice de bande et $\mathbf{k}$ est moment cristallin qui marque les conditions aux limites dans la zone du Brillouin. On exploite la symétrie de translation pour réduire notre problème à l'espace d'Hilbert pour une cellule unitaire au lieu de celle de l'ensemble du cristal. Cela nous conduit à une multitude d'espaces d'Hilbert en raison de la dépendance en $\mathbf{k}$ pour les conditions aux limites sur une cellule unité. Avec l'aide de la transformation unitaire (1.65), par laquelle on obtient des conditions aux limites $\mathbf{k}$ -dépendante (1.66) et d'autre part une dépendance en $\mathbf{k}$ qui est introduite comme paramètre dans la transformation unitaire sur l'hamiltonien nous permet d'obtenir :

$$H(\mathbf{k}) = \exp^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} H \exp^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (1.68)$$

$$H(\mathbf{k})u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.69)$$

$$\left[\frac{1}{2m} (\mathbf{P} + \hbar\mathbf{k})^2 + V(\mathbf{r}) \right] u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.70)$$

Ainsi le nouveau hamiltonien transformé dépend du paramètre $\mathbf{k}$ et tous les états propres résident dans le même espace de Hilbert. On peut ainsi identifier la zone de Brillouin comme l'espace des paramètres pour l'hamiltonien transformée $H(\mathbf{k})$ et $\mathbf{k}$ en tant que fonction de base. Étant donné que la dépendance en $\mathbf{k}$ de la fonction de base est inhérente au problème de Bloch, divers effets de la phase de Berry sont apparus dans les cristaux. Par exemple, si on fait varier le moment $\mathbf{k}$ dans l'espace des vecteurs d'ondes, l'état de Bloch va accueillir une phase de Berry :

$$\gamma_n = i \oint_c d\mathbf{k} \cdot \langle u_{n,\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (1.71)$$

où la connexion de Berry et sa courbure sont données par :

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = i \langle u_{n,\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle \quad , \quad \mathbf{\Omega}_n(\mathbf{k}) = i \langle \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} | \times | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (1.72)$$

Nous soulignons que le chemin C doit être fermé pour faire évaluer une quantité invariante de la jauge pour avoir une signification physique. D'une manière générale, il ya deux façons de générer un chemin fermé dans l'espace des moments. On peut appliquer un champ magnétique, qui induit un mouvement cyclotron le long d'une orbite fermée dans l'espace des $\mathbf{k}$. De cette façon, la phase de Berry peut se manifester dans différents effets magnéto-

oscillant [64], qui ont été observés dans le composé métallique [65], et plus récemment dans le graphène [66–68]. On peut également appliquer un champ électrique pour provoquer une variation linéaire en $\mathbf{k}$. Dans ce cas, un chemin fermé est réalisé lorsque $\mathbf{k}$ balaie la zone de Brillouin.

Un aperçu peut être obtenu à partir de quelques manipulations simples sur l'équation de Schrödinger. Imaginons une fonction d'onde dans un cristal soumis à un champ électrique

$$\left[\frac{1}{2m} (\mathbf{P} + \hbar \mathbf{k})^2 + V(\mathbf{r}) - e\Phi(\mathbf{r}, t) \right] u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t), \quad (1.73)$$

où $\Phi(\mathbf{r}, t)$ est le potentiel scalaire. Maintenant, nous effectuons une transformation de jauge

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \longrightarrow \exp \left(\frac{ie}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \Phi(\mathbf{r}, t') \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t). \quad (1.74)$$

L'équation (1.73) change en conséquence :

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} + \hbar \mathbf{k} + e \int_{t_0}^t dt' E(\mathbf{r}, t') \right)^2 + V(\mathbf{r}) \right] u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \quad (1.75)$$

$$\left[\frac{1}{2m} [\mathbf{P} + \hbar (\mathbf{k} + \Delta \mathbf{k})]^2 + V(\mathbf{r}) \right] u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \quad (1.76)$$

$$\hbar \Delta \mathbf{k} = -e \int_{t_0}^t dt' E(\mathbf{r}, t'). \quad (1.77)$$

Dans cette équation, on interprète l'effet du champ électrique comme un changement de $\mathbf{k}$, c'est à dire, un changement dans les conditions aux limites de la fonction d'onde réelle. De cette façon, le champ électrique est rien de plus qu'une variable externe qui ne pénètre pas dans l'équation de Schrödinger directement, mais seulement par l'intermédiaire du paramètre $\Delta \mathbf{k}$ et donne lieu à la phase de Berry. La courbure de Berry $\Omega_n(\mathbf{k})$ est une propriété intrinsèque de la structure de bande, car elle ne dépend que de la fonction d'onde. Elle est différente de zéro dans une large gamme des matériaux, en particulier, dans les cristaux avec brisure de symétrie de renversement de temps. En fait, une fois que nous avons introduit le concept de la courbure de Berry, une boucle fermée n'est pas nécessaire parce que la courbure de Berry elle-même est une quantité localement invariante de jauge.

1.3.2 Polarisation électrique

La polarisation électrique est l'une des grandeurs fondamentales de la physique de la matière condensée, indispensable à toute description des phénomènes diélectriques de la matière. Malgré son importance, la théorie de la polarisation dans les cristaux a été mal exprimée. La difficulté principale réside dans le fait que dans les cristaux la distribution de charge est périodique dans l'espace, par conséquent l'opérateur dipôle électrique n'est pas bien défini. Cette difficulté est plus apparente dans les solides covalents, où les charges d'électrons sont distribuées d'une façon continue entre les atomes. Dans ce cas, une simple intégration de la densité de charge donne des valeurs arbitraires en fonction du choix de la cellule de l'unité [69]. Ces problèmes sont résolus par la suite par une théorie moderne de polarisation [4, 5]. Une observation essentielle apportée par Resta [4] est que même si la valeur de la polarisation $\mathbf{P}$ est mal exprimée, sa variation est bien définie. Ensuite, King-Smith et Vanderbilt [5] ont signalé que la polarisation $\mathbf{P}$ a un lien profond avec la phase de Berry des états électroniques. La description de leur théorie est basée sur les états à une particule. Cependant, le même schéma s'applique aux véritables solides avec des interactions électroniques en remplaçant les états à une particule par les orbitales de Kohn et Sham dans la théorie de la fonctionnelle de la densité. La reformulation de la théorie de polarisation en termes de la phase de Berry a eu beaucoup de succès ces dernières années dans les études des matériaux diélectriques et ferroélectriques.

Pour pallier à l'ambiguïté dans le calcul de la polarisation des systèmes périodiques, Vanderbilt et Resta ont développé une théorie moderne de la polarisation. Leur approche fait appel au fait qu'un changement dans la polarisation est un mouvement de charges et crée donc un courant. Soit λ le déplacement d'ions. Il varie de 0 à 1 quand les ions se déplacent d'une façon adiabatique d'un état initial à un état final. La variation de la polarisation entre ces deux états est donnée par $\int_0^1 d\lambda d\mathbf{P}/d\lambda$, où

$$\mathbf{P}(\lambda) = \frac{q}{V} \sum_i \langle \Phi_i | \mathbf{r} | \Phi_i \rangle. \quad (1.78)$$

La sommation s'étend sur tous les états de Bloch occupés $\Phi_i(\lambda)$ et V est le volume du cristal. Pour un cristal infini, la valeur moyenne de $\mathbf{r}$ est mal définie. Par conséquent, nous considérons un système fini au départ, et lorsque $V \rightarrow \infty$ l'expression mathématique

devient bien définie. Les états de Bloch sont des solutions de l'équation de Schrödinger,

$$H_\lambda |\Phi_i\rangle = \left(\frac{p^2}{2m} + V_\lambda \right) |\Phi_i\rangle = \epsilon_i |\Phi_i\rangle, \quad (1.79)$$

où V_λ est le potentiel du cristal. A partir de l'équation (??), il n'est pas difficile de montrer que, pour $j \neq i$, on a

$$(\epsilon_i - \epsilon_j) \langle \Phi_j | \frac{\partial \Phi_i}{\partial \lambda} \rangle = \langle \Phi_j | \frac{\partial V_\lambda}{\partial \lambda} | \Phi_i \rangle. \quad (1.80)$$

Par conséquent,

$$\frac{d\mathbf{P}}{d\lambda} = \frac{q}{V} \sum_i \sum_{i \neq j} \left[\langle \Phi_i | \mathbf{r} | \Phi_j \rangle \frac{\langle \Phi_j | \mathbf{V}_\lambda | \Phi_i \rangle}{(\epsilon_i - \epsilon_j)} + c.c. \right] \quad (1.81)$$

On peut convertir les éléments de matrice $\mathbf{r}$ à ceux de $\mathbf{p}$:

$$\langle \Phi_i | \mathbf{r} | \Phi_j \rangle = \frac{i\hbar}{m} \frac{\langle \Phi_i | \mathbf{p} | \Phi_j \rangle}{(\epsilon_j - \epsilon_i)} \quad (1.82)$$

A l'aide de cette identité, l'équation (??) s'écrit

$$\frac{d\mathbf{P}}{d\lambda} = \frac{q\hbar}{imV} \sum_i \sum_{i \neq j} \left[\frac{\langle \Phi_i | \mathbf{p} | \Phi_j \rangle \langle \Phi_j | \mathbf{V}_\lambda | \Phi_i \rangle}{(\epsilon_i - \epsilon_j)^2} - c.c. \right] \quad (1.83)$$

Maintenant tous les éléments de la matrice sont bien définis et le volume V peut être infini. Après l'intégration par rapport à λ , la résultante $\Delta\mathbf{P}$ est sans ambiguïté, même pour un solide covalent et infini. Les états de Bloch sont marqués par $i = (m, \mathbf{k})$ et $j = (n, \mathbf{k})$, n et m sont les indices de la bande et $\mathbf{k}$ est le moment du Bloch défini dans la première zone de Brillouin. L'équation (??) peut être transformée en une forme très élégante, révélant sa liaison avec la courbure de Berry [5]. On définit un $\mathbf{k}$ -dépendant hamiltonien, $\tilde{H} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. C'est l'hamiltonien de la fonction périodique $u_{n\mathbf{k}}$. Il est alors facile de montrer que

$$\langle \Phi_{m\mathbf{k}} | \mathbf{p} | \Phi_{n\mathbf{k}} \rangle = \frac{m}{\hbar} \langle u_{m\mathbf{k}} | \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}, \tilde{H} \right] | u_{n\mathbf{k}} \rangle = \frac{m}{\hbar} (\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{m\mathbf{k}}) \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}. \quad (1.84)$$

A l'aide de cette équation et d'une autre très similaire à l'équation (??) (il suffit de

remplacer l'état Φ_i par u_i), nous obtenons finalement ($\alpha = x, y, z$)

$$\frac{d\mathbf{P}_\alpha}{d\lambda} = -\frac{iq}{V} \sum_{n\mathbf{k}} \left(\left\langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} \middle| \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \lambda} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \lambda} \middle| \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha} \right\rangle \right) \quad (1.85)$$

$$= -\frac{q}{V} \sum_{n\mathbf{k}} \Omega_{k_\alpha\lambda}^n(\mathbf{k}), \quad (1.86)$$

où

$$\Omega_{k_\alpha\lambda}^n = \left\langle \frac{\partial u}{\partial k_\alpha} \middle| \frac{\partial u}{\partial \lambda} - c.c. \right\rangle, \quad (1.87)$$

est la courbure de Berry pour la n^{ieme} bande dans l'espace des paramètres k_α et λ . Finalement, on peut intégrer entre deux valeurs de λ et sommer sur la contribution de toutes les bandes occupées ce qui donne la formule de Vanderbilt et Resta [5]

$$\Delta\mathbf{P} = \mathbf{P}(\lambda_f) - \mathbf{P}(\lambda_i) \quad \text{avec} \quad \mathbf{P}(\lambda) = \frac{2i}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d\mathbf{k} \sum_{n=1}^{n_b} \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_k | u_{n\mathbf{k}} \rangle. \quad (1.88)$$

Ceci définit une valeur effective de la contribution des électrons à la polarisation $\mathbf{P}$. A priori, cette formule permet de connaître la différence de polarisation entre deux états et non la polarisation absolue d'un état. Pour avoir accès à la polarisation absolue d'un état, il faut prendre la différence avec la polarisation effective d'un état possédant une symétrie d'inversion (polarisation nulle), ou réintroduire la contribution des ions.

Prenons un système unidimensionnel comme exemple. En supposant que la constante de réseau est a , alors la variation de la polarisation est

$$\Delta\mathbf{P} = \frac{e}{2\pi} \sum_n \int_0^{\frac{2\pi}{a}} dk \int_0^1 d\lambda \Omega_{k\lambda}^n \quad (1.89)$$

Le domaine de l'intégration est un rectangle avec des longueurs 1 et $\frac{2\pi}{a}$ de chaque côté. La zone d'intégration peut être convertie en une intégrale curviligne autour de la limite du rectangle, ce qui donne la phase de Berry γ_n pour une telle boucle. Par conséquent,

$$\Delta\mathbf{P} = e \sum_n \frac{\gamma_n}{2\pi} \quad (1.90)$$

Dans le cas particulier où l'état final de la déformation V_1 est le même que l'état initial

V_0 , la phase de Berry ne peut être que des multiples entiers de 2π [5].

Les développements récents dans ce domaine se divisent en deux catégories : Sur le plan du calcul, la polarisation dans des champs électriques finis a été abordée, et elle a une forte influence sur la théorie fonctionnelle de la densité dans les systèmes étendus [46]. Elle est mise en application comme option standard dans la plupart des codes ab-initio pour le calcul des structures électroniques, qui a révolutionné la théorie des matériaux ferroélectriques et piézoélectriques [70, 71]. Sur le plan théorique, Resta [72] a proposé un opérateur de position en mécanique quantique pour les systèmes étendus. Il a montré que la valeur moyenne d'un tel opérateur peut être utilisée pour caractériser la transition de phase entre le métal et les états d'isolation [73] et est étroitement liée au phénomène de localisation d'électrons.

1.3.3 Magnétisation orbitale

Aujourd'hui, il est bien connu que le magnétisme dans les atomes et molécules provient de deux sources distinctes liées à la mécanique quantique : le moment magnétique de spin et le moment magnétique orbital des électrons. Des théories rigoureuses pour les deux parties existent à plusieurs niveaux et, par conséquent, le calcul des moments magnétiques des atomes et des molécules est devenu une procédure standard. La situation est similaire dans les solides ; une quantité étroitement liée au moment magnétique est l'aimantation orbitale dans un cristal. Elle est non nulle pour une brisure de symétrie de renversement du temps, ce qui peut se produire spontanément dans les matériaux ferromagnétiques et ferrimagnétiques, ou peut être induite dans un matériau non magnétique par un champ magnétique appliqué. Bien que ce phénomène soit connu depuis longtemps, notre compréhension de l'aimantation orbitale dans les cristaux est restée dans un stade primitif. En fait, il n'y avait pas moyen de calculer cette quantité. La difficulté principale est exactement la même pour le calcul de la polarisation électrique : le dipôle magnétique n'est pas défini dans un système périodique. Pour un cristal magnétique, le moment orbital est donné par :

$$\mathbf{m}_{orb} = \frac{-e}{2c} \sum_n f_n \langle \Psi_n | \mathbf{r} \times \mathbf{v} | \Psi_n \rangle, \quad (1.91)$$

où c est la vitesse de la lumière, e la charge électrique et f_n le nombre d'occupation. L'aimantation $\mathbf{M}_{orb}$ peut alors être définie comme le moment magnétique par unité de

volume

$$\mathbf{M}_{orb} = \frac{\mathbf{m}_{orb}}{V} = \frac{-e}{2cV} \sum_n f_n \langle \Psi_n | \mathbf{r} \times \mathbf{v} | \Psi_n \rangle. \quad (1.92)$$

En écrivant cette expression en termes des fonctions de Bloch

$$\mathbf{M}_{orb} = \frac{-e}{2c} \sum_n \int_{ZB} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \mathbf{r} \times \mathbf{v} | \Psi_{n\mathbf{k}} \rangle, \quad (1.93)$$

et comme ces fonctions sont étendues, l'élément de matrice de l'opérateur position $\mathbf{r}$ est mal défini et en conséquence l'équation ci-dessus ne conduit pas à une définition rigoureuse de la magnétisation orbitale. Si on essaye de résoudre le problème en changeant simplement la base des états du Bloch par une autre base plus localisée, cela seul ne donne pas de solution. En outre, les méthodes des réponses linéaires existent pour les systèmes périodiques qui contournent le problème d'une autre manière, mais ne permettent que le calcul des variations d'aimantation et non l'aimantation elle-même [74]. Une formulation générale et exacte de la théorie de l'aimantation orbitale a été développée par Thonhauser [6], basée sur une dérivation de la représentation de Wannier où la phase du Berry joue un rôle important. Ici nous donnons quelques notes essentielles pour cette approche et nous renvoyons le lecteur aux références [75, 76] pour plus du détail.

Pour formuler cette aimantation orbitale, nous nous limitons à des solides isolés, décrits par un hamiltonien à une particule avec brisure de la symétrie de renversement du temps. Nous commençons en considérant un échantillon fini, que nous allons ensuite faire tendre jusqu'à ce qu'il devienne un solide périodique. L'aimantation orbitale de l'échantillon fini peut être calculée en utilisant l'équation (1.92). Comme les fonctions de Wannier sont localisées d'une façon exponentielle, l'élément de matrice de l'opérateur position $\mathbf{r}$ est maintenant bien défini. Mais, l'équation (1.92) n'entraîne pas l'aimantation orbitale totale, elle correspond à la contribution de la circulation locale $\mathbf{M}_{orb}^{LC}$ (la circulation résultant d'une fonction de Wannier qui tourne autour de son centre).

$$\mathbf{M}_{orb}^{LC} = \frac{-e}{2cV_0} \langle 0 | \mathbf{r} \times \mathbf{v} | 0 \rangle \quad (1.94)$$

La partie manquante à l'aimantation provient de la contribution itinérante de surface. Pour trouver cette contribution manquante, nous devons calculer le courant de la surface causée par la circulation itinérante. Le courant de surface donne évidemment une

contribution supplémentaire à l'aimantation qui est donnée par

$$\mathbf{M}_{orb}^{IC} = \frac{-e}{2cV} \sum_n \mathbf{r}_n \times \langle \Psi_n | \mathbf{r} \times \mathbf{v} | \Psi_n \rangle \langle 0 | \mathbf{r} \times \mathbf{v} | 0 \rangle \quad (1.95)$$

En utilisant des conditions aux limites adaptées au système et la symétrie de translation, la composante $\mathbf{M}_{orb,z}^{LC}$ du moment magnétique correspondant alors devient enfin

$$\mathbf{M}_{orb,z}^{IC} = \frac{-e}{2cV} \text{Im} \sum_R \langle R_x | \mathbf{r}_y | 0 \rangle \langle 0 | H | R \rangle - R_y \langle R | \mathbf{r}_x | 0 \rangle \langle 0 | H | R \rangle \quad (1.96)$$

où plus généralement

$$\mathbf{M}_{orb}^{IC} = \frac{-e}{4cV} \sum_R \mathbf{R} \times \mathbf{v}_{\langle 0, R \rangle} \quad (1.97)$$

exprimant clairement aussi la contribution itinérante comme une propriété du volume. Les deux contributions $\mathbf{M}_{orb}^{IC}$ et $\mathbf{M}_{orb}^{LC}$ peuvent être toutes les deux converties dans l'espace de la représentation de Bloch. Avec la définition des fonctions de Wannier en termes de la partie périodique de la fonction de Bloch

$$|\mathbf{R}\rangle = \frac{V_0}{(2\pi)^3} \int d^3k \exp^{ik \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R})} |u_k\rangle, \quad (1.98)$$

le résultat principal devient, après un simple calcul d'algèbre

$$\mathbf{M}_{orb} = \mathbf{M}_{orb}^{LC} + \mathbf{M}_{orb}^{IC} = \frac{e}{2\hbar c} \text{Im} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \langle \partial_K u_K | \times | (H_K + E_K) | \partial_K u_K \rangle \quad (1.99)$$

L'équation (1.99) est le résultat principal de cette section. Il donne l'aimantation orbitale d'un solide en termes d'une intégrale de la zone de Brillouin sur des quantités bien comprises. Même dans l'expression finale, les deux contributions correspondantes se distinguent clairement. La contribution de la surface peut être écrite comme :

$$\mathbf{M}_{orb}^{IC} = \frac{-e}{4cV} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} E_K \boldsymbol{\Omega}_K \quad (1.100)$$

où $\boldsymbol{\Omega}_K = \boldsymbol{\nabla}_K \times \mathbf{A}_K$ est la courbure de Berry et $\mathbf{A}_K$ est la connexion de Berry révélant la relation sous-jacente avec la théorie de la phase de Berry. Les deux parties de l'équation (1.99) sont invariantes du jauge individuellement et elles sont donc, en principe, observables séparément par une combinaison de mesures magnéto mécaniques.

1.3.4 L'effet Hall anormal

Dans les matériaux magnétiques, la résistivité de Hall présente une contribution supplémentaire, proportionnelle à l'aimantation M :

$$\rho_H = R_0 B + 4\pi R_s M. \quad (1.101)$$

Le premier terme, proportionnel au champ magnétique B , décrit l'effet Hall normal tandis que le deuxième terme, proportionnel à l'aimantation M décrit l'effet Hall anormal, la composante R_s dépend du matériau considéré. L'origine physique de ces deux contributions est distincte : l'effet Hall normal est dû à la force de Lorentz tandis que l'effet Hall anormal résulte de la présence simultanée du couplage spin-orbite et d'une polarisation de spin. Pour différentes raisons, il y a actuellement un regain d'intérêt pour l'effet Hall anormal. Ce n'est pas seulement lié au développement des études de transport dépendant du spin mais aussi du fait des comportements intéressants de la résistivité de Hall anormale observée dans les films magnétiques [77] et les multicouches [78–80]. Des théories ont été développées afin d'expliquer l'effet Hall anormal. Deux mécanismes conduisant à l'effet Hall anormal ont été identifiés ; les mécanismes extrinsèques, basés sur la diffusion des porteurs de charges par des impuretés ou des défauts et les mécanismes intrinsèques dans lesquels le concept de phase de Berry joue un rôle important qui est notre objet de discussion de ce paragraphe.

Le mécanisme de l'effet Hall anormal est un problème énigmatique depuis sa découverte, et il dure depuis près d'un siècle. Il implique des notions profondément liés à la topologie et à la géométrie qui ont été formulées uniquement au cours des dernières années après que la phase de Berry a été reconnue . En 1954 Karplus et Luttinger [54] fournissent une première étape dans le décryptage de ce problème. Ils ont montré que les électrons mobiles peuvent avoir une contribution supplémentaire à la vitesse de groupe lorsqu'un champ électrique externe est appliqué. Ce terme supplémentaire, surnommé "la vitesse anormale," auxquels contribuent tous les états occupés dans les conducteurs avec couplage spin-orbite, peut être non nul et conduit à l'effet Hall anormal. Par conséquent, cette contribution ne dépend que de la structure de bande parfaite de l'hamiltonien périodique et est complètement indépendante de la diffusion des impuretés ou de défauts (donc appelé AHE intrinsèque). Karplus et Luttinger n'ont pas compté que leur théorie

soit la réponse finale pour décrire correctement l'effet Hall anormal pour la raison que le courant qu'ils ont trouvé n'était pas une mesure invariante de jauge, et ne pourrait pas décrire ainsi l'observable réelle. Ils ont précisé, cependant, que l'importance de l'expression trouvée et sa dépendance à l'égard de la concentration d'impureté avait une bonne concordance avec des résultats des mesures expérimentales, en proposant que l'interaction spin-orbite et la magnétisation doivent être les forces responsables de l'effet. Ce fait a eu du mal à être largement accepté avant que le concept de la phase de Berry ne soit bien établi.

Coordonnées non-commutatives

L'approche semi-classique, basée sur la préparation d'un paquet d'ondes pour les états de la même bande, ne peut donner des bonnes résultats quand le champ électrique est appliqué. Puisque le champ électrique mélange des états de différentes bandes, une partie de paquet d'ondes libre commence par des oscillations rapides par rapport aux autres parties. Un tel paquet d'onde ne répond pas aux critères de base d'être un objet classique parce qu'il se compose de plusieurs parties avec des fréquences d'oscillation fortement différentes. La résolution de ce problème a été suggérée la première fois par Adams et Blount [81]. La partie non-diagonale de l'hamiltonien dû au champ électrique peut être considérée comme champ périodique qui modifie les fonctions d'ondes de Bloch. Ainsi on peut choisir une autre base des états de Bloch, dans laquelle le terme dû au champ électrique n'a aucun élément de matrice qui mélangent les bandes. À l'ordre linéaire dans le champ électrique $\mathbf{E} = \mathbf{E}_x x$, la partie périodique des états de Bloch modifiés s'écrit :

$$|u_{n\mathbf{k}}\rangle' = |u_{n\mathbf{k}}\rangle + ie\mathbf{E}_x \sum \frac{\langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \rangle}{\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{m\mathbf{k}}} |u_{m\mathbf{k}}\rangle \quad (1.102)$$

Alors à $t = 0$ on peut préparer un nouveau paquet d'ondes

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^D k}{L^{D/2}} a(\mathbf{k}) \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})] |u_{n\mathbf{k}}\rangle' \quad (1.103)$$

qui ne couple pas tout de suite les différentes composantes d'oscillation en présence de champ électrique externe. Il est maintenant facile de calculer la vitesse du paquet d'ondes dans la direction transversale au champ électrique. Soit E_x le champ électrique dans la

direction x et $H = H_0 + eE_x x$ l'hamiltonien du système en présence de ce champ. Alors le paquet d'ondes évolue d'une façon que

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = e^{-iHt} \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.104)$$

La vitesse transversale est calculée de la manière suivante :

$$\begin{aligned} v_y &= \frac{d}{dt} \langle \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) | y | \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle u_{n\mathbf{k}} | -i \left[i \frac{\partial}{\partial k_y}, H_0 \right] | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{\partial \epsilon_{n\mathbf{k}}}{\partial k_y} + ieE_x \left(\langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_y} | \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_x} \rangle - \langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_x} | \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_y} \rangle \right) \\ &= \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_y} - eE_x F_z^n \end{aligned} \quad (1.105)$$

où $\mathbf{F}^n$ est la courbure de Berry de la bande de Bloch avec l'index n et

$$F_z^n = \text{Im} \left(\langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_y} | \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_x} \rangle - \langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_x} | \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_y} \rangle \right) \quad (1.106)$$

est sa composante suivant la direction z . Le premier terme dans l'équation (1.105) est juste la vitesse habituelle qui égale la partie diagonale de l'opérateur vitesse, alors que le reste de l'expression s'appelle la vitesse anormale. Cette contribution anormale est finalement responsable de l'effet Hall anormal.

Il y a parfois un malentendu au sujet de la façon dont les coordonnées noncommutative apparaissent dans la théorie. Parfois on affirme simplement que ceci apparait après la transformation unitaire sur les observables quantiques qui décrivent les états de Bloch. Naturellement, ceci n'est pas vrai parce que la transformation unitaire seule ne peut rendre ces opérateurs noncommutatifs. La raison est plus profonde : Dans la base standard des états de Bloch avec la partie périodique $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ qui diagonalise l'opérateur H_0 , l'opérateur position a la forme suivante :

$$\mathbf{r} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + \mathbf{A}(\mathbf{k}) + \mathbf{X} \quad (1.107)$$

où $\mathbf{A}(\mathbf{k})$ est diagonale dans les indices de bande et ses éléments sont les connections de Berry des bandes de Bloch et $\mathbf{X}$ est purement la partie non diagonale. Si nous voulons travailler avec les états de Bloch modifiée donnés par (1.102), nous devrions trouver un nouveau hamiltonien en fonction de ces variables non-commutative. Ainsi, dans la base

modifiée l'hamiltonien a la forme suivante :

$$H = H'_0 + e\mathbf{E} \cdot \left(i\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + \mathbf{A}(\mathbf{k}) \right) \quad (1.108)$$

où maintenant H'_0 est un nouvel opérateur, qui a la même forme de matrice dans la base modifiée (1.102) que l'hamiltonien libre H_0 dans la base originale des états de Bloch $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$. Dans la base (1.102) le hamiltonien (1.108) est, par construction, diagonal dans des indices de bande comprenant des termes linéaires en présence du champ électrique. Ainsi il semble être utile de regrouper les termes dans l'hamiltonien originale de sorte que dans la base modifiée nous avons toujours la partie diagonale non perturbée H'_0 mais le champ électrique se couple seulement à sa projection sur un sous-espace d'une seule bande donnée.

D'une manière générale, on peut exprimer l'opérateur position $\mathbf{r}$ en utilisant les coordonnées covariantes x^v . Ainsi, l'opérateur qui diagonalise H s'écrit

$$x^v = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_v} + X_v^{nn}(\mathbf{p}) \quad (1.109)$$

et sa nature implique qu'il s'agit de transitions inter-bandes virtuelles [9]. Bien que le mouvement du paquet d'ondes se limite à la bande de conduction, sa position à l'intérieur d'une cellule unité implique l'occupation virtuelle de bandes supérieures dont les effets apparaissent comme une phase géométrique. Ong et Lee [82] ont montrés que le terme $\nabla_p \times \mathbf{X}^{nn}$ agit comme un champ magnétique effectif qui vit dans l'espace des impulsions. L'application d'un champ électrique E conduit à une vitesse anormale, ce qui donne un courant de Hall. Cela se voit en évaluant la relation de commutation entre x^u et x^v

$$[x^u, x^v] = i\hbar \left[\frac{\partial X_v^{nn}}{\partial p_u} - \frac{\partial X_u^{nn}}{\partial p_v} \right] = i\hbar \epsilon_{uv\lambda} \mathbf{B}_n(\mathbf{p})_\lambda \quad (1.110)$$

où le champ $\mathbf{B}$ est défini de la manière suivante $\mathbf{B}_n(\mathbf{p}) = \nabla_p \times \mathbf{X}^{nn}$. Ceci est analogue à la relation de commutation entre les composantes de $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}$ en présence du potentiel vecteur c'est à dire :

$$[\pi^u, \pi^v] = i\hbar \epsilon_{uv\lambda} [\nabla_r \times \mathbf{A}(r)]_\lambda = i\hbar \mathbf{B}_\lambda(\mathbf{r}) \quad (1.111)$$

La vitesse anormale provient du champ magnétique effectif $\mathbf{B}_n(\mathbf{p})$, et de la non commutativité des coordonnées covariantes de jauge x^u . Cette perspicacité a anticipé l'idée moderne de la courbure de la phase de Berry. En calculant le commutateur entre x^u et l'hamiltonien $H_{nn} = E_n(\mathbf{p}) - F^v x^v$, on obtient

$$v_{nn} = -i[x, H_{nn}] = \frac{\partial E_n(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} - \mathbf{F} \times \mathbf{B}_n(\mathbf{p}) \quad (1.112)$$

Le second terme sur le côté droit est appelé la vitesse anormale.

En résumé, si nous considérons l'évolution du paquet d'ondes induit par les états de Bloch modifiés, mathématiquement, au lieu de travailler avec les bandes se mélangeant les éléments non diagonaux causés par le champ électrique, nous pouvons supposer que nous traitons toujours l'hamiltonien H_0 original sans champ électrique à condition d'introduire des nouveaux opérateurs noncommutatifs. La vitesse anormale apparaît alors comme conséquence de la noncommutativité de ces opérateurs modifiés.

La formule de Kubo

La contribution à la conductivité intrinsèque ne dépend que de la structure de bande du cristal parfait. Elle peut être calculée directement à partir de la formule de Kubo [83] :

$$\sigma_{xy} = e^2 \hbar \int_{ZB} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \sum_n \sum_{m \neq n} f_n(\mathbf{k}) \times \frac{\text{Im} [\langle n, \mathbf{k} | \mathbf{v}(\mathbf{k}) | m, \mathbf{k} \rangle \times \langle m, \mathbf{k} | \mathbf{v}(\mathbf{k}) | n, \mathbf{k} \rangle]_z}{(\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{m\mathbf{k}})^2} \quad (1.113)$$

L'opérateur de vitesse est défini par

$$\mathbf{v}(k) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{r}, H(\mathbf{k})] = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k}) \quad (1.114)$$

ce qui rend cette contribution tout à fait unique, c'est que, comme dans le cas de l'effet Hall quantique dans un cristal, elle est directement liée aux propriétés topologiques des états de Bloch. Plus précisément, il est proportionnel à l'intégration sur la courbure de Berry pour chaque bande occupée [43]. En utilisant l'expression suivante

$$\langle n, \mathbf{k} | \nabla_{\mathbf{k}} | m, \mathbf{k} \rangle = \frac{\langle n, \mathbf{k} | \nabla_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k}) | m, \mathbf{k} \rangle}{\epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_m(\mathbf{k})} \quad (1.115)$$

l'équation (1.113) se réduit à

$$\sigma_{xy} = \frac{-e^2}{\hbar} \sum_n \int_{ZB} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f_n(\mathbf{k}) \times \boldsymbol{\Omega}_n^z(\mathbf{k}) \quad (1.116)$$

où $\mathbf{A}_n(\mathbf{k})$ est la connexion de la phase de Berry $\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = i\langle n, \mathbf{k} | \nabla_{\mathbf{k}} | n, \mathbf{k} \rangle$ et $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})$ est la courbure de Berry $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k})$ correspondante aux états $|n, \mathbf{k}\rangle$. La comparaison entre les équations (1.113) et (1.116) donne une formule de Kubo équivalente qui est largement utilisée dans la littérature [84, 85]

$$\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = i\hbar^2 \sum_{m \neq n} \frac{\langle n, \mathbf{k} | \mathbf{v}(\mathbf{k}) | m, \mathbf{k} \rangle \times \langle m, \mathbf{k} | \mathbf{v}(\mathbf{k}) | n, \mathbf{k} \rangle}{(\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{m\mathbf{k}})^2} \quad (1.117)$$

En principe, tous les états occupés et inoccupés doivent être comptabilisés dans la sommation. Une caractéristique importante de cette forme, c'est qu'elle s'exprime en termes des éléments de la matrice non diagonale de l'opérateur de vitesse par rapport aux états de Bloch. Le premier calcul ab initio de la courbure de Berry a été effectivement réalisée par Fang [19] en utilisant (1.117). Les auteurs illustrent bien l'existence d'un monopole magnétique dans l'espace des moments cristallins. L'origine de cette forte structure est la quasi-dégénérescence de bandes et agit comme un monopôle magnétique qui a été formulé théoriquement par Bérard [17]. Un effet similaire a été prouvé par Yao [38].

Une des motivations pour identifier la contribution intrinsèque est qu'elle peut être évaluée avec précision, même pour des matériaux relativement complexes en utilisant des techniques de premiers principes. Dans de nombreux matériaux qui ont un fort spin-orbite pour les bandes couplés, la contribution intrinsèque domine l'effet Hall anormal.

1.3.5 Effet Hall quantique

En 1980, Klaus von Klitzing [86], à Grenoble, découvrit dans le cas de semi-conducteurs à très basse température plongés dans un champ magnétique intense que la résistance de Hall variait par paliers en liaison avec un multiple entier de $\frac{\hbar}{e^2}$, où e est la charge électrique élémentaire et $\hbar$ la constante de Planck. Il effectue des mesures de transport sous champ magnétique sur des échantillons dans lesquels un gaz bidimensionnel d'électrons est réalisé. Il s'agit de mesures simultanées de résistance longitudinale $R_L = R_{xx}$ et de

résistance de Hall $R_H = R_{XY}$, en fonction de la tension de grille qui permet de faire varier la densité n_{el} de porteurs, ici des électrons, dans un champ magnétique constant. En abaissant la température, il constate l'apparition d'oscillations de la résistance longitudinale avec le champ magnétique. Ces oscillations sont connues depuis les années 1930 sous le nom d'oscillations "Shubnikov-de Haas", mais ici elles deviennent géantes, jusqu'à ce que la résistance longitudinale R_L s'annule pour certaines plages de n_{el} . Et pour ces mêmes plages, la résistance de Hall devient constante. Von Klitzing réalise très vite que cette quantification de la résistance de Hall correspond à $R_H = n \frac{h}{e^2}$ et $R_L = 0$, ce qui a lui valu le prix Nobel de physique en 1985. Cet effet a généré beaucoup de travaux en physique théorique avancée. Dans un article fondamental paru en 1982, Thouless et ses collaborateurs [52] exploitent une équation dérivée de la formule de Kubo [83] utilisée dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire qui aboutit à la loi de quantification de la conductance de Hall. Ils calculent la contribution des q sous-bandes, fractionnement d'une bande électronique sous l'effet d'un champ magnétique correspondant au flux par cellule unité $\Phi = \frac{p}{q}$, à la valeur de la conductance de Hall totale. Ceci traduit l'apparition de bandes d'énergies discrètes pour les électrons bidimensionnels soumis à un champ magnétique. Ces bandes sont séparées par des gaps en énergie. La situation est donc analogue à celle d'un isolant, avec une séparation nette entre bandes remplies d'électrons et les bandes vides. Ils ont montré que ces bandes d'énergies remplies ont un ordre topologique et que la conductivité de Hall est étroitement liée à la courbure de Berry (pas encore découvert par Berry à l'époque) ce que nous allons brièvement formuler.

Considérons un gaz d'électrons bidimensionnel soumis à un champ magnétique perpendiculaire à un faible champ électrique dans un plan. Afin de ne pas rompre la périodicité du potentiel scalaire, nous choisissons une jauge en fonction du temps pour le champ électrique de la forme $\mathbf{E} = -\partial \mathbf{A}_E / \partial t$, $\mathbf{A}_E = -\mathbf{E}t$. L'hamiltonien s'écrit

$$H = \frac{(\pi - e\mathbf{E}t)^2}{2m} + V_L(r) \quad (1.118)$$

où $\pi = p + e\mathbf{A}_0$ inclus le potentiel vecteur du champ magnétique, et V_L est le potentiel dû au réseau périodique. Il est plus pratique d'utiliser la dépendance en k de l'hamiltonien $\tilde{H}$ et la fonction périodique u_{nk} dans notre discussion. Elles sont reliées par $\tilde{H}|u_{nk}\rangle = E_{nk}|u_{nk}\rangle$. Nous supposons que le système peut être résolu avec des valeurs propres et des

états propres connus, $\widetilde{H}_0|u_{nk}^{(0)}\rangle = E_{nk}^{(0)}|u_{nk}^{(0)}\rangle$ en l'absence d'un champ électrique externe [51]. Le champ électrique est alors traité comme une perturbation. Dans un premier ordre de perturbation, on a

$$|u_{nk(t)}\rangle = |n\rangle - i\hbar \sum_{n' \neq n} \frac{|n'\rangle \langle n' | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_{n'}} \quad (1.119)$$

où $\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}_0 - e\mathbf{E}t/\hbar$, $|n\rangle$ et ϵ_n sont des abréviations de $|u_{nk(t)}^{(0)}\rangle$ et $E_{nk(t)}^{(0)}$. La vitesse d'une particule dans la n^{ieme} bande est donnée par

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \langle u_{nk} | \frac{\partial \widetilde{H}}{\hbar \partial \mathbf{k}} | u_{nk} \rangle \quad (1.120)$$

Après le remplacement des états dans l'équation (1.119), nous trouvons

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{\partial \epsilon_n}{\partial \mathbf{k}} - i \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n | \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \mathbf{k}} | n' \rangle \langle n' | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_{n'}} - c.c. \quad (1.121)$$

Le premier terme est la vitesse du groupe en l'absence de la perturbation électrique. Avec l'aide d'une équation similaire à (??)

$$\langle n | \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \mathbf{k}} | n' \rangle = (\epsilon_n - \epsilon_{n'}) \langle \frac{\partial n}{\partial \mathbf{k}} | n' \rangle \quad (1.122)$$

on obtient finalement une expression de la forme

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{\partial \epsilon_n}{\partial \mathbf{k}} - i \left(\langle \frac{\partial n}{\partial \mathbf{k}} | \frac{\partial n}{\partial t} \rangle - \langle \frac{\partial n}{\partial t} | \frac{\partial n}{\partial \mathbf{k}} \rangle \right) \quad (1.123)$$

Par un changement de variable, le second terme devient $\mathbf{\Omega}_n \times \dot{\mathbf{k}} = (-e/\hbar)\mathbf{\Omega}_n \times \mathbf{E}$, où $\mathbf{\Omega}_{n\alpha} = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle \frac{\partial n}{\partial \mathbf{k}_\beta} | \frac{\partial n}{\partial \mathbf{k}_\gamma} \rangle$ est la courbure de Berry dans l'espace des impulsions. Pour un gaz d'électrons bidimensionnel, $\mathbf{\Omega}_n = \Omega_n \hat{z}$. Tous les états au-dessous de l'énergie de Fermi contribuent à la densité de courant,

$$\mathbf{J} = \frac{1}{V} \sum_{nk} -e\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{\hbar} \sum_n \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \mathbf{\Omega}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{E} \quad (1.124)$$

Notez que le premier terme de l'équation (1.123) ne contribue pas au courant. A partir

de l'équation (1.124), il est clair que la conductivité de Hall est donnée par,

$$\sigma_{yx} = \frac{e^2}{\hbar} \sum_n \frac{1}{2\pi} \int d^2\mathbf{k} \, \Omega_n(\mathbf{k}) \quad (1.125)$$

Thouless et al [52] ont montré que l'intégrale de la courbure de Berry sur toute la zone de Brillouin divisé par 2π doit être un entier c_n . Cet entier qu'on appelle nombre de Chern dans la topologie des bandes caractérise la propriété topologique de l'espace des fibrés, dans lequel la variété de la base est la zone de Brillouin à deux dimensions, et la fibre est la phase de l'état de Bloch. Par conséquent, la conductivité de Hall pour une bande remplie est toujours un multiple entier de $e^2/\hbar$. Cette propriété topologique est la raison pour laquelle l'effet Hall quantique est si fort pour les variétés d'échantillons. Même si la discussion ici est basée sur l'état de Bloch pour une seule particule, la conclusion reste valable pour les états à plusieurs corps [87]. On remarque que les dernières formules pour la variation de la polarisation électrique $\Delta\mathbf{P}$ dans la section précédente et ici ceux de la conductivité de Hall se ressemblent beaucoup. Les deux sont basées sur la théorie de la réponse linéaire. En effet, l'analogie peut être poussée plus loin si $\Delta\mathbf{P}$ est considéré comme une intégration sur le temps d'un courant de polarisation $\mathbf{J}_p = \partial\mathbf{P}/\partial t$. Ce dernier, comparé à l'équation (1.124), peut être liée à la courbure de Berry directement.

Chapitre 2

La mécanique quantique non-commutative

2.1 Introduction

Une généralisation naturelle de la mécanique quantique utilisant des coordonnées d'espace-temps non-commutatives a été dès son origine envisagée par Heisenberg (dans une lettre écrite à Pierls vers la fin de 1930 [88]) en utilisant la possibilité de présenter des relations d'incertitude relatives aux coordonnées, espérant ainsi éviter les singularités induites par la théorie des champs. Pierls s'est servi de ces idées par la suite dans son travail lié au problème des niveaux de Landau pour un électron dans un champ magnétique. Heisenberg a également présenté ses observations sur cette possibilité à Pauli qui en a alors parlé à Oppenheimer [89]. Enfin c'est Hartland Snyder, un étudiant d'Oppenheimer qui a formalisé la première fois cette idée dans un article (Quantised Space time) [90, 91] entièrement consacré à ce sujet, l'article a été l'acte de naissance de ce qu'on appelle aujourd'hui la Mécanique Quantique non-commutative. L'idée de Snyder était de trouver une description logique pour la structure de l'espace-temps qui soit justifiée pour les petites longueurs d'onde. Il pensait de cette manière arriver à régulariser les comportements à très courtes distances et ainsi éliminer le problème de la self-énergie infinie qui est inhérente à la théorie quantique des champs tout en conservant la covariance de Lorentz. Presque immédiatement, C.N. Yang [92] a réagi et a écrit un article pour prolonger le travail de Snyder au cas d'un espace courbe (en particulier l'espace de Sitter). Enfin, en

1948, Moyal a abordé le même problème mais en utilisant des fonctions de répartition de Wigner définies dans l'espace de phase et a ainsi présenté ce qui est connu aujourd'hui comme le « produit étoile de Moyal », un produit associatif et non commutatif, qui décrit la structure mathématique de la mécanique quantique [93].

Mais, comme parallèlement à cela, la théorie de groupe de renormalisation (Bogolioubov puis Wilson) produisait des résultats remarquables, celle-ci a réussi à prévoir exactement des valeurs numériques pour des observables physiques en électrodynamique quantique, alors la théorie de Snyder a été en grande partie ignorée.

Cependant, les idées de la géométrie non-commutative ont été rétablies de nouveau dans les années 80 par les mathématiciens Connes, Woronowicz et Drinfeld, qui ont généralisé la notion d'une structure différentielle au cas non commutatif [94–96]. Avec l'introduction d'une intégrale généralisée [97], ceci permet de définir l'action d'un champ de Yang-Mills sur une grande classe des géométries non-commutatives. Le but de la géométrie non-commutative est de généraliser la dualité entre espace géométrique et algèbre au cas plus général où l'algèbre n'est plus commutative. Cela conduit à modifier deux concepts fondamentaux des mathématiques, ceux d'espace et de symétrie et à adapter l'ensemble des outils mathématiques, dont le calcul infinitésimal et la cohomologie à ces nouveaux paradigmes. Loin d'être une simple généralisation, l'intérêt initial de la théorie provient de phénomènes entièrement nouveaux et inattendus qui n'ont pas de contrepartie dans le cas classique commutatif. Le premier de ces phénomènes est l'apparition naturelle du temps à partir de la non-commutativité. Il s'agit là du résultat clé de la thèse d'Alain Connes, qui lui a permis de donner une classification des algèbres d'opérateurs (algèbres de Von Neumann).

La théorie des champs non-commutative suscite un intérêt croissant, parce qu'elle est intermédiaire entre la théorie ordinaire des champs et la théorie des cordes, apparaissant notamment comme limite effective de la théorie des cordes dans certains régimes. Une évidence plus concrète pour la noncommutativité de l'espace-temps est venue de la théorie des cordes, qui est actuellement un des meilleurs candidats pour une théorie de la gravité quantique. Des cordes ayant une longueur intrinsèque finie l_s , peuvent être employées pour décrire des structures de courte distance. Par conséquent, les distances plus petites que l_s ne sont pas possibles à observer. En fait, basées sur l'analyse à des échelles d'énergie très élevées [98–100] des relations d'incertitude de Heisenberg modifiées ont été postulées

sous la forme $\Delta x = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{1}{\Delta p} + l_s^2 \Delta p \right)$. Il est facile de voir qu'on retrouve le résultat de la mécanique quantique habituel dans la limite $l_s \rightarrow 0$. Seiberg et Witten [101] ont identifié les limites dans lesquelles la dynamique entière des cordes peut être décrite en termes de théorie super-symétrie sur un espace non commutatif. Leur analyse mène à l'équivalence entre les champs de jauge ordinaires et les champs de jauge non commutatifs, réalisés par un changement de variables. Ce changement de variables est généralement connu sous le nom de l'application Seiberg-Witten. Actuellement de nombreux physiciens travaillent autour du lien étroit qui semble exister entre la théorie de jauge non-commutatives, la théorie des cordes et la M théorie.

Beaucoup d'attention a été accordée récemment à la formulation et aux conséquences expérimentales possibles des prolongements du formalisme standard de la mécanique quantique pour tenir compte de la noncommutativité des opérateurs de position [102–112]. Ceci a été inspiré par des idées venant de la théorie quantique des champs et de la théorie des cordes [101, 113–115]. La manière standard de construire une théorie des champs non-commutative est de remplacer le produit habituel (apparaissant dans l'action dans l'intégrale fonctionnelle) par le produit de Moyal, défini par

$$(\Phi_1 * \Phi_2)(x) = \exp(i\theta_{\nu\mu} \partial_x^\nu \partial_y^\mu) \Phi_1(x) \Phi_2(y) \big|_{x=y}, \quad (2.1)$$

où $\theta_{\nu\mu}$ est une matrice constante antisymétrique. Inspiré par ce formalisme, beaucoup d'auteurs ont considéré un prolongement de la notion de la noncommutativité à la mécanique quantique non relativiste, habituellement désignée dans la littérature sous le nom de la mécanique quantique non-commutative (MQNC). Cette théorie est formulée dans les mêmes limites par la théorie standard (MQS), c.-à-d., en termes de mêmes variables dynamiques représentées par des opérateurs dans un espace de Hilbert et un vecteur d'état qui évolue selon l'équation de Schrödinger $i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = H_{nc} |\Psi\rangle$, où H_{nc} est l'hamiltonien pour un système donné dans la théorie non-commutative. La différence cruciale avec la théorie standard est que dans la théorie non-commutative les opérateurs représentant la

position d'une particule ne commutent pas entre eux :

$$\begin{aligned} [x_i, x_j] &= \theta_{ij} \\ [x_i, p_j] &= i\hbar\delta_{ij} \\ [p_i, p_j] &= 0. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Pour spécifier complètement un système particulier dans le cadre de la mécanique quantique non-commutative il est nécessaire de définir l'hamiltonien H_{nc} , qu'on note simplement par $H_\theta = H_{nc}$. Cet hamiltonien H_θ doit être choisi de telle façon qu'il se réduit à hamiltonien standard H dans la limite $\theta \rightarrow 0$. Deux approches ont été considérées pour construire la MQNC :

(a) en posant simplement $H_\theta = H$, de sorte que la seule différence entre MQS et MQNC soit la présence d'un θ différent de zéro dans le commutateur entre les opérateurs de position [102, 107, 109, 112] .

(b) en décrivant naïvement le système physique à l'aide de l'équation de Schrödinger standard

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = H \left(p = \frac{\hbar}{i} \nabla, x \right) * \Psi(x, t) = H_\theta \Psi(x, t), \tag{2.3}$$

où $H(p, x)$ est le même hamiltonien que celui de la théorie quantique standard de sorte que la dépendance en θ se manifeste seulement par le produit étoile dans l'équation (2.3) [105, 106, 108]. Pour un hamiltonien du type $H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ décrivant une particule non-relativiste se déplaçant dans un potentiel extérieur, l'hamiltonien modifié H_θ peut être simplement obtenu par un changement dans le potentiel

$$H_\theta = \frac{p^2}{2m} + V(x_i - \frac{1}{2\hbar} \theta_{ij} p_j). \tag{2.4}$$

En mécanique quantique ordinaire, le potentiel $V(x)$ agit sur la fonction d'onde $\Psi(x, p)$ comme un opérateur de multiplication, à savoir $\Psi \rightarrow V \cdot \Psi$. En mécanique quantique non-commutative, le potentiel V agit sur Ψ au moyen du produit-étoile $\Psi \rightarrow V * \Psi$. Si l'on calcule la transformée de Fourier de cette relation, on se rend compte que l'action du potentiel au moyen du produit-étoile est identique à l'action du potentiel dépendant des

coordonnées $\hat{x}$ et non plus des x ordinaires

$$(V * \Psi)(x) = V(\hat{x})\Psi(x), \quad (2.5)$$

avec $\hat{x}_i = x_i - \frac{1}{2}\theta_{ij}p_j$ [108].

En résumé, en mécanique quantique non-commutative, l'hamiltonien décrivant le système peut être exprimé, soit en fonction des opérateurs $\hat{x}$ et p , soit en fonction des opérateurs x et $\hat{p}$ satisfaisant des relations de commutation canoniques mais agissant sur la fonction d'onde au moyen du produit-étoile. L'étude de modèles exactement solubles en mécanique quantique peut nous permettre d'avoir une meilleure compréhension de certains phénomènes survenant en théorie quantique des champs non-commutative. Jusqu'ici beaucoup d'exemples intéressants dans la MQNC ont été étudiés intensivement, tel que le spectre de l'atome d'hydrogène [112, 116–118], l'oscillateur harmonique [102, 104, 119, 120], l'effet d'Aharonov-Bohm en présence du champ magnétique [121–123], et le problème de Landau [106, 124]. Les applications physiques éventuelles peuvent, entre autres, se trouver dans des problèmes de matière condensée comme l'effet Hall quantique. Dans la lignée des premiers travaux concernant les variables de l'espace de phase non-commutatif [125–129], la mécanique quantique non-commutative a été définie de manière simple et directe en suivant plusieurs approches [108, 109, 112, 130–132] et quelques modèles de base ont été étudiés [102, 106, 108, 109, 112, 130–134]. Par la suite, plusieurs aspects ont été développés [117, 124, 135–146].

Dans ce cadre de la théorie quantique non-commutative, afin de construire un ensemble de générateurs du groupe $SO(3)$, A. Berard and H. Mohrbach [17] ont considéré qu'un moment dual de Poincaré exprimé dans l'espace des impulsions doit-être introduit. Cette idée a été inspirée de la noncommutativité des vitesses en présence d'un champ électromagnétique, un formalisme qui est dû à Feynman [147–155]. En effet, la motivation de Feynman initiale était d'élaborer un procédé de quantification sans utiliser un lagrangien ou un hamiltonien. En commençant par les relations de commutation entre la position et la vitesse d'une simple particule non relativiste, qui est décrite par la loi de Newton, il a déduit l'existence d'un champ électromagnétique satisfaisant aux équations de Maxwell. La noncommutativité des vitesses en présence d'un champ électromagnétique implique que l'algèbre $SO(3)$ qui décrit la symétrie de rotation est brisée. Si nous reconstituons

une telle symétrie, il est nécessaire d'ajouter un moment de Poincare au moment angulaire [153, 155–157]. Une conséquence directe de cette restauration est la génération d'un monopôle magnétique de Dirac. Le prolongement de ces idées à l'espace des impulsions (espace dual), en considérant la mécanique quantique non-commutative, mène à l'introduction d'un monopôle dual de Dirac dans l'espace des impulsions [17, 18]. Ce dernier a été mis en évidence expérimentalement très récemment lors de l'étude de l'effet Hall anormal dans l'espace des impulsions d'un cristal ferromagnétique [19]. Nous avons alors suggéré un lien entre ce champ non commutatif et la courbure de Berry exprimée dans l'espace des impulsions qui est à l'origine de l'effet Hall anormal. Ainsi, il a été notamment trouvé que pour certains systèmes semi-conducteurs, une phase de Berry en impulsion joue un rôle essentiel en affectant les propriétés de transport. Ce terme de Berry génère un courant de spin transversal qui est à l'origine de l'effet Hall de spin [44]. Enfin, l'étude de l'équation de Dirac dans l'approximation adiabatique, en se basant sur la transformation de Fouldy-Wouthuysen [158] nous mène à ajouter à l'opérateur position une contribution anormale due à la connexion de la jauge de Berry non abélienne qui rend l'algèbre de la mécanique quantique non-commutative.

2.2 L'électromagnétisme selon Feynman

En 1990, Dyson [147] a édité une preuve due à Feynman des équations de Maxwell, en utilisant seulement la loi du mouvement de Newton et les relations de commutation entre la position et la vitesse. Avec cette prescription minimale, Feynman n'a jamais supposé l'existence du formalisme hamiltonien ou lagrangien.

2.2.1 Les propositions de Feynman

En considérant une particule non-relativiste de masse m soumise à une force extérieure $F_i(x, \dot{x}, t)$ qui se déplace dans un espace euclidien tridimensionnel avec une position $x_i(t)$ et obéissant à l'équation du mouvement

$$m \ddot{x}_i = F_i(x, \dot{x}, t), \quad (2.6)$$

et dont la position $x_i(t)$ et la vitesse $\dot{x}_i(t)$ satisfont aux relations de commutation suivantes :

$$[x_i, x_j] = 0 \quad (2.7)$$

$$[x_i, \dot{x}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (2.8)$$

Où $[,]$ sont les crochets de Feynman qui ont les propriétés suivantes :

(i) bilinéarité,

$$[\lambda a + \mu b, c] = \lambda [a, c] + \mu [b, c] \quad (2.9)$$

$$[a, \lambda b + \mu c] = \lambda [a, b] + \mu [a, c]. \quad (2.10)$$

(ii) antisymétrie,

$$[a, b] = -[b, a] \quad (2.11)$$

(iii) identité de Jacobi,

$$[a + [b, c]] + [b + [c, a]] + [c + [a, b]] = 0 \quad (2.12)$$

(iv) règle I de Leibniz,

$$[a, bc] = [a, b]c + b[a, c] \quad (2.13)$$

(v) règle II. de Leibniz,

$$\frac{d}{dt} [a, b] = \left[\frac{da}{dt}, b \right] + \left[a, \frac{db}{dt} \right]. \quad (2.14)$$

Les crochets de Poisson $\{, \}$ possèdent également les propriétés (i) à (iv) comme conséquence automatique de sa définition. Cependant, la propriété (v) n'est pas en général vérifiée pour les crochets de Poisson.

2.2.2 Les résultats de Feynman

De ces propositions, Feynman, en 1948, a déduit les résultats suivants :

(i) La force $F_i(x, \dot{x}, t)$ peut être écrite comme

$$F_i(x, \dot{x}, t) = E_i(x, t) + \varepsilon_{ijk} \left\langle \dot{x}_j B_k(x, t) \right\rangle, \quad (2.15)$$

où le symbole $\langle \dots \rangle$ se rapporte à la prescription de Weyl.

(ii) Les champs $\mathbf{E}(x, t)$ et le $\mathbf{B}(x, t)$ satisfont aux équations homogènes de Maxwell

$$\text{div} \mathbf{B} = 0 \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \text{rot} \mathbf{E} = 0, \quad (2.17)$$

qui implique l'existence d'un potentiel scalaire $\Phi(x, t)$ et d'un potentiel vecteur $\mathbf{A}(x, t)$ tels que

$$\mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{A} \quad (2.18)$$

$$\mathbf{E} = -\text{grad} \Phi - \text{rot} \mathbf{A}. \quad (2.19)$$

Ces deux résultats correspondent réellement à la force de Lorentz et au premier groupe d'équations de Maxwell où on peut identifier $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ comme champs électrique et magnétique, respectivement. Dyson en a déduit que les seuls champs possibles qui peuvent uniformément agir sur une particule quantique sont les champs de jauge.

2.2.3 Démonstration des résultats

A partir de la dérivation de l'équation (2.8) par rapport au temps et en utilisant (2.13) on obtient

$$m [x_i, \dot{x}_j] + [x_i, \dot{F}_j] = 0. \quad (2.20)$$

Ceci permet d'écrire

$$m [x_i, \dot{x}_j] = - [x_i, \dot{F}_j] = \frac{i\hbar}{m} \varepsilon_{ijk} B_k. \quad (2.21)$$

On peut considérer cette équation comme définition du champ magnétique $\mathbf{B}$. L'équation (2.20) peut être écrite comme

$$B_k = \frac{m^2}{2i\hbar} \varepsilon_{klm} [\dot{x}_l, \dot{x}_m]. \quad (2.22)$$

Le champ $\mathbf{B}$ dépendrait de $x, \dot{x}$ et de t . Mais l'identité de Jacobi et l'équation (2.8) implique que

$$\begin{aligned} [x_i, B_k] &= \frac{m^2}{2i\hbar} \varepsilon_{klm} \left[x_i, [\dot{x}_l, \dot{x}_m] \right] \\ &= \frac{m^2}{2i\hbar} \varepsilon_{klm} \left[[\dot{x}_i, \dot{x}_l], \dot{x}_m \right] + [\dot{x}_l, [\dot{x}_i, \dot{x}_m]] = 0. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Cela signifie que le champ $\mathbf{B}$ est une fonction qui dépend seulement de la variable position x et du temps t . Une propriété remarquable pour une fonction $f(x, t)$ est que

$$[x_k, f(x, t)] = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial f}{\partial x_k}, \quad (2.24)$$

qui est une conséquence directe des équations (2.7) et (2.8). On peut employer l'équation (2.24) pour obtenir

$$[\dot{x}_k, B_k] = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial B_k}{\partial x_k}. \quad (2.25)$$

D'autre part, l'équation (2.22) et l'identité de Jacobi nous permet d'écrire

$$\begin{aligned} [\dot{x}_k, B_k] &= \frac{m^2}{2i\hbar} \varepsilon_{klm} [\dot{x}_k, [\dot{x}_l, \dot{x}_m]] \\ &= \text{div} \mathbf{B} = 0, \end{aligned} \quad (2.26)$$

qui est la preuve de l'équation (2.16).

Afin de démontrer la deuxième équation de Maxwell (2.17), il est nécessaire de définir l'ordre de Weyl qui consiste à symétriser le produit entre les opérateurs de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \langle x_i \dot{x}_j \rangle &= \frac{1}{2} (x_i \dot{x}_j + \dot{x}_j x_i), \\ \langle x_i \dot{x}_j \dot{x}_k \rangle &= \frac{1}{2} (x_i \dot{x}_j \dot{x}_k + x_i \dot{x}_k \dot{x}_j + \dot{x}_j x_i \dot{x}_k + \dot{x}_j \dot{x}_k x_i + \dot{x}_k x_i \dot{x}_j + \dot{x}_k \dot{x}_j x_i). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Le champ $\mathbf{E}$ dépend généralement de x et de t , mais en employant les équations (2.15), (2.21), (2.8) et (2.23) dans cet ordre, on obtient

$$\begin{aligned} [x_l, E_i] &= [x_l, F_i] - \varepsilon_{ijk} \left\langle [x_l, \dot{x}_j] B_k + \dot{x}_j [x_l, B_k] \right\rangle \\ &= \frac{i\hbar}{m} \varepsilon_{lik} B_k - \varepsilon_{ijk} \frac{i\hbar}{m} \delta_{ij} B_k = 0. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Ce qui indique que le champ $\mathbf{E}$ est une fonction qui ne dépend que de x et de t , $\mathbf{E} = \mathbf{E}(x, t)$. La dérivation par rapport au temps de l'équation (2.22) nous permet d'écrire

$$\frac{\partial B_k}{\partial t} + \left\langle \dot{x}_j \frac{\partial B_k}{\partial x_j} \right\rangle = \frac{m^2}{i\hbar} \varepsilon_{klm} [\dot{x}_l, \ddot{x}_m]. \quad (2.29)$$

A partir des équations (2.20), (2.15), (2.21), (2.24) et (2.16) le terme à droite de l'équation (2.29) devient

$$\begin{aligned} & \frac{m^2}{i\hbar} \varepsilon_{klm} [\dot{x}_l, E_m + \varepsilon_{mij} \langle \dot{x}_i B_j \rangle] \\ &= \frac{m^2}{i\hbar} \left(\varepsilon_{klm} [\dot{x}_l, E_m] + (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk}) \langle [\dot{x}_l \dot{x}_i] B_j + \dot{x}_i [\dot{x}_l B_j] \rangle \right) \\ &= -\varepsilon_{klm} \frac{\partial E_m}{\partial x_l} + (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk}) \left\langle \frac{1}{m} \varepsilon_{lin} B_n B_j - \dot{x}_i \frac{\partial B_j}{\partial x_l} \right\rangle \\ &= -\varepsilon_{klm} \frac{\partial E_m}{\partial x_l} + \left\langle \frac{1}{m} \varepsilon_{lin} B_n B_j - \dot{x}_k \frac{\partial B_j}{\partial x_j} + \dot{x}_i \frac{\partial B_k}{\partial x_i} \right\rangle \\ &= -\varepsilon_{klm} \frac{\partial E_m}{\partial x_l} + \left\langle \dot{x}_i \frac{\partial B_k}{\partial x_i} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Enfin les deux équations (2.29) et (2.30) nous permettent d'écrire

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \text{rot} \mathbf{E} = 0. \quad (2.31)$$

Ceci est la preuve de l'équation (2.17). Finalement on a :

$$\begin{aligned} \text{div} \mathbf{B} &= 0 \\ \text{et} \quad \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \text{rot} \mathbf{E} &= 0, \end{aligned} \quad (2.32)$$

qui correspondent réellement au premier groupe d'équations de Maxwell. En fait, seulement le premier groupe d'équations de Maxwell est donné; le deuxième groupe, selon

Dyson, est une simple définition de la matière. Ce n'est pas une nouvelle idée , Le Bel-lac et Levy-Leblond [159] avaient déjà étudié l'invariance galiléenne de ces équations. Bien qu'avec cette approche, une structure lagrangienne ou hamiltonienne est inutile, Hojman et Shepley [148] ont prouvé qu'en employant un problème variationnel inverse de Helmholtz sous certaines conditions, une action peut être associée à ces relations de commutation de Feynman.

L'interprétation du formalisme du Feynman pour les équations de Maxwell a suscité un grand intérêt parmi les physiciens. En particulier, Tanimura [149] a généralisé les résultats de Feynman pour le cas relativiste. Une prolongation de l'approche de Tanimura a été réalisée [155] en utilisant la dualité de Hodge pour montrer les deux groupes des équations de Maxwell avec un monopôle magnétique.

Dans la référence [150], les descriptions des particules relativistes et non-relativistes dans un champ électromagnétique ont été étudiées, tandis que dans [151], une équation dynamique pour les particules de spin a été proposée. Une interprétation mathématique rigoureuse de la preuve de Feynman liée au problème inverse pour la dynamique de Poisson a été formulée dans [152]. Récemment , certains auteurs ont inclus les résultats de Feynman dans le cadre de la géométrie non-commutative [160].

2.3 L'algèbre du groupe $SO(3)$ et le moment de Poincaré

2.3.1 Le monopôle magnétique de Dirac

L'idée des monopôles magnétiques, particules hypothétiques portant la charge magnétique g , est une des plus influentes dans la physique théorique moderne. La première proposition théorique que la charge magnétique devrait exister a été faite par Dirac [161]. L'idée de départ est de symétriser les équations de Maxwell en supposant l'existence d'une charge magnétique localisée en un point de l'espace. Les équations d'évolution des champs sont modifiées afin de tenir compte de cette charge. En prenant un monopôle magnétique de charge g à l'origine, la divergence du champ magnétique n'est plus nulle mais vaut désormais $div\mathbf{B} = 4\pi g\delta^3(\mathbf{r})$. On a donc affaire à un champ magnétique radial qui satisfait une loi de Coulomb (par analogie directe avec le champ électrique). Cependant, il est

impossible de trouver une expression du potentiel vecteur $\mathbf{A}$ qui soit valable dans tout l'espace. En effet, si le potentiel était non singulier, en appliquant le théorème de Stokes à une surface fermée autour du monopôle, on arriverait à

$$\int d\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{B}} = \int d\vec{\mathbf{l}} \cdot \vec{\mathbf{A}} = \vec{0}. \quad (2.33)$$

Ceci est en contradiction avec la non-nullité de la divergence étant donné la relation

$$\int d\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{B}} = \int d^3x \operatorname{div} \vec{\mathbf{B}} = 4\pi g \neq 0. \quad (2.34)$$

Cette règle de quantification de Dirac est une propriété topologique, qui nous indique que l'existence d'un monopôle magnétique impliquerait que la charge électrique soit quantifiée. La condition de quantification de la charge électrique vérifie la loi $e = n\hbar c/2g$. Avant Dirac, l'asymétrie étonnante des équations de Maxwell avait poussé Poincaré et Thompson à présenter la charge magnétique dans la théorie comme un objet façonné pour simplifier le calcul, alors que Pierre Curie suggérait déjà l'existence réelle de la charge magnétique [162]. L'idée des monopôles magnétiques a été prolongée plus tard par la découverte des solutions monopôles des théories non-Abéliennes classiques [163–166] et de l'introduction du concept de particules appelées "dyons" portant à la fois la charge électrique et magnétique [167–170] et menant par la suite au concept de la dualité [171] dans la théorie des cordes. Mais à ce jour, on n'a encore observé aucune trace de l'existence d'un monopôle magnétique. L'approche de Dirac est difficile à justifier car il n'existe aucune raison a priori de supposer l'existence d'un monopôle, si ce n'est qu'elle rend la théorie plus symétrique. Depuis son introduction par Dirac, les physiciens manifestent un grand intérêt pour le monopôle magnétique malgré les insuffisances de preuves expérimentales. C'est plutôt son intérêt théorique qui attire l'attention : il fournit en effet l'exemple physique le plus simple de l'importance des aspects topologiques en mécanique quantique. Le cadre le plus adapté pour comprendre cet aspect est celui de la géométrie différentielle et en particulier la théorie des fibrés et des connexions. Un autre aspect du champ du monopôle que les physiciens ont longuement apprécié est que, malgré la symétrie parfaite du champ, le potentiel vecteur $\mathbf{A}$ n'est pas invariant par rotation.

2.3.2 L'algèbre du groupe $SO(3)$

Une des symétries les plus importantes de la physique est la symétrie sphérique correspondant à l'isotropie de l'espace physique et qui vérifie les lois d'algèbre du groupe $SO(3)$. On montre alors que l'application d'un champ électromagnétique brise cette symétrie. En effet l'isotropie de l'espace engendre une loi de conservation de moment orbital total donné par

$$\frac{d \mathbf{L}}{dt} = 0, \quad (2.35)$$

où $L_i = m \varepsilon_{ijk} x_j p_k$. En absence d'un champ électromagnétique, qui implique que

$$[\dot{x}_i, \dot{x}_j] = 0,$$

nous avons l'algèbre du groupe $SO(3)$ qui vérifie les crochets de Poisson suivants :

$$[x_i, L_j] = \{x_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk} x_k \quad (2.36)$$

$$[\dot{x}_i, L_j] = \{\dot{x}_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk} \dot{x}_k \quad (2.37)$$

$$[L_i, L_j] = \{L_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk} L_k. \quad (2.38)$$

L'application d'un champ électromagnétique qui engendre une modification dans la relation de commutation entre les vitesses

$$[\dot{x}_i, \dot{x}_j] = \frac{\alpha}{m^2} F_{ij} = \frac{\alpha}{m^2} \varepsilon_{ijk} B_k ,$$

fait briser cette symétrie de groupe de rotation. On a alors les relations de commutation suivantes pour l'algèbre du $SO(3)$:

$$[x_i, L_j] = \{x_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk} x_k \quad (2.39)$$

$$[\dot{x}_i, L_j] = \{\dot{x}_i, L_j\} + \frac{\alpha}{m} \varepsilon_{jkl} x_k F_{il}(x) = \varepsilon_{ijk} \dot{x}_k + \frac{\alpha}{m} \varepsilon_{jkl} x_k F_{il}(x) \quad (2.40)$$

$$[L_i, L_j] = \{L_i, L_j\} + \alpha \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jms} x_k x_m F_{ls}(x) = \varepsilon_{ijk} L_k + \alpha \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jms} x_k x_m F_{ls}(x). \quad (2.41)$$

Afin de restaurer cette loi d'algèbre nous définissons un nouveau moment angulaire $\vec{L}$ qui est fonction à priori de la position et de la vitesse $\vec{L} = \vec{L}(x, p)$. Nous considérons alors la loi de transformation suivante $L_i \rightarrow \tilde{L}_i = L_i + M_i$, et imposant à ce nouveau moment

angulaire L_i de vérifier algèbre du groupe $SO(3)$ suivant :

$$[x_i, L_j] = \{x_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk} x_k \quad (2.42)$$

$$[\dot{x}_i, L_j] = \{\dot{x}_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk} \dot{x}_k \quad (2.43)$$

$$[L_i, L_j] = \{L_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk} L_k . \quad (2.44)$$

Ces équations donnent alors trois contraintes sur l'expression du moment angulaire L_i : De la première relation (2.42) nous déduisons facilement que $[x_i, M_j] = 0$, alors M_i est une fonction qui dépend seulement de la position $M_i = M_i(x)$. Pour la deuxième relation nous obtenons

$$[\dot{x}_i, M_j] = \frac{-1}{m} \frac{\partial M_j(x)}{\partial x_i} = -\frac{\alpha}{m} \varepsilon_{jkl} x_k F_{il}(x), \quad (2.45)$$

et finalement la troisième relation donne

$$M_i = \frac{\alpha}{2} \varepsilon_{jkl} x_i x_k F_{jl}(x) = -\alpha (\mathbf{x} \cdot \mathbf{B}) x_i . \quad (2.46)$$

Les équations (2.45) et (2.46) sont compatibles seulement si le champ magnétique $\mathbf{B}$ est le monopôle magnétique de Dirac, qui est donné par

$$\vec{B} = \frac{g}{4\pi} \frac{\vec{r}}{r^3}. \quad (2.47)$$

Le vecteur $\vec{M}$ qui nous permet de reconstituer la symétrie du groupe $SO(3)$ est alors le moment de Poincaré qui a été introduit par Bérard et Mohrbach [154, 156]. Cette expression a été déjà trouvée par Poincaré dans un contexte différent [172]. En outre nous constatons que pour le monopôle de Dirac, la source du champ est localisée à l'origine

$$\begin{aligned} \text{div} B &= \left[\dot{x}_i, \left[x_j, \dot{x}_k \right] \right] + \left[\dot{x}_j, \left[x_k, \dot{x}_i \right] \right] + \left[\dot{x}_k, \left[x_i, \dot{x}_j \right] \right] \\ &= \frac{g}{4\pi} \left[\dot{x}_i, \frac{x_i}{r^3} \right] = g\delta(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.48)$$

Nous voyons que dans la construction de l'algèbre des crochets du Feynman, le fait que nous n'avons pas imposé l'identité de Jacobi entre les vitesses est une condition nécessaire pour obtenir une solution monopôle. Ainsi, le monopôle magnétique du Dirac est une conséquence directe de la conservation de la symétrie du groupe de Lie $SO(3)$.

2.4 Mécanique quantique non-commutative (MQNC)

2.4.1 Mise en évidence expérimentale du monopôle magnétique en impulsion

En 1931 Paul Dirac a prouvé que si la charge magnétique existe, elle doit être quantifiée dans les unités de $\hbar/e$, où $\hbar$ est la constante de Planck et e est la charge de l'électron. Assez récemment une expérience au Japon a prouvé l'existence d'une charge magnétique effective de Dirac dans l'espace des impulsions, qui est d'habitude employé par les physiciens de la matière condensée pour analyser les propriétés des cristaux. Ces résultats, qui se basent sur le travail théorique mené par une équipe de physiciens, suggèrent que l'existence des monopôles puissent avoir des conséquences physiques directes dans les matériaux magnétiques comme SrRuO₃ [19]. Les caractéristiques de ces monopôles en impulsion sont mathématiquement semblables à celles des monopôles magnétiques de l'espace réel qui ont été longtemps cherchés par des physiciens des particules. Comme la phase d'Aharonov-Bohm tient compte des monopôles dans l'espace réel, la phase géométrique de Berry tient compte des monopôles dans l'espace des paramètres plus généraux. Dans un solide, en présence d'un champ électrique externe, il s'avère que la vitesse de groupe du paquet d'ondes qui est employé pour décrire un électron contient un terme supplémentaire qui est proportionnelle à la courbure de Berry. C'est étroitement lié à la manière avec laquelle un champ magnétique dans l'espace réel contribue au changement de l'impulsion causé par la force de Lorentz. Il semble donc raisonnable de rechercher des monopôles dans l'espace des impulsions car le champ associé (la courbure de Berry) peut exercer un vrai effet sur la dynamique des particules dans les cristaux. Un tel effet dynamique est connu sous le nom de l'effet Hall anormal.

Récemment la signification géométrique de l'effet Hall anormal d'origine intrinsèque a été identifiée comme conséquence de la présence d'une phase de Berry. En effet, on considérant la phase de Berry $a_n(\mathbf{k}) = i\langle u_n(\mathbf{k}) | d\mathbf{k} | u_n(\mathbf{k}) \rangle$ où la fonction d'onde $u_n(\mathbf{k})$ est la partie périodique des ondes de Bloch. Alors l'opérateur de position covariant de jauge $x_v = i\frac{\partial}{\partial k_v} - a_n^v(\mathbf{k})$ pour un paquet d'ondes associé à un électron dans une bande d'énergie

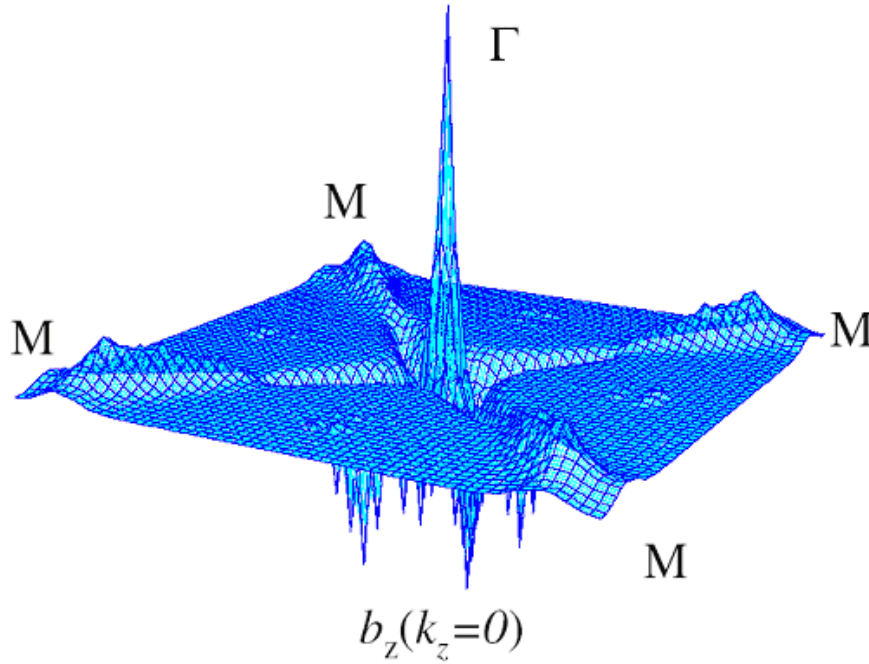
donnée n , vérifie la relation de commutation suivante :

$$[x_\nu, x_\nu] = \frac{\partial a_n^\nu(\mathbf{k})}{\partial k_\nu} - \frac{\partial a_n^\nu(\mathbf{k})}{\partial k_\nu} = -iF_{\nu\nu}(\mathbf{k}), \quad (2.49)$$

où $F_{\nu\nu}(\mathbf{k})$ est la courbure de Berry dans l'espace des impulsions. La conductivité transversale σ_{xy} peut être écrite comme une intégrale de la courbure de la phase de Berry associée à tous les états électroniques occupés dans l'espace des impulsions :

$$\sigma_{xy} = \sum n_f(E_n(\mathbf{k})) b_z(\mathbf{k}). \quad (2.50)$$

A partir de résultats expérimentaux, Fang et ses collaborateurs ont déduit numériquement que ces courbures de Berry $F_{\nu\nu}(\mathbf{k})$ dans un certain nombre de semi-conducteurs magnétiques et des métaux de transition s'identifient à un monopôle en impulsion qui est présenté par un pic aux points où le champ de courbure devient singulier ou infini (Voir fig.2-1).



Champ de jauge dans l'espace des impulsions obtenu par des calculs de premier-principe pour un cristal SrRuO₃. La crête pointue au point $k_z = 0$ correspond au monopôle magnétique de Dirac $\propto \frac{\mathbf{p}}{p^3}$.

2.4.2 L'algèbre $SO(3)$ et la MQNC

Nous généralisons la mécanique quantique dans le cadre de la géométrie non-commutative en introduisant le paramètre θ qui est une fonction des variables r et p . Ceci est motivé par le fait que :

(i) Pour un champ θ constant, nous prouvons qu'une particule dans un potentiel harmonique a un comportement semblable à une particule dans un champ magnétique constant θ de la mécanique quantique standard, avec un terme paramagnétique qui apparaît dans l'hamiltonien. D'ailleurs la particule en présence du champ θ acquiert une masse effective duale de la même manière que celle d'un électron se déplaçant dans un potentiel périodique pour un solide. Ainsi il est légitime d'interpréter ce champ comme un champ ayant les propriétés du vide. Dans ce contexte il est normal de prolonger la théorie avec un champ non-constant. Cette proposition est fortement imposée par la brisure de symétrie induite par les générateurs de groupe des rotations dans l'espace non commutatif. Afin de restaurer cette algèbre, nous prouvons alors que ce champ doit être identifié à un monopôle magnétique de Dirac dans l'espace des impulsions. Ces effets physiques montrent une dualité entre les quantités définies dans l'espace des impulsions comparées à celles définies dans l'espace des positions.

(ii) La deuxième motivation vient des travaux théoriques récents [173] relatif à l'effet Hall anormal dans les composés ferromagnétique bidimensionnels prévoyant la singularité topologique dans la zone de Brillouin qui est due à la phase de Berry. En effet une des expériences très récentes effectuées dans le même contexte [19] prévoit un monopôle magnétique en impulsion. Ce dernier qui apparaît naturellement dans l'expression de la conductivité de Hall [52] présente des singularités à l'origine des coordonnées. Nous considérerons alors ce cadre comme une réalisation physique d'une théorie plus générale, où la courbure de Berry correspond à ce champ θ .

Propriétés du champ $\theta(p)$

Considérant une particule quantique de masse m dont les coordonnées satisfont à l'algèbre de Heisenberg déformée :

$$[x_i, x_j] = i\hbar q_\theta \theta_{ij}(x, p) \quad (2.51)$$

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (2.52)$$

$$[p_i, p_j] = 0, \quad (2.53)$$

où θ est un champ qui est une fonction a priori de la position $\mathbf{r}$ et de l'impulsion $\mathbf{p}$ et q_θ est une charge caractérisant l'intensité de l'interaction de la particule avec le champ θ . La relation de commutation entre les impulsions implique qu'il n'y a aucun champ magnétique extérieur bien que sa présence ne pose pas de problème. Il est bien connu que ces relations de commutation puissent être obtenues à partir de la déformation de l'algèbre de Poisson pour des observables classiques en introduisant le produit de Weyl-Wigner-Moyal [93] développé au premier ordre en θ . L'identité de Jacobi suivante :

$$[p_i, [x_j, x_k]] + [x_j, [x_k, p_i]] + [x_k, [p_i, x_j]] = 0, \quad (2.54)$$

implique une propriété importante qui est que le champ θ est indépendant de la position $\theta_{jk} = \theta_{jk}(p)$. Alors on peut considérer ce champ comme un dual d'un champ magnétique et q_θ comme un dual d'une charge électrique. Le fait que le champ soit homogène dans l'espace est une propriété essentielle du vide. En outre, on voit facilement qu'une particule dans ce domaine se déplace librement, c'est à dire, le champ de vide n'agit pas sur le mouvement de la particule en l'absence d'un potentiel externe. L'effet du champ θ se manifeste seulement en présence d'un potentiel qui dépend de la position. Pour aller plus loin dans les propriétés de ce champ θ , considérons l'autre identité de Jacobi entre les positions

$$[x_i, [x_j, x_k]] + [x_j, [x_k, x_i]] + [x_k, [x_i, x_j]] = 0, \quad (2.55)$$

donnant l'équation du mouvement du champ :

$$\frac{\partial\theta_{ij}}{\partial p_k} + \frac{\partial\theta_{jk}}{\partial p_i} + \frac{\partial\theta_{ki}}{\partial p_j} = 0, \quad (2.56)$$

qui est l'équation duale de l'équation de Maxwell $\text{div } B = 0$. Comme nous verrons plus tard, l'équation (2.56) n'est pas satisfaisante en présence d'un monopôle et ceci aura des conséquences importantes. Si nous considérons maintenant la transformation de la position $X^i = x^i + q_\theta a_\theta^i(x, p)$ où a_θ est a priori une fonction de la position et de l'impulsion, qui

restaure l'algèbre canonique habituelle de Heisenberg

$$[X_i, X_j] = 0 \quad (2.57)$$

$$[X_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (2.58)$$

$$[p_i, p_j] = 0. \quad (2.59)$$

La deuxième relation de commutation (2.58) implique que a_θ est indépendante de la position, alors que la relation de commutation entre les positions (2.57) mène à une expression de θ en terme du champ de jauge a_θ de la manière suivante :

$$\theta_{ij}(p) = \frac{\partial a_\theta^i(p)}{\partial p_j} - \frac{\partial a_\theta^j(p)}{\partial p_i}. \quad (2.60)$$

Cette relation est duale de la relation standard d'électromagnétique dans l'espace des positions. Afin d'examiner plus en détail les propriétés de ce nouveau champ, considérons un des cas les plus simples que l'on puisse imaginer : celui d'une particule dans un oscillateur harmonique soumise à un champ constant θ_{ij} . L'hamiltonien d'un oscillateur harmonique exprimé en termes des coordonnées originales (x, p) s'écrit :

$$H_\theta(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2, \quad (2.61)$$

d'où nous obtenons :

$$p_i = m\dot{x}_i - kq_\theta\theta_{ij}x_j \quad , \quad \dot{p}_i = -kx_i , \quad (2.62)$$

et l'équation du mouvement

$$m\ddot{x}_i = kq_\theta\theta_{ij}\dot{x}_j - kx_i , \quad (2.63)$$

qui correspond formellement à une particule dans un oscillateur harmonique qui est soumise à un champ magnétique extérieur constant. De l'équation (2.60) nous déduisons que $a_\theta^i(p) = q_\theta\theta_{ij}p_j$ d'où $X^i = x^i + \frac{1}{2}q_\theta\theta_{ij}p_j$. L'hamiltonien dans ce cas peut alors s'écrire comme

$$H_\theta(X, p) = \frac{(m_*^{-1})p_i p_j}{2} + \frac{k}{2}X^2 - k\frac{q_\theta}{2m}\vec{\theta} \cdot \vec{L}, \quad (2.64)$$

avec

$$L_i(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} (X_j p_k + p_k X_j) , \quad (2.65)$$

où $\theta_{ij} = \delta_{ij} \theta^2 - \theta_i \theta_j$ qui est le tenseur dual du tenseur de Maxwell. L'interaction avec le champ θ est due à la présence du potentiel harmonique dépendant de la position qui mène à une interaction paramagnétique duale pouvant être expérimentalement observable. Comme dans l'étude en physique solide d'un électron dans le potentiel périodique crée par des ions, la particule dans un champ θ acquiert une masse effective qui brise l'homogénéité de l'espace. Cette très forte analogie avec le vide d'un solide nous pousse à regarder ce champ θ comme une propriété du vide lui-même.

Le moment angulaire en MQNC :

Considérant maintenant le problème du moment angulaire, il est évident quand on l'exprime en coordonnées canoniques, qu'il vérifie l'algèbre du groupe des rotations, cependant il n'est pas conservé

$$\frac{d\vec{\mathbf{L}}(\mathbf{X}, \mathbf{p})}{dt} = k_{q\theta} \vec{\mathbf{L}} \times \vec{\boldsymbol{\theta}} . \quad (2.66)$$

Dans les coordonnées originales (commutatives) (x, p) , le moment angulaire habituel $L_i(x, p) = \varepsilon_{ijk} x_j p_k$ ne satisfait pas cette algèbre. Ainsi il semble qu'il n'y a aucun générateur de rotation dans l'espace (x, p) . Nous montrerons alors qu'un véritable moment angulaire peut être défini seulement si θ est un champ non constant.

De la définition du moment angulaire nous déduisons les relations de commutation suivantes $[x_i, L_j] = \varepsilon_{ijk} x_k$

$$[x_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k + i\hbar q_\theta \varepsilon_{jkl} p_l \theta_{ik}(p) \quad (2.67)$$

$$[p_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} p_k \quad (2.68)$$

$$[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k + i\hbar q_\theta \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} p_l p_n \theta_{km}(p), \quad (2.69)$$

prouvant en particulier que l'algèbre $SO(3)$ est brisée. Pour reconstituer cette algèbre

nous considérons la loi de transformation suivante :

$$L_i \rightarrow \mathbf{L}_i = L_i + M_\theta^i(x, p), \quad (2.70)$$

et exigeant les relations de commutation suivantes :

$$[x_i, \mathbf{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k \quad (2.71)$$

$$[p_i, \mathbf{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} p_k \quad (2.72)$$

$$[\mathbf{L}_i, \mathbf{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k. \quad (2.73)$$

On déduit que la deuxième équation (2.72) implique que le moment $\mathbf{M}$ dépend seulement de l'impulsion

$$M_\theta^i(x, p) = M_\theta^i(p), \quad (2.74)$$

tandis que la troisième (2.73) mène à

$$M_\theta^i(p) = \frac{1}{2} q_\theta \varepsilon_{jkl} p_j p_l \theta_{kj}(p). \quad (2.75)$$

Les deux équations (2.73) et (2.75) nous permettent de définir un monopôle dual de Dirac dans l'espace des impulsions :

$$\vec{\theta}(\mathbf{p}) = \frac{g_\theta}{4\pi} \frac{\vec{\mathbf{p}}}{p^3}, \quad (2.76)$$

où g_θ est la charge magnétique duale associée au champ θ . En conséquence nous avons

$$\vec{\mathbf{M}}_\theta(\mathbf{p}) = -\frac{q_\theta g_\theta}{4\pi} \frac{\vec{\mathbf{p}}}{p}, \quad (2.77)$$

qui est le moment dual du célèbre moment de Poincaré présenté dans l'espace de positions [154, 172]. Alors que le moment angulaire généralisé

$$\mathbf{L} = m \left(\vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{p}} \right) - \frac{q_\theta g_\theta}{4\pi} \frac{\vec{\mathbf{p}}}{p}, \quad (2.78)$$

est le vrai moment angulaire satisfaisant l'algèbre de groupe $SO(3)$, c'est l'addition du moment angulaire de la particule et du champ du monopôle dual. On peut vérifier que

c'est une quantité conservée pour une particule libre. La dualité entre le monopôle dans l'espace des moments et le monopôle de Dirac est due à la symétrie des relations de commutation de la mécanique quantique non-commutative où $[x_i, x_j] = i\hbar q_\theta \varepsilon_{ijk} \theta_k(\mathbf{p})$ et de la mécanique quantique standard dans un champ magnétique où $[v_i, v_j] = i\hbar q \varepsilon_{ijk} B_k(\mathbf{x})$. Par conséquent les deux champs de jauge $\theta(\mathbf{p})$ et $B(\mathbf{x})$ sont dual l'un de l'autre. En présence d'un monopôle l'identité de Jacobi (2.55) n'est pas vérifiée

$$\begin{aligned} & [x_i, [x_j, x_k]] + [x_j, [x_k, x_i]] + [x_k, [x_i, x_j]] \\ &= -q_\theta \hbar^2 \frac{\partial \theta_i(p)}{\partial p_i} \\ &= -4\pi q_\theta \hbar^2 \delta^3(p). \end{aligned} \tag{2.79}$$

On peut interpréter tout ceci par analogie avec l'explication donnée par Jackiw [174] d'une violation comparable de l'identité de Jacobi entre les impulsions par le monopôle de Dirac dans la mécanique quantique standard. La présence de monopôle dans l'espace des moments est liée à la brisure de symétrie du groupe des translations pour les impulsions. Par conséquent la loi d'addition des moments est différente de la loi additionnelle de Galilée habituelle. En effet si nous définissons l'élément du groupe des translations des moments par :

$$T(\vec{b}) = \exp \left(i \vec{\mathbf{r}} \cdot \vec{b} / \hbar \right), \tag{2.80}$$

nous avons la relation suivante :

$$T(\vec{b}_1)T(\vec{b}_2) = \exp \left\{ i \frac{q_\theta}{\hbar} \Phi(\mathbf{p}; b_1, b_2) \right\} T(\vec{b}_1 + \vec{b}_2), \tag{2.81}$$

où $\Phi(\mathbf{p}; b_1, b_2)$ est le flux de champ θ . Ce terme est responsable de la violation de l'associativité qui est seulement restaurée si l'équation de quantification suivante est satisfaite

$$\int d^3\mathbf{p} \frac{\partial \theta_i}{\partial p_i} = \frac{2\pi n \hbar}{q_\theta}, \tag{2.82}$$

menant à $q_\theta g_\theta = \frac{n\hbar}{2}$, qui est comparable à la quantification de Dirac [174]. Nous avons déjà mentionné dans le paragraphe précédent que la configuration singulière dans l'espace des moments, a été découverte dans une expérience dans le cadre de l'effet Hall anormal pour un cristal ferromagnétique [19]. L'analogie entre ce résultat et le monopôle que nous avons

déduit de la considération de la symétrie dans la mécanique quantique non-commutative, nous suggère d'interpréter la courbure de Berry dans l'effet Hall anormal comme un champ non commutatif

$$\vec{\theta}(\mathbf{p}) = \frac{g_\theta}{4\pi} \frac{\vec{\mathbf{P}}}{p^3}. \quad (2.83)$$

Le lien avec la mécanique quantique non-commutative est alors clairement évident : $\theta(\mathbf{p})$ est le champ correspond à la courbure de Berry F_k et $a_\theta(p)$ est associé à la phase de Berry $a_n(k)$. Ceci prouve que des situations physiques avec une phase de Berry dans l'espace des moments pourraient être exprimées dans le cadre de la mécanique quantique non-commutative. Ce lien étroit entre la mécanique quantique non-commutative et la phase de Berry est justifié par la volonté de préserver des symétries exactes. En effet, la restauration de l'algèbre de Heisenberg implique l'existence d'un champ de jauge dual dans l'espace des moments. Ensuite les propriétés de ce nouveau champ qui doit satisfaire l'algèbre de groupe $SO(3)$ impliquent que ce champ est le monopôle dual de Dirac dans l'espace des impulsions. Ce monopôle est responsable de la violation de l'identité de Jacobi et implique la non-associativité de la loi d'addition des moments. Pour reconstituer l'associativité, une quantification duale de Dirac est nécessaire. On peut alors interpréter le champ $\theta(\mathbf{p})$ comme une courbure de Berry exprimée dans l'espace des impulsions dans le cadre de l'effet Hall anormal.

2.5 Lien entre la phase de Berry et la MQNC

Nous avons généralisé la mécanique quantique non-commutative en considérant une particule quantique dont les coordonnées satisfont à l'algèbre déformée de Heisenberg :

$$[x_i, x_j] = i\hbar g_\theta \theta_{ij}(x, p) \quad (2.84)$$

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (2.85)$$

$$[p_i, p_j] = 0. \quad (2.86)$$

Une conséquence importante de la non-commutativité entre les coordonnées est que l'algèbre $SO(3)$ est déformée. Pour remédier à cette absence de la symétrie des générateurs

du groupe des rotations on a introduit un monopôle de Dirac dans l'espace des moments pour l'algèbre des positions de la manière suivante

$$[x_i, x_j] = i\hbar\lambda\varepsilon_{ijk}\frac{p_k}{p^3}. \quad (2.87)$$

Une autre manière possible de représenter des relations de commutation qui satisfont à l'algèbre de groupe des rotations est d'introduire un nouvel opérateur de position

$$\mathbf{R} = \mathbf{r} - \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{S}}{p^2}. \quad (2.88)$$

Le moment angulaire s'écrit alors :

$$\mathbf{J} = \mathbf{R} \times \mathbf{p} + \mathbf{S}. \quad (2.89)$$

L'énergie potentielle dans ce cas contient maintenant un terme supplémentaire dû à l'interaction spin-orbite $V(\mathbf{R} + \mathbf{p} \times \mathbf{S}/p^2)$. En fait, le procédé inverse est généralement plus efficace. En considérant un hamiltonien ayant une interaction spin-orbite particulière, on peut essayer d'obtenir un hamiltonien ayant une dynamique due à l'algèbre non-commutative des coordonnées. Ce procédé a été appliqué avec succès à l'étude du transport adiabatique dans les semi-conducteurs en présence de l'interaction spin-orbite [44] où la dynamique est régie par la relation de commutation (2.87). L'aspect important est de déterminer lequel des opérateurs de positions r ou R décrira la vraie trajectoire moyenne de la particule. En fait il est bien connu que R ne possède pas la vraie propriété d'un opérateur de position d'une particule relativiste. Nous verrons que cette remarque cruciale implique une nouvelle prévision au sujet de la limite non-relativiste d'une particule de Dirac. Dans la physique des particules il est à ce jour bien connu que le non-commutativité des coordonnées des particules sans masse est une propriété fondamentale parce que l'opérateur de position ne se transforme pas comme un vecteur à moins qu'il satisfasse l'équation (2.87) et que $\theta_{ij}(p)$ soit la courbure de Berry pour une particule sans masse avec une hélicité donnée λ [175]. Dans ce paragraphe nous présentons un autre point de vue pour introduire le monopôle dual de Dirac dans la physique des hautes énergies et la physique de la matière condensée en considérant l'évolution adiabatique des particules relativistes. En particulier le calcul de la courbure de Berry des particules de Dirac provoque un opérateur de position non com-

mutatif qui a été déjà postulé par Bacry [176]. Une généralisation à n'importe quel spin est possible par l'intermédiaire des équations du mouvement de Bargmann-Wigner [177]. Ce formalisme nous mène à généraliser l'algèbre non-commutative en considérant un champ θ qui dépend aussi bien de l'impulsion que du spin. La connexion associée est alors non abélienne mais devient abélienne dans la limite où la masse devient nulle ce qui mène à une configuration d'un monopôle pour la courbure de Berry.

2.5.1 Représentation de Foldy-Wouthuysen

La transformation de Foldy-Wouthuysen [158] consiste à effectuer, un développement de l'équation de Dirac à n'importe quel ordre en v/c par une transformation unitaire. Dans la nouvelle représentation, l'hamiltonien à l'ordre considéré que nous noterons H_{FW} , est un opérateur pair de sorte que grandes et petites composantes sont complètement découplées à cet ordre. En ignorant les petites composantes, on obtient une théorie approchée à deux composantes. Les opérateurs agissant sur ces snipeurs à deux composantes sont obtenus en projetant les opérateurs de la représentation de Foldy-Wouthuysen sur l'espace associé aux grandes composantes. Cela nécessite généralement une nouvelle interprétation des opérateurs. Notamment, on verra que l'on obtient, dans cette représentation, un opérateur position beaucoup plus satisfaisant que dans la représentation à quatre composantes de Dirac. L'hamiltonien de Dirac pour une particule relativiste d'une masse M a la forme

$$H = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta M + V(\mathbf{R}), \quad (2.90)$$

où V est un opérateur qui agit seulement sur les degrés de liberté orbitaux. Dans ce cas, il est possible de découpler grandes et petites composantes. Les grandes composantes deviennent alors dans cette représentation les états d'énergie positive alors que les petites composantes décrivent les états d'énergie négative. Définissons les projecteurs $A_{\pm}$ sur les états d'énergie positive et négative respectivement

$$A_{\pm} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{H_D}{E_p} \right] = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta M}{E_p} \right], \quad (2.91)$$

où $E_p = \sqrt{p^2 + M^2}$ est la valeur propre d'une onde plane d'impulsion $\mathbf{p}$. De même, on définit les projecteurs $B_{\pm}$ sur l'espace, respectivement, des grandes et petites composantes :

$$B_{\pm} = \frac{1}{2} [1 \pm \beta]. \quad (2.92)$$

La transformation que l'on cherche doit permettre de transformer un état propre d'énergie positive (bi-spineur), en un spineur à deux composantes. L'opérateur U de la transformation de Foldy-Wouthuysen doit donc transformer le projecteur A_+ en B_+ et A_- en B_- . Par définition, U doit satisfaire :

$$UU^+ = U^+U = 1 \quad \text{et} \quad B_{\pm} = UA_{\pm}U^+. \quad (2.93)$$

U étant unitaire, on doit avoir : $U = e^{iS}$. Comme U doit permettre de supprimer les termes impairs dans l'hamiltonien $(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})$, on cherche un opérateur S de la forme :

$$S = -\frac{i}{2M} \beta (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) \times \boldsymbol{\theta}, \quad (2.94)$$

où θ est une fonction de p/M que l'on détermine en imposant la suppression des termes impairs dans l'hamiltonien. On trouve

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2E_p}{M + E_p}} \left[1 + \beta \frac{H_D}{E_p} \right] \\ &= \frac{E_p + Mc^2 + c\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{2E_p(E_p + Mc^2)}}, \end{aligned} \quad (2.95)$$

avec $E_p = \sqrt{p^2 c^2 + Mc^4}$,

2.5.2 Hamiltonien pour une particule massive

La transformation (2.95) permet de déterminer l'hamiltonien H_{FW} dans la représentation de Foldy-Wouthuysen :

$$H_{FW} = U(\mathbf{p}) H U(\mathbf{p})^+ = E_p \beta + U(\mathbf{p}) V (i\hbar \partial_{\mathbf{p}}) U(\mathbf{p})^+. \quad (2.96)$$

L'énergie cinétique est maintenant diagonale tandis que le terme d'énergie potentielle devient $V(\mathbf{D})$ avec une dérivé covariante définie par $\mathbf{D} = i\hbar\partial_{\mathbf{p}} + \mathbf{A}$, et avec un potentiel de jauge $\mathbf{A} = i\hbar U(\mathbf{p})\partial_{\mathbf{p}}U(\mathbf{p})^+$, qui s'écrit

$$\mathbf{A} = \frac{\hbar c (ic^2 \mathbf{p} (\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\beta}) + i\beta (E_p + Mc^2) E_p \boldsymbol{\alpha} - cE_p \boldsymbol{\Sigma} \times \mathbf{p})}{2E_p^2 (E_p + Mc^2)}, \quad (2.97)$$

où $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{1} \otimes \boldsymbol{\sigma}$, qui est une matrice 4×4 . Considérons l'approximation adiabatique en considérant que le degré de liberté de l'impulsion en tant que lent et le degré de liberté de spin en tant que rapide, comme dans la configuration nucléaire dans le traitement adiabatique des problèmes moléculaires, ce qui nous permet de négliger la transition entre les niveaux. Nous ne gardons que le bloc matriciel diagonal dans le potentiel de jauge et nous projetons sur le sous-espace d'énergie positive. Cette projection élimine le zitterbewegung qui correspond à un mouvement oscillatoire autour de la position moyenne de la particule qui mélange les énergies positives et négatives.

2.5.3 Opérateur de position

En utilisant la transformation (2.95) nous obtenons une connexion de jauge non triviale qui nous permet de définir un nouvel opérateur de position r pour cette particule :

$$r = i\hbar\partial_{\mathbf{p}} + \frac{c\hbar (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\sigma})}{2E_p (E_p + Mc^2)}, \quad (2.98)$$

qui est une matrice de 2×2 . Cet opérateur de position (2.98) n'est pas nouveau, il avait déjà été postulé par Bacry [176] . En effet, dans un contexte complètement différent, en considérant la représentation irréductible du groupe de Poincaré, cet auteur a proposé d'adopter un opérateur de position général pour les particules massives ou sans masse ayant un spin quelconque. Dans cette approche qui est facilement généralisable à n'importe quel spin, la partie anormale de l'opérateur de position résulte d'un processus adiabatique d'un système en interaction qui est liée à la connexion de Berry. On peut montrer alors que la partie anormale de l'opérateur de position peut être interprétée comme la connexion de Berry dans l'espace des moments, qui est par définition une matrice 4×4 :

$$\mathbf{A}_{\alpha\beta}(\mathbf{p}) = i\hbar \langle \alpha \mathbf{p} + |\partial \mathbf{p}| \beta \mathbf{p} + \rangle, \quad (2.99)$$

où $|\alpha\mathbf{p}+\rangle$ est un vecteur propre de l'équation libre de Dirac pour des énergies positives. La connexion de Berry peut également être écrite comme

$$\mathbf{A}_{\alpha\beta}(\mathbf{p}) = i\hbar\langle\Phi_\alpha|U\partial\mathbf{p}U^+|\Phi_\beta\rangle, \quad (2.100)$$

en termes de vecteurs de base canoniques $|\Phi_\alpha\rangle = (1000)$ et $|\Phi_\beta\rangle = (0100)$. Avec l'élément non nul appartenant seulement au sous-espace positif, nous pouvons définir la connexion de Berry en considérant la matrice 2×2 suivante :

$$\mathbf{A}(\mathbf{p}) = i\hbar P (U\partial\mathbf{p}U^+) , \quad (2.101)$$

où P est un projecteur sur le sous-espace d'énergie positive. Dans ce contexte le champ θ qui a été postulé dans [17, 154, 157] émerge naturellement par suite du mouvement adiabatique d'une particule de Dirac et correspond à une courbure de jauge non-abélienne qui satisfait la relation

$$\theta^{ij}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}) = \partial_{p^i} A^j - \partial_{p^j} A^i + [A^i, A^j] . \quad (2.102)$$

Les relations de commutation entre les coordonnées sont alors données par :

$$\begin{aligned} [x^i, x^j] &= i\hbar\theta^{ij}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}) \\ &= -i\hbar^2\epsilon_{ijk}\frac{c^4}{2E_p^3}\left(M\sigma^k + \frac{p^k(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma})}{E_p + Mc^2}\right). \end{aligned} \quad (2.103)$$

Cette relation a des conséquences très importantes puisque elle implique la non localisation des particules à spin. Ce fait est intrinsèque et il n'est pas lié à la création de paires durant le processus de mesure (pour un exposé détaillé de cet aspect important voir [176]).

2.5.4 Courbure de Berry non abélienne

Il est possible de généraliser la construction de l'opérateur de position pour une particule avec un spin $n/2$ quelconque par les équations de Bargmann-Wigner

$$(\gamma_\mu^{(i)}\partial_\mu + M + V)\Psi_{(a_1\dots a_n)} = 0, \quad (2.104)$$

où $\Psi(a_1 \dots a_n)$ est une amplitude de Bargmann-Wigner et $\gamma_\mu^{(i)}$ sont des matrices opérantes sur a_i .

Pour chaque équation nous avons un hamiltonien

$$H^{(i)} = \alpha^{(i)} \cdot \mathbf{p} + \beta M + V, \quad (2.105)$$

et donc

$$\left(\prod U^{(j)}(p) \right) H^{(i)} \left(\prod U^{(j)}(p) \right)^+ = E_p \beta^{(i)} + V(\mathbf{D}), \quad (2.106)$$

avec

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= i\hbar \partial_{\mathbf{p}} + \sum A^{(i)} \quad \text{et} \\ A^{(i)} &= i\hbar U^{(i)}(\mathbf{p}) \partial_{\mathbf{p}} U^{(i)}(\mathbf{p})^+ \end{aligned} \quad (2.107)$$

En faisant comme précédemment (approximation adiabatique et projection sur les énergies positives) on obtient l'opérateur du position r pour les particules de spin quelconque

$$r = i\hbar \partial_{\mathbf{p}} + \frac{c^2 (\mathbf{p} \times \mathbf{S})}{E_p (E_p + Mc^2)}, \quad (2.108)$$

avec $S = \hbar (\sigma^{(1)} + \dots + \sigma^{(n)}) / 2$. La généralisation de l'équation (2.103) est alors :

$$\begin{aligned} [x^i, x^j] &= i\hbar \theta^{ij}(\mathbf{p}, \mathbf{S}) \\ &= -i\hbar^2 \varepsilon_{ijk} \frac{c^4}{2E_p^3} \left(MS^k + \frac{p^k (\mathbf{p} \cdot \mathbf{S})}{E_p + Mc^2} \right). \end{aligned} \quad (2.109)$$

2.5.5 Particule non massive

Pour une particule sans masse, nous déduisons la relation

$$r = i\hbar \partial_{\mathbf{p}} + \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{S}}{p^2}, \quad (2.110)$$

avec la relation de commutation donnant un monopôle

$$[x^i, x^j] = i\hbar \theta^{ij}(\mathbf{p}, \mathbf{S}) = -i\hbar \varepsilon_{ijk} \lambda \frac{p_k}{p^3}, \quad (2.111)$$

où l'hélicité est définie par

$$\lambda = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{S}}{p} = g_\theta q_\theta. \quad (2.112)$$

Nous retrouvons le monopôle introduit dans le paragraphe précédent afin de restaurer la symétrie $SO(3)$. Ici il a une interprétation physique très simple, il correspond à la courbure de Berry résultant d'un processus adiabatique pour une particule sans masse d'hélicité λ . D'autre part, il n'est pas surprenant qu'une particule sans masse possède une configuration de monopôle car il est bien connu en physique de solide que lorsqu'on est en présence d'une dégénérescence de bandes on a également un monopôle qui apparaît dans l'espace des moments [1]. C'est précisément ce qui se passe dans ce cas pour une particule sans masse ou les bandes d'énergie positive et négative sont dégénérées en $p = 0$. Ce monopôle est le cas limite d'une courbure de jauge non abélienne provenant d'une particule massive soumise à un processus adiabatique. Si $\lambda = \pm 1$ nous sommes en présence d'un photon dont l'opérateur position a la propriété non-commutative en accord avec sa faible localisation ce qui est certainement un fait expérimental. Le couplage spin-orbite qui apparaît dans l'expression de l'opérateur du position (2.108) est une très petite correction dans le contexte de la physique des particules, mais elle pourrait être beaucoup plus importante dans celui de la physique du solide parce que l'effet spin-orbite est beaucoup plus important que dans le vide. Par exemple, dans les semi-conducteurs le monopôle dans l'espace des impulsions a été prédit et observé dans le cas de la limite $E_G \rightarrow 0$ entre les bandes de valence et les bandes de conduction [178, 179]. Il est également intéressant de regarder les propriétés de symétrie de l'opérateur du position en ce qui concerne le groupe des rotations spatiales. En termes de coordonnées commutatives $\mathbf{R}$, le moment angulaire est par définition $\mathbf{J} = \mathbf{R} \times \mathbf{p} + \mathbf{S}$, tandis qu'en termes de coordonnées non-commutatives, le moment angulaire s'écrit

$$\mathbf{J} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} + \mathbf{M}, \quad (2.113)$$

où

$$\mathbf{M} = \mathbf{S} - \mathbf{A} \times \mathbf{p}. \quad (2.114)$$

On peut explicitement vérifier qu'en termes de coordonnées non-commutatives, la relation $[x^i, J^j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k$ est satisfaite; donc, comme R , r se transforme en un vecteur sous les rotations de l'espace, mais la relation $d\mathbf{R}/dt = c\mathbf{a}$ est physiquement inacceptable.

Pour une particule sans masse, l'équation (2.114) mène à un moment de Poincaré lié au monopôle dans l'espace des impulsions qui est introduit par Bérard et Mohrbach [17].

2.5.6 Applications physiques

Nous nous intéressons maintenant à regarder quelques propriétés physiques de l'opérateur de position non-commutatif sur des exemples concrets. Considérons l'équation du mouvement d'une particule dans un potentiel arbitraire. En raison de la présence de la phase de Berry dans la définition de la position, l'équation du mouvement change. Afin de calculer le commutateur $[x_k, V(\mathbf{x})]$, on peut considérer l'approximation semi-classique $[x_k, V(\mathbf{x})] = i\hbar\partial_l V(x)\theta^{kl} + O(\hbar^2)$, qui donne les équations du mouvement suivantes :

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}} &= \frac{\mathbf{p}}{E_p} - \dot{\mathbf{p}} \times \boldsymbol{\theta} \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\nabla V(\mathbf{r}),\end{aligned}\tag{2.115}$$

avec $\theta_i = \varepsilon_{ijk}\theta_{jk}$. Ces équations sont la généralisation relativiste des équations trouvées dans [19] qui mènent à l'effet Hall de spin dans les semi-conducteurs. Les équations (2.115) ont également la même forme que celles qui sont trouvées dans [180, 181] dans le cadre de la physique de la matière condensée pour une particule sans spin se propageant dans un potentiel périodique. La seule différence est que la phase de Berry qui est seulement due au potentiel périodique a une origine physique complètement différente de celle introduite dans [180, 181]. Une application physique importante de ce formalisme concerne la limite non-relativiste d'une particule de spin de Dirac qui possède une charge dans un potentiel $V(\mathbf{r})$. Dans cette limite, nous obtenons

$$H(\mathbf{R}, \mathbf{p}) \approx Mc^2 + \frac{p^2}{2M} + V(\mathbf{R}) + \frac{e\hbar}{4M^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}),\tag{2.116}$$

qui est l'hamiltonien de Pauli avec un terme d'interaction spin-orbite. Comme indiqué dans [182], l'approximation de Born-Oppenheimer pour l'équation de Dirac mène au même hamiltonien non-relativiste par suite de la phase de Berry

$$\theta_{ij} = -\frac{\varepsilon_{ijk}\sigma_k}{2Mc^2}.\tag{2.117}$$

Comme conséquence de l'équation (2.116), nous déduisons la vitesse liée à l'opérateur position $\mathbf{R}$

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{p_i}{M} + \frac{e\hbar}{4M^2c^2}\varepsilon_{ijk}\sigma_j\partial_k V(\mathbf{r}), \quad (2.118)$$

tandis que la limite non-relativiste de l'équation (2.115) mène à l'opérateur de vitesse suivant :

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{p_i}{M} + \frac{e\hbar}{2M^2c^2}\varepsilon_{ijk}\sigma_j\partial_k V(\mathbf{r}). \quad (2.119)$$

Ce résultat prévoit une augmentation de l'interaction spin-orbite quand le nouvel opérateur de position est considéré. On peut apprécier la similitude entre notre résultat et la précession de Thomas. En effet, ce résultat offre une autre manifestation à la précession de Thomas qui présente une différence entre la limite galiléenne menant à l'équation (2.118) et la limite non-relativiste menant à l'équation (2.119). La limite ultra-relativiste nous donne un autre exemple de transport topologique de spin. Expérimentalement, on a déjà observé un transport topologique de spin dans le cas de la propagation des photons dans un milieu non homogène [183, 184], où la polarisation des photons polarisés circulairement gauche et droits ont des trajectoires différentes dans un guide d'onde, un phénomène qui est interprété en mécanique quantique comme résultant de l'interaction entre le moment orbital et le spin du photon [183, 184]. Cette approche fournit une nouvelle interprétation pour cet effet, également connu sous le nom d'« effet Magnus optique », qui est maintenant expliquée en termes de la non-commutativité de l'opérateur position qui contient un terme d'interaction spin-orbite. Pour illustrer notre formalisme, considérant un simple hamiltonien qui décrit un photon dans un milieu non homogène $H = pc/n(r)$. Les équations du mouvement $\dot{\mathbf{x}} = [\mathbf{x}, H]/i\hbar$ et $\dot{\mathbf{p}} = [\mathbf{p}, H]/i\hbar$ dans l'approximation semi-classique mène à la relation suivante

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{c}{n} \left(\frac{p_i}{p} + \frac{\lambda\varepsilon_{ijk}}{p^2} \frac{\partial \ln n}{\partial x_j} \right), \quad (2.120)$$

qui contient une contribution qui est due à la phase de Berry. Par conséquent, la vitesse n'est plus égale à c/n . Les équations (2.120) sont identiques à celles présentées phénoménologiquement dans [183, 184], mais ici, elles sont rigoureusement déduites des considérations physiques différentes. Des équations semblables sont également données dans [185] où l'effet Magnus optique est également interprété en termes de courbure de Berry, mais dans

le cadre de l'optique géométrique.

En résumé, la généralisation des crochets de Feynman appliquée aux opérateurs positions conduit à la mécanique quantique non-commutative. Nous avons alors montré que le paramètre de la non commutativité θ entre les opérateurs positions doit être une fonction de l'impulsion si on veut définir un moment angulaire. Ceci s'oppose aux nombreux théories qui considèrent θ comme une constante. Nous avons alors proposé que ce monopôle pouvait correspondre à une courbure de Berry associée à un électron de Bloch ou de Dirac. D'autre part, nous avons examiné l'évolution adiabatique de l'équation de Dirac afin de clarifier la relation qui existe entre ce monopôle et la courbure de Berry dans l'espace des impulsions. Nous avons constaté que l'opérateur de position acquiert naturellement une contribution anormale due à une connexion de Berry abélienne qui rend l'algèbre de la mécanique quantique non-commutative. Enfin, en utilisant l'équation de Bargmann-Wigner, nous avons généralisé notre formalisme à toutes les particules de spin connus. La non-commutativité des coordonnées est responsable du transport topologique de spin similaire à l'effet Hall de spin dans la spintronique ou de l'effet Magnus en optique.

Chapitre 3

La phase de Berry et les électrons de Bloch

3.1 Introduction

Les propriétés des électrons dans un solide sont habituellement décrites dans le cadre de la théorie d'électrons de Bloch dans un potentiel périodique. En particulier, l'étude de la dynamique semi-classique et les propriétés de transport des électrons de Bloch en présence des champs externes (magnétiques ou électriques) mènent à des résultats importants pour la compréhension des propriétés des métaux, des semi-conducteurs et d'isolants [186]. Pour des champs extérieurs faibles, le modèle semi-classique interdit les transitions interbandes, et requiert donc que l'énergie d'un électron reste confinée à l'intérieur des limites de la bande dans laquelle l'électron se trouvait lui-même à l'origine. Dans cette approximation la dynamique d'un électron de Bloch dans une $n^{ième}$ bande donnée est habituellement donnée par les équations du mouvement semi-classiques suivantes :

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (3.1)$$

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}} \quad (3.2)$$

où $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ sont les champs électriques et magnétiques respectivement . Le moment cristallin $\mathbf{K}$ pour un électron a été remplacé par un moment covariant de jauge $\mathbf{k} = \mathbf{K} + e\mathbf{A}(\mathbf{R})$ qui a été introduit pour la première fois par Peierls (substitution de Peierls) [187]. Cette

substitution qui a été d'abord justifiée par Peierls dans le cadre du modèle des liaisons fortes a été à l'origine de développements ultérieurs dans le cadre d'introduire d'hamiltoniens effectifs décrivant correctement le mouvement des électrons de Bloch en présence d'un champ magnétique extérieur [14, 53, 54, 81, 188–193]. Ces équations sont exactes à un certain ordre de champ extérieur appliqué. Ce n'est que récemment, dans une série d'articles, que les équations du mouvement semi-classiques des électrons de Bloch en présence d'un champ magnétique extérieur ont été introduites correctement [42, 180, 181, 194, 195]. Ces auteurs ont développés un outil puissant pour décrire la dynamique d'un paquet d'ondes représentant le mouvement des électrons dans des cristaux perturbés. Ils ont construit un paquet d'ondes en se basant sur les états de Bloch appartenant à une bande simple décrits par un hamiltonien local, obtenue en remplaçant les perturbations par leur valeur au centre du paquet d'ondes, et en dérivant sa dynamique sous une forme générale, basée sur un principe de variation dépendant du temps. Ils ont trouvé les nouvelles équations du mouvement suivantes en présence des champs électromagnétiques :

$$\dot{\mathbf{r}}_c = \frac{\partial \mathcal{E}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}_c} - \dot{\mathbf{k}} \times \Omega_n(\mathbf{k}_c) \quad (3.3)$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (3.4)$$

Le deuxième terme de l'équation (3.3) est la correction à la vitesse anormale qui est due à la présence d'une courbure de Berry Ω_n d'état électronique de Bloch dans la $n^{ième}$ bande indiquée, associée au mouvement de l'électron dans la $n^{ième}$ bande d'énergie. $\varepsilon(k) = \varepsilon_0(\mathbf{k}) - m(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{B}$ est l'énergie de bande comprenant une correction due au moment magnétique orbital $m(\mathbf{k})$. Ces auteurs ont dérivé l'énergie du paquet d'ondes jusqu'au premier ordre dans le gradient des perturbations, incluant les corrections de la phase de Berry pour décrire la dynamique semi-classique et les règles de quantification. Pour les champs électromagnétiques, la magnétisation orbitale et la vitesse anormale sont obtenues simplement pour une bande simple, ces deux dernières sont les ingrédients de base, en plus de l'énergie de bande, qui doit être incluse dans la formulation de la dynamique semi-classique des électrons dans les cristaux, afin d'expliquer les propriétés électroniques et les phénomènes de transport en présence de champ électromagnétique [54]. Ces quantités sont des mesures invariantes de jauge et ont des significations physiques directes sur les

phénomènes de transport comme l'effet hall anormal et l'effet hall de spin démontrés par des nombreuses applications ces dernières années. Cette méthode développée par Niu et ses collaborateurs est importante pour décrire le mouvement des électrons de Bloch mais elle a été construite à partir d'un modèle semi-classique en se basant sur le mouvement de paquet d'ondes, en particulier elle ne peut pas être appliquée pour la description d'autres phénomènes tels que l'interaction électromagnétique des électrons de Bloch qui exige une théorie qui dépasse l'approximation semi-classique. En plus, la dérivation d'un hamiltonien semi-classique présente des difficultés en présence des termes de phase de Berry [10]. En fait, le caractère non-canonique qui apparaît dans les équations du mouvement avec des corrections dues à la phase de Berry a mené ces auteurs à conclure que le volume naïf de l'espace de phase n'est pas conservé en présence d'une phase de Berry et d'un champ magnétique, ce qui viole le théorème de Liouville. Pour remédier à cette situation, ces auteurs ont présenté une densité d'état modifiée dans l'espace de phase de la forme

$$D(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = (2\pi)^{-d} (1 + e\mathbf{B} \cdot \Omega/\hbar) \quad (3.5)$$

tels que $D(\mathbf{r}, \mathbf{k})d\mathbf{r}d\mathbf{k}$ demeure constant dans le temps.

Ce point de vue a été immédiatement critiqué par plusieurs auteurs. En particulier, en rapportant la dynamique semi-classique de l'électron de Bloch à la dynamique galiléenne exotique présentée indépendamment dans le cadre de la mécanique quantique non-commutative [11], C. Duval et autres [196, 197] ont constaté la validité du théorème de Liouville quand la forme symplectique de volume des phases est correctement employée. Ce n'est que dans un travail récent [12, 13, 198–201] que la nature d'un hamiltonien non canonique pour la description semi-classique des électrons de Bloch et de Dirac dans le champ électromagnétique avec des corrections dues à la phase de Berry a été rétablie. Ces auteurs ont développé une méthode mathématique puissante afin de diagonaliser des hamiltoniens quantiques à valeur matricielle très généraux. Cette méthode est basée sur un développement en puissance de la constante de Plank $\hbar$. dans cette formulation la constante $\hbar$ doit être vue comme une variable notée α , ce qui permet de généraliser cette méthode à d'autres systèmes relativistes et non relativistes et de dépasser le cadre semi-classique. Cette méthode fait aussi apparaître d'une manière naturelle des variables canoniques non-commutative qui sont fonction d'un champ de jauge induit par la phase

de Berry. Les équations du mouvement génériques qui résultent de cette méthode sont également corrigées par des termes de phase de Berry. D'ailleurs, ce formalisme qui est plus pratique et puissant reflète l'origine des phénomènes physiques étudiés et pourrait toujours être appliqué à plusieurs autres systèmes en physique de la matière condensée ou en physique des particules.

3.2 Modèle semi-classique des électrons de Bloch

Il est intéressant d'examiner des situations où les cristaux sont perturbés par un champ magnétique extérieur de diverses manières. Jusqu'ici, la description la plus utile a été la théorie de la dynamique semi-classique des électrons dans une bande d'énergie, complétée par la règle de quantification semi-classique ou les équations de transport de Boltzmann. La connaissance de cette dynamique semi-classique est également suffisante pour la construction d'une théorie quantique efficace, valide au même ordre du champ. Dans cette approche, l'effet d'un potentiel périodique est traité par des méthodes de la mécanique quantique et donne naissance à des structures de bande d'énergie, alors qu'un champ électromagnétique supplémentaire est traité comme perturbation classique.

Le modèle semi-classique prédit comment, en absence de collisions, la position $\mathbf{r}$ et le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ de chaque électron évolue en présence de champs électrique et magnétique appliqué. Cette prédiction est basée entièrement sur la connaissance de la structure de bande du cristal, c'est à dire sur les formes des fonctions $\varepsilon_n(\mathbf{k})$. le modèle considère les $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ comme les fonctions données, et ne dit rien sur la manière de les calculer. Le but du modèle est de relier la structure de bandes aux propriétés de transport et donne la réponse des électrons aux champs appliqués. Les fonctions $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ étant données, le modèle semi-classique associe à chaque électron une position $\mathbf{r}$, un vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et un indice de bande n qui évoluent, au cours du temps et en présence de champs extérieures, selon les règles suivantes :

- 1-L'indice de bande n est une constante du mouvement (Le modèle ignore les transitions inter-bandes), il peut être omis dans la suite.
- 2- La dynamique de l'électron de Bloch dans une bande donnée est décrite par les

équations semi-classiques suivantes [186] :

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (3.6)$$

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}} \quad (3.7)$$

où $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ est l'énergie de la $n^{ième}$ bande et $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ sont les champs électriques et magnétiques.

3- Le vecteur d'onde d'un électron n'est défini qu'à un vecteur du réseau réciproque additif $\mathbf{K}$ près. Les indices $n, \mathbf{r}, \mathbf{k}$ et $n, \mathbf{r}, \mathbf{k} + \mathbf{K}$ sont des manières complètement équivalentes de décrire le même électron.

L'équation (3.6) indique que le taux de variation de moment cristallin est égal à la force de Lorentz qui est du au champ externe. La seconde (3.7) donne la vitesse de groupe en termes de gradient de l'énergie de bande dans l'espace réciproque k . Ces équations constituent la base de la théorie de la dynamique et de transport d'électrons de Bloch dans en présences des perturbations externes faibles. Elles ont mené à un certain nombre de résultats très utiles dans la physique de solide et les semi-conducteurs [186].

La dérivation d'Eq. (3.6) et (3.7) remonte à Bloch, Peierls, Jones et Zener au début des années 30 [202]. En supposant que les probabilités de transition à d'autres bandes sont négligeables, ils ont prouvé que ces équations décrivent le mouvement d'un paquet d'ondes étroit obtenu par superposition des états de Bloch d'une bande. De divers prolongements de la théorie ont été faits pour traiter des perturbations d'une nature plus générale et pour obtenir des corrections à (3.6) et (3.7) pour des champs élevés : Peierls [187] a fait l'effort de construire un hamiltonien effective pour décrire la dynamique d'un électron de Bloch. Il a introduit une substitution (substitution de Pieerls) en remplaçant le moment cristallin $\hbar \mathbf{k}$ par l'opérateur invariant de jauge $-\hbar \nabla + e\mathbf{A}(x)$ dans la bande d'énergie non-perturbée :

$$H_{eff} = \varepsilon_{0,n} \left[-\hbar \nabla + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right] \quad (3.8)$$

20 ans plus tard, Slater [203] et le Luttinger [204] ont donné une dérivation plus rigoureuse d'un hamiltonien effective pour des perturbations électromagnétiques, en développant la fonction d'onde dans la base des fonctions de Wannier $\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_l f_l(t) W(\mathbf{x} - \mathbf{R}_l)$. Ils ont prouvé que la fonction $f(x, t)$ défini par $f(\mathbf{R}_l, t) = f(t)$, satisfait à d'équation de

Schrodinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f = \left\{ \varepsilon_{0,n} \left[-\hbar \nabla + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(x) \right] - e\Phi(\mathbf{x}) \right\} f$$

Une justification complète a été ensuite donnée par Kohn [188]. Une version simplifiée de la preuve a été plus tard formulée par Blount, Roth et Wannier et Fredkin qui dérivent un opérateur approximatif d'énergie de bande comme une extension d'une série asymptotique dans des champs de forces extérieurs, ainsi que des expressions générales pour les premiers termes de cette série [14, 189–191]. Leurs méthodes, bien qu'elles sont différentes, sont toutes basées sur une transformation unitaire approximatif de l'hamiltonien initial d'électrons de Bloch dans un champ électromagnétique qui élimine les éléments de matrice inter-bandes et conduit à un opérateur efficace diagonale dans la bande d'énergie. Le principal avantage de la méthode de Blount est qu'elle est une application d'un régime de diagonalisation générale applicable à toute sorte de matrice tandis que les deux autres sont spécifiques à l'état solide. En particulier, Blount a également examiné le cas d'une particule de Dirac dans un champ électromagnétique dont le hamiltonien a été diagonalisée au second ordre. Plus tard, Weigert et Littlejohn ont développé une méthode systématique pour diagonaliser des hamiltonien quantique en général en série de la constante $\hbar$ [192]. Un avantage de ce type d'expansion est évidemment qu'il peut être valable pour fort champ externe, mais également que la limite semi-classique est facilement obtenue. Malheureusement, cette méthode implique l'expansion des séries formelles en termes de symboles des opérateurs ce qui rend la méthode très compliquée pour des applications pratiques. Récemment, une variante de la transformation Foldy Wouthuysen valables pour les champs forts et aussi basée sur un développement en $\hbar$ de l'hamiltonien de Dirac a été présentée [193]. Ce n'est pas la fin de l'histoire en ce qui concerne les équations de Bloch (3.6) et (3.7). Adams [205] a prolongé les travaux du Slater et Luttinger au formalisme d'opérateur des bandes multiples. Karplus, Luttinger, et Kohn ont dérivé une correction à la vitesse (3.7), connue sous le nom de vitesse anormale, et prévoit l'effet Hall spontané dans les matériaux ferromagnétiques [53, 54, 206]. Plus tard, Adams et Blount [81, 189], ont prouvés que cette limite résulte de la non-commutativité entre les composants cartésiennes de l'opérateur position.

Bien que les deux équations (3.6) et (3.7) expliquent la plupart des phénomènes physiques liés au transport des électrons, elles ne reproduisent pas exactement la dynamique

des électrons qui acquièrent des termes supplémentaires due à la phase de Berry. Ces termes devraient en principe être présents pour décrire la dynamique des électrons. Dans la pratique, ils sont presque toujours négligés, pour deux raisons. D'abord, ils disparaissent par symétrie dans toute la zone de Brillouin. Deuxièmement, même lorsqu'ils ne sont pas identiquement nul, en présence de petits champs électriques et magnétiques externes, ces termes supplémentaires sont proportionnels aux champs appliqués. Leur contribution à des quantités telles que les courants électriques et thermiques est proportionnelle au carré des champs électriques et magnétiques, et peut être négligée.

3.3 Formulation lagrangienne :

C'est tout récemment que les équations du mouvement correctes des électrons de Bloch en présence d'un champ électrique et magnétiques qui incluent la vitesse anormale qui est proportionnelle à la courbure de Berry ont été dérivées par Sundaram et Niu [7].

Sundaram et Niu [7, 180, 181] arrivent à introduire un terme important supplémentaire dans l'équation (3.7) qui est proportionnelle à la courbure de Berry pour un état de Bloch. Ils ont conçu un cadre très puissant pour étudier le mouvement d'un paquet d'onde qui est basée sur la dérivation d'un lagrangien effective pour un paquet d'onde donné se déplaçant dans un champ extérieur faible.

En effet, considérant un électron dans un potentiel périodique décrit par l'hamiltonien $H = H_0 + \nabla H$, où H_0 est l'hamiltonien local et ∇H traduit l'ensembles des termes induit par la perturbation des champs extérieurs. On peut construire un paquet d'onde centré en r_c par la superposition linéaire des états de Bloch $|W_0\rangle = \int_{ZB} d^3q \omega(\mathbf{k}, t) |\Psi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}, t)\rangle$, où $\omega(\mathbf{K}, t)$ est une fonction de distribution centrée en r_c dans l'espace dans l'espace réciproque. On suppose que la distribution $\omega(\mathbf{K}, t)$ est étroite comparé à la taille de la zone de Brillouin et au vecteur d'onde moyenne $\langle k \rangle$. Alors, l'hamiltonien locale H_0 qui décrit le mouvement du centre de paquet d'onde satisfait à l'équation de Schrödinger :

$$H_0(\mathbf{r}_c, \mathbf{t}) |\Psi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}, t)\rangle = E_{0n}(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}, t) |\Psi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}, t)\rangle \quad (3.9)$$

$|\Psi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}, t)\rangle$ est la fonction d'onde de Bloch qui peut être écrite comme : $|\Psi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}, t)\rangle = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} |u_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}, t)\rangle$, n est l'indice de bande et $\mathbf{k}$ est le moment cristallin. La position de centre

de packet d'onde est donnée par : $\mathbf{r}_c = \langle \Psi | \mathbf{r} | \Psi \rangle$. Cette condition peut être exprimée en termes d'autres paramètres d'un packet d'onde, en écrivant l'amplitude dans la fonction $\omega(q, t)$ sous la forme : $\omega(\mathbf{k}, t) = |\omega(\mathbf{k}, t)| e^{i\gamma(\mathbf{k}, t)}$ et en utilisant les éléments de matrice de l'opérateur de position $\mathbf{r}$ entre les états de Bloch, nous constatons que

$$\langle \Psi | \mathbf{r} | \Psi \rangle = \int_{ZB} d^3k |\omega|^2 \left[\frac{\partial \gamma}{\partial \mathbf{k}} + \langle u_n | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_n \rangle \right] \quad (3.10)$$

avec $|u_n\rangle = |u_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}, t)\rangle = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} |\Psi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}, t)\rangle$ qui est la partie périodique de l'onde de Bloch. Selon notre hypothèse qu'un packet d'ondes soit étroit dans l'espace de $\mathbf{k}$, l'Eq. (3.10) devient :

$$\mathbf{r}_c = \frac{\partial \gamma}{\partial \mathbf{k}_c} + \langle u_n | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}_c} | u_n \rangle$$

En effet, les équations du mouvement de centre de packet d'onde $\mathbf{r}$ et le moment cristallin $\mathbf{k}$ peuvent être déduite on utilisant le principe de variation dépendant du temps dans la formulation du lagrangienne suivant :

$$L = \left\langle \Psi \left| i \frac{d}{dt} - H \right| \Psi \right\rangle$$

Le premier terme $\langle \Psi | i \frac{d}{dt} | \Psi \rangle$ peut se mettre sous la forme :

$$\left\langle \Psi \left| i \frac{d}{dt} \right| \Psi \right\rangle = \frac{\partial \gamma_c}{\partial t} - \dot{\mathbf{k}}_c \cdot \mathbf{r}_c + \dot{\mathbf{k}}_c \cdot \left\langle u \left| i \frac{\partial u}{\partial \mathbf{k}_c} \right\rangle + \dot{\mathbf{r}}_c \cdot \left\langle u \left| i \frac{\partial u}{\partial \mathbf{r}_c} \right\rangle + \left\langle u \left| i \frac{d}{dt} \right| u \right\rangle \quad (3.11)$$

La valeur du hamiltonien, qui donne l'énergie de packet d'ondes $\varepsilon = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \simeq \langle \Psi | H_0 | \Psi \rangle + \langle \Psi | \nabla H | \Psi \rangle$ peut être évaluée jusqu'au premier ordre dans les gradients de perturbation. La partie du l'hamiltonien local est :

$$\langle \Psi | H_0 | \Psi \rangle = \varepsilon_c(\mathbf{r}_c, \dot{\mathbf{k}}_c, t)$$

alors que la correction de gradient exige quelques calculs, mais le résultat est :

$$\nabla \varepsilon = -i \operatorname{Im} \left[\left\langle \frac{\partial u}{\partial \mathbf{r}_c} \left| \cdot (\varepsilon_c - H_c) \right| \frac{\partial u}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle \right]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_c} \quad (3.12)$$

Enfin, le lagrangien prend la forme final suivante :

$$L = -\varepsilon + \mathbf{k}_c \cdot \dot{\mathbf{r}}_c + \dot{\mathbf{k}}_c \cdot \left\langle u \left| i \frac{\partial u}{\partial \mathbf{k}_c} \right\rangle + \dot{\mathbf{r}}_c \cdot \left\langle u \left| i \frac{\partial u}{\partial \mathbf{r}_c} \right\rangle + \left\langle u \left| i \frac{\partial u}{\partial t} \right\rangle \quad (3.13)$$

Les deux premières termes dans le lagrangien (3.13) sont les mêmes que celle d'un lagrangien typique d'une particule classique avec le hamiltonien classique. Les autres limites sont géométriques, dans le sens que leur contribution à l'action dépend de la trajectoire dans l'espace de phase mais pas du mouvement le long de cette trajectoire. C'est la manifestation de la phase de Berry en mécanique quantique. La formulation lagrangienne fournit entièrement une approche invariante de jauge à l'étude de la dynamique d'un paquet d'ondes.

Il est maintenant facile de trouver les équations du mouvement dans un potentiel arbitraire avec un gradient faible dans un champ électromagnétique en variant l'action le long de la trajectoire. En effet, le Lagrangien en présence d'un champ électromagnétique prend la forme :

$$L = -\varepsilon_0(\mathbf{k}_c) - \mathbf{m} \cdot \mathbf{B} + e\Phi(\mathbf{r}_c, t) + \mathbf{k}_c \cdot \dot{\mathbf{r}}_c - e\dot{\mathbf{r}}_c \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_c, t) + \dot{\mathbf{k}}_c \cdot \left\langle u \left| i \frac{\partial u}{\partial \mathbf{k}_c} \right\rangle \quad (3.14)$$

ou $\mathbf{m}$ est le moment magnétique orbital donnée par :

$$\mathbf{m} = e \operatorname{Im} \left[\left\langle \frac{\partial u}{\partial \mathbf{k}} \right| \times (\varepsilon_c - H_0(\mathbf{k})) \left| \frac{\partial u}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle \right]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_c} \quad (3.15)$$

$\mathbf{A}(\mathbf{r}_c, t)$ et $\Phi(\mathbf{r}_c, t)$ sont les potentiel vecteur et le potentiel scalaire du champ électromagnétique respectivement. À partir des équations d'Euler-Lagrange on peut décrire le mouvement semi-classique par les deux équations suivantes :

$$\dot{\mathbf{r}}_c = \frac{\partial \mathcal{E}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}_c} - \dot{\mathbf{k}}_c \times \Omega_n(\mathbf{k}_c) \quad (3.16)$$

$$\dot{\mathbf{k}}_c = -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}}_c \times \mathbf{B} \quad (3.17)$$

Par rapport aux équations semi-classique dans les ouvrages standards [186] , il ya deux nouvelles quantités dans l'équation (3.16) , qui peuvent avoir des conséquences importantes. Le premier est la courbure de Berry $\Omega(\mathbf{k})$ qui décrit la vitesse anormale de

l'électron de Bloch. Le second est l'énergie de bande $\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mathbf{m}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{B}$ corrigée par un terme qui est due au moment magnétique orbital.

L'équation (3.16) prouve que la courbure de Berry Ω_n définit comme :

$$\Omega_n(\mathbf{k}) = \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{k}} \middle| \times \middle| \frac{\partial u_n}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle \quad (3.18)$$

peut être considérée comme champ magnétique non-habituel agissant dans l'espace de vecteur d'onde $\mathbf{k}$. Cependant, à la différence du champ magnétique dans l'électrodynamique, qui est une courbure pure, la courbure de Berry provient d'une source : Dans l'électrodynamique, un champ magnétique avec de telles propriétés proviendrait des monopoles magnétiques. Leurs analogues dans des bandes de Bloch sont les points des croisements exacts des courbes de dispersion [207]. Comme la formule classique (équation (3.7)) a eu beaucoup de succès dans la description de diverses propriétés électroniques dans le passé. Il est donc important de savoir dans quelles conditions le terme de la courbure de Berry ne peut être négligé. La forme générale de la courbure de Berry Ω_n peut être obtenue par l'analyse de symétrie. La formule de la vitesse (3.16) devrait être invariante pour des opérations de symétries. Pour la symétrie de renversement du temps $\dot{\mathbf{r}}$ et $\mathbf{k}$ changent du signe quand $\mathbf{E}$ est fixé, ce qui exige que $\Omega_n(-\mathbf{k}) = -\Omega_n(\mathbf{k})$. Si le système possède une symétrie spatiale alors $\Omega_n(-\mathbf{k}) = \Omega_n(\mathbf{k})$. Par conséquent, pour des cristaux ayant les deux symétries simultanément, la courbure de Berry s'annule identiquement dans toute la zone de Brillouin, c'est le cas dans la plupart des applications en physique du solide. Dans ce cas l'équation (3.16) se réduit à l'expression simple (3.7). Cependant, il existe de nombreux systèmes physiques importants où les deux symétries ne sont pas présentes simultanément comme dans GaAs où la symétrie d'inversion spatiale est brisée ou en présence d'ordre ferromagnétique ou antiferromagnétique qui brise la symétrie de renversement du temps. Dans tous ces cas, les propriétés dynamiques et de transport doivent être décrites par l'équations du mouvement complète (3.16). Notez que même pour les cristaux ayant les deux symétries simultanément, la dégénérescence des bandes d'énergie peut conduire à une courbure non nulle et une aimantation ; un exemple typique est donné par le graphène [194]. Ce cas est due à la présence d'une phase de Berry topologique associé aux bandes de dégénérescence [208]. Le terme $\dot{\mathbf{k}}_c \times \Omega_n(\mathbf{k}_c)$ est apparue tout à fait tôt dans l'histoire pour expliquer la dynamique effective d'un électron de Bloch [81, 189]. Elle pro-

duit d'une vitesse anormale qui est transversale au champ électrique appliqué. Une fois appliquée à l'effet Hall quantique, la théorie semi-classique peut expliquer le courant de Hall et la quantification de la conductivité de Hall [52, 180, 181, 209]. Ces dernières années, elle a aidé en résolvant le mystère de l'effet Hall anormal dans les matériaux ferromagnétiques [8, 19, 54, 210, 211]. C'est également une notion primaire motivant la proposition de l'effet Hall de spin intrinsèque [44, 212] et de l'effet Hall optique [55–57, 60–62].

La courbure de Berry non seulement modifie la dynamique des électrons mais a également un effet profond sur la densité d'états électronique dans l'espace des phases. Dans la physique du solide, la valeur moyenne d'une observable représentée par des fonctions de Bloch, est donnée par [2]

$$\sum_{n\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{O} | \Psi_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (3.19)$$

où $f_{n\mathbf{k}}$ est la fonction de distribution. Dans la limite semi-classique, la somme est convertie en une intégrale dans l'espace des impulsions $\mathbf{k}$

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{V} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \quad (3.20)$$

où V est le volume et $(2\pi)^d$ est la densité d'états. D'un point de vue classique, la densité constante des Etats est garantie par le théorème de Liouville, qui stipule que l'élément de volume est une quantité conservée au cours de l'évolution temporelle du système. Le théorème de Liouville a été initialement créé pour la dynamique des hamiltonien classiques standards, et son importance ne peut pas être sous-estimée, car il est une base de la physique statistique classique. Toutefois, ce n'est plus le cas pour la dynamique semi-classique modifiée par la phase de Berry. Cette dernière rend, en général, les équations du mouvement non-canoniques [7, 181, 213–215], ce qui induit la violation du théorème de Liouville. L'évolution temporelle d'un élément de volume $\Delta V = \Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{k}$ est donnée par

$$\frac{1}{\Delta V} \frac{\partial \Delta V}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}} \quad (3.21)$$

En insérant les équations du mouvement (3.16) et (3.17) dans l'équation (3.21) et après

un calcul algébrique simple, nous montrons que :

$$\Delta V = \frac{V_0}{1 + (e/\hbar)\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}} \quad (3.22)$$

Le fait que la courbure de Berry $\boldsymbol{\Omega}$ est généralement dépendante de $\mathbf{k}$ et le champ magnétique qui lui aussi dépend de $\mathbf{r}$ impliquent que l'espace des phases change au cours de l'évolution temporelle les variables d'état $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$. Bien que le volume de l'espace des phases n'est plus conservé, il est une fonction locale des variables d'état et n'a rien à voir avec l'histoire de l'évolution dans le temps. Nous pouvons donc introduire une densité d'états modifiée

$$D(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \left(1 + \left(\frac{e}{\hbar} \right) \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega} \right) \quad (3.23)$$

tel que le nombre d'états dans l'élément de volume $D_n(\mathbf{r}, \mathbf{k})\Delta V$ reste constant dans le temps. Le pré-facteur $(2\pi)^{-d}$ est obtenu en exigeant que la densité d'états $D_n(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ se réduise à la forme conventionnelle lorsque la courbure de Berry disparaît. La modification vient du fait que les variables dynamique $\mathbf{r}$ et $\mathbf{k}$ ne sont plus des variables canoniques, et la densité d'états peut être considérée comme une mesure de l'espace des phases [196, 197, 216, 217]. L'espace des phases $d\mathbf{r}d\mathbf{k}$ est vrai que lorsque $\mathbf{r}$ et $\mathbf{k}$ forment un ensemble canonique. Cependant, les variables d'espace des phases obtenues à partir du paquet d'ondes ne sont pas canoniques en générale.

Il faut noter que, en plus de l'inconvénient du formalisme Lagrangien qui viole le théorème de Liouville, l'application des équations (3.16) et (3.17) pour la quantification de Bohr Sommerfeld n'explique pas la valeur de l'indice de Maslov [218]. En fait, une valeur non entière peut donner une prévision plus précise des niveaux d'énergie [219]. Deuxièmement, cette méthode échoue si la trajectoire dans l'espace de phase n'est pas fermée, ou si le système dynamique est chaotique.

3.4 La méthode de diagonalisation

Pour remédier à ces insuffisances du formalisme Lagrangien et confirmer l'importance de la phase de Berry sur la dynamique semi-classiques des électrons de Bloch, il apparaît essentiel de développer un formalisme hamiltonien à partir duquel on peut dériver la dynamique semi-classique. L'analogie entre les électrons de Bloch et les électrons de Dirac

et la formulation hamiltonienne dans une représentation diagonale émergent au moyen de nouvelles quantités qui dépendent d'un champ de jauge qui reflètent l'influence de la phase de Berry. Pour l'électron libre de Dirac il existe une méthode qui est bien connue et qui sert à diagonaliser l'hamiltonien (la transformation de Fouldy-Wouthuysen) [158]. Il existe aussi des transformations de Fouldy-Wouthuysen pour beaucoup de classes d'hamiltoniens dans un champ extérieur [220–222], mais le problème demeure non résolu dans la plupart des cas. Afin de dépasser cette limitation Gosselin, Bérard et Mohrbach [12, 13, 198–200] ont formulé une nouvelle méthode de diagonalisation pour des hamiltoniens quantiques à valeur matricielle qui est basée sur un développement en puissance de la constante de Planck $\hbar$ qui est définie comme un paramètre. Cette méthode n'est pas limitée à des Hamiltoniens de Dirac mais est applicable également à une grande classe des systèmes quantiques. Dans cette approche on s'aperçoit que l'opérateur d'énergie diagonal et les opérateurs dynamiques qui dépendent des termes de la phase de Berry forment une algèbre non-commutative. Une application pour l'électron de Dirac et une autre pour l'électron de Bloch sont considérées afin d'éclairer l'avantage de la méthode.

3.4.1 La formulation

Nous considérons un système quantique dont l'espace des états est un produit tensorielle $L^2(R^3) \otimes V$, où V est l'espace interne. En d'autres termes, l'hamiltonien de ce système peut être écrit comme une matrice $H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ dont les éléments sont des opérateurs dépendant des variables canoniques $\mathbf{P}$ et $\mathbf{R}$, l'exemple le plus concret étant l'hamiltonien de Dirac.

Le but de ce paragraphe est de décrire un processus de diagonalisation pour cet hamiltonien quantique H_0 à valeur matricielle comme développement en série de puissances de la constante de Planck $\hbar$. Ce développement fournit des corrections quantiques à l'hamiltonien diagonalisé et donne la situation classique quand $\hbar = 0$. Par diagonalisation, nous voulons toujours dire trouver une transformation unitaire qui rend l'hamiltonien diagonal, c'est-à-dire, que nous ne visons pas à trouver les valeurs propres, mais plutôt à dériver la représentation diagonale de l'hamiltonien, qui est habituellement appropriées pour la dynamique semi-classique. La constante de Planck $\hbar$ est remplacée par un paramètre α afin d'établir une équation différentielle reliant l'hamiltonien diagonalisé à deux valeurs

dictinctes de paramètre α : α et $\alpha + d\alpha$. L'intégration de cette équation permet alors de déterminer les différents termes dans le développement du l'hamiltonien diagonalisé en puissances de $\hbar$.

Avant de décrire la méthode, on considère les trois propositions suivantes :

1- L'hamiltonien du système peut être écrit comme une matrice d'une certaine taille $H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R})$, qui est une matrice dont les coefficients dépendent de $\mathbf{P}$ et de $\mathbf{R}$. L'exemple typique est l'hamiltonien de Dirac libre.

2-On suppose que pour chaque valeur de α , l'hamiltonien H_0 est exactement diagonalisable à l'intermédiaire d'une matrice $U_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ c.a.d.

$$U_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R})H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R})U_\alpha^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \quad (3.24)$$

3- Cette diagonalisation est bien connue pour $\alpha = 0$, elle correspond au cas où $\mathbf{P}$ et $\mathbf{R}$ commute.

Nous considérerons maintenant α comme un paramètre arbitraire afin de trouver une relation entre $\varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ et $\varepsilon_{\alpha+d\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R})$. Mais pour faciliter le calcul de $\varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R})$, nous devons d'abord écrire l'hamiltonien $H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ ainsi que toutes les expressions faisant apparaître les opérateurs canoniques $\mathbf{R}$ et $\mathbf{P}$, sous une forme symétrisée. Naturellement cette symétrisation présentera des termes d'ordre $\hbar$ dus aux relations de commutation.

Nous considérons une diagonalisation pour un ordre α :

$$U_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R})H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R})U_\alpha^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = \varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \text{ si } [\mathbf{P}, \mathbf{R}] = -i\alpha \quad (3.25)$$

De la même manière pour un ordre $\alpha + d\alpha$ on a :

$$U_{\alpha+d\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R})H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R})U_{\alpha+d\alpha}^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = \varepsilon_{\alpha+d\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \text{ si } [\mathbf{P}, \mathbf{R}] = -i\alpha + d\alpha \quad (3.26)$$

Si on développe l'équation (3.26) au premier ordre en $d\alpha$, on a alors :

$$\varepsilon_{\alpha+d\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = U_\alpha H_0 U_\alpha^\dagger + d\alpha (\partial_\alpha U_\alpha H_0 U_\alpha^\dagger + U_\alpha H_0 \partial_\alpha U_\alpha^\dagger) \quad (3.27)$$

Cette dernière expression nous donne

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{\alpha+d\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) &= U_\alpha H_0 U_\alpha^\dagger + d\alpha \left(\partial_\alpha U_\alpha U_\alpha^\dagger \varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) + \varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) U_\alpha \partial_\alpha U_\alpha^\dagger \right) \quad (3.28) \\
&= U_\alpha H_0 U_\alpha^\dagger + \varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \left(\partial_\alpha U_\alpha U_\alpha^\dagger + U_\alpha \partial_\alpha U_\alpha^\dagger \right) d\alpha \\
&\quad + \left[\partial_\alpha U_\alpha U_\alpha^\dagger, \varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \right] d\alpha
\end{aligned}$$

Essayons maintenant de développer le terme : $\partial_\alpha U_\alpha U_\alpha^\dagger + U_\alpha \partial_\alpha U_\alpha^\dagger$. A partir de l'égalité $U_{\alpha+d\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) U_{\alpha+d\alpha}^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = 1$ si $[\mathbf{P}, \mathbf{R}] = -i\alpha + d\alpha$ on déduit que

$$\partial_\alpha \left(U_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) U_\alpha^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}) + U_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \partial_\alpha U_\alpha^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \right) \quad (3.29)$$

Comme $U_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) U_\alpha^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \neq 1$ quand $[\mathbf{P}, \mathbf{R}] = -i\alpha + d\alpha$. Alors on peut écrire

$$\varepsilon_{\alpha+d\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = U_\alpha H_0 U_\alpha^\dagger + \varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \left[1 - U_\alpha U_\alpha^\dagger \right] \left[\partial_\alpha U_\alpha U_\alpha^\dagger, \varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) d\alpha \right] \quad (3.30)$$

Pour calculer $U_\alpha H_0 U_\alpha^\dagger$ on introduit des nouvelles variables $\mathbf{p}$ et $\mathbf{r}$ de tel sorte que $[\mathbf{p}, \mathbf{r}] = i d\alpha$

A partir de l'équation (3.25) on a :

$$U_\alpha(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) H_0(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) U_\alpha^\dagger(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) = \varepsilon_\alpha(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) \quad (3.31)$$

avec

$$U_\alpha(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) U_\alpha^\dagger(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) = 1 \quad (3.32)$$

Il faut noter que $\mathbf{P} + \mathbf{p}$ et $\mathbf{R} + \mathbf{r}$ forment un couple de variables canoniques pour commutateur $i\alpha$. Comme conséquence des relations (3.31) et (3.32), l'équation (3.30) se met sous la forme

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{\alpha+d\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) &= \varepsilon_\alpha(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) - U_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}) U_\alpha^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \quad (3.33) \\
&\quad - U_\alpha(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) H_0(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) U_\alpha^\dagger(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) \\
&\quad + \varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \left[U_\alpha(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) U_\alpha^\dagger(\mathbf{P} + \mathbf{p}, \mathbf{R} + \mathbf{r}) - U_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) U_\alpha^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \right] \\
&\quad + \left[\partial_\alpha U_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) U_\alpha^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}), \varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \right] d\alpha
\end{aligned}$$

En augmentant le développement au second ordre du terme de droite de l'équation (3.33), nous avons alors le résultat suivant :

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{\alpha+d\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) &= \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) + [\partial_{\alpha} U_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) U_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{P}, \mathbf{R}), \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R})] d\alpha \\
&+ \frac{1}{2} \{ A_{\alpha}^{R_l} \nabla_{R_l} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) + \nabla_{R_l} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) A_{\alpha}^{R_l} + A_{\alpha}^{R_l} \nabla_{P_l} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) + \} d\alpha \\
&+ \frac{i}{2} \left\{ \frac{1}{2} \nabla_{P_l} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) A_{\alpha}^{R_l} + [\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}), A_{\alpha}^{R_l}] A_{\alpha}^{P_l} d\alpha - [\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}), A_{\alpha}^{P_l}] A_{\alpha}^{R_l} \right\} d\alpha \\
&- [Asym A_{\alpha}^{P_l, R_l}, \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R})] + \frac{id\alpha}{2} \{ Asym \{ \nabla_{P_l} \nabla_{R_l} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \} \} \\
&+ \frac{1}{2} \nabla_{P_l} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) A_{\alpha}^{R_l} - U_{\alpha} Asym \{ \nabla_{P_l} \nabla_{R_l} H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \} U_{\alpha}^{\dagger}
\end{aligned} \tag{3.34}$$

$$\tag{3.35}$$

L'opérateur *Asym* a pour rôle de symétriser toutes les fonctions qui dependent des variables *R* et *P*

$$Asym \left\{ \frac{1}{2} A(\mathbf{R}) B(\mathbf{P}) + \frac{1}{2} B(\mathbf{P}) A(\mathbf{R}) \right\} = \frac{1}{2} [B(\mathbf{P}), A(\mathbf{R})]$$

Après avoir écrire le terme à droite de l'équation (3.34) en termes des connections de Berry définies par :

$$\begin{aligned}
A_{\alpha}^{R_l} &= i U_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \nabla_{P_l} U_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \\
A_{\alpha}^{P_l} &= i U_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \nabla_{R_l} U_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{P}, \mathbf{R})
\end{aligned} \tag{3.36}$$

l'équation différentielle satisfaite par $\frac{d}{d\alpha} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ se met sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\alpha} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) &= [\partial_{\alpha} U_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) U_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{P}, \mathbf{R}), \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R})] + \frac{1}{2} A_{\alpha}^{R_l} \nabla_{R_l} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \\
&+ \{ + \nabla_{R_l} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) A_{\alpha}^{R_l} + A_{\alpha}^{P_l} \nabla_{P_l} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) + \nabla_{P_l} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) A_{\alpha}^{P_l} \} \\
&+ \frac{i}{2} \{ [\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}), A_{\alpha}^{R_l}] A_{\alpha}^{P_l} - [\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}), A_{\alpha}^{P_l}] A_{\alpha}^{R_l} - \} \\
&+ \frac{i}{2} \{ Asym \nabla_{P_l} \nabla_{R_l} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) \} - U_{\alpha} Asym \{ \nabla_{P_l} \nabla_{R_l} H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}) U_{\alpha}^{\dagger} \} \\
&- \frac{i}{2} [Asym A_{\alpha}^{P_l, R_l}, \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) - [\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{P}, \mathbf{R}), [A_{\alpha}^{R_l}, A_{\alpha}^{P_l}]]]
\end{aligned} \tag{3.37}$$

$$\tag{3.38}$$

Nous pouvons séparer l'équation donnant l'énergie (3.37) dans une une partie diagonale

et une autre partie non diagonale de tels sorte que :

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\alpha}\varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) &= P_+ \text{ [partie droite de l'équation (3.37)]} \\ 0 &= P_- \text{ [partie droite de l'équation (3.37)]}\end{aligned}\tag{3.39}$$

P_+ et P_- sont des projecteurs sur la partie diagonale et non-diagonale respectivement. Ces deux équations sont complétées par la condition suivante :

$$\partial_\alpha U_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R})U_\alpha^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}) + U_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R})\partial_\alpha U_\alpha^\dagger(\mathbf{P}, \mathbf{R}) - \frac{i}{2} \text{Asym} A_\alpha^{P_l, R_l} + (A_\alpha^{P_l, R_l})^+ - \frac{i}{2} [A_\alpha^{R_l}, A_\alpha^{P_l}] = 0\tag{3.40}$$

Les trois équations (3.37) , (3.39) et (3.40) détermine alors, suivant la puissance de la constante $\hbar$, l'énergie du système quantique en question. En fait, l'intégration par rapport à $\hbar$ de l'équation (3.39) donne $\varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ à l'ordre n en connaissant toutes les quantités à l'ordre $n - 1$. Par conséquent, le processus de diagonalisation est contrôlé ordre par ordre dans le développement en serie de la constante $\hbar$.

3.4.2 L'approximation semi-classique

Dans cette section nous considérons la diagonalisation d'un hamiltonien au niveau semi-classique ainsi que les équations du mouvement résultantes. En fait, l'approximation semi-classique a récemment eu des nouvelles applications importantes en physique de solide, notamment, les équations du mouvement indiquent alors une nouvelle contribution due à la courbure de Berry. Cette contribution, appelée la vitesse anormale, modifie profondément la dynamique des particules. Par exemple, dans l'espace des impulsions l'effet Hall de spin dans les semi-conducteurs [44], qui peut être interprété dans ce contexte. De même, la découverte expérimentale récente d'un monopole en $\mathbf{P}$ dans l'espace des impulsions peut également être d'une manière élégante interprétée comme l'influence de la courbure de Berry sur la dynamique semi-classique des électrons de Bloch [17, 19].

L'équation (3.37) est suffisante pour déduire l'hamiltonien semi-classique, il suffit d'écrire que $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + \alpha\varepsilon_1$, avec ε_0 l'énergie diagonalisée à l'ordre zéro, on peut alors

résoudre l'équation (3.37) en posant $\alpha = \hbar$

$$\begin{aligned}\varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R}) &= \varepsilon_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}) + \hbar \left\{ A_0^{R_l} \nabla_{R_l} \varepsilon_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}) + \nabla_{R_l} \varepsilon_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}) A_0^{R_l} \right\} \\ &+ \hbar \left\{ A_0^{P_l} \nabla_{P_l} \varepsilon_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}) + \nabla_{P_l} \varepsilon_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}) A_0^{P_l} \right\} + \\ &\frac{i\hbar}{2} P_+ \left\{ \left[\varepsilon_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}), A_0^{R_l} \right] A_0^{P_l} - \left[\varepsilon_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}), A_0^{P_l} \right] A_0^{R_l} \right\}\end{aligned}\quad (3.41)$$

Avec les notations : $A_0^P = P_+ [A_0^P]$ $A_0^R = P_+ [A_0^R]$ cette dernière expression peut être écrite sous la forme suivante :

$$\varepsilon_\alpha(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \approx \varepsilon_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + \frac{i\hbar}{2} P_+ \left\{ \left[\varepsilon_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}), A_0^{R_l} \right] A_0^{P_l} - \left[\varepsilon_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}), A_0^{P_l} \right] A_0^{R_l} \right\} + O(\hbar^2) \quad (3.42)$$

Où on a introduit les opérateurs dynamiques projetés, qui sont les opérateurs de position et d'impulsion covariants suivants : $r = R + \hbar A_0^R$ et $p = P + \hbar A_0^P$ avec $A_0^R = i [U_0 \nabla_P U_0^+]$ et $A_0^P = i [U_0 \nabla_R U_0^+]$. La matrice $U_0(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ est la matrice de diagonalisation pour H_0 quand les opérateurs sont supposés commuter et l'énergie qui découle est $\varepsilon_\alpha(\mathbf{P}, \mathbf{R})$. Quand $\mathbf{P}$ et $\mathbf{R}$ ne commutent pas, la matrice $U_0(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ ne diagonalise pas H_0 . Afin d'obtenir les corrections à l'énergie à l'ordre semi-classique dû à la noncommutativité de $\mathbf{P}$ et de $\mathbf{R}$, nous devons calculer $\varepsilon_1(\mathbf{P}, \mathbf{R})$. A partir de l'hamiltonien diagonal, les équations du mouvement peuvent être maintenant facilement dérivées. Les équations d'évolution doivent être considérées, non pour la position et l'impulsion habituelles, mais plutôt pour les variables projetées $\mathbf{r}$ et $\mathbf{p}$. En fait, ces dernières apparaissent naturellement dans le processus de diagonalisation à l'ordre $\hbar$. Remarquons que leurs composantes ne commutent pas :

$$\begin{aligned}[r_i, r_j] &= i\hbar^2 \Theta_{ij}^{rr} = i\hbar^2 (\nabla_{P_i} A_{R_j} - \nabla_{P_j} A_{R_i}) + \hbar^2 [A_{R_j}, A_{R_i}] \\ [p_i, p_j] &= i\hbar^2 \Theta_{ij}^{pp} = -i\hbar^2 (\nabla_{R_i} A_{P_j} - \nabla_{R_j} A_{P_i}) + \hbar^2 [A_{P_j}, A_{P_i}] \\ [p_i, r_j] &= -i\hbar \delta_{ij} + i\hbar^2 \Theta_{ij}^{pr} = -i\hbar \delta_{ij} - i\hbar^2 (\nabla_{R_i} A_{R_j} + \nabla_{P_j} A_{P_i}) + \hbar^2 [A_{P_i}, A_{R_j}]\end{aligned}\quad (3.43)$$

En employant le formalisme hamiltonien, les équations générales du mouvement pour les

variables $\mathbf{r}$, $\mathbf{p}$ sont données par :

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}} &= \frac{i}{\hbar} [\mathbf{r}, \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] + \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{r}, \frac{i\hbar}{2} P_+ \{ [\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}), A_{R_l}] A_{P_l} - [\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}), A_{P_l}] A_{R_l} \} \right] \\ \dot{\mathbf{p}} &= \frac{i}{\hbar} [\mathbf{p}, \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})] + \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{p}, \frac{i\hbar}{2} P_+ \{ [\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}), A_{R_l}] A_{P_l} - [\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}), A_{P_l}] A_{R_l} \} \right]\end{aligned}\quad (3.44)$$

Le dernier terme dans chaque équation représente une contribution due à la magnétisation. Il est intéressant de noter que dans le cadre des électrons de Bloch dans un champ magnétique, l'hamiltonien et les équations du mouvement précédentes ont été déjà dérivés avec un autre formalisme [7, 180, 181] et elles donnent exactement le même terme de magnétisation indiquée dans ces articles. Cette méthode semble alors être une prolongation de [7, 180, 181], cependant, elle semble être plus pratique et plus générale, en offrant la possibilité d'aller au delà du niveau semi-classique.

3.4.3 Application 1 : l'électron de Dirac

Pour appliquer notre formalisme précédant et montrer l'efficacité de la méthode de diagonalisation, nous considérerons le cas d'un hamiltonien de Dirac dans le champ électromagnétique. La diagonalisation de cet hamiltonien est un problème difficile qui a été résolu seulement approximativement dans la limite non-relativiste. Une autre approche consiste à diagonaliser l'hamiltonien à l'ordre semi-classique en utilisant la transformation approximative de Foldy-Wouthuysen [158]. La méthode de diagonalisation développée dans ce paragraphe est la plus adaptée puisque elle permet de transformer l'hamiltonien de Dirac en une matrice (2×2) diagonalisable par blocs (due au degré de liberté du spin). Nous considérons alors l'hamiltonien de Dirac suivant :

$$H_0(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = \alpha \cdot (\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{R})) + \beta m + V(\mathbf{R}) \quad (3.45)$$

où α et β sont les matrices de Dirac

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 & & \sigma_i \\ 0 & 0 & & \\ & & 0 & 0 \\ \sigma_i & & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

avec σ_i ($i = 1, 2, 3$) est la matrice de Pauli et β qui est défini par

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

Remplaçant $\mathbf{R}$ par le paramètre r , de sorte que nous puissions diagonaliser $H_0(\mathbf{P}, \mathbf{r})$ par la transformation bien connue de Foldy-Wouthuysen

$$U(\mathbf{P}, \tilde{\mathbf{r}}) = \frac{E + m + \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{P} - \mathbf{A}(\tilde{\mathbf{r}}))}{\sqrt{2E(E + m)}} \quad (3.48)$$

où $E = \sqrt{(\mathbf{P} - \mathbf{A}(r))^2 + m^2}$. Dans ce contexte, nous définissons la connexion de Berry (non projetée) au premier ordre en $\hbar$ comme une matrice (4×4)

$$A_{R_i} = i\hbar U \nabla_{P_i} U^\dagger = \hbar \frac{i \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{R})) P_i \beta + i \beta E(E + m) \alpha_i - E (\boldsymbol{\Sigma} \times (\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{R})))_i}{2E^2(E + m)} \quad (3.49)$$

et

$$A_{P_l} = -i\hbar U \nabla_{R_l} U^\dagger = \nabla_{R_l} A_k(\mathbf{R}) A_{R_k} \quad (3.50)$$

où E dénotera maintenant la forme symétrisée de l'énergie

$$E = \sqrt{(\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{R}))^2 + m^2} \quad (3.51)$$

Ici à l'ordre zéro dans $\hbar$, on peut considérer que $\mathbf{P}$ et $\mathbf{R}$ commutent. Les matrices de spin $\boldsymbol{\Sigma}$ sont données par

$$\boldsymbol{\Sigma}_i = \begin{pmatrix} & & 0 & 0 \\ \sigma_i & & 0 & 0 \\ & & & \\ 0 & 0 & & \sigma_i \\ 0 & 0 & & \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

La méthode générale développée dans la section précédente nous permet alors d'avoir un hamiltonien diagonal

$$H_D = P [UH_0U^+] = \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + \frac{i}{2\hbar} P [[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}), A_{R_l}] A_{P^l} - [\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}), A_{P^l}] A_{R_l}] + V(\mathbf{r}) \quad (3.53)$$

où $\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ est la matrice $\beta \sqrt{(\mathbf{p} - \mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + m^2}$ et $P [[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}), A_{R_l}] A_{P^l} - [\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}), A_{P^l}] A_{R_l}]$ est la projection sur la partie diagonale. Dans l'équation (3.53) les opérateurs $(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ sont les variables dynamiques satisfaisant aux relations de commutations non canoniques (3.43).

En utilisant les expressions de la connexion de Berry, H_D peut être réécrit comme :

$$H_D = \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + P \left[-\frac{i}{2} [\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}), U \nabla_{P^i} U^+] \varepsilon^{ijk} U \nabla_{P^j} U^+ \right] \frac{B^k(\mathbf{r})}{\hbar} + V(\mathbf{r}) \quad (3.54)$$

D'ailleurs, un calcul détaillé nous donne au premier ordre de $\hbar$:

$$P \left[-\frac{i}{2} [\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}), U \nabla_{P^i} U^+] \varepsilon^{ijk} U \nabla_{P^j} U^+ \right] \frac{B^k(\mathbf{r})}{\hbar} = \beta \frac{\hbar \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B}}{2E} - \beta \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}}{E} \quad (3.55)$$

où nous avons introduit le moment angulaire intrinsèque semi-classique des particules $\mathbf{L} = \mathbf{P} \times A_R$ avec $A_R = P[A_R] = \hbar \frac{(\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{R})) \times \boldsymbol{\Sigma}}{2E(E+m)}$ qui est la projection de la connexion de Berry sur la partie diagonale. Par conséquent, l'hamiltonien à considérer est donné par

$$H_D = \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + \beta \frac{\hbar \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B}}{2E} - \beta \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}}{E} + V(\mathbf{r}) \quad (3.56)$$

qui est l'hamiltonien déduit dans un autre formalisme [223].

3.4.4 Application 2 : électron de Bloch

Essayons maintenant de voir l'influence des termes de Berry en considérant un électron dans un réseau cristallin perturbé par la présence d'un champ électromagnétique externe $\mathbf{B}$. L'hamiltonien dans ce cas, est de la forme $H = H_0 - e\phi(\mathbf{R})$, avec H_0 qui est la contribution magnétique et $\phi(\mathbf{R})$ est le potentiel électrique. La difficulté principale pour trouver la représentation diagonale est due au fait qu'en présence d'un champ électromagnétique, les opérateurs de translation T de réseau ne commutent pas [180, 181]. Afin de traiter ce problème il est commode d'exprimer le champ magnétique total comme

une somme d'un champ constant $\mathbf{B}$ et d'une autre petite partie $\delta\mathbf{B}(\mathbf{R})$ non-uniforme. La partie magnétique H_0 devienne alors :

$$H_0 = \left(\frac{\mathbf{P}}{2m} + e\mathbf{A}(\mathbf{R}) + e\delta\mathbf{A}(\mathbf{R}) \right)^2 + V_p(\mathbf{R}), \quad (3.57)$$

où $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ et $\delta\mathbf{A}(\mathbf{R})$ sont les potentiels vecteurs due au champ magnétique homogènes et non homogènes respectivement, et $V_p(\mathbf{R})$ est le potentiel périodique. La grande partie de champ magnétique $\mathbf{B}$ est choisie de tel sorte que le flux magnétique par cellule unité est une fraction de flux quantique h/e . L'avantage d'une telle décomposition est que pour $\delta\mathbf{A}(\mathbf{R}) = 0$, les opérateurs magnétiques de translation $\mathbf{T}(\mathbf{R}_i) = \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_i)$ sont des quantités qui commutent, permettant alors de diagonaliser exactement l'hamiltonien et de traiter $\delta\mathbf{A}(\mathbf{R})$ comme petite perturbation. L'espace d'état de l'électron de Bloch est engendré par un vecteur de base $|n, \mathbf{k}\rangle = |\mathbf{k}\rangle \otimes |n\rangle$, où n correspond à un index de bande. L'état $|n, \mathbf{k}\rangle$ peut être considéré comme un vecteur de base canonique tel que $U^+(K)|n\rangle = |u_n(\mathbf{k})\rangle$ avec $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ qui est la partie périodique des ondes de Bloch magnétiques. Dans cette représentation l'opérateur d'impulsion $\mathbf{K}|n, \mathbf{k}\rangle = \mathbf{k}|n, \mathbf{k}\rangle$ et l'opérateur de position $\mathbf{R} = \frac{i\partial}{\partial\mathbf{K}}$, ce qui implique la relation de commutation canonique suivante : $[R_i, K_j] = i\delta_{ij}$.

Nous intéressons premièrement à la diagonalisation du l'hamiltonien donné par (3.57) pour $\delta\mathbf{A} = 0$ par une matrice unitaire $U(\mathbf{K})$ (dont l'expression précise n'est pas nécessaire pour le moment) tels que $UHU^+ = \mathcal{E}(\mathbf{K}) - e\phi(U\mathbf{R}U^+)$, où $\mathcal{E}_n(\mathbf{K})$ est la matrice d'énergie diagonale, avec n l'index de bande. Considérant alors que le quasi-moment est invariant par l'action de U , (par exemple, $\mathbf{k} = U\mathbf{K}U^+ = \mathbf{K}$) l'opérateur de position devient dans la nouvelle représentation dû au fait que $[R_i, K_j] = i\delta_{ij}$:

$$r = U\mathbf{R}U^+ = \mathbf{R} + iU\partial_{\mathbf{K}}U^+. \quad (3.58)$$

Dans l'approximation adiabatique, qui consiste à négliger des transitions d'inter-bande, on doit projeter la coordonnée de position (l'opérateur de l'impulsion est diagonal et invariant par construction) sur une certaine bande tels que le *nième* opérateur de position d'intra-bande $\mathbf{r}_n = P_n(\mathbf{r})$ s'écrit $\mathbf{r}_n = \mathbf{R} + \mathcal{A}_n$. La quantité $\mathcal{A}_n = iP_n(U\partial_{\mathbf{K}}U^+)$ est la connexion de Berry. On peut aisément montrer que ses éléments de matrice sont donnés par $\mathcal{A}_n(\mathbf{k}) = i\langle u_n(\mathbf{k})|\partial_{\mathbf{k}}|u_n(\mathbf{k})\rangle$, où nous avons employé $U^+(k)|n\rangle = |u_n(\mathbf{k})\rangle$ avec $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ est la partie

périodique des ondes de Bloch. L'inconvénient quand on considère l'approximation d'une bande est que l'algèbre des coordonnées devient non-commutative

$$[r^i, r^j] = i\Theta^{ij}(\mathbf{k}), \quad (3.59)$$

avec $\Theta^{ij}(k) = \partial^i \mathcal{A}^j(k) - \partial^j \mathcal{A}^i(k)$. Dans l'approximation d'une bande, l'hamiltonien total avec un potentiel électrique est donné par :

$$P_n(UHU^+) = \mathcal{E}(\mathbf{k}) - e\phi(\mathbf{r}). \quad (3.60)$$

Maintenant, nous considérons l'hamiltonien en présence d'un champ magnétique où la perturbation $\delta\mathbf{A}$ brise la symétrie de translation. Dans ce cas, nous devons remplacer $\mathbf{K}$ dans toutes les expressions par $\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{K} + \mathbf{e}\frac{\delta\mathbf{A}(\mathbf{R})}{\hbar}$. Comme le flux de champ $\delta\mathbf{B}$ sur une plaquette n'est pas un multiple rationnel du flux quantique, nous ne pouvons pas diagonaliser simultanément ses composants K_i puisqu'elles ne commutent plus :

$$[\tilde{\mathbf{K}}^i, \tilde{\mathbf{K}}^j] = -ie\varepsilon^{ijk}\delta B_k(\mathbf{R}). \quad (3.61)$$

Par suite de cette non-commutativité, nous visons juste à quasi-diagonaliser l'hamiltonien à l'ordre semi-classique. Pour ce faire, nous remplaçons $U(\mathbf{K})$ par $U(\tilde{\mathbf{K}})$ de sorte que les connexions de Berry non projetées s'écrivent $\mathcal{A}_{R_i} = iU\nabla_{\tilde{K}_i}U^+$ et $\mathcal{A}_{K_l} = \nabla_{R_l}\delta A_k(\mathbf{R})\mathcal{A}_{R_k}$. Ceci nous permet de définir l'opérateur de position intra-bande :

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{R} + A_n, \quad (3.62)$$

et celui de l'impulsion :

$$\tilde{\mathbf{k}}_n \simeq \tilde{\mathbf{K}} - eA_n(\tilde{\mathbf{k}}_n) \times \delta\mathbf{B}(\mathbf{r}_n)/\hbar + O(\hbar), \quad (3.63)$$

avec $A_n = P_n(U\nabla_{\tilde{\mathbf{K}}}U^+)$ qui est la projection de la connexion de Berry sur la n ième bande choisie. On peut facilement voir que les éléments de matrice A_n peuvent être exprimées comme $A_n(\mathbf{k}) = i\langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} | u_n(\mathbf{k}) \rangle$. Ce qui est tout à fait nouveau ici, est la transformation sur l'opérateur impulsion $\tilde{k}_n$ qui contient également une correction due à la connexion de Berry. L'hamiltonien peut donc être diagonalisé par la transformation

$U(\tilde{\mathbf{K}}) + \frac{i}{4\hbar} [\mathcal{A}_{Rl}, \mathcal{A}_{Pl}] U(\tilde{\mathbf{K}})$ plus une projection sur la nième bande de telle sorte que :

$$\begin{aligned} P_n \left[U(\tilde{\mathbf{K}}) H U^\dagger(\tilde{\mathbf{K}}) \right] &= P_n \left[\mathcal{E}(\tilde{\mathbf{k}}) - \frac{i}{4} [\mathcal{E}(\mathbf{K}), U \nabla_{K_i} U^\dagger] \varepsilon^{ijk} \frac{\delta B^k(\mathbf{r})}{\hbar} U \nabla_{K_j} U^\dagger \right. \\ &\quad \left. - \frac{i}{4} U \nabla_{K_j} U^\dagger [\mathcal{E}(\mathbf{K}), U \nabla_{K_i} U^\dagger] \varepsilon^{ijk} \frac{\delta B^k(\mathbf{r})}{\hbar} \right] \\ &= \mathcal{E}_n(\tilde{\mathbf{k}}_n) - \mathcal{M}(\tilde{\mathbf{K}}) \cdot \delta \mathbf{B}(\mathbf{r}_n) + O(\hbar^2) \end{aligned} \quad (3.64)$$

où $\mathcal{M}(\tilde{\mathbf{K}}) = P_n(\frac{ie}{2\hbar} [\mathcal{E}(\tilde{\mathbf{K}}), \mathcal{A}(\tilde{\mathbf{K}})] \times \mathcal{A}(\tilde{\mathbf{K}}))$ est la magnetisation orbitale (le moment magnétique orbital des électrons de Bloch) qui a été obtenue précédemment dans le cadre de la dynamique pour un paquets d'ondes d'électrons de Bloch [7, 180, 181].

3.5 La substitution de Peierls généralisée

L'approche semi-classique pour étudier le transport électronique, même qu'il est approximatif, il peut être précis à une certaine limite. On peut tirer profit de la simplicité de la théorie semi-classique et de l'appliquer pour étudier divers phénomènes quantiques. Parfois, la prévision de la théorie quantique effective simplifiée pourrait être aussi précise que la théorie quantique originale. Par exemple la quantification de Bohr-Sommerfeld pour quantifier l'orbite de cyclotron prévoit avec succès les positions des niveaux de Landau dans les bandes magnétiques de Bloch [224]. Le formalisme semi-classique est aussi important pour inclure des effets des termes de Berry. La phase de Berry se manifeste également comme décalage de l'action classique, affectant ainsi les énergies des niveaux quantifiés, par exemple, les niveaux de Landau. On peut appliquer une substitution généralisée de Peierls rapportant les variables physiques aux variables canoniques, transformant la dynamique semi-classique en pleine théorie quantique valide au premier ordre. Cette substitution est essentielle pour la détermination de vraies équations du mouvement semi-classiques, ainsi que la quantification de Bohr-Sommerfeld pour les niveaux d'énergie en présence d'un champ magnétique, dont la généralisation implique de nouvelles structures de jauge liées aux phases de Berry [214, 225]. Ce paragraphe présente une étude détaillée de la quantification semi-classique pour une particule quantique simple dans un champ magnétique, en s'appuyant sur le cas des électrons dans un cristal et des électrons de Dirac [201]. Cette description unifiée d'une particule dans un champ magnétique est basée sur la méthode

de diagonalisation développée précédemment. Cette méthode a comme conséquence un hamiltonien effectif diagonal en termes des jauges covariantes mais non canoniques, avec des coordonnées non-commutatives. On montrera que la substitution de Peierls généralisée dépendant de la phase de Berry est nécessaire pour l'établissement des équations du mouvement complètes [201] ainsi pour la quantification de Bohr-Sommerfeld pour les niveaux d'énergie en présence d'un champ magnétique. Par conséquent, il est clair que les effets de phase de Berry en physique du solide n'est pas quelque chose facile à expliquer, mais le concept est essentiel pour une compréhension logique de tous les phénomènes de base.

3.5.1 La substitution de Peierls classique (1933)

Slater a rétabli l'intérêt d'un théorème dû à Wannier qui permet d'étudier le comportement des électrons dans un potentiel périodique perturbé. Ce théorème peut être énoncé comme suit : Sachant que l'énergie pour le potentiel périodique non perturbé en fonction de la l'impulsion $\mathbf{p}$ est connue, et elle est donnée par $E_0(\mathbf{p})$. Soit $e\varphi(\mathbf{r})$ le potentiel perturbé, (par exemple, le potentiel d'un champ électrique appliqué). Alors les énergies permises E du problème perturbé sont données approximativement en résolvant l'équation

$$[E_0(-i\hbar\nabla) + e\varphi(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (3.65)$$

La question qui se pose est : quelles modifications qui sont nécessaires à introduire quand un champ magnétique externe est également imposé. Ce problème a été étudié et résolu à un certain degré par Peierls, en liaison avec sa recherche sur le diamagnétisme des électrons dans les métaux. La modification la plus simple compatible aux conditions de l'invariance de jauge serait obtenue en remplaçant $-i\hbar\nabla$ par $-i\hbar\nabla - (e/c)\mathbf{A}$, où $\mathbf{A}$ est le potentiel vecteur de champ magnétique.

Afin de formuler ceci d'une manière détaillée, considérons le mouvement d'un électron dans un réseau cristallin placé dans un champ magnétique $\mathbf{B}$ constant. Si on part d'un hamiltonien de l'électron dans un champ périodique $U(\mathbf{r})$ dans la représentation des coordonnées

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad (3.66)$$

l'introduction d'un champ magnétique extérieur s'effectue de la façon suivante :

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}) \quad (3.67)$$

On peut établir la forme générale de la dépendance de l'hamiltonien par rapport au potentiel du champ en se fondant uniquement sur les conditions de l'invariance des équations par rapport au transformation de potentiel et des fonctions d'ondes telles que

$$A \rightarrow A + \nabla f, \quad \Psi \rightarrow \Psi \exp \left(\frac{ie}{\hbar c} f \right) \quad (3.68)$$

ou $f(\mathbf{r})$ est une fonction arbitraire des coordonnées.

Dans un champ faible le potentiel $A(\mathbf{r})$ est une fonction lentement variable des coordonnées. En vue de préciser le rôle que joue cette lenteur de la variation, considérant d'abord le cas limite d'un potentiel constant $A(\mathbf{r}) = A_0$. Le passage de $A = 0$ à $A = A_0$ est équivalent à la transformation (3.68) avec $f = A_0 \mathbf{r}$; par conséquent, à la place des fonctions propres initiales $\Psi_{sk} = u_{sk} \exp ikr$ le nouveau hamiltonien aura pour fonctions propres $u_{sk} \exp \left\{ i \left(\mathbf{p} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_0 \right) \mathbf{r} \right\}$. Il s'ensuit que pour conférer à la quasi-impulsion l'ancienne signification (celle d'une quantité déterminant la variation de la phase de la fonction d'onde lors des translations) on doit poser $\mathbf{K} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}_0/\hbar c$. La quantité $\mathbf{k}$ ainsi définie peut être appelée quasi-impulsion généralisée. Les nouvelles fonctions propres s'écrivent maintenant $\Psi_{sk} = u_{s,\mathbf{K}-e\mathbf{A}_0/\hbar c} \exp ikr$ et les valeurs correspondantes de l'énergie de l'électron sont égales à $\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \varepsilon_s(\mathbf{p} - e\mathbf{A}_0/\hbar c)$. Nous pouvons affirmer maintenant que dans le cas d'un potentiel $A(\mathbf{r})$ lentement variable dans l'espace, les fonctions d'ondes d'ordre zéros par rapport à l'intensité de champ seront de la forme $\Psi_{sk} = u_{s,\mathbf{K}-e\mathbf{A}(\mathbf{r})/\hbar c} \exp ikr$. On doit considérer maintenant les énergies $\varepsilon_s(\mathbf{K} - e\mathbf{A}/\hbar c)$ comme des operateurs formant l'hamiltonien dans la représentation $\mathbf{K}$. A la même approximation on doit entendre par $\mathbf{r}$ l'opérateur $\mathbf{r} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{K}}$. Mais comme l'opérateur $\frac{\partial}{\partial \mathbf{K}}$ est diagonal par rapport aux indices de bandes, l'hamiltonien est également diagonale. Nous arrivons ainsi à la conclusion que le mouvement de l'électron dans un réseau soumis à l'action d'un champ magnétique est décrit par l'hamiltonien

$$H_s = \varepsilon_s(\mathbf{K} - e/\hbar c \mathbf{A}(\mathbf{r})),$$

où $\mathbf{r} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{K}}$ [187]. A cette approximation il existe donc une analogie complète avec le

mode d'introduction du champ magnétique dans l'hamiltonien d'une particule libre dans la représentation des impulsions.

3.5.2 La substitution de Peierls généralisée et les équations du mouvement

Considérant un électron dans un champ uniforme $\mathbf{B} = \nabla \times \tilde{\mathbf{A}}$ décrit par un hamiltonien $H(\mathbf{\Pi}, \mathbf{R})$ où $\mathbf{\Pi} = \mathbf{P} + e\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{R})$ qui est l'impulsion covariante. En présence d'un champ électrique externe $\varphi(\mathbf{R})$, on peut écrire l'hamiltonien sous la forme :

$$H(\mathbf{\Pi}, \mathbf{R}) = H_m(\mathbf{\Pi}) + \varphi(\mathbf{R}), \quad (3.69)$$

avec $H_m(\mathbf{\Pi})$ est la contribution purement magnétique et $\varphi(\mathbf{R})$ est le potentiel électrique.

L'aspect de la connexion de Berry, dans le paragraphe précédent nous permet alors de définir un hamiltonien diagonal et de trouver une représentation matricielle avec des éléments diagonaux par block qui correspondent à des sous espaces pour différentes bandes d'énergie. Des corrections Quantiques sont alors introduites afin d'exprimer cet hamiltonien sous une forme diagonale. Cependant si nous limitons à l'ordre semi-classique (le rayon de courbure de l'orbite est grand en comparaison à la longueur d'onde), les éléments diagonaux de cet hamiltonien qui sont marqués par l'indice de bande n s'écrivent :

$$(H_d)_{nn} = \varepsilon_n(\boldsymbol{\pi}_n) + \varphi(\mathbf{r}_n) - e\hbar\mathbf{M}_n \cdot \mathbf{B}. \quad (3.70)$$

Le terme $\varepsilon_n(\boldsymbol{\pi})$ est l'élément de matrice à l'ordre zéros (non perturbé), dans lequel des variables classiques sont maintenant remplacées par les opérateurs quantiques $\boldsymbol{\pi}_n = \mathbf{\Pi} + \hbar\mathbf{A}_{\mathbf{\Pi}}$ et $\mathbf{r}_n = \mathbf{R} + \hbar\mathbf{A}_k$, où nous avons défini la connexion de Berry comme la projection sur la n ème bande d'énergie $A_{R/\mathbf{\Pi}} = \mathcal{P}_n [\mathcal{A}_{R/\mathbf{\Pi}}]$ de la matrice $\mathcal{A}_{R/\mathbf{\Pi}} = \pm i [U \nabla_{\mathbf{\Pi}/R} U^\dagger]$. Dans le cas magnétique, la connexion de Berry dans l'espace des impulsions a pour expression suivante $A_{\mathbf{\Pi}} = -e\mathbf{A}_R \times \mathbf{B}$.

Ceci nous fait penser à remplacer dans l'expression d'énergie (3.70) la substitution de Peierls traditionnelle $\mathbf{\Pi} = \mathbf{P} + e\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{R})$ avec une substitution de Peierls généralisée par

l'intermédiaire d'un moment covariant non canonique¹ :

$$\boldsymbol{\pi}_n = \boldsymbol{\Pi} - e\hbar\mathbf{A}_R \times \mathbf{B}, \quad (3.71)$$

qui inclue un terme supplémentaire dû à la phase de Berry. Cette nouvelle contribution à l'impulsion a été négligée avant, dans le travail d'Adams et de Blount [81] mais elle est importante pour la détermination correcte des équations du mouvement semi-classique d'un électron dans une bande magnétique de Bloch. Le dernier terme $\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}$ de l'équation (3.70) traduit le couplage entre le champ magnétique $\mathbf{B}$ et le moment orbitale $\mathbf{M}$ qui est un vecteur définit par :

$$\mathbf{M}(\mathbf{k}) = \frac{i}{2}\mathcal{P}_n([\varepsilon, \mathcal{A}] \times \mathcal{A}) = \frac{\hbar}{2}\mathcal{P}_n(\dot{\mathcal{A}} \times \mathcal{A}) \quad (3.72)$$

Il faut noter qu'il est plus pratique (particulièrement dans physique de solide [224]) d'écrire les éléments de matrice des composants de $\mathbf{M}$ comme

$$M^i = \frac{i\hbar^2\varepsilon^{ijk}}{2} \sum_{m \neq n} \frac{(\dot{\mathcal{A}}_j)_{nm}(\dot{\mathcal{A}}_k)_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}$$

où nous avons employé le fait que : $\dot{\mathcal{A}}_{nm} = \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_n - \varepsilon_m)\mathcal{A}_{nm}$.

Le moment magnétique orbital $\mathbf{M}$ trouve une explication très simple dans la description lagrangienne en utilisant le paquet d'ondes [7]. Contrairement à une particule classique, ce paquet d'ondes a une diffusion limitée dans l'espace réel. En fait, étant donné qu'il est construit en utilisant une base incomplète des fonctions de Bloch ; la taille du paquet d'ondes a une limite inférieure non nulle [226]. Par conséquent, un paquet d'ondes peut posséder en plus de mouvement de centre de masse une auto rotation autour de ce centre, qui à son tour donne lieu à un moment magnétique orbital en plus de son mo-

¹Lorsque l'on étudie un électron dans un potentiel périodique en présence d'un champ magnétique, il faut être prudent dans la définition des divers moments. Tout d'abord, il y a le moment canonique qui est l'impulsion $\mathbf{P}$ canoniquement conjugué à la position $\mathbf{R}$. Deuxièmement, il y a le moment cristallin $\boldsymbol{\Pi}$ défini par le théorème de Bloch en présence d'un potentiel vecteur, il est obtenu à partir de l'impulsion canonique par un couplage minimal $\boldsymbol{\Pi} = \mathbf{P} + e\mathbf{A}(\mathbf{R})$ (substitution de Peierls traditionnelle) et il est directement relié à la quantité du mouvement en l'absence d'un potentiel périodique. Par contre le moment covariant $\boldsymbol{\pi}$ (impulsion généralisée) qui décrit le mouvement complet de l'électron en présence du potentiel géométrique de Berry et du potentiel vecteur électromagnétique, est exprimé par la substitution de Peierls généralisée donnée par la formule (3.71).

ment de spin ². Nous soulignons que le moment orbital est une propriété intrinsèque de la bande. Son expression finale (3.15) ne dépend pas de la forme réelle et la taille du paquet d'ondes et ne dépend que des fonctions de Bloch. Sous des opérations de symétrie, le moment orbital se transforme exactement comme la courbure de Berry. Par conséquent si le système possède simultanément une symétrie de renversement du temps et une symétrie spatiale, $\mathbf{M}$ est nul en général.

La connexion de Berry nous permet aussi d'introduire (en général) des courbures naturellement non-Abéliennes $\Theta_{ij}(k) = \partial_{\pi i} \mathcal{A}_j - \partial_{\pi j} \mathcal{A}_i + [\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_j]$ (pour la simplicité nous omettons maintenant des indices de bande). Les opérateurs de position satisfont alors à une algèbre non-commutative :

$$[r^i, r^j] = i\Theta^{ij}(\boldsymbol{\pi}) \quad (3.73)$$

Les moments covariants généralisés satisfont une algèbre légèrement modifiée par apport au moment habituel par un terme de l'ordre $\mathbf{B}^2$ qui peut en général être négligé

$$[\boldsymbol{\pi}^i, \boldsymbol{\pi}^j] = -ie\varepsilon^{ijk} B_k + ie^2 \varepsilon^{ipk} \varepsilon^{jqk} \Theta^{pk} B_k B_l \quad (3.74)$$

Les relations de Heisenberg entre les coordonnées et les impulsions $[r^i, \boldsymbol{\pi}^j] = i\hbar\delta_{ij}$ est également modifiée par :

$$[r^i, \boldsymbol{\pi}^j] = i\hbar\delta_{ij} - ie\varepsilon^{jlk} B_k \Theta^{il} \quad (3.75)$$

L'ensemble des relations de commutations non triviales indiquées par les équations (3.73), (3.74) et (3.75) sont identiques à ce qui a été déduit dans d'autres travaux [216] dans le cadre de l'électron de Dirac en utilisant la transformation approximative de Foldy Wouthuysen [158]. Ceci prouve qu'une structure commune est à la base de la quasi-diagonalisation d'hamiltoniens quantiques généraux en présence des champs électromagnétiques [12].

Elle s'avère que les équations (3.70) , (3.73) , (3.74) et (3.75) sont essentiels pour la détermination des équations du mouvement semi-classiques avec les termes de Berry qui

²L'aimantation apparaît comme conséquence d'une structure interne, qui n'est pas liée au spin d'électrons, mais plutôt au pseudo-spin de deux bandes couplées. Comme le moment magnétique orbital est un effet de transitions virtuelles à d'autres bandes. Dans le présent travail, nous négligeons le spin de l'électron et donc ne discutons pas de l'effet Zeeman.

s'écrivent en présence d'un potentiel électromagnétique de la manière suivantes :

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{-i}{\hbar} [\mathbf{r}, H] = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \boldsymbol{\pi}} - \hbar \dot{\boldsymbol{\pi}} \times \Theta(\boldsymbol{\pi}) \quad (3.76)$$

$$\dot{\mathbf{k}} = \frac{-i}{\hbar} [\boldsymbol{\pi}, H] = -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B} \quad (3.77)$$

où $\mathcal{E}(\boldsymbol{\pi}) = \varepsilon - e\hbar\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}(\boldsymbol{\pi})$ est l'énergie de bande en absence de champ électrique et $\Theta(\mathbf{k}) = \varepsilon^{ijk}\Theta^{jk}/2$ est la courbure de Berry d'un état électronique associée au mouvement d'électron dans la $n^{ième}$ bande d'énergie. Comparé aux équations du mouvement semi-classiques développées dans les manuels standard [186], il ya deux nouvelles quantités qui peut avoir des conséquences importantes. L'une est la courbure de Berry ; il génère une vitesse anormale $\dot{\boldsymbol{\pi}} \times \Theta(\boldsymbol{\pi})$ qui est analogue à la force magnétique de Lorentz $\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}$ donnée par l'équation (3.77) mais dans l'espace des impulsions en raison de la courbure de Berry $\Theta(\boldsymbol{\pi})$. Elle prend en compte l'effet de la vitesse moyenne des transitions virtuelles à d'autres bandes $m \neq n$. En présence d'un champ électrique extérieur, cette vitesse anormale est perpendiculaire au champ électrique appliqué et donne lieu à l'effet Hall anormal. L'autre est la correction de l'aimantation à l'énergie de bande $\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}$, ce qui donne l'énergie d'un électron de Bloch dans un domaine magnétique tel que $\mathcal{E} = \varepsilon - e\hbar\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}$. La correction à l'énergie de bande est l'énergie magnétique supplémentaire en raison de couplage du moment magnétique orbital $\mathbf{M}$ au champ magnétique externe $\mathbf{B}$. Elle est étroitement liée à l'aimantation dans un solide. Cette aimantation orbitale modifie le spin de l'électron et est à l'origine du facteur g anormale dans la physique de la matière condensée ³.

Notre approche indique d'abord que l'opérateur $\boldsymbol{\pi}$ est en fait un opérateur d'impulsion généralisé qui est remplacé par la substitution de Peierls généralisée, et en second lieu, que les équations du mouvement ne sont pas limitées aux électrons de Bloch dans un champ magnétique mais sont valables pour tout système physique décrit par un hamiltonien évalué par une matrice arbitraire de la forme $H(\mathbf{R}, \boldsymbol{\Pi}) = H_m(\boldsymbol{\Pi}) + \varphi(\mathbf{R})$. En particulier elles sont également valables pour des particules de Dirac se déplaçant dans un champ électromagnétique. Dans les solides, pour des cristaux avec une symétrie d'inversion spatiale et d'inversion du temps simultanée, la courbure de Berry et le moment magnétique

³Ceci explique pourquoi dans la théorie des électrons relativistes de Dirac, l'électron a un spin [2] .

disparaissent dans toute la zone de Brillouin [7, 180, 181]. C'est le cas pour la plupart des applications dans la physique solide, mais il y a des situations où ces symétries ne sont pas simultanément présentes comme dans GaAs, où la symétrie d'inversion est brisée, ou dans les matériaux ferromagnétiques, qui brisent la symétrie d'inversion de temps. De la même manière, la présence d'un champ magnétique fort dans les bandes magnétiques de Bloch brise les symétries d'inversion de temps. Dans tous ces cas les propriétés dynamiques et de transport doivent être décrites par les équations du mouvement données par les formules (3.76) et (3.77).

Ces équations sont d'abord dérivées avec un formalisme lagrangien [7, 180, 181] décrit dans le paragraphe précédent. Ensuite, elles sont développées dans un autre contexte en utilisant la dynamique Galiléenne exotique [227, 228]. Une version relativiste pour les particules de Dirac a été aussi introduite par d'autres auteurs [223, 229]. Ce formalisme a été reproduit pour le transport de la lumière dans les cristaux photoniques [63], où les effets de la phase de Berry associés sont vivement exposés dans des expériences. Dans différentes situations physiques, la phase de Berry qui modifie les équations du mouvement entraîne de nouveaux effets comme l'effet Hall de spin d'un électron de Dirac dans un champ électromagnétique [199] ou l'effet Magnus de la lumière se propageant dans un milieu non homogène [60, 61, 230] ; ce qui a récemment donné lieu dans le cas du photon à une extension de l'optique géométrique dite « geometrical spinoptics ».

Une grande partie de notre intuition sur le transport électronique est dérivée de l'image semi-classique qui montre que les électrons se comportent presque comme des particules libres en réponse à des champs extérieurs à condition qu'on utilise l'énergie de la bande à la place de la dispersion d'une particule libre. Pour cette raison, les premières principales études des propriétés électroniques sont de cette nature. Nous constatons alors que, tout comme l'énergie de Bloch $\varepsilon(\boldsymbol{\pi})$, la courbure de Berry $\Theta(\boldsymbol{\pi})$ et le moment magnétique orbital $\mathbf{M}$ sont des quantités intrinsèques des bandes d'énergie (non induites par le champ appliqué). Ces trois quantités complétées par la substitution généralisée de Peierls, sont les grands piliers de la théorie des bandes. Contrairement à l'énergie de Bloch qui a été développée depuis longtemps, les autres quantités sont relativement nouvelles, mais leur importance devrait augmenter avec le temps.

3.5.3 Les variables canoniques

La dérivation des variables canoniques est une manière alternative de quantifier une théorie classique est d'introduire des variables de position et d'impulsion qui satisfont au crochet de Poisson suivants :

$$\{\bar{x}_i, \bar{x}_j\} = 0 \quad , \quad \{\bar{x}_i, \bar{p}_j\} = \delta_{ij} \quad \text{et} \quad \{\bar{p}_i, \bar{p}_j\} = 0 \quad (3.78)$$

Ceci signifie également qu'ils vérifient les relations de commutation :

$$[\bar{x}_i, \bar{x}_j] = 0 \quad , \quad [\bar{x}_i, \bar{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad \text{et} \quad [\bar{p}_i, \bar{p}_j] = 0 \quad (3.79)$$

Les paires complémentaires $(\bar{\mathbf{r}}, \bar{\mathbf{k}})$ sont des variables canoniques si leurs équations du mouvement sont de la forme canonique :

$$\dot{\bar{\mathbf{r}}} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \bar{\mathbf{p}}} \quad \text{et} \quad \dot{\bar{\mathbf{p}}} = -\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \bar{\mathbf{r}}} \quad (3.80)$$

Les quantités $\mathbf{r}$ et $\boldsymbol{\pi}$ qui sont données par les équations (3.76) et (3.77) décrivant le mouvement des électrons ne sont pas des variables canoniques puisque leurs équations du mouvement ne vérifient pas la forme ci-dessus. Ceci est dû principalement aux potentiels de jauge de Berry $\mathcal{A}_r$ et le potentiel électromagnétique $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{R})$, qui produisent une dynamique complète pour les électrons. Basé sur ces relations de commutation, ces variables peuvent être écrites explicitement en utilisant la représentation des opérateurs différentiels ou la représentation des matrices. Cependant, afin de quantifier la théorie, on doit trouver des variables canoniques qui doivent vérifier les crochets de Poisson.

Par exemple, les variables dynamiques $\boldsymbol{\pi}$ et $\mathbf{r}$ données par les équations (3.76) et (3.77) leurs crochets de Poisson ne sont pas de la forme canonique [10, 61, 196].

$$\{r_i, r_j\} = \varepsilon^{ijk} \Omega_k / \gamma \quad (3.81)$$

$$\{r_i, \pi_j\} = \delta_{ij} + eB_i \Omega_j / \gamma \quad (3.82)$$

$$\{\pi_i, \pi_j\} = -\varepsilon^{ijk} B_k / \gamma \quad (3.83)$$

avec $\gamma = 1 + e\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$.

Afin d'effectuer la quantification canonique, commençons par deux cas spéciaux. Le premier est un électron de Bloch dans le solide avec la courbure de Berry nulle sous l'influence d'un champ magnétique ($\mathbf{\Omega} = \mathbf{0}, \mathbf{B} \neq \mathbf{0}$).

Dans ce cas, les équations (3.81) , (3.82) et (3.83) se réduisent à

$$\begin{aligned}\{r_i, r_j\} &= 0 \\ \{r_i, \pi_j\} &= \delta_{ij} \\ \{\pi_i, \pi_j\} &= -\varepsilon^{ijk} B_k\end{aligned}\tag{3.84}$$

Évidemment, si on assume que $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + e\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{R})$ et on exige à $\mathbf{r}$ et $\mathbf{p}$ d'être des variables conjuguées canoniquement, alors la version quantifiée de la formule (3.83) peut être vérifiée

$$\{p_i, p_j\} = 0$$

C'est la substitution familière de Peierls [187].

Dans le deuxième cas, on considère un système avec la courbure de Berry mais sans champ magnétique ($\mathbf{\Omega} \neq \mathbf{0}, \mathbf{B} = \mathbf{0}$). Dans ce cas encore, nous avons $\gamma = 1$. Maintenant le rôle des variables $\mathbf{r}$ et $\boldsymbol{\pi}$ dans les relations de commutation est renversé, les variables d'imputions commutent alors que les coordonnées ne commutent pas

$$\begin{aligned}\{r_i, r_j\} &= \varepsilon^{ijk} \Omega_k \\ \{r_i, \pi_j\} &= \delta_{ij} \\ \{\pi_i, \pi_j\} &= 0\end{aligned}\tag{3.85}$$

On peut appliquer une substitution de Peierls mais cette fois-ci pour les variables de position et écrire que $\mathbf{r} = \mathbf{R} + A(\boldsymbol{\pi})$. Alors, il n'est pas difficile de voir que la relation de commutation (3.81) est satisfaisante.

$$\{R_i, R_j\} = 0$$

Après la quantification canonique, $\mathbf{r}$ devient $\frac{i\partial}{\partial \mathbf{p}}$ dans la représentation de quasi-impulsion. Dans le travail de Blount [189], l'opérateur de position $\mathbf{r}$ dans l'approximation d'une-bande

acquiert une correction, qui est la connexion de Berry $\mathcal{A}$. Par conséquent, la variable $\mathbf{r}$ peut être identifié avec l'opérateur de position projeté $P\mathbf{R}P$. Quand $\mathbf{B}$ et Ω sont différents de zéro, l'application de la substitution de Peierls pour les deux variables $\mathbf{r}$ et $\boldsymbol{\pi}$ simultanément de la même manière que précédemment ne donnent pas les relations de commutation canoniques correctes, ceci est due, principalement, en raison du facteur non trivial γ . Généralement des variables canoniques exactes ne peuvent pas être trouvées facilement. Même si on peut toujours avoir des paires canoniques dans un formalisme hamiltonien, qui est garanti par le théorème de Darboux [231], dans la pratique, cependant, les trouver peut ne pas être une tâche triviale. Il est alors constaté que la dérivation d'un hamiltonien semi-classique présente quelques difficultés en présence de termes de phase de Berry. En effet, comme il a été indiqué dans [7], ce calcul nécessite la connaissance des relations de commutation canoniques entre r_c et k_c (une procédure de re-quantification), mais ces relations ne peuvent être trouvées à partir de formalisme de Lagrange.

C'est la substitution généralisée de Peierls

$$\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\Pi} - e\hbar\mathcal{A}_R \times \mathbf{B} \quad \text{avec} \quad \mathbf{r} = \mathbf{R} + \hbar\mathcal{A}_R \quad (3.86)$$

introduites dans le paragraphe précédent avec la connexion de Berry $\mathcal{A}_R$ et le potentiel de jauge électromagnétique $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{R})$, qui mènent aux relations de commutation canoniques valables à l'ordre linéaire du champ magnétique $\mathbf{B}$ et de la courbure de Berry Ω . En effet, le raccordement entre les variables canoniques et les variables dynamiques se fait de la manière suivante :

$$\mathbf{p} = \boldsymbol{\pi} - e\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) + e\hbar\mathcal{A}_R \times \mathbf{B} \quad \text{et} \quad \mathbf{R} = \mathbf{r} - \hbar\mathcal{A}_R$$

où $\mathbf{p}$ et $\mathbf{R}$ sont maintenant des variables canoniques. L'hamiltonien (3.69) est exacte et représente l'évolution de particules dans ces nouvelles coordonnées. Il est encore non diagonale, toutefois cette non diagonalité est maintenant entièrement contenu dans le potentiel de la jauge $\mathcal{A}_R$ et $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{R})$.

Une raison plus profonde pour la modification de la densité d'état dans le travail de Xiao [10] trouve maintenant une explication simple dans la mécanique quantique non-commutative. L'origine de la densité d'état $D(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ avec $\boldsymbol{\pi} = \hbar\mathbf{k}$, est alors évi-

dente [198] ; la forme du volume exact dans l'espace des phases $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ doit inclure le jacobien $D(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \left(1 + \left(\frac{e}{\hbar}\right) \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}\right)$ de la transformation des variables canoniques $(\mathbf{R}, \mathbf{p})$ aux variables dynamiques $(\mathbf{r}, \boldsymbol{\pi})$. La densité d'états modifiée $D(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = (2\pi)^{-d} \left(1 + \left(\frac{e}{\hbar}\right) \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}\right)$ introduite par Xiao [10] afin d'assurer la validité du théorème de Liouville nous dit que l'élément de volume $D(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{k}$ a un nombre d'états quantiques constant et il doit être utilisé pour calculer les valeurs moyennes des observables obtenus par intégration sur l'espace des phases. Nous devons comprendre bien que les coordonnées $\mathbf{r}$ et $\boldsymbol{\pi}$ peuvent être remplacées par d'autres canonique $\mathbf{R}$ et $\mathbf{p}$, mais peut-être moins apparentes physiquement. Pour ces variables canoniques la densité d'états s'écrit $(2\pi)^{-d}$ et les mêmes valeurs moyennes peuvent être obtenues par l'évaluation directe de l'intégrale de l'élément de volume $\Delta \mathbf{R} \Delta \mathbf{p}$ ⁴. En conséquence, et en comparant les équations (3.76) et (3.77), nous pouvons conclure que les variables $\mathbf{r}$ et $\mathbf{k}$ correspondent aux variables de centre du paquet d'ondes $\mathbf{r}_c$ et le vecteur d'onde moyen $\mathbf{k}_c$ dans la référence [10]. Une autre manière de la description hamiltonienne est l'introduction de la structure symplectique non-canonique (crochets de Poisson) sur l'espace des phases pour les variables covariantes [11, 196, 197]. Une telle structure symplectique permet de définir le vrai volume dans l'espace des phases, qui satisfait au théorème de Liouville. Évidemment, les différentes approches sont équivalents les uns aux autres et ne représentent que des formalismes différents.

3.6 Quantification de Bohr-Sommerfeld :

Au mouvement classique de l'électron dans un métal en présence d'un champ magnétique décrivant une trajectoire fermée dans l'espace des impulsions correspond dans l'espace ordinaire un mouvement cyclotron dans le plan orthogonal à la direction de champ appliqué $\mathbf{B}$. Géométriquement cette trajectoire est l'intersection de la section de la surface iso-énergétique (surface d'énergie constante) $\varepsilon(\mathbf{k}) = \text{const}$ par un plan perpendiculaire au champ magnétique [224]. Sans quantification, la taille d'une orbite⁵ est déterminée par l'énergie initiale de l'électron et peut être modifiée par continuité. En passant à la théorie

⁴La situation est analogue à la transformation jacobéenne entre les intégrales d'une fonction dans R^3 effectuée par exemple entre les coordonnées cartésiennes et les coordonnées sphériques

⁵L'orbite est un contour d'énergie sur la surface de Fermi. Sa taille peut changer en permanence en fonction de l'état initial de l'électron.

quantique ⁶, cela donne lieu à des orbites cyclotron quantifiés et conduit à l'apparition de plusieurs niveaux d'énergie discrète pour chaque valeur donnée de la quasi-impulsion longitudinale (niveaux de Landau). Ces niveaux sont déterminés par la condition de la quantification semi-classique de Bohr-Sommerfeld sous la forme suggérée par Onsager pour les électrons de Bloch [232]. Onsager a été le premier à donner cette condition pour une orbite fermée et sans la correction de la phase de Berry qui s'écrit :

$$\oint \mathbf{P} d\mathbf{R} = 2\pi\hbar(n + 1/2) \quad (3.87)$$

L'intégration de l'équation (3.87) nous permet de définir une section de l'orbite $S_0(\varepsilon, k_z)$ où l'intégrale est prise sur une trajectoire fermée de l'espace k . Cette intégrale n'est autre que l'aire embrassée par la trajectoire c'est-à-dire l'aire S_0 de la section de la surface iso-énergétique par le plan $k_z = \text{const}$ avec z est la direction du champ magnétique :

$$S_0(\varepsilon, k_z) = \frac{2\pi eB}{\hbar}(n + 1/2) \quad (3.88)$$

Physiquement la quantification d'Onsager est Similaire au modèle de l'atome de Bohr [2]. Elle précise que la phase totale φ , de la fonction d'onde semi-classique, accumulée par un électron autour de son orbite cyclotron est la somme de trois contributions qui doit être des multiples entiers de 2π . Ces contributions sont : la phase de Broglie spatiale $k \times 2\pi r$, la phase d'Aharonov-Bohm $-eB \times \pi r^2 / \hbar$ et la contribution $-\pi$ due à l'indice de Maslov [233]. Les deux premiers termes sont classiques. La phase de Broglie est juste la phase accumulée d'une onde plane sur une trajectoire de longueur $2\pi r$. La phase d'Aharonov-Bohm vient du fait que l'électron entoure une région où le flux magnétique Φ est non nul. Cette phase peut être considérée comme une phase de Berry due à la courbure magnétique dans l'espace réel. Par contre, le dernier terme est la première correction quantique à l'action classique, il apparaît à l'ordre $\hbar$ et représente des effets ondulatoires. La contribution de Maslov provient de deux caustiques sur l'orbite cyclotron [234], chacun contribuant d'un facteur $-\pi/2$. Ces caustiques ⁷ représentent des singularités dans la fonction d'onde semi-classique, où la densité de probabilité diverge et la phase accumule une somme

⁶Dans le cas semi-classique la notion de trajectoire de l'électron conserve son sens et la méthode de quantification est un moyen de sélectionner les états quantiques permis d'un continuum d'états classiques.

⁷Les caustiques ne sont pas les propriétés d'une seule orbite, mais d'une famille d'orbites classiques.

supplémentaire d'un facteur $-\pi/2$. Avec la collection de ces trois termes, on aboutit à l'équation (3.88).

Roth [14] a ajouté une correction à la règle de quantification d'Onsager sans l'appeler une phase de Berry pour la raison évidente que celle-ci a été découvert beaucoup plus tard. Il a montré alors que la quantification semi-classique pour l'énergie d'un électron de Bloch dans un champ magnétique est de la forme :

$$S(\varepsilon, k_z) = \frac{2\pi eB}{\hbar}(n + \gamma) \quad (3.89)$$

La quantité γ est appelé un décalage de phase ($0 \leq \gamma < 1$) et elle n'est pas donnée par la règle de quantification semi-classique d'Onsager. La détermination précise de γ exige d'inclure des effets ondulatoires et donc d'ajouter des termes d'ordre $\hbar$ dans l'expansion semi-classique. Pour des électrons libres, et pour une seule bande d'électrons de Bloch (non couplé), $\gamma = 1/2$ en raison de la présence de deux caustiques sur l'orbite de cyclotron [234]. Une relation entre le décalage de phase γ et la nature des fonctions d'ondes de Bloch a été obtenu par Roth. il a constaté que γ pouvez dépendre de l'orbite cyclotron C et qu'elle peut être liée à une quantité Γ qui est identifié plus tard par Wilkinson [234] comme une phase de Berry acquis par l'électron de Bloch pendant une orbite cyclotron C :

$$\gamma(C) = \gamma_M + \gamma_B = \frac{1}{2} - \frac{\Gamma(C)}{2\pi}. \quad (3.90)$$

où $\gamma_M = \frac{1}{2}$ est la contribution des indices de Maslov et $\gamma_B = \frac{\Gamma(C)}{2\pi}$ qui est due à la phase de Berry. De cette façon, l'équation (3.88) devienne :

$$S(\varepsilon, k_z) = \frac{2\pi eB}{\hbar}\left(n + \frac{1}{2} - \frac{\Gamma(C)}{2\pi}\right) \quad (3.91)$$

Comme les niveaux d'énergie semi-classique des électrons constituent la base de l'analyse des phénomènes d'oscillation dans les métaux [235, 236] et comme ils sont exprimés par la constante γ induite par la règle de quantification (3.89), la phase du Berry doit se manifestée dans un certain nombre d'effets physiques bien connus (par exemple, l'effet de Haas-van Alphen et l'effet Shubnikov-de Haas) [235] et, par conséquent, peut être détectée expérimentalement. Cependant, cette phase est généralement ignorée dans les expériences. Il est admis [235, 236] que $\gamma = 1/2$ qui est couramment utilisée en décrivant

les phénomènes d'oscillation dans les métaux, en l'absence de la rupture magnétique, et par conséquent la phase ne contient pas d'informations essentielles sur la structure de bande d'un métal. Alors il semble utile d'examiner la quantité $\Gamma(C)$ afin de lui donner une forme explicite en termes de la phase du Berry. Pour se faire, nous allons introduire tout d'abord quelques approximations [224].

1- Nous considérerons que les orbites pour lesquelles les probabilités de transition d'inter-bandes magnétiques sont négligeables. En effet, le mouvement semi-classique implique une faible probabilité de rupture magnétique c'est-à-dire une variation par saut de l'impulsion de l'électron qui passe d'un contour sur un autre⁸. Si on néglige cette probabilité, l'électron se meut sur un seul contour d'une section de la surface iso-énergétique.

2- Nous nous limitons aux grands nombres quantiques : la condition de quantification semi-classique peut être corrigée par l'introduction d'une correction se réduisant à l'adjonction aux grands nombres quantiques. Pour déterminer cette correction il faut analyser le mouvement près des points d'arrêt limitant le domaine d'intégration.

3- On doit encore tenir compte du caractère approché de l'hamiltonien. Si le réseau possède un centre d'inversion, les corrections à l'hamiltonien sont quadratiques par rapport à l'intensité du champ et n'affecte pas la condition (3.88). Mais s'il n'y a pas de centre d'inversion les corrections à l'hamiltonien sont linéaires par rapport au champ magnétique $\mathbf{B}$. dans ce cas le terme correctif $1/2$ dans l'équation (3.88) perd tout son sens.

4- Nous négligeons l'effet du spin. Si on tient compte du spin de l'électron, chaque niveau doit se séparer en deux composantes où l'interaction spin-orbite lève la dégénérescence pour un cristal possédant un centre d'inversion. De ces fait les niveaux de Landau doivent subir un certain étalement.

Après avoir montré la nécessité de la substitution généralisée de Peierls pour la détermination des équations du mouvement semi-classiques, nous étudions maintenant la pertinence de ce nouveau concept au niveau de la quantification semi-classique des niveaux d'énergie pour un mouvement d'électrons dans un champ magnétique uniforme,

⁸La probabilité de transition d'une trajectoire à une autre est naturellement grande si ces trajectoires sont anormalement proches l'une de l'autre. C'est ce qui se produit si la trajectoire passe près de lieu d'intersection de deux nappes de la surface iso-énergétique (près du point de dégénérescence).

sans potentiel électrique $\varphi(\mathbf{r}) = 0$, de sorte que les équations (3.76) deviennent :

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}} &= \frac{1}{1 - e\hbar\mathbf{B}\Theta} \left(\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\boldsymbol{\pi}} \right) \\ \dot{\boldsymbol{\pi}} &= \frac{-e1}{1 - e\hbar\mathbf{B}\Theta} \left(\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\boldsymbol{\pi}} \times \mathbf{B} \right).\end{aligned}\tag{3.92}$$

Pour une raison de simplicité, on suppose que le champ magnétique $\mathbf{B}$ est dirigé dans la direction z . L'énergie est alors donnée par $\mathcal{E} = \varepsilon_0(\mathbf{k}) - M_z(\boldsymbol{\pi}) \cdot \mathbf{B}$. En conséquence, les orbites remplissent la condition $\mathcal{E} = \text{const}$ et $\pi_z = \text{const}$. La quantification semi-classique des niveaux d'énergie peut être faite selon la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld

$$\oint P_{\perp} dR_{\perp} = 2\pi\hbar(n + 1/2),\tag{3.93}$$

où $P_{\perp}$ est l'impulsion canonique dans le plan perpendiculaire à l'axe défini par $\pi_z = \text{const}$. L'intégration étant étendue à la période de mouvement et n étant un nombre entier positif supposé grand. Il est plus commode de choisir la jauge $\tilde{A}_y = BX$, $\tilde{A}_x = \tilde{A}_z = 0$. Dans cette jauge, on a $\pi_z = P_z = \text{const}$ et nous choisissons l'impulsion covariante habituelle $\Pi_y = P_y + eBX$. Lorsque le mouvement a lieu dans un champ magnétique homogène, l'invariant adiabatique est indépendant de choix du potentiel vecteur. Par conséquent la coordonné X est une variable cyclique et de ce fait la composante de la quasi-impulsion généralisée se conserve. Comme $BX = B(x - \hbar A_x)$, l'impulsion covariante généralisée définie de telle sorte que $\pi_y = \Pi_y + e\hbar B A_x$ devient $\pi_y = P_y + eBx$ qui est formellement la même relation que celle entre les variables canoniques, sauf maintenant qu'elle est fonction d'un nouvel opérateur d'impulsion généralisé. Cette relation avec les équations du mouvement données par (3.92) nous permet d'écrire $\dot{P}_y = \dot{\pi}_y - eB\dot{x} = 0$ avec P_y qui est une constante de mouvement de sorte que $\oint P_y dY = P_y \oint dY = 0$ et l'équation (3.93) devient simplement :

$$\oint P_x dX = 2\pi\hbar(n + 1/2).\tag{3.94}$$

Cette intégrale n'est autre que l'aire embrassée par la trajectoire, c'est-à-dire l'aire S de la section de la surface isoénergétique. Maintenant en introduisant la définition de l'impulsion généralisée $P_x = \pi_x + e\hbar A_y B$ et la différentielle de l'opérateur canonique de

position $dX = dx - \hbar dA_x = \frac{d\pi_y}{eB} - \hbar dA_x$, la condition de Bohr-Sommerfeld (3.93) s'écrit :

$$\oint \pi_x d\pi_y = 2\pi\hbar eB \left(n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi} \oint A_\perp d\boldsymbol{\pi}_\perp \right), \quad (3.95)$$

où l'intégrale est maintenant pris le long d'une trajectoire fermée Γ dans l'espace des impulsions π et $\frac{1}{2\pi} \oint A_\perp d\boldsymbol{\pi}_\perp = \phi_B$ est la phase de Berry pour l'orbite Γ . Il est intéressant de voir qu'en termes de l'impulsion covariante habituelle (substitution de Peierls) nous avons à la place de l'équation (3.95) la condition :

$$\oint \Pi_x d\Pi_y = 2\pi\hbar eB (n + 1/2). \quad (3.96)$$

L'intégration dans l'équation (3.95) nous permet de définir une section de l'orbite $S_0(\varepsilon, \pi_z)$ qui est l'intersection d'une surface d'énergie constante $\varepsilon(\pi) = \text{const}$ avec le plan $\pi_z = \text{const}$. Par conséquent la condition donnée par l'équation (3.95) détermine implicitement les niveaux d'énergie $\varepsilon_n(\pi_z)$.

Calculant maintenant la section $S_0(\mathcal{E}, \pi_z) = S_0(\varepsilon - e\hbar M_z B, \pi_z) \approx S_0(\varepsilon, \pi_z) + dS$, avec $dS = \oint d\kappa d\boldsymbol{\pi}_\perp$ le secteur de l'anneau entre la surface d'énergie constante $\varepsilon = \text{const}$ et la surface extérieur $\varepsilon + d\varepsilon$ avec $d\varepsilon = -e\hbar M_z B$, où $d\kappa = \sqrt{d\pi_x^2 + d\pi_y^2}$ est une longueur élémentaire de l'orbite. Comme dS peut être écrit ;

$$dS = \oint \frac{d\varepsilon d\kappa}{|\partial\varepsilon/\partial\boldsymbol{\pi}_\perp|} = -e\hbar B \oint \frac{M_z d\kappa}{|\partial\varepsilon/\partial\boldsymbol{\pi}_\perp|}, \quad (3.97)$$

où l'intégrale est défini sur toute l'orbite Γ , on a finalement :

$$S_0(\mathcal{E}, \pi_z) = 2\pi\hbar eB \left(n + \frac{1}{2} - \phi_B - \frac{1}{2\pi} \oint \frac{M_z(\boldsymbol{\pi}) d\kappa}{|\partial\varepsilon/\partial\boldsymbol{\pi}_\perp|} \right). \quad (3.98)$$

Il est plus pratique d'écrire sous la forme $S_0(\mathcal{E}, \pi_z) = 2\pi\hbar eB (n + \gamma)$ définissant ainsi le coefficient :

$$\gamma - \frac{1}{2} = -\phi_B - \frac{1}{2\pi} \oint \frac{M_z d\kappa}{|\partial\varepsilon/\partial\boldsymbol{\pi}_\perp|}. \quad (3.99)$$

Ce dernier peut être écrit sous une forme différente

$$\gamma - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2\pi} \oint \frac{[\tilde{\mathbf{v}} \times \mathbf{A} + \mathbf{M}]_z d\kappa}{|\partial\varepsilon/\partial\boldsymbol{\pi}_\perp|}. \quad (3.100)$$

avec $\tilde{\mathbf{v}} \equiv \partial \varepsilon / \partial \boldsymbol{\pi}$. L'équation (3.100) est une généralisation d'un résultat trouvé par Roth [14] et Falkovskii [15, 16], dans le contexte spécifique des électrons de Bloch dans un champ magnétique. La relation avec la phase de la Berry a été faite plus tard par Mikitik et Sharlai [237]. Dans les articles [14] et [237], le terme $[\tilde{\mathbf{v}} \times \mathbf{A} + \mathbf{M}]_z$ a été écrit comme $\frac{1}{2} \mathcal{P}_n \left[\left(\frac{\boldsymbol{\Pi}}{m} + \mathbf{v} \right) \times \mathcal{A} \right]$ où $\mathbf{v} = \frac{\boldsymbol{\Pi}}{m} + \hbar \dot{\mathcal{A}}$ est l'opérateur de vitesse après projection sur une bande, et $\boldsymbol{\Pi} = m \dot{\mathbf{R}}$ est une relation valide seulement pour un hamiltonien dont l'énergie cinétique est de la forme $\boldsymbol{\Pi}^2 / 2m$. Par conséquent l'équation (3.98) est plus générale et a un plus large champ d'application, car c'est un résultat général qui s'applique pour n'importe quel genre de système simple de particules dans un champ magnétique, y compris des électrons de Bloch et de Dirac. D'une manière primordiale, la condition de Bohr-Sommerfeld que nous avons introduit est une conséquence de la substitution généralisée de Peierls [201].

Pour les électrons de Bloch, la jauge de Berry $A(\mathbf{k})$ est abélienne (un opérateur scalaire) qui s'écrit en termes de la partie périodique des ondes de Bloch $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ comme :

$$A(\mathbf{k}) = i \langle u_n(\mathbf{k}) | \partial_{\mathbf{k}} | u_n(\mathbf{k}) \rangle, \quad (3.101)$$

où $\mathbf{k}$ est le moment généralisé ($\mathbf{k} = \boldsymbol{\pi} / \hbar$). L'application de l'équation (3.98) pour la trajectoire des électrons dans un cristal avec l'inversion de la symétrie spatiale et du temps, où Φ et $\mathbf{M}$ sont nulles dans la zone de Brillouin, a été étudiée par Mikitik et Sharlai [237]. Mais ces auteurs ont également précisé le fait que la phase de Berry est déferente de zéro quand l'orbite de l'électron entoure la ligne de contact entre les bandes d'un métal, réellement $\Phi_B = \pm 1/2$. En conséquence, dans ce cas $\gamma = 0$, au lieu de $\gamma = 1/2$ qui est utilisé généralement en décrivant l'effet d'oscillation dans les métaux [186]. Comme application simple de l'équation (3.98), considérant un cristal avec une symétrie d'inversion spatiale, et où la surface de Fermi est une ellipsoïde de révolution caractérisé par les deux masses effectives, une masse transversale $m_{\perp}$ et l'autre m_l longitudinale. Dans ce cas, les niveaux d'énergie peuvent facilement être déduits. Puisque $\mathcal{E} = \hbar^2 \left(\frac{\mathbf{k}_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + \frac{K_z^2}{2m_l} \right)$ et la surface $S_0(\mathcal{E}, K_z)$ est un disque d'un rayon $\mathbf{k}_{\perp}^2 = 2m_{\perp} \left(\mathcal{E} / \hbar^2 - \frac{K_z^2}{2m_l} \right)$ de sorte que les niveaux d'énergie

$$\mathcal{E}_n = \frac{eB\hbar}{m_{\perp}} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 K_z^2}{2m_l}, \quad (3.102)$$

coïncident réellement avec les solutions exactes puisque les niveaux d'énergie d'un oscil-

lateur harmonique conservent leur forme pour des grand nombres quantiques n .

Nous considérons maintenant l'hamiltonien de Dirac $H = \alpha \cdot \mathbf{\Pi} + \beta m$ en présence d'un champ magnétique uniforme, avec α et β sont les familières matrice (4×4) de Dirac. La diagonalisation semi-classique s'effectue par une projection sur un sous-espace d'énergie positive, menant ainsi à des matrices (2×2) qui décrivent l'opérateur d'énergie $\mathcal{E} = \varepsilon - e\hbar \mathbf{M} \cdot \mathbf{B}$ avec $\varepsilon = \sqrt{\pi^2 + m^2}$. Le moment magnétique est donné par $\mathbf{M} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2\varepsilon} - \frac{\mathbf{L}}{\varepsilon}$, où $\mathbf{L} = \boldsymbol{\pi} \times A$ représente le moment angulaire orbital intrinsèque [12, 223]. Il s'avère que pour l'hamiltonien de Dirac, le moment magnétique peut également être exprimé comme $\mathbf{M} = \varepsilon \boldsymbol{\Theta}$, avec une courbure qui est donnée par la matrice [12, 223] :

$$\boldsymbol{\Theta}(\boldsymbol{\pi}) = -\frac{1}{2\varepsilon^3} \left[m\boldsymbol{\sigma} + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) \boldsymbol{\pi}}{\varepsilon + m} \right], \quad (3.103)$$

où σ sont les matrices de Pauli. La connexion de Berry est définie comme $A = i \langle +, \boldsymbol{\pi} | \partial_{\boldsymbol{\pi}} | +, \boldsymbol{\pi} \rangle$ où $|+, \boldsymbol{\pi}\rangle$ est un spineur à deux composantes du sous-espace d'énergie positive. Dans le but de calculer les niveaux de Landau comme application de l'équation (3.98), on considère que le champ magnétique $\mathbf{B}$ se dirige dans la direction z de sorte que $\pi_z = P_z = \text{const.}$ Puisque la section $S_0(\varepsilon, p_z)$ est un disque de rayon $\pi_{\perp}^2 = \varepsilon^2 - m^2 - P_z^2$, l'application de l'équation (3.98) consiste à remplacer ε par $\mathcal{E}$ dans $\pi_{\perp}^2$ de sorte que nous ayons

$$S_0(\mathcal{E}, P_z) = \pi (\mathcal{E}_n^2 - m^2 - P_z^2), \quad (3.104)$$

qui donne la quantification semi-classique des niveaux d'énergie de Landau par la relation ;

$$\mathcal{E}_n^2 - m^2 - P_z^2 = 2\hbar e B \left(n + \frac{1}{2} - \phi_B - \frac{1}{2\pi} \oint \frac{M_z d\kappa}{|\partial \varepsilon / \partial \boldsymbol{\pi}_{\perp}|} \right). \quad (3.105)$$

Maintenant, à partir de la connexion $A = \frac{\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\sigma}}{2\varepsilon(\varepsilon+m)}$, on peut déduire la phase de Berry qui s'écrit :

$$\phi_B = -\frac{\tau}{2} + \tau \left(\frac{m}{2\varepsilon} + \frac{P_z^2}{2\varepsilon(\varepsilon+m)} \right), \quad (3.106)$$

où $\xi = \pm 1/2$ sont les valeurs propres de la matrice de Pauli σ_z . Cette phase est la somme d'une partie topologique $-\frac{\xi}{2}$ et d'une autre $\xi \left(\frac{m}{2\varepsilon} + \frac{P_z^2}{2\varepsilon(\varepsilon+m)} \right)$ non-topologique. La

contribution du moment magnétique donne le terme :

$$\frac{1}{2\pi} \oint \frac{M_z d\kappa}{|\partial\varepsilon/\partial\boldsymbol{\pi}_\perp|} = -\tau \left(\frac{m}{2\varepsilon} + \frac{P_z^2}{2\varepsilon(\varepsilon + m)} \right), \quad (3.107)$$

qui annule exactement la partie topologique ϕ_B . Ce qui nous permet alors d'écrire finalement :

$$\varepsilon_n = \mathcal{E}_n = \sqrt{m^2 + 2\hbar B e \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\tau}{2} \right) + P_z^2}. \quad (3.108)$$

Elle s'avère dans cet exemple que la quantification d'énergie semi-classique coïncide également avec le résultat exact. On s'attend d'habitude à ce que la phase de la Berry (excepté pour les particules de Dirac massives) prenne une valeur topologique $\Phi_B = \pm 1/2$, par suite de la dégénérescence de bande pour une impulsion nulle [1, 208]. Ce n'est pas le cas ici parce que le champ magnétique lève cette dégénérescence et que P_z n'est pas nul en générale. Mais la contribution de moment magnétique compense exactement la contribution de la phase de Berry non-topologique [201]. Cette récompensation peut être facilement compréhensible à partir de l'expression (3.100) pour le coefficient γ . En effet, à partir de l'égalité :

$$[\tilde{\mathbf{v}} \times A + \mathbf{M}]_z = \left[\frac{\boldsymbol{\pi} \times A}{\varepsilon} \right]_z + \frac{\tau}{2\varepsilon} - \frac{\mathbf{L}_z}{\varepsilon} = \frac{\tau}{2\varepsilon}, \quad (3.109)$$

on montre que :

$$\gamma = \frac{1}{2} + \frac{\tau}{2} = 0 \text{ ou } 1. \quad (3.110)$$

Pour un système de Dirac bidimensionnel on s'attend à ce que le moment magnétique pour les particules sans masse disparaisse exactement, et que la phase de Berry prenne la valeur topologique $\Phi_B = \pm 1/2$. Le mouvement d'électrons dans le graphène est une situation physique intéressante qui illustre cette affirmation. En effet, le graphène bidimensionnel est une structure qui se cristallise dans une structure en nid d'abeilles avec la symétrie d'inversion d'espace et de temps, de sorte que $\mathbf{M} = 0$. La zone de Brillouin hexagonale a deux points de Dirac distincts dégénérés marqués par $\tau = \pm 1$ où les bandes de conduction et de valence se réunissent et les excitations électroniques se comportent comme les fermions relativistes sans masse, de sorte que $\Phi_B = \pm 1/2$ et par conséquent [238] :

$$\mathcal{E}_n = \pm \sqrt{2\hbar e B \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\tau}{2} \right)}. \quad (3.111)$$

Cependant l'état fondamental n'est pas dégénéré et il y a seulement une possibilité pour le réaliser ($n = 0$ et $\tau = -1$).

Les niveaux de Landau des électrons dans le graphène ont d'abord été obtenus par McClure [239], dans un cadre purement quantique, il a montré que $\tau = -1$ et a prédit le nouveau comportement du graphène. Mikitik et Sharlai [237] ont pu montrer aussi que cette valeur de Φ_B peut être attribuée à une phase de Berry, qui annule exactement la contribution de Maslov. Cette phase de Berry est en fait la phase qui apparaît dans l'espace de Hilbert lors de la rotation d'un bi-spineur d'un angle de 2π dans l'espace réel. La conclusion est que $\Phi_B = -1/2$ dans le graphène et cette valeur qui a été observée expérimentalement dans l'effet Shubnikov-de Haas et l'effet Hall quantique [68, 240, 241].

En résumé, la méthode de diagonalisation que nous avons introduite mène à un hamiltonien effectif diagonal en termes de coordonnées non-commutatives. Les variables dynamiques habituelles sont alors remplacées par des variables généralisées (covariantes) qui sont fonction d'un champ de jauge induit par la phase de Berry. Cette non-commutativité implique automatiquement des équations du mouvement modifiées par une vitesse anormale qui est responsable de l'effet Hall anormal. Nous avons ainsi pu prédire de nouveaux effets, comme la nécessité de remplacer la fameuse substitution de Peierls par une substitution de Peierls généralisée comprenant un terme de Berry. Ceci nous permet de déterminer les équations semi-classiques complètes de mouvement des électrons de Bloch et de Dirac, ainsi que la condition de quantification de Bohr-Sommerfeld pour les niveaux d'énergie.

Conclusion générale

Ce travail porte sur l'étude de la phase de Berry dans le cadre de la mécanique quantique non-commutative. Particulièrement, nous avons examiné le rôle de cette phase dans la dynamique semi-classique des électrons de Bloch et son lien avec la mécanique quantique non-commutative.

Nous avons d'abord montré le lien étroit qui existe entre l'approche de Feynman des équations de Maxwell et la mécanique quantique non-commutative. En particulier, nous avons prouvé que la restauration des symétries brisées de groupe $SO(3)$ mène à l'existence de monopôle de Dirac dans l'espace de configuration ou l'espace des moments. En fait, la généralisation des idées de Feynman au cas de la mécanique quantique non-commutative est intéressante parce qu'elle mène naturellement à l'introduction d'un champ $\theta(p)$. Comme réalisation physique de la théorie non-commutative, nous avons prouvé que ce champ $\theta(p)$ peut être interprété dans quelques circonstances comme une courbure de Berry, exprimée dans l'espace des impulsions dans le cadre de l'effet Hall anormal. En effet une des expériences assez récente a prévu un monopôle magnétique en impulsion. Ce dernier qui apparaît naturellement dans l'expression de la conductivité de Hall présente des singularités à l'origine des coordonnées. Nous avons aussi considéré l'évolution adiabatique de l'équation de Dirac afin de calculer la courbure de Berry dans l'espace des impulsions. Dans la représentation de Foldy-Wouthuysen pour l'équation de Dirac, on constate que l'opérateur position acquiert une contribution anormale due à la connexion de Berry non abélienne qui rend l'algèbre de la mécanique quantique non-commutative. Cette géométrie non-commutative est à la base de la structure algébrique de toutes les particules de spin connues. L'aspect commun de tous ces cas est qu'une contribution anormale à l'opérateur position provienne de la représentation où l'énergie cinétique devient diagonale (la représentation de Foldy-Wouthuysen). Quand des tran-

sitions interbandes (mouvement adiabatique) sont négligées, la structure algébrique des coordonnées devient non-commutative. Ensuite, après avoir déterminé un nouvel opérateur de position, nous avons montré qu’une généralisation à toutes les particules de spin est possible en employant l’équation du mouvement de Bargmann-Wigner et nous avons exploré ses conséquences au niveau des équations du mouvement semi-classique dans plusieurs situations physiques. La non-commutativité des coordonnées est responsable d’un transport topologique similaire à l’effet Hall de spin dans la physique spintronic ou à l’effet Magnus dans des systèmes optiques. Comme application de ce formalisme, nous avons présenté la nouvelle dynamique pour les particules non-relativistes en présence d’un champ électrique.

D’autre part, afin de décrire convenablement les propriétés des électrons de Bloch influés par la phase de Berry, nous avons introduit un formalisme à partir duquel on peut dériver la dynamique semi-classique. Cette méthode aboutit à un hamiltonien effectif diagonal en termes de coordonnées non-commutatives. Elle permet aussi d’introduire d’une manière naturelle des variables canoniques qui sont fonction d’un champ de jauge induit par la phase de Berry. Les équations génériques du mouvement qui en résultent de cette méthode sont également corrigées par des limites de phase de Berry. Dans le cas d’un électron de Bloch dans le champ électromagnétique, cette approche mène aux mêmes équations de mouvement et à la même magnétisation qui sont développées par d’autres auteurs. D’ailleurs, ce formalisme qui est plus pratique et puissant reflète l’origine des phénomènes physiques étudiés et pourrait toujours être appliqué à plusieurs autres systèmes dans la physique de la matière condensée ou la physique des particules. Nous avons prouvé qu’une substitution généralisée de Peierls comprenant un terme dû à la phase de Berry doit être considérée pour un traitement semi-classique correct des électrons dans un champ magnétique. On obtient un terme supplémentaire par rapport aux équations habituelles de la physique du solide (non nul pour une brisure de symétrie d’inversion). Ce terme qui traduit la vitesse anormale est proposé pour la première fois par Karplus et Luttinger. Il serait responsable de la conductivité de Hall spontanée dans certains corps ferromagnétiques. Cette substitution qui engendre des nouvelles variables dynamiques, transforme la dynamique semi-classique en pleine théorie quantique valide au premier ordre. L’ensemble des relations de commutations non triviales qui résultent sont identiques à ce qui a été déduit dans d’autres travaux dans le cadre de l’électron

de Dirac en utilisant la transformation approximative de Foldy-Wouthuysen. Ceci prouve qu'une structure commune est à la base de la quasi-diagonalisation d'hamiltoniens quantiques généraux en présence des champs électromagnétiques. D'une manière primordiale, la condition de Bohr-Sommerfeld que nous avons introduite est une conséquence de la substitution généralisée de Peierls, par conséquent elle est plus générale et a un champ d'application plus large, car c'est un résultat général qui s'applique à n'importe quel genre de système simple de particules dans un champ magnétique, y compris des électrons de Bloch et de Dirac. La généralisation de cette formule aux électrons de Dirac montre la relation étroite entre le moment magnétique et la partie non-topologique de la phase de Berry, ce qui donne la quantification des orbites de cyclotron et prévoit avec succès les positions des niveaux de Landau dans les bandes magnétiques de Bloch modifiées par les termes de Berry. D'une manière générale, nous avons tenté de montrer l'importance de la phase de Berry dans différents domaines de la physique et son lien avec la Mécanique quantique dite non-commutative.

Bibliographie

- [1] M. V. Berry, Proc. Roy. Soc. London A , 392, **45** (1984).
- [2] D. Xiao, M. Chang and Q. Niu, Rev. Mod. Phys. **82**,1959 (2010).
- [3] J. Zak, Phys. Rev. Lett. **62**, 2747 (1989).
- [4] R. Resta, Ferroelectrics **136**, 51 (1992).
- [5] R.D. King-Smith and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **47**, 1651 (1993).
- [6] T. Thonhauser, D. Ceresoli, D. Vanderbilt, and R. Resta, Phys. Rev. Lett. **95**, 137205 (2005).
- [7] G. Sundaram and Q. Niu, Phys. Rev. B **59**, 14195 (1999).
- [8] T. Jungwirth, Q. Niu, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **88**, 207208 (2002).
- [9] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald, and N. P.Ong, Rev. Mod. Phys. **82**, 1539 (2010).
- [10] D.Xiao, J.Shi and Q.Niu, Phys.Rev.Lett. **95**, 137204 (2005).
- [11] P. A. Horvathy, L. Martina and P. Stichel, Phys. Lett. B **615**, 87 (2005).
- [12] P. Gosselin, A. Berard, H. Mohrbach, Eur. Phys. J. B **58**, 137 (2007).
- [13] P. Gosselin, J. Hanssen, H. Mohrbach, Phys. Rev. D **77**, 085008 (2008).
- [14] L.M. Roth, Phys. Rev. **145**, 434 (1966).
- [15] L.A. Fal'kovskii, Sov. Phys. JETP **22**, 423 (1966).
- [16] L. A. Fal'kovskii, Sov. Phys. Usp. 11 , 1 (1968) [Usp. Fiz. Nauk 94 , 1 (1968)].
- [17] A. Bérard and H. Mohrbach, Phys. Rev. D **69**, 127701 (2004).
- [18] A. Bérard, H. Mohrbach, J. Lages, P. Gosselin, Y. Grandati, H. Boumrar, F. Menas, Journal of Physics : Conference Series **70**, 012004 (2007).
- [19] Z. Fang et al. : Science **302**, 92 (2003).

- [20] V. Fock, Z. Phys. **49**, 323 (1928).
- [21] C. A. Mead and D. G. Truhlar, J. Chem. Phys. **70**, 2284 (1979).
- [22] F. Wilczek and A. Zee, Phys. Rev. Lett. **52**, 2111 (1984).
- [23] Y. Aharonov and A. Anandan, Phys. Rev. Lett. **58**, 1593 (1987).
- [24] J. Samuel and R. Bandhari : Phys. Rev. Lett. **60**, 2339 (1988).
- [25] B. Goss Levi, Phys. Today **46**, 17 (1993).
- [26] T. Kato, J. Phys. Soc. Jpn. **5**, 435(1950).
- [27] A. Messiah, Quantum Mechanics (North Holland, Amsterdam), Vol. II (1962).
- [28] Y. Aharonov, and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
- [29] S. Pancharatnam : Proc. Ind. Acad. Sci. A **44**, 247 (1956).
- [30] H. C. Longuet-Higgins, U. Opik, M. H. L. Pryce, R. A. Sack : Proc. Roy. Soc. London Ser. A **244**, 1 (1958).
- [31] G. Herzberg, H. C. Longuet-Higgins : Discuss. Faraday Soc. **35**, 77 (1963).
- [32] H. C. Longuet-Higgins : Proc. Roy. Soc. London Ser. A **344**, 147 (1975).
- [33] B. Simon, Phys. Rev. Lett. **51**, 2167 (1983).
- [34] A. Bohm and al. The Geometric Phase In quantum systems. Springer, 2003. ISSN 0172-5998.
- [35] T. Bitter, D. Dubbers : Phys. Rev. Lett. **59**, 251 (1987).
- [36] W. Dittrich et M. Reuter, Classical and Quantum Dynamics. From classical Paths to Paths Integrals, Springer Verlag, 1994.
- [37] J. H. Hannay, J. Phys. A **18**, 221 (1985).
- [38] Y. Yao and al., Phys. Rev. Lett. **92**, 037204 (2004).
- [39] M. C. Chang, and Q. Niu, J. Phys. : Condens. Matter **20**,193202 (2008).
- [40] M. Nakahara, Geometry, Topology and physics, Graduate Series in Physics, Adam Hilger, 1991.
- [41] D. Culcer, Y. Yao, and Q. Niu, Phys. Rev. B **72**, 085110 (2005).
- [42] R. Shindou, and K. I. Imura, Nucl. Phys. B **720**, 399 (2005).
- [43] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **93**, 206602 (2004).

- [44] S. Murakami , N. Nagaosa, and S. C. Zhang , Science **301**, 1348 (2003).
- [45] J. Sinova and al., Phys. Rev. Lett. **92**, 126603 (2004).
- [46] I. Souza, J. Iniguez and D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. **89**, 117602 (2002).
- [47] R. W. Nunes and David Vanderbilt. Phys. Rev. Lett. **73**, 712 (1994).
- [48] J. Shi, G. Vignale, D. Xiao and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **99**, 197202 (2007).
- [49] H. Koizumi, Y. Takada, Phys. Rev. B **65**, 153104 (2002).
- [50] J. E. Avron and R. Seiler, Phys. Rev. Lett. **54**, 259 (1985).
- [51] Q. Niu , D. J. Thouless, Y. Wu : Phys. Rev. B **31**, 3372 (1985).
- [52] D. Thouless, M. Kohmoto, N. Nightingale, N. de Nijs , Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
- [53] W. Kohn and J. M. Luttinger. Phys. Rev. **108**, 590 (1957).
- [54] R. Karplus, J. M. Luttinger, Phys. Rev. **95**, 1154 (1954).
- [55] M. Onoda, S. Murakami, and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **93**, 83901 (2004).
- [56] K. Sawada, and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **95**, 237402 (2005).
- [57] M. Onoda, S. Murakami, and N. Nagaosa, Phys. Rev. E **74**, 66610 (2006).
- [58] F. I. Fedorov, Dokl. Akad. Nauk SSSR **105**, 465 (1955).
- [59] C. Imbert, Phys. Rev. D **5**, 787 (1972).
- [60] K. Y. Bliokh et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 073903 (2006).
- [61] C. Duval et al., Phys. Rev. D **74**, 021701 (R) (2006).
- [62] K. Bliokh, Phys. Rev. Lett. **97** 043901 (2006).
- [63] K. Y. Bliokh, A. Niv, V. Kleiner, and E. Hasman, Nat. Photonics **2**, 748 (2008).
- [64] G. P. Mikitik, and Y. V. Sharlai, Phys. Rev. Lett. **93**, 106403 (2004).
- [65] R. G. Goodrich, and al., Phys. Rev. Lett. **89**, 026401(2002).
- [66] K. S. Novoselov, and al., Nature "London" **438**, 197 (2005).
- [67] K. S. Novoselov, and al., Nature Phys. **2**, 177 (2006).
- [68] Y. Zhang, Y.W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, Nature "London" **438**, 201(2005).
- [69] R. M. Martin, Phys. Rev. B **9**, 1998 (1974).

- [70] R. Resta, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **11**, R69 (2003).
- [71] W. H. Duan and Z. R. Liu, Curr. Opin. Solid State Mater. Sci. **10**, 40 (2006).
- [72] R. Resta, Phys. Rev. Lett. **80**, 1800 (1998).
- [73] I. Souza, T. Wilkens, and R. M. Martin, Phys. Rev. B **62**, 1666 (2000).
- [74] F. Mauri and S.G. Louie, Phys. Rev. Lett. **76**, 4246 (1996).
- [75] T. Thonhauser, Int. J. Mod. Phys. B **25**, 1429 (2011).
- [76] R. Resta, Condens. Matter **22**, 123201 (2010).
- [77] J. Caulet and al., J. Magn. Magn. Mater. **198**, 318 (1999).
- [78] H. Sato, T. Kumano, Y. Aoki, T. Kaneko et R. Yamamoto, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 416. (1993).
- [79] C.L. Canedy, X.W. Li, and G. Xiao, J. Appl. Phys. **81**, 5367 (1997).
- [80] C. L. Canedy, X. W. Li, and Gang Xiao. Phys. Rev. B **62**, 508 (2000).
- [81] E. N. Adams and E. I. Blount, J. Chem. Phys. **10**, 286 (1959).
- [82] N. P. Ong and W.-L. Lee, in Foundations of quantum mechanics in the light of new technology, (ISQM Tokio 2005) edited by S. Ishioka and K. Fujikawa, World Scientific, 121 (2006).
- [83] R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan **12**, 570 (1957).
- [84] G. Y. Guo, Y. Yao and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **94**, 226601 (2005).
- [85] Y. Yao and Z. Fang. Phys. Rev. Lett. **95**, 156601 (2005).
- [86] K. v. Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).
- [87] L. Berger and G. Bergmann, in The Hall Effect and Its Applications edited by C. L. Chien, and C. R. Westgate (Plenum, New York, 1979) p. 55.
- [88] W. Heisenberg, 1985 Letter to R. Peierls (1930), in Wolfgang Pauli, Scientific, Correspondence vol II, p 15,ed K von Meyenn (Berlin : Springer Verlag).
- [89] W. Pauli 1993 Letter to R.J. Oppenheimer (1946), in Wolfgang Pauli, Scientific Correspondence vol III, p 380, ed K von Meyenn (Berlin : Springer Verlag).
- [90] H. S. Snyder, Phys. Rev. **71**, 38 (1947).
- [91] H. S. Snyder, Phys. Rev. **72**, 68 (1947).

- [92] C. N. Yang. Phys. Rev. **72**, 874 (1947)
- [93] J. E. Moyal, Proc. Cambridge Phil. Soc. **45**, 99 (1949)
- [94] A. Connes, Non-commutative differential geometry, Inst. Hautes Études Sci. Publ. Math. **62**, 257 (1985).
- [95] S. L. Woronowicz, Publ. Res. Inst. Math. Sci. **23**, 117 (1987).
- [96] S. L. Woronowicz, Commun. Math. Phys. **111**, 613 (1987).
- [97] A. Connes, M.A. RieMel, Contemp. Math. **62**, 237 (1987).
- [98] D. Amati, M. Ciafaloni, and G. Veneziano, Phys. Lett. B **216**, 41 (1989).
- [99] D. J. Gross, P.F. Mende, Nucl. Phys. B **303**, 407 (1988).
- [100] G.Veneziano Europhys. Lett **2**, 199 (1986).
- [101] N. Seiberg and E. Witten, JHEP **09**, 032 (1999).
- [102] A. Smailagic and E.Spallucci, Phys. Rev. D **65**, 107701 (2002).
- [103] P. M. Ho and H. C. Kao, Phys. Rev. Lett. **88**, 151602 (2002).
- [104] R. Banerjee, Mod. Phys. Lett. A **17**, 631 (2002).
- [105] O. F. Dayi and A. Jellal, Phys. Lett. A **287**, 349 (2001).
- [106] J. Gamboa, F. Mendez, M. Loewe and J.C. Rojas, Mod. Phys. Lett. A **16**, 2075 (2001).
- [107] B. Muthukumar and P. Mitra, Phys. Rev. D **66**, 027701 (2002).
- [108] L. Mezincescu, (Star Operation in Quantum Mechanics), (2000), hep-th/0007046.
- [109] V.P. Nair and A.P. Polychronakos, Phys. Lett. B **505**, 267 (2001).
- [110] D. Kochan and M. Demetrian, Acta Physica Slovaca 52, No. 1, pp. 1-9 (2002)
- [111] Y. Zunger, JHEP **104**, 039 (2001).
- [112] M. Chaichian, M.M. Sheikh-Jabbari and A. Tureanu, Phys. Rev. Lett. **86**, 2716 (2001).
- [113] A. Connes, M.R. Douglas and A.S. Schwarz, JHEP **02**, 003 (1998).
- [114] M.R. Douglas and N.A. Nekrasov, Rev. Mod. Phys. **73**, 977 (2002).
- [115] I. Hinchliffe and N. Kersting and Y.L. Ma , Int. J. Mod. Phys. A **19**, 179 (2004).
- [116] M. Chaichian, M.M. Sheikh-Jabbari, A. Tureanu, Eur. Phys. J. C **36**, 251 (2004).

- [117] L. Kang et C. Nedal, Chin. Phys. Lett. **23**, 51122 (2006).
- [118] N. Chair and M. Dalabeeh J. Phys. A : Math. Gen. **38**, 1553 (2005) .
- [119] A.Smailagic E.Spallucci, J. Phys. A **35**, L363-L368 (2002).
- [120] J. Jing, and al., Eur. Phys. J. C **54**, 685 (2008).
- [121] M. Chaichian , P. Prešnajder , M.M. Sheikh-Jabbari , A. Tureanu Physics Letters B **527**, 149 (2002) .
- [122] B. Harms and O. Micu J. Phys. A : Math. Theor. **40**, 10337 (2007)
- [123] K. Li, S.Dulat, Eur. Phys. J. C **46**, 825 (2006).
- [124] P. A. Horvathy, Ann. Phys. **299**, 128 (2002).
- [125] V. Gerald, R. Dunne, R. Jackiw, and C. A. Trugenberger, Phys. Rev. D **41**, 661 (1990).
- [126] J. Madore, An introduction to non-commutative differential geometry and physical applications, Cambridge University Press, (2000).
- [127] J. Lukierski, P. C. Stichel, and W. J. Zakrzewski, Annals of Physics **260**, 224 (1997).
- [128] D. Bigatti and L. Susskind, Phys. Rev. D **62**, 066004 (2000).
- [129] C. Duval and P. A. Horvathy, Phys. Lett. B **479**, 284 (2000).
- [130] C. Sochichiu, Applied Sciences **3**, 48 (2001).
- [131] J. Gamboa, M. Loewe, and J. C. Rojas, Phys. Rev. D **64** , 067901 (2001).
- [132] B. Morariu and Alexios P. Polychronakos, Nucl. Phys. B **610**, 531 (2001).
- [133] A. Hatzinikitas and I. Smyrnakis, J. Math. Phys. **43**, 113 (2002).
- [134] S. Belucci, A. Nersessian, and C. Sochichiu, Phys. Lett. B **522**, 345 (2001).
- [135] B. Morariu and Alexios P. Polychronakos, Nucl. Phys. B **634**, 326 (2002).
- [136] O. Espinosa and P. Gaete, Symmetry in non-commutative quantum mechanics,(2002), hep-th/0206066.
- [137] L. Jonke and S. Meljanac, Eur. Phys. J. C **29**, 433 (2003).
- [138] I. Dadić, L. Jonke, and S. Meljanac, Acta Phys. Slov. **55**, 149 (2005).
- [139] E. Harikumar, V. Sunil Kumar, and A. Khare, Phys. Lett. B **589**, 155 (2004).
- [140] P. K. Ghosh, Eur. Phys. J. C **42** , 355 (2005).

- [141] I. Dadić, L. Jonke, and S. Meljanac, *Acta Phys. Slovaca* **55**, 149 (2007).
- [142] S. Bellucci and A. Yeranyan, *Phys. Lett. B* **609**, 418 (2005).
- [143] X. Calmet, *Phys. Rev. D* **71**, 085012 (2005).
- [144] X. Calmet and M. Selvaggi, *Phys. Rev. D* **74**, 037901 (2006).
- [145] F. G. Scholtz, B. Chakraborty, J. Govaerts, and S. Vaidya, *J. Phys. A* **40**, 14 581 (2007).
- [146] M. Rosenbaum, J. David Vergara, and L. R. Juárez, *Phys. Lett. A* **367**, 1 (2007).
- [147] F. Dyson, *Am. J. Phys.* **58**, 209 (1990).
- [148] S. A. Hojman and L. C. Shepley, *J. Math. Phys.* **32**, 142 (1991).
- [149] S. Tanimura, *Ann. Phys.* **220**, 229 (1992).
- [150] C. R. Lee, *Phys. Lett. A* **148**, 146 (1990).
- [151] C. H. Chou, *Phys. Lett. B* **323**, 147 (1994).
- [152] J. F. Carinena, L. A. Ibort, G. Marmo and A. Stern, *Phys. Rep.* **263**, 153 (1995).
- [153] A. Bérard, H. Mohrbach and P. Gosselin, *Int. Jour. Theor. Phys.* **39**, 1055 (2000).
- [154] A. Bérard, Y. Grandati and H. Mohrbach, *Phys. Lett. A* **254**, 133 (1999).
- [155] A. Bérard, Y. Grandati and H. Mohrbach, *Jour. Math. Phys.* **40**, 3732 (1999).
- [156] A. Bérard and H. Mohrbach, *Int. Jour. Theor. Phys.* **39**, 2623 (2000).
- [157] A. Bérard, J. Lages, and H. Mohrbach, *Eur. Phys. J. C* **35**, 373 (2004).
- [158] L.L. Foldy, S.A. Wouthuysen, *Phys. Rev.* **78**, 29 (1949).
- [159] M. Le Bellac and J. M. Levy-Leblond, *Nuov. Cim.* **14**, 217 (1973).
- [160] J. F. Carinena and H. Figueroa, *J. Phys. A* **39**, 3763 (2006).
- [161] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **133**, 60 (1931).
- [162] P. Curie, *Séances Soc. Phys. (Paris)*, 76 (1894).
- [163] T. T. Wu and C. N. Yang, *Phys. Rev. D* **12**, 3845 (1975).
- [164] G. Hooft, *Nucl. Phys. B* **79**, 276 (1974).
- [165] A. M. Polyakov, *JETP Lett.* **20**, 194 (1974).
- [166] Y. Nambu, *Phys. Rev. D* **10**, 4262 (1974).

- [167] J. Schwinger, Science **165**, 757 (1969).
- [168] B. Julia and A. Zee, Phys. Rev. D **11**, 2227 (1975).
- [169] M. K. Prasad and C. M. Sommerfeld, Phys. Rev. Lett. **35**, 760 (1975).
- [170] E. B. Bogomol'nyi, Sov. J. Nucl.Phys. **24**, 449 (1976).
- [171] C. Montonen and D. Olive, Phys. Lett. B **72**, 117 (1977).
- [172] H. Poincaré, C. R. Acad. Sci. Paris **123**, 530 (1896).
- [173] M. Onoda and N. Nagaosa, J. Phys. Soc. Jpn **71**, 19 (2002).
- [174] R. Jackiw, Phys. Rev. Lett. **54**, 159 (1985) .
- [175] B.S. Skagerstam , hep-th/9210054 GÖTEBORG-92-09, ITP-92-09
- [176] H. Bacry, "Localizability and Space in Quantum Physics", Lecture Notes in Physics, Vol 308. Heidelberg, Springer-Verlag, (1988).
- [177] V. Bargmann, E.P. Wigner, Proc. Nat. Acad. Sci. **34**, 211 (1948).
- [178] Yu. Bychkov, E.I. Rashba, JETP Lett. **39**, 78 (1984).
- [179] E.I. Rashba, Physica E **20**, 189 (2004).
- [180] M. C. Chang and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **75**, 1348 (1995).
- [181] M. C. Chang and Q. Niu, Phys. Rev. B **53**, 7010 (1996).
- [182] H. Mathur, Phys. Rev. Lett. **67**, 3325 (1991).
- [183] A.V. Dooghin et al., Phys. Rev. A **45**, 8204 (1992).
- [184] V.S. Liberman, B.Y. Zeldovich, Phys. Rev. A **46**, 5199 (1992).
- [185] K.Y. Bliokh, Y.P. Bliokh, Phys. lett. A **333**, 181 (2004).
- [186] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics (Saunders, Philadelphia, 1976), Chaps. 8–12.
- [187] R. Peierls, Z. Phys. **80**, 763 (1933).
- [188] W. Kohn, Phys. Rev. **115**, 1460 (1959).
- [189] E. I. Blount, in Solid State Physics, edited by F. Seitz and D. Turnbull (Academic Press, New York, 1962), Vol. 13, p. 305.
- [190] E. I. Blount, Phys. Rev. **126**, 1636 (1962).
- [191] G. H. Wannier, D.R. Fredkin, Phys. Rev. **125**, 1910 (1962).

- [192] S. Weigert and R. G. Littlejohn, Phys. Rev. A **47**, 3506 (1993).
- [193] A. J. Silenko, Phys. Rev. A **77**, 012116 (2008).
- [194] D. Xiao, W. Yao, Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **99**, 236809 (2007).
- [195] K. I. Imura and R. Shindou, Physica E **29**, 637 (2005).
- [196] C. Duval, et al., Phys.Rev.Lett. **96**, 099701 (2006).
- [197] C. Duval, et al., Mod. Phys. Lett. B **20**, 373 (2006).
- [198] P. Gosselin, F. Menas, A. Berard, H. Mohrbach, Europhys. Lett. **76**, 651 (2006).
- [199] P. Gosselin, A. Berard, H. Mohrbach, Phys. Lett. A **368**, 356 (2007).
- [200] P. Gosselin, A. Berard, H. Mohrbach, Phys. Rev. D **75**, 084035 (2007).
- [201] P. Gosselin, H. Boumrar and H. Mohrbach, Europhysics Letters (EPL) **84**, 50002 (2008)
- [202] H. Jones and C. Zener, Proc. Royal. Soc. (London) **144**, 101 (1934).
- [203] J. C. Slater, Phys. Rev. **76**, 1592 (1949).
- [204] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **84**, 814 (1951).
- [205] E. N. Adams, Phys. Rev. **85**, 41 (1952).
- [206] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **112**, 739 (1958).
- [207] N. Nagaosa, J. Phys. Soc. Japan **75**, 04200 (2006).
- [208] A. Shapere and F. Wilczek, Geometric Phases in Physics, World Scientific, 1989.
- [209] M. Kohmoto, J. Phys. Soc. Japan **62**, 659 (1993).
- [210] Y. aguchi, and al., Science **291**, 2573 (2001).
- [211] C. Zeng, Y. Yao, Q. Niu and H. Weiering, Phys. Rev. Lett. **96**, 37204 (2006).
- [212] S. Murakami, N. Nagaosa and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **69**, 235206 (2004).
- [213] H. Kuratsuji and S. Iida, Phys. Rev. D **37**, 441 (1988).
- [214] R. G. Littlejohn and W. G. Flynn, Phys. Rev. A **44**, 5239 (1991).
- [215] G. Panati, H. Spohn, and S. Teufel, Commun. Math. Phys. **242**, 547 (2003).
- [216] K. Y. Bliokh, Phys. Lett. A **351**, 123 (2006).
- [217] D. Xiao, J. Shi, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **96**, 099702 (2006).

- [218] H. v. Houten and al., Phys. Rev. B **39**, 8556 (1989).
- [219] H. Friedrich, and J. Trost, Phys. Rev. Lett. **76**, 4869 (1996).
- [220] E. Eriksen, Phys. Rev. **111**, 1011 (1958).
- [221] A. G. Nikitin, J. Phys. A **31**, 3297 (1998).
- [222] A. J. Silenko , J. Math. Phys. **44**, 2952 (2003).
- [223] K.Y. Bliokh, Europhys. Lett. **72**, 7 (2005).
- [224] E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii, Statistical Physics vol 9, Pergamon Press, 1981.
- [225] W. G. Flynn and R. G. Littlejohn, Phys. Rev. Lett **66** (1991) 2839.
- [226] N. Marzari, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **56**, 12847 (1997).
- [227] C. Duval, P. A. Horvathy Theor.Math.Phys. **144**, 899 (2005).
- [228] L. Martina, Theoretical and Mathematical Physics **167**, 816 (2011).
- [229] K.Y. Bliokh, Y.P. Bliokh, Ann. Phys. **319**, 13 (2005).
- [230] A. Berard and H. Mohrbach, Phys. lett. A 352 (2006) 190.
- [231] V. I. Arnold, Mathematical Methods of Classical Mechanics, 2nd ed. (Springer-Verlag, New York), 1989.
- [232] L. Onsager, Phil. Mag. **43**, 1006 (1952).
- [233] V.P. Maslov, V.S. Buslaev, Théorie des perturbations et méthodes asymptotiques (Dunod, 1972).
- [234] M. Wilkinson, J. Phys. A **17**, 3459 (1984).
- [235] D. Shoenberg, Magnetic Oscillations in Metals (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1984).
- [236] I. M. Lifshitz, and al., Electron Theory of Metals (Nauka, Moscow, 1971).
- [237] G. P. Mikitik and Yu. V. Sharlai, Phys. Rev. Lett. **82**, 2147 (1999).
- [238] P. Gosselin, A. Berard, H. Mohrbach et S. Ghosh Eur. Phys. J. C **59**, 883 (2009).
- [239] J.W. McClure, Phys. Rev. 104, 666 (1956).
- [240] K. S. Novoselov et al., Nature **438**, 197 (2005).
- [241] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov and J. P. Carbotte, Int. Jour. Mod. Phys. B **21** , 4611 (2007).

Résumé:

La théorie semi-classique de la dynamique des électrons de Bloch joue un rôle très important dans la compréhension des spectres électroniques et des propriétés de transport dans le solide. Il a été constaté que les équations du mouvement de plusieurs systèmes semi-classiques doivent tenir compte d'une vitesse anormale provenant de la contribution de la phase de Berry. Ceci a aidé à résoudre le mystère de l'effet Hall anormal dans les matériaux ferromagnétiques. Nous présentons une approche alternative pour la dérivation des équations du mouvement d'un électron dans les bandes magnétiques de Bloch, basée sur une diagonalisation semi-classique des hamiltonien quantiques. Nous montrons que les variables dynamiques ne sont pas les opérateurs canoniques habituels, mais de nouveaux opérateurs covariants qui incluent des potentiels de jauge de Berry. Le caractère commun de ce formalisme hamiltonien est qu'une géométrie non commutative engendre la structure algébrique des coordonnées et des impulsions. Une substitution généralisée de Peierls comprenant un terme de Berry doit être considérée pour la détermination des équations semi-classiques complètes du mouvement, ainsi que pour la condition de quantification de Bohr-Sommerfeld pour les niveaux d'énergie. De plus l'idée de Feynman sur l'électromagnétisme est étendue à l'espace des impulsions dans le cadre de la mécanique quantique non commutative. Nous montrons que la non commutativité des coordonnées est responsable d'un nouveau effet appelé effet Hall de spin. Nous montrons aussi sa relation avec la phase de Berry. En générale, nous mentionnons les efforts actuels menés dans le but de mieux comprendre la relation étroite existant entre la géométrie non-commutative et la phase de Berry.

Mots clés: Phase de Berry, mécanique quantique non commutative, méthode de diagonalisation, substitution généralisée de Peierls, dynamique semi-classique, quantification de Bohr-Sommerfeld

Abstract:

The semi-classical theory of Bloch electron dynamics plays a very important role in our understanding of electronic spectra and transport properties in solids. It has been found that the equations of motion of several semi-classical systems must take into account anomalous velocity terms rising from Berry's phase contributions. It helped in solving the mystery of the anomalous Hall effect in ferromagnetic materials. We present an alternative approach for the derivation of the equations of motion of an electron in magnetic Bloch bands, based on a direct semiclassical diagonalization of the full quantum Hamiltonians. We show that the dynamical variables are not the usual canonical operators, but new covariant operators including Berry's gauge potentials. The common feature of these Hamiltonian formulations is that a non commutative geometry underlies the algebraic structure of both coordinates and moments. We have shown that a generalized Peierls substitution including a Berry's phase term must be considered for the determination of the full semiclassical equations of motion, as well as for the semi-classical Bohr-Sommerfeld quantization condition for energy levels. Then, we extend the idea of Feynman on electromagnetism in momentum space taking into account the non-commutative quantum mechanics. In this context, we show that the non-commutative coordinates is responsible of a new effect called the spin Hall effect. We also show its relationship to the Berry phase concept. More generally, we mention the current efforts carried out in order to better understand the close relation existing between the non-commutative geometry and the Berry's phase.

Key Words: Berry's phase, non-commutative quantum mechanics, semi-classical diagonalization, generalized Peierls substitution, semi-classical dynamics, Bohr-Sommerfeld quantization