

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Ferhat Abbas - SETIF

MEMOIRE

Présenté à la Faculté des sciences
Département de Physique

Pour l'obtention du diplôme de

MAGISTER

Option : Physique théorique

Par

SAADI YAHIA

THEME

Généralisation du théorème adiabatique pour le spectre continu

Soutenu publiquement le : 02/06/2007

Devant la commission d'examen :

Président :	K. Bencheikh	Professeur	UFAS - Sétif
Rapporteur :	M. Maâmache	Professeur	UFAS - Sétif
Examineur :	H. Hachemi	Professeur	UFAS - Sétif
Examineur :	S. Houamer	M. C	UFAS - Sétif

REMERCIEMENTS

Je remercie Dieu tout puissant clément et miséricordieux de m'avoir soigné et aidé.

Je tiens, avant tout, à exprimer ma profonde gratitude à monsieur Maâmache Mustapha, professeur à l'université de Sétif, qui a assumé la direction de ce travail. Qu'il veuille bien trouver ici l'expression de ma reconnaissance pour son dévouement, sa patience, sa disponibilité, ses conseils et son aide constante qu'il m'a apporté tout au long de ce travail.

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

Monsieur K. Bencheikh, professeur à l'université de Sétif, qui me fait le grand honneur d'accepter la présidence du jury.

Monsieur H. Hachemi, professeur à l'université de Sétif, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de participer à ce jury.

Monsieur, S. Houamer, maître de conférence à l'université de Sétif, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant également de participer à ce jury.

J'adresse mes vifs remerciements à Mr. Jean-Pierre Provost, professeur à l'université de Nice, pour avoir accepté de lire le manuscrit de ce travail ainsi pour ses remarques et propositions qui ont permis de perfectionner cet accomplissement. Ainsi qu'à tous les enseignants qui, par leur enseignement, leur encouragement et leur aide, ont contribué à ma formation durant tous mes

études dès le primaire à l'université, je cite surtout Mme. Abd Elawi et Mme. Boucenène.

DEDICACES

Je remercie le Dieu pour m'avoir donné la force d'accomplir ce travail pour aller plus loin In Chaa Allah.

Je dédie ce travail à mes parents, ma mère pour ses encouragements et ses prières tout au long de mes études, mon père pour tout ce qu'il a fait pour que je puisse avoir ce résultat.

Je le dédie à mes frères et sœurs, et je les remercie pour leurs encouragements et leurs aides, et à toute ma grande famille.

A tous mes amis sans citer les noms.

A mes collègues de l'université de Batna ; Yassine, Adel, Tahar, Hamza, Oussama, ... et de l'université de Sétif ; Soheyb, Nadir, Houssine, Faouzi ... Mosbah du centre universitaire de El Oued et Khaled de l'université de Jijel ...

A tous ceux qui aiment Yahia et ceux que Yahia aime.

Yahia

TABLE DES MATIERES

<i>REMERCIEMENTS</i>	iii
<i>DEDICACES</i>	v
TABLE DES MATIERES	vii
LE RESUME	x
INTRODUCTION	12
LES DIFFERENCES PRINCIPALES ENTRE LE SPECTRE DISCRET ET LE SPECTRE CONTINU	17
I. Historique :	17
II. Le problème du discret et continu en mécanique quantique :	17
1) <i>L'équation de Schrödinger :</i>	18
2) <i>La théorie des espaces hilbertiens :</i>	21
1. Les vecteurs propres :	21
2. Les valeurs propres :	22
3) <i>L'influence de la nature du spectre sur la dynamique du système :</i>	23
1. Cas du spectre discret :	23
2. Cas du spectre continu :	24
COMMENT TRAITER LE SPECTRE CONTINU ? UNE APPROCHE COMPARATIVE	28
I. Introduction :	28
II. Exposition de la méthode :	28
1) <i>Définition d'une base :</i>	29
2) <i>Le choix de la base :</i>	30
3) <i>Symbole de Kronecker et distribution de Dirac :</i>	32
4) <i>Orthonormalisation :</i>	35
1. Orthogonalité :	35
2. Normalisation :	37
a) <i>Cas discret :</i>	37
b) <i>Cas continu :</i>	38
3. Discussion :	40
5) <i>Projecteurs dans l'espace de Hilbert :</i>	50
1. Relations de fermetures :	50
2. Les projecteurs :	53
a) <i>Projecteur sur une base discrète :</i>	53
b) <i>Projecteur sur une base continue :</i>	55
III. Conclusion :	57
SOLUTION DE L'EQUATION DE SCHRÖDINGER DEPENDANT DU TEMPS ET THEOREME ADIABATIQUE	61
I. Solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps :	61
1) <i>Les différentes méthodes pour la résolution de l'équation de Schrödinger :</i>	63
2) <i>La nécessité des méthodes approximatives :</i>	65
1. La théorie des perturbations dépendant du temps :	65
2. L'approximation soudaine :	67
3. L'approximation adiabatique :	67
II. Approximation adiabatique :	68

1) <i>L'approximation adiabatique avant la mécanique quantique</i> :	68
2) <i>L'approximation adiabatique en mécanique quantique</i> :	69
3) <i>Le théorème adiabatique dans le cas discret</i> :	71
1. L'énoncé du théorème adiabatique :	72
2. Démonstration du théorème adiabatique :	73
a) <i>Introduction</i> :	73
b) <i>Démonstration type du théorème adiabatique</i> :	73
c) <i>Validité de l'approximation adiabatique</i> :	80
4) <i>Généralisation du théorème adiabatique pour le spectre continu</i> :	81
1. Les difficultés de la généralisation :	81
a) <i>Le rôle du gap</i> :	81
b) <i>La nature de la dynamique du spectre</i> :	82
c) <i>L'invariance du nombre quantique</i> :	83
2. Généralisations au spectre continu :	83
3. Le théorème adiabatique sans la condition du gap :	84
a) <i>Cas d'un état discret séparé du spectre continu par un gap</i> :	85
b) <i>Cas de croisement de deux valeurs propres</i> :	85
c) <i>Cas général</i> :	86
4. Le théorème adiabatique généralisé pour le spectre continu :	87
5. L'énoncé du théorème adiabatique généralisé :	90
6. démonstration du théorème adiabatique généralisé :	91
a) <i>Représentation des axes tournants</i> :	91
b) <i>Démonstration du théorème</i> :	97
c) <i>L'approximation adiabatique</i> :	102
LA PHASE GEOMETRIQUE GENERALISEE	110
I. Les applications du théorème adiabatique :	110
II. La phase géométrique de Berry :	110
1) <i>Introduction</i> :	110
2) <i>La phase de Berry dans le cas discret</i> :	112
3) <i>Interprétation de La phase de Berry</i> :	114
4) <i>les différentes applications de La phase de Berry</i> :	115
III. Généralisation de la phase de Berry pour le cas continu :	117
1) <i>Les différentes généralisations de la phase de Berry</i> :	117
1. Evolutions non adiabatiques :	117
2. Systèmes non cycliques :	117
3. Systèmes non hermitiens :	118
4. Autres généralisations :	118
2) <i>La phase de Berry pour le spectre continu</i> :	118
IV. Exemples d'application de la phase géométrique généralisée :	126
1) <i>L'équation de Dirac dans un champ électromagnétique</i> :	126
1. Description du problème :	126
2. Recherche des vecteurs et valeurs propres :	127
3. Calcul de la phase géométrique généralisée :	131
4. Interprétation de la phase géométrique généralisée :	134
5. La limite non relativiste :	136
2) <i>Une particule dans un champ homogène</i> :	138
V. L'aspect géométrique de la matrice S :	141
1) <i>Introduction</i> :	141
2) <i>Représentation interaction et matrice S</i> :	142

3) <i>Limite adiabatique et phase géométrique</i> :	146
4) <i>Diffusion par un potentiel sans réflexion</i> :	148
1. Approche indépendant du temps (solution exacte) :	148
2. Approche dépendant du temps :	152
CONCLUSION.....	158
APPENDICE : RELATION D'ORTHONORMALISATION POUR LE SPECTRE	
CONTINU	160
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....	163

LE RESUME

Le théorème adiabatique est l'un des plus anciens et importants théorèmes en mécanique quantique. Il est largement appliqué en physique théorique ou expérimentale. Il s'agit d'une propriété des états du *spectre discret* d'un hamiltonien dépendant d'un ensemble de paramètres lentement variables.

L'existence d'un gap entre les niveaux d'énergie est une condition nécessaire pour assurer la validité de l'approximation adiabatique, une exigence qui n'est pas vérifiée dans le cas d'un spectre continu.

On se propose de donner une généralisation du théorème adiabatique pour le cas du *spectre continu*, après avoir rappeler les différentes difficultés liées au spectre continu et les différentes méthodes pour les surmonter. Une démonstration de cette généralisation est proposée ainsi qu'une discussion des résultats obtenus.

La découverte de la phase de Berry (1983) a constitué un complément théorique au théorème adiabatique ordinaire en mécanique quantique. Ce complément exprime qu'en plus de la phase dynamique associée à l'hamiltonien instantané, l'évoluer d'un système adiabatique et cyclique admet une autre phase, dite de Berry, qui ne dépend que de la trajectoire suivie dans l'espace des paramètres et définit donc une notion de transport géométrique.

Depuis sa découverte, la phase de Berry a été généralisée pour plusieurs systèmes physiques : à savoir, les systèmes classiques (angle de Hannay), les systèmes non cycliques, non adiabatiques, ...etc. De plus, on montre dans ce travail que la généralisation du théorème adiabatique pour le spectre continu implique l'apparition d'un analogue de la phase de Berry ; *la phase géométrique généralisée*. Cette dernière a une forme analogue à celle obtenue dans le cas du spectre discret et vérifie les mêmes propriétés.

De plus, la phase géométrique généralisée vérifie une autre propriété supplémentaire : en effet, dans les problèmes de diffusion on montre que, pour un spectre non dégénéré, la phase géométrique généralisée n'est que l'élément diagonal de la matrice de diffusion ou matrice S .

Des exemples d'application sont proposés ; le premier est un exemple de calcul de la phase géométrique généralisée. Le deuxième est un exemple qui permet d'illustrer quelques propriétés de cette nouvelle phase. Le dernier admet une solution exacte dans le cadre de la

théorie de diffusion, cette même solution est établie approximativement en suivant une approche dépendant adiabaticquement du temps, où on montre que la phase géométrique généralisée est une bonne approximation de l'amplitude de transmission.

Mots-clés : approximation adiabatique, théorème adiabatique, gap d'énergie, spectre discret, spectre continu, différentielles propres, phase de Berry, phase géométrique, matrice S.

INTRODUCTION

Le recours vers les méthodes d'approximation est un choix inévitable en physique. Ceci est dû non seulement à l'insuffisance technologique ou aux capacités limitées de l'être humain, mais aussi à la nature même des objets physiques. Parmi ces méthodes l'approximation adiabatique est l'une des méthodes puissantes en mécanique quantique.

Quoique cette méthode soit approximative, elle constitue l'un des domaines de recherche actifs en physique théorique. En effet, l'approximation adiabatique n'est pas une simple méthode de résolution, mais elle s'appuie sur le théorème dit adiabatique dont la démonstration et l'application aux différents problèmes physiques nécessitent un outil mathématique puissant.

Malgré l'importance et les résultats obtenus par cette méthode, son domaine d'application reste limité aux systèmes ayant des spectres d'énergie de nature discrète. L'extension du théorème adiabatique aux systèmes dont le spectre est continu est une question qui n'a été posée que très récemment (la fin des années 90) et qui n'est pas encore bien développée. Cet effet est dû essentiellement à la nature contradictoire du mot *continu* qui reste toujours un problème philosophique non résolu.

Le but de ce travail est d'établir la généralisation du théorème adiabatique au cas du spectre continu. Une telle généralisation nécessite une démonstration plus au moins rigoureuse ainsi qu'une discussion des résultats déjà obtenus et des applications physiques qui vont ressortir, c'est ce qu'on propose de montrer.

On va d'abord rappeler, au premier chapitre, les diverses propriétés du spectre continu et leurs différences principales avec celles du spectre discret. Puis on introduit les outils mathématiques qui seront utilisés dans les prochains chapitres.

Dans le deuxième chapitre, on va rappeler les différentes méthodes utilisées pour surmonter ces difficultés. Ainsi, on va suivre une approche comparative entre les deux spectres discret et continu. On cite d'abord le résultat obtenu dans le cas discret puis on donne celui correspondant au cas continu, en insistant sur la manière avec laquelle on effectue la généralisation de ce dernier. Pour apercevoir les analogies entre les deux spectres on utilisera le même système d'indices. Les notions qui seront traitées dans ce chapitre sont les notions de : *base, orthogonalité, normalisation, fermeture, projecteur et interprétation probabiliste.*

Ces notions ne sont pas données arbitrairement, elles seront largement utilisées dans les chapitres suivants. Comme pour le premier chapitre, on construira le formalisme mathématique nécessaire pour ce travail. Tout au cours du chapitre, on commence la résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps sous sa forme générale pour aboutir à l'approximation adiabatique.

Le but de ces deux premiers chapitres est d'aider le lecteur à mieux sentir les différences entre les deux spectres, ce qui n'est pas toujours disponible dans la littérature ! et de le convaincre de la validité et la nécessité des méthodes qui seront utilisées par la suite.

Au troisième chapitre on aborde l'étude du théorème adiabatique après avoir donné un bref rappel des différentes méthodes soit exactes ou approximées utilisées dans la résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps. En suivant toujours la même approche comparative, et du fait que ce travail est aussi un travail de synthèse, on commencera par citer les différents résultats et applications du théorème adiabatique dans le cas discret. Ensuite, on abordera les différentes difficultés qui apparaissent lors de l'application de ce théorème adiabatique dans le cas continu ainsi que les résultats obtenus lors des tentatives de l'obtention d'une telle généralisation. Un théorème adiabatique généralisé sera donné. Après, on discutera ces résultats en montrant les différentes importunités qu'ils contiennent. Finalement, on proposera une nouvelle forme analogue mais simple de ce théorème généralisé ainsi qu'une démonstration et une discussion détaillée.

Le quatrième chapitre s'intéresse à l'établissement de la phase géométrique généralisée¹ ; une généralisation de la phase de Berry dans le cas discret, et à l'aspect géométrique de la matrice S ; où on montre que dans le cadre de la théorie de diffusion, et pour des cas particuliers, la phase géométrique généralisée n'est que l'argument de la valeur propre de la matrice S . Ce dernier résultat constitue une bonne confirmation des résultats du chapitre précédent.

Finalement, on propose quelques exemples d'application, à savoir ; l'équation de Dirac dans un champ électromagnétique, une particule dans un champ homogène et l'exemple dans diffusion par un potentiel sans réflexion.

¹ On note que cette phase a été prédite par le professeur M. Maâmache même avant la généralisation du théorème adiabatique.

Un appendice couronne ce mémoire consacré à l'illustration des difficultés concernant l'orthonormalisation des états du spectre continu. Les résultats de cet appendice seront utilisés dans le deuxième et le dernier chapitre.

Chapitre I

Les différences principales entre le spectre discret et le spectre continu

LES DIFFERENCES PRINCIPALES ENTRE LE SPECTRE DISCRET ET LE SPECTRE CONTINU

I. Historique :

Depuis l'antiquité, les deux mots « continu »¹ et « discret »² ont été le sujet d'un très long débat philosophique et mathématique ; en effet, l'opposition de l'un avec l'autre a été aperçue depuis l'origine grecque, comme on peut le voir par exemple dans les arguments paradoxaux de Zénon d'Élée³, le paradoxe du mouvement en constitue l'un de ces arguments le plus célèbre. En mathématique, l'hypothèse du continu est la plus ancienne et l'une des questions fondamentales ouvertes en théorie des ensembles [11, 21].

Tout au long de l'histoire de l'évolution de la physique ces deux mots ont joué un rôle essentiel dans la détermination de la nature de la matière, l'une des énigmes les plus ardues de la physique, ce qui a conduit à l'apparition de deux grandes écoles : l'école atomiste, pour laquelle la matière discrète est constituée de particules séparées, parmi ses pionniers, on peut citer Démocrite, Newton, Einstein ... etc. De l'autre côté, l'hypothèse de la continuité de la matière était inévitable ; le fluide *calorique*, l'*éther* et l'aspect ondulatoire de la matière attribués à Lavoisier, Huygens, Maxwell ... etc. sont parmi les idées les plus fondamentales de cette deuxième école [26].

II. Le problème du discret et continu en mécanique quantique :

Cette introduction résume la situation de la physique jusqu'au début du 19^{ème} siècle, qui a connu l'apparition de l'une des deux grandes théories physiques du siècle – à savoir, la relativité et la physique quantique – cette dernière, à travers un principe dit de L. De Broglie a pu unifier les points de vue des deux écoles [7, 14,50]. Si cette théorie a donné une solution au problème du continu et discret sur le niveau fondamental, l'histoire n'est pas encore terminée.

¹ « Le mot continu désigne en général ce qui est d'un seul tenant, ce qui se module avec tous les degrés intermédiaires souhaitables (ainsi les flux liquides nous semblent continus, l'espace et le temps nous paraissent devoir l'être) » [49].

² Ou bien *discontinu* : « ce qui éclate, se résout en individus isolés, ce qui est séparé d'avec soi-même, comme l'indique l'étymologie latine (ainsi les bornes kilométriques le long des routes, les mots successifs dans les phrases, ou les lettres dans les mots sont les unités d'ensembles ou de séries discrètes) » [49].

³ Zénon d'Élée, né aux environs de l'an 500 avant J.-C [11, 21].

1) *L'équation de Schrödinger* :

Tout au début de la mécanique quantique on a été confronté au problème de l'explication des *états discrets* d'un atome, un caractère nouveau non pas de la matière mais des états susceptibles d'être occupés par cette dernière. En effet, dans le cadre de la mécanique classique l'état d'un système physique est bien défini par la connaissance des variables dynamiques du système, solutions des équations de Newton ou celles de Maxwell, qui sont des quantités continues d'où la continuité des grandeurs qui déterminent l'état du système tel que l'énergie [30, 52]. Alors pour se faire, il fallait d'abord trouver l'analogue des équations de la mécanique classique, une telle équation, qui ne peut pas être directement déduite d'une manière rigoureuse des anciens principes, mais intuitivement devinée [73] sera l'un des postulats de la théorie, cette équation c'est ce qu'on appelle aujourd'hui l'*équation de Schrödinger*¹ [7, 14, 50].

Alors, en mécanique quantique, tout revient à résoudre l'équation de Schrödinger ; une équation aux dérivées partielles, du premier ordre par rapport au temps et du second ordre par rapport aux coordonnées de l'espace ordinaire. Il y a plusieurs méthodes mathématiques pour résoudre une telle équation, soit analytiques ou numériques. Parmi ces méthodes les plus puissantes, on a la méthode de séparation de variables qui conduit, avec des conditions aux bords imposées *a priori*, au problème dit de Sturm-Liouville [10, 33, 68]. De plus, l'équation de Schrödinger est linéaire et homogène par rapport aux solutions, d'où ces dernières obéissent au *principe de superposition* [50].

A cause de ces propriétés de l'équation de Schrödinger, ses solutions, dites fonctions d'onde du système², doivent vérifier un certain nombre de conditions, à savoir ; l'uniformité et la continuité dans tout l'espace ainsi que leurs dérivées même pour les points de discontinuité du potentiel ! [7, 14, 50]. Comme la résolution de l'équation de Schrödinger revient à résoudre un problème de Sturm-Liouville, les fonctions d'onde doivent appartenir à un espace hermitien³ ou plus exactement, en prenant compte du principe de superposition, à un sous-espace de l'espace hermitien ; l'espace de Hilbert⁴. Il reste alors à donner une interprétation pour ces fonctions d'onde qui, en plus des conditions précédentes, vérifient une

¹ Postulée par Erwin Schrödinger en 1926 [50].

² Notion introduite pour la première fois en mécanique quantique par Schrödinger en 1926 [50].

³ Un espace muni d'une forme hermitienne ; application d'espace vectoriel dans le corps des nombres complexes [33, 49, 68].

⁴ Un espace hermitien complet est dit de Hilbert [33, 49, 68].

équation dite de *continuité*¹. Cette équation implique la conservation de la norme des fonctions d'onde, ce qui a conduit Max Born en 1926 [55, 56] à donner une interprétation probabiliste de la fonction d'onde.

L'interprétation de la norme de la fonction d'onde comme une densité de probabilité a imposé des restrictions sur les solutions qui peuvent représenter un état physique ; en fait, ces fonctions doivent être de carrés sommables, c'est-à-dire appartenir à un sous-espace de l'espace de Hilbert noté l^2 .

Ainsi, en faisant appel à la théorie des espaces hilbertiens qui constitue l'un des outils les plus puissants de l'analyse fonctionnelle et de la physique mathématique et dont E. Schmidt, M. Fréchet et F. Riesz [44, 49] géométrisent en introduisant le langage des *normes*, de l'*orthogonalité* et surtout des *bases hilbertiennes*. Les fonctions d'onde se présentent comme des combinaisons linéaires sous la forme d'une somme discrète des éléments de ces bases qui apparaissent le plus souvent comme fonctions propres de certains opérateurs différentiels linéaires.

En suivant cette méthode, il suffit de résoudre l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien du système, alors les états discrets de l'atome ont été établis parfaitement ainsi que ceux de nombreux systèmes physiques, tels que l'oscillateur harmonique, le moment cinétique, particule dans un puit infini... etc. Ces exemples constituent des cas très particuliers. En fait, avec l'interprétation probabiliste des fonctions d'onde i.e. le fait que ces dernières soit de carré sommable, il y a très peu d'opérateur, tels les exemples ci-dessus, ayant un ensemble *complet* de vecteurs propres vérifiant cette propriété. On peut prendre comme exemple une particule dans un puits de potentiel carré, elle possède des fonctions propres de carrés sommables mais qui ne forment pas un ensemble complet, dans ce cas il est facile de construire une fonction d'onde qui représente un état physique réel mais qui ne peut pas être développée sur ces fonctions propres toutes seules. Par conséquent, il y a un grand nombre de quantités physiques qui ne puissent pas être qualifiées en tant qu'*observables*, ce fait soumet la théorie à une limitation intolérable ? [7, 14].

¹ On entend par l'équation de continuité une équation de la forme : $\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$.

² Défini par Hilbert lui-même à l'occasion de l'étude des équations intégrales par V. Volterra, I. Fredholm et E. Schmidt, et qui résout les principaux problèmes posés en interprétant les équations en termes d'endomorphismes de l'espace l^2 [49, 68].

De l'autre côté, Schrödinger a été conduit à un type de problème aux valeurs propres de structure entièrement différente ! En effet, si les coefficients de l'équation de Schrödinger sont *singuliers sur les bords du domaine de l'espace*, ou, en particulier, si *le domaine est infini*, une partie du spectre de valeurs propres ou bien tout le spectre va se comporter autrement ; des *spectres continus* vont apparaître, c'est-à-dire des valeurs propres qui puissent balayer leurs domaines de définitions de manière continue [33, 68], les fonctions propres correspondant à ce type de valeurs propres ne sont pas de carrés sommables!

On est donc en face d'une situation contradictoire ;

- soit on rejette l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde et on accepte toutes les solutions de l'équation de Schrödinger, par conséquent, une autre interprétation est nécessaire ?
- Sinon, si le fait que les solutions doivent être de carré sommable est une condition à maintenir, alors quels seront les critères à poser pour dire qu'une quantité physique soit une observable ou non ? Et comment on doit traiter les opérateurs ayant des spectres continus ?

Dans ce qui va suivre, on va voir comment on sort de cette situation en acceptant toutes les solutions¹ de l'équation de Schrödinger, une chose qui va assurer la complétude des bases de l'espace de Hilbert. De l'autre côté, l'interprétation probabiliste est maintenue et adaptée de façon à ne pas exclure ces solutions. On va essayer de citer les difficultés qui accompagnent le spectre continu et les différentes méthodes proposées pour le traiter et généraliser les résultats obtenus dans le cas du spectre discret (pour plus de détails voir Chapitre 2). Ces problèmes sont connus sous le nom de problèmes aux limites singuliers et les résultats fondamentaux obtenus dans ce domaine sont associés aux noms de H. Weyl, M. H. Stone, E. C. Titchmarsh, K. Kodaira [26]. En particulier le théorème fondamental de développement qui généralise celui de Hilbert-Schmidt (spectre continu) et qui permet de donner une présentation unitaire de la théorie du développement des fonctions en série de Fourier, série de fonctions d'Hermite, fonctions de Bessel, intégrale de Fourier, ...etc. [26]. Il reste à noter que les généralisations proposées dans ce travail restent sur le plan formel et leur application n'est pas toujours évidente sur le plan technique ! Pour commencer, on va faire un bref aperçu sur la théorie de Hilbert dans le cas du spectre discret.

¹ En tant que solutions mathématiques sans aucune interprétation physique *a priori* !

2) *La théorie des espaces hilbertiens :*

La théorie des espaces hilbertiens, définis précédemment, trouve son origine dans celle des développements de fonctions arbitraires en séries de fonctions orthogonales qui apparaissent, comme on l'a déjà signalé, le plus souvent comme fonctions propres de certains opérateurs différentiels linéaires ; séries de Fourier, fonctions sphériques, polynômes orthogonaux... etc. Ces fonctions sont généralement des solutions de problèmes de type Sturm-Liouville. Ce dernier conduit au problème aux valeurs propres suivant [33, 68] :

$$\hat{D}(\vec{r})[f(\vec{r})] = d \cdot f(\vec{r}) \quad (\text{I-1})$$

avec $\hat{D}(\vec{r})$ un opérateur différentiel linéaire¹ des coordonnées de l'espace représentées ici par le vecteur position \vec{r} , f une fonction de \vec{r} et d un nombre complexe. On appelle *fonction propre* de l'opérateur $\hat{D}(\vec{r})$ toute fonction f vérifiant cette équation, le nombre d lui correspondant est dit *valeur propre* de l'opérateur.

1. Les vecteurs propres :

En physique, l'opérateur $\hat{D}(\vec{r})$ ne peut pas être quelconque ; en effet, comme ce dernier va représenter une grandeur physique réelle, par exemple l'énergie, le moment cinétique ... il doit être une *observable* c'est-à-dire un *opérateur hermitien*² dont les fonctions propres forment une base de l'espace de Hilbert. On montre que les fonctions propres d'un opérateur hermitien sont orthogonales deux à deux [14, 33, 68]. À cause de cette propriété, on dit souvent que l'espace de Hilbert est un espace vectoriel dans lequel on peut faire de la *géométrie*³, en effet, tout ce qui précède est analogue au problème géométrique suivant : si A est une application linéaire de \mathfrak{R}^3 dans \mathfrak{R}^3 , trouver les valeurs propres λ et les vecteurs propres X_λ tels que :

$$A[X_\lambda] = \lambda \cdot X_\lambda \quad (\text{I-2})$$

et examiner si les vecteurs propres de A forment une base de \mathfrak{R}^3 , d'où le nom vecteurs propres pour les fonctions propres f . La différence est qu'il s'agit pour ces dernières de problème de dimension infinie.

¹ $\hat{D}(\vec{r})$ peut être aussi matriciel, dans ce cas f est une fonction colonne correspondante ; scalaire, spineur, bispineur ... etc.

² Dans le langage mathématique, un tel opérateur est dit aussi auto-adjoint.

³ C'est à partir de ce caractère géométrique qu'on peut manipuler les bases hilbertiennes comme des bases de l'espace ordinaire lors du changement de bases dans les chapitres suivants (surtout fin du chapitre 4) !

Toutes les fonctions de l'espace de Hilbert peuvent s'écrire sous forme d'un développement sur la base des vecteurs propres. La nature du développement dépend de la nature du *spectre* de l'opérateur en question (à savoir, une série, une intégrale ou bien les deux).

2. Les valeurs propres :

L'ensemble de tous les valeurs propres d forme ce qu'on appelle *spectre* de l'opérateur $\hat{D}(\vec{r})$.

En général, comme pour tout opérateur, le spectre d'un observable peut être (fig.1) : continu (a), discret (b) ou les deux à la fois ; les parties discrète et continue, si elles existent simultanément, peuvent être disjointes (c) (d)¹ ou se recouvrir (e) : une valeur propre discrète peut fort bien être "noyée" dans un *continuum* d'autres valeurs propres cette situation étant toutefois assez exceptionnelle² [13, 18, 73]. La figure ci-dessous donne quelques dispositions possibles.

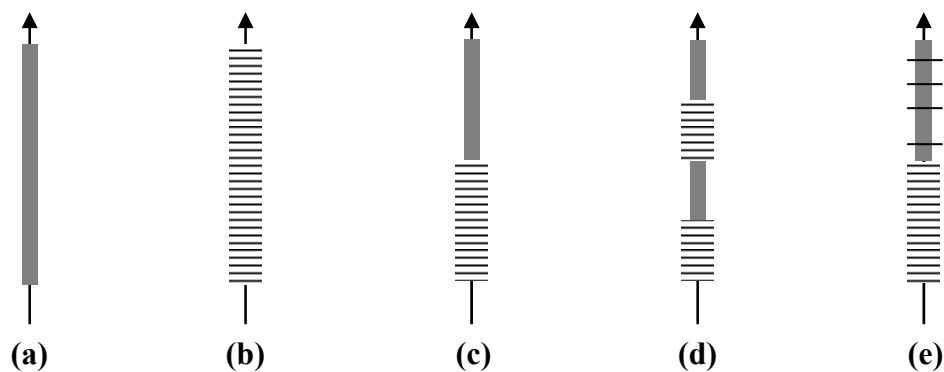


Figure 1 : Différentes possibilités pour le spectre d'un opérateur.

Il reste à rappeler une propriété très importante du spectre d'un opérateur, en fait, la relation entre les valeurs propres et les vecteurs propres n'est pas univoque ; on peut rencontrer des cas où à une valeur propre correspondent plus d'un seul vecteur propre, une telle valeur propre est dite *dégénérée*. On appelle *degré de dégénérescence* d'une valeur propre le nombre de vecteurs propres qui lui correspondent. Il varie de 0 (dans ce cas la valeur propre est dite *non dégénérée*) à l'infini, soit d'une manière discrète ou continu. Une valeur propre appartenant à un spectre continu peut avoir une dégénérescence repérée par un

¹ La figure (d) représente un spectre avec des bandes continues, comme il se passe, par exemple, dans les réseaux cristallins.

² Une telle situation est observée pour les noyaux ayant un nombre de charge très grand, où on voit que le spectre discret est plongé dans le spectre continu des énergies négatives (*mer de Dirac*) ce qui donne naissance à la création spontanée de paires électron-positron.

indice discret et vice versa [7]. De plus, la dégénérescence peut être repérée par plusieurs indices de différentes natures. Plusieurs phénomènes et grandeurs physiques sont liés à la dégénérescence, par exemple la levée de dégénérescence qui est due aux perturbations stationnaires et la notion de *section efficace de diffusion...* etc.

3) L'influence de la nature du spectre sur la dynamique du système :

Lorsqu'il s'agit de l'hamiltonien, c'est-à-dire lorsque l'opérateur $\hat{D}(\vec{r})$ représente l'hamiltonien $H(\vec{r}; t)$ dont le spectre constitue l'ensemble des énergies possibles du système considéré, la nature de ce spectre conditionne potentiellement toute la dynamique du système [7, 14, 50].

1. Cas du spectre discret :

Lorsque le problème aux valeurs propres précédent possède des conditions aux bords régulières, les valeurs propres discrètes¹ sont forcées dans le système par la nécessité de la continuité des fonctions d'onde sur ces bords [7, 14, 50, 68], par exemple les bords d'un puit de potentiel infini. Notons qu'une valeur propre discrète peut servir de standard métrologique puisqu'elle a, intrinsèquement, une valeur fixée par la valeur des constantes fondamentales à une précision infiniment grande (exemple : l'atome de ⁸⁶Kr, dont une transition à longtemp servit de référence pour la définition du mètre-étalon) [13].

Lorsqu'il s'agit de l'hamiltonien, les bords ci-dessus sont déterminés par des valeurs particulières du potentiel auquel le système est soumis. En effet, pour un potentiel donné, par exemple le potentiel ci-contre, les valeurs propres constituent les énergies possibles du système, soient E , qui doivent vérifier la condition suivante [7, 50] :

$$E \geq V_{\min} \quad (I-3)$$

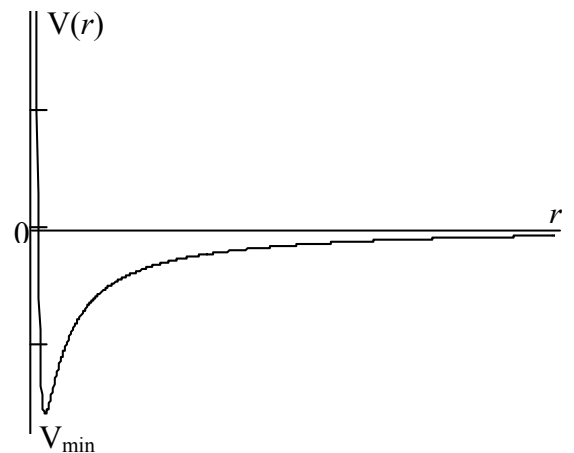


Figure 2 : Potentiel effective d'une particule dans un champs coulombien avec un moment angulaire différent de zéro.

Pour assurer la régularité des conditions aux bords, les énergies doivent vérifier, en plus de cette condition, la condition² suivante [7, 50] :

¹ Ces valeurs propres discrètes expriment la quantification de la grandeur physique en question.

² Comme on l'a mentionné, page 20, hors de cette condition on est dans le cas du spectre continu.

$$E < \min_{|\vec{r}|=\infty} (V(\vec{r})) \quad (\text{I-4})$$

Dans l'exemple de la figure 2 on a :

$$\min_{|\vec{r}|=\infty} (V(\vec{r})) = 0 \quad (\text{I-5})$$

Donc, un état stationnaire d'un spectre discret correspond toujours à un mouvement fini du système, c'est-à-dire, ni le système ni n'importe quelle partie de ce système ne peut se trouver à l'infini [50]. Le système est donc confiné au voisinage du centre de la force qui dérive du potentiel [17, 68], et on dit souvent qu'il est dans un état lié. Un tel état correspond soit à un mouvement périodique si le rapport de deux fréquences quelconques du système étant un nombre rationnel, l'oscillateur harmonique en est un cas extrême ; toutes les fréquences sont multiples entiers d'une même fréquence. Ou bien pseudopériodique avec des temps de pseudo-retour (temps de Poincaré) éventuellement très grand si ces rapports sont irrationnels [13].

En terme de fonction d'onde, ce qui précède signifie certainement que le module carré de la fonction d'onde diminue tout à fait rapidement, devenant zéro à l'infini [50], d'où le fait quelle est de carré sommable¹, autrement dit, la probabilité d'une valeur infini des coordonnées est nulle.

Il reste à indiquer une propriété importante du spectre discret, les valeurs propres discrètes ne sont pas toujours dégénérées ; en effet, à une dimension, aucune des valeurs propres n'est dégénérées [7, 50].

2. Cas du spectre continu :

Si maintenant, comme on l'a déjà indiqué², la condition (I-4) n'est pas vérifiée, c'est-à-dire on a :

$$E > \min_{|\vec{r}|=\infty} [V(\vec{r})] \quad (\text{I-6})$$

Dans le cas de l'exemple représenté par la figure 2, cette condition s'écrit $E > 0$. Dans ce cas, la particule est dite libre et peut occuper toute position \vec{r} telle que :

$$E > V(\vec{r}) \quad (\text{I-7})$$

¹ En effet, l'intégrale sur tout l'espace du module carré de telles fonctions est convergent [50].

² La note 2 de la page précédente.

D'autre part, l'ensemble des valeurs propres vérifiant cette condition forme un spectre continu correspondant à un mouvement infini [50], contrairement au mouvement fini des états liés.

En terme de fonction d'onde, soit $\psi(\vec{r}, t)$ une telle fonction, l'intégrale $\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ diverge¹, cette divergence est due au fait que $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ ne s'annule pas à l'infini, ou tend vers zéro très lentement [50] ce qui veut dire que le système, ou une certaine partie de lui, se trouve à l'infini. Ici, le carré du module de la fonction d'onde ne détermine pas directement la probabilité des différentes valeurs des coordonnées, mais doit être seulement regardé, comme on va le voir ultérieurement (voir formule (II-115)), comme une quantité proportionnelle à cette probabilité.

Si maintenant on a une fonction d'onde qui est une superposition de différents états stationnaires d'un spectre continu, l'intégrale précédente doit converger de sorte que le système reste dans une région finie de l'espace² [50]. Cependant, au cours du temps, cette région se déplace sans restriction, et le système s'écarte à l'infini.

Finalement, à l'inverse du spectre discret, le spectre continu est généralement dégénéré sauf pour quelques cas très particuliers à une dimension comme le montre la figure ci-contre [50], par contre pour les autres cas, le spectre continu est doublement dégénéré à une dimension et infiniment dégénéré pour les dimensions supérieures.

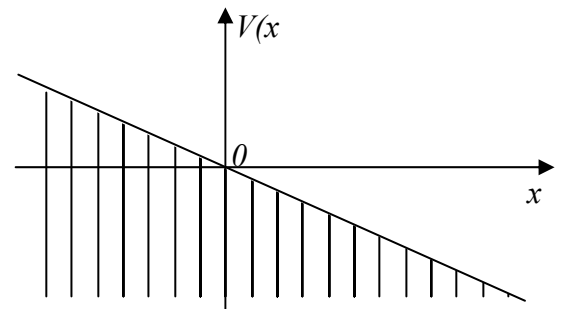


Figure 3 : Exemple d'un potentiel avec un spectre continu non dégénéré, à savoir : $V(x) = -f x$.

¹ Cette divergence exprime le fait que les fonctions d'ondes ne sont pas de carrés sommables.

² La superposition est l'une des méthodes les plus importantes pour traiter les problèmes de divergence du spectre continu comme on va le voir dans les chapitres qui vont suivre.

Chapitre II

Comment traiter le spectre continu ? Une approche comparative

COMMENT TRAITER LE SPECTRE CONTINU ? UNE APPROCHE COMPARATIVE

I. Introduction :

Dans ce paragraphe on va voir comment on peut traiter le spectre continu ? Mais cette fois avec un peu plus de détails techniques. Les notions qui seront considérées ici sont les notions de : Base, Orthogonalité, Normalisation, Complétude, Fermeture et interprétation Probabiliste. On va d'abord rappeler les définitions de ces dernières appliquées dans le cas d'un spectre discret, puis on les généralise au cas du spectre continu !

On va exposer une méthode¹ [5] pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps dans sa forme la plus générale. Cette dernière consiste à donner un rôle principale aux vecteurs propres, à travers des quelles les notions ci-dessus seront introduites tout au cours des développements.

Le but de ce chapitre est de donner un aperçu sur les méthodes avec lesquelles on traite le spectre continu. Pour des raisons de simplicité on va s'intéresser aux cas où on a des spectres complètement discrets ou complètement continus non dégénérés.

II. Exposition de la méthode :

L'équation de Schrödinger est décrite par l'équation suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{II-1})$$

où $\frac{\partial}{\partial t}$ la dérivée partielle par rapport au temps ; le ket $|\psi(t)\rangle$, selon la notation de Dirac [14], représente la fonction d'onde du système :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle \quad (\text{II-2})$$

l'hamiltonien $H(t)$ du système est un opérateur linéaire [50] dont les valeurs propres représentent les énergies susceptibles d'être prises par le système considéré. Dans le cas d'une

¹ Cette méthode est une méthode formelle et son application n'est pas toujours évidente.

particule neutre, sans spin, de masse $m(t)$ et d'impulsion \vec{P} en mouvement dans un potentiel $V(\vec{R}, t)$ l'hamiltonien ci-dessus s'écrit¹ :

$$H(t) = \frac{\vec{P}^2}{2m(t)} + V(\vec{R}, t) \quad (\text{II-3})$$

Déterminer l'état du système revient à déterminer les fonctions (II-2) qui vérifient l'équation de Schrödinger (II-1) ; la méthode proposée consiste à appliquer la théorie des espaces hilbertiens (cf. Ch. I. §II-2), c'est-à-dire développer ces fonctions sur les éléments d'une base privilégiée. En effet, comme l'espace de Hilbert, soi \mathcal{H} , est un espace vectoriel, alors il admet au moins une base [49, 68].

1) Définition d'une base :

Un ensemble \mathcal{E} d'éléments de l'espace \mathcal{H} est dit une base de \mathcal{H} s'il vérifie les deux conditions suivantes [33, 68] :

- Les éléments de \mathcal{E} sont Linéairement indépendants.
- L'espace \mathcal{H} est engendré² par \mathcal{E} .

Ces deux conditions impliquent que *chaque* élément de l'espace \mathcal{H} est une combinaison linéaire *unique* des éléments de \mathcal{E} , c'est-à-dire :

$$\forall \Psi(\vec{r}, t) \in \mathcal{H} : \Psi(\vec{r}, t) = \sum_{k \in I} C(k; t) \Phi(k; \vec{r}, t) \quad (\text{II-4})$$

avec k un indice appartenant à un certain ensemble I , $\Phi(k; \vec{r}, t)$, $k \in I$ les éléments de la base \mathcal{E} , t est un paramètre qui va jouer dans la suite le rôle du temps, et $C(k; t)$, $k \in I$ les coefficients du développement.

Avant de continuer, Il reste à noter que toutes les formules qui vont suivre seront écrites en notation de Dirac, sauf pour des cas particuliers.

La nature du développement est déterminée par l'ensemble I ; en effet, si ce dernier est dénombrable c'est-à-dire $I \subseteq \mathbb{Z}$ alors le développement $\sum_{k \in I}$ est une sommation ordinaire

¹ Ici \vec{P} et \vec{R} sont des opérateurs.

² On peut dire aussi que l'espace \mathcal{H} est l'enveloppe de \mathcal{E} .

sous forme de séries infinies¹. Dans ce cas, les $C(k;t)$, $k \in I$ constituent une suite de nombres $C_k(t)$, $k \in I$ que l'on peut considérer comme l'ensemble des valeurs d'une fonction discrète définie sur des nombres entiers [13] :

$$\forall \Psi(\vec{r}, t) \in \mathcal{H} : |\psi(t)\rangle = \sum_{k \in I} C_k(t) |\tilde{\varphi}_k(t)\rangle \quad (\text{II-5})$$

Par contre, si $I \subseteq \mathfrak{R}$ le développement $\sum_{k \in I}$ est remplacé par l'intégrale $\int_I dk$ en appliquant le théorème des intégrales de Fourier [14, 25, 68] :

$$\forall \Psi(\vec{r}, t) \in \mathcal{H} : |\psi(t)\rangle = \int_I C(k;t) |\tilde{\varphi}(k;t)\rangle dk \quad (\text{II-6})$$

et $C(k;t)$, $k \in I$ se réduit à une fonction ordinaire de la variable k . Alors, on distinguera deux types de bases, à savoir ; continue ou discrète, selon la nature de l'ensemble I .

2) Le choix de la base :

Pour une base donnée, et pour résoudre l'équation de Schrödinger il suffit de déterminer les coefficients $C_k(t)$, $k \in I$, ou $C(k;t)$, $k \in I$, qui vérifient les systèmes d'équation obtenus en injectant des développements (II-5), ou (II-6) respectivement (Resp.)² selon la nature de I , dans l'équation (II-1) ce qui donne³:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{k \in I} C_k(t) |\tilde{\varphi}_k(t)\rangle = \sum_{k \in I} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_k(t) \right] |\tilde{\varphi}_k(t)\rangle + \sum_{k \in I} C_k(t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\varphi}_k(t)\rangle \right] \\ &= \sum_{k \in I} i\hbar \dot{C}_k(t) |\tilde{\varphi}_k(t)\rangle + \sum_{k \in I} C_k(t) i\hbar \dot{|\tilde{\varphi}_k(t)\rangle} \end{aligned}$$

de l'autre côté, on a⁴ :

$$H(t) |\psi(t)\rangle = H(t) \sum_{k \in I} C_k(t) |\tilde{\varphi}_k(t)\rangle = \sum_{k \in I} C_k(t) H(t) |\tilde{\varphi}_k(t)\rangle$$

d'où

$$\sum_{k \in I} C_k(t) H(t) |\tilde{\varphi}_k(t)\rangle = \sum_{k \in I} i\hbar \dot{C}_k(t) |\tilde{\varphi}_k(t)\rangle + \sum_{k \in I} C_k(t) i\hbar \dot{|\tilde{\varphi}_k(t)\rangle} \quad (\text{II-7})$$

¹ Il est clair qu'une telle sommation, pour recevoir un sens, implique des conditions de convergence topologique [13] dont on va supposer vérifier dans tout ce qui va suivre.

² Dans tout le reste du travail, lorsqu'il est nécessaire, on utilisera l'abréviation Resp. à la place du mot respectivement.

³ Dans tout ce qui va suivre, le point sur n'importe quel terme signifie la dérivée de ce dernier par rapport au temps.

⁴ Le passage de l'opérateur $H(t)$ après le signe de sommation est assuré par la linéarité de ce dernier.

L'équation analogue dans le cas continu est obtenue de la même manière :

$$\int_I C(k;t)H(t)|\tilde{\varphi}(k;t)\rangle dk = \int_I i\hbar\dot{C}(k;t)|\tilde{\varphi}(k;t)\rangle dk + \int_I C(k;t)i\hbar|\dot{\tilde{\varphi}}(k;t)\rangle dk \quad (\text{II-8})$$

On voit apparaître dans ces deux dernières équations les termes suivants : $|\dot{\tilde{\varphi}}_k(t)\rangle$ ou $|\dot{\tilde{\varphi}}(k;t)\rangle$ qui représentent les dérivées par rapport au temps des éléments de la base choisie. Pour le moment, on va laisser ces derniers pour les chapitres suivants où ils vont jouer un rôle très important¹. En plus on a les termes $H(t)|\tilde{\varphi}_k(t)\rangle$ ou $H(t)|\tilde{\varphi}(k;t)\rangle$ qui représentent les résultats de l'application de l'opérateur $H(t)$ sur les vecteurs de la base, ces résultats ne sont que des fonctions quelconques de l'espace \mathcal{H} , d'où ils puissent être développées sur les éléments de la même base selon (II-5) et (II-6) Resp. :

$$H(t)|\tilde{\varphi}_k(t)\rangle = \sum_{l \in I} h_{kl}(t)|\tilde{\varphi}_l(t)\rangle \quad (\text{II-9})$$

$$H(t)|\tilde{\varphi}(k;t)\rangle = \int_I h(k,l;t)|\tilde{\varphi}(l;t)\rangle dl \quad (\text{II-10})$$

En utilisant (II-9) et (II-10) les expressions (II-7) et (II-8) s'accomplissent d'avantage. Cependant, il y a un cas particulier pour lequel elles vont se simplifier considérablement. En effet, si le résultat de l'application de l'hamiltonien sur chaque vecteur de la base est proportionnel à ce dernier c'est-à-dire si on a :

$$H(t)|\tilde{\varphi}_k(t)\rangle = E_k(t)|\tilde{\varphi}_k(t)\rangle \quad (\text{II-11})$$

$$H(t)|\tilde{\varphi}(k;t)\rangle = E(k;t)|\tilde{\varphi}(k;t)\rangle \quad (\text{II-12})$$

avec $E_k(t)$ et $E(k;t)$ sont des scalaires à identifier ultérieurement, alors les équations (II-7) et (II-8) deviennent Resp. :

$$\sum_{k \in I} C_k(t)E_k(t)|\tilde{\varphi}_k(t)\rangle = \sum_{k \in I} i\hbar\dot{C}_k(t)|\tilde{\varphi}_k(t)\rangle + \sum_{k \in I} C_k(t)i\hbar|\dot{\tilde{\varphi}}_k(t)\rangle \quad (\text{II-13})$$

$$\int_I C(k;t)E(k;t)|\tilde{\varphi}(k;t)\rangle dk = \int_I i\hbar\dot{C}(k;t)|\tilde{\varphi}(k;t)\rangle dk + \int_I C(k;t)i\hbar|\dot{\tilde{\varphi}}(k;t)\rangle dk \quad (\text{II-14})$$

¹ En effet, ce sont ces deux termes qui vont donner naissance à une phase géométrique en plus de la phase dynamique (voir le quatrième chapitre).

Il reste à trouver des bases dont les éléments vérifient les équations (II-11) et (II-12) Resp.. Ainsi, on est conduit à un problème aux valeurs propres du genre (I-1). Par conséquent, les bases recherchées sont formées par l'ensemble des vecteurs propres de l'hamiltonien¹. Dans ce cas, $E_k(t)$ et $E(k;t)$ représentent l'ensemble des énergies possibles du système soit dans le cas discret ou continu Resp..

En supposant réglé le problème du choix de la base, en résolvant les équation (II-11) ou (II-12) selon la nature de I , on peut déduire les systèmes d'équation donnant les différents coefficients $C_k(t)$, $k \in I$, ou $C(k;t)$, $k \in I$ Resp., en utilisant les deux propriétés d'une base. Une chose qui n'est pas toujours évidente sous leurs formes données dans la définition (voir page 29), pour cette raison on va donner une autre forme plus pratique de ces deux conditions.

Mais avant de faire, on va introduire deux outils mathématiques d'une grande importance dans la suite.

3) *Symbole de Kronecker et distribution de Dirac :*

Revenant à l'expression (II-11) qui constitue un cas particulier de (II-9) et ça en posant :

$$\begin{cases} h_{kl}(t) = 0 & k \neq l \\ h_{kk}(t) = E_k(t) & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{II-15})$$

Ce système peut être condensé sous la forme suivante

$$h_{kl}(t) = E_k(t) \delta_{kl} \quad (\text{II-16})$$

en utilisant le symbole δ_{kl} introduit dans le calcul tensoriel par L. Kronecker [43] dont il prend le nom et qui est défini comme suit :

$$\forall k, l \in \mathbb{Z} : \delta_{kl} = \begin{cases} 1 & k = l \\ 0 & k \neq l \end{cases} \quad (\text{II-17})$$

Ainsi, on peut résumer le rôle du symbole de Kronecker lorsqu'on substitue (II-16) dans (II-9) par le fait d'extraire un point spécifié k de la série (II-9).

¹ En effet, comme l'hamiltonien doit être une observable, ces vecteurs propres forment une base de \mathcal{H} [7, 14].

Généralisons maintenant cette procédure pour le cas des deux expressions (II-10) et (II-12), c'est-à-dire imaginer une grandeur qui généralise le symbole de Kronecker dans l'expression (II-16), soit :

$$h(k, l : t) = E(k; t) \delta(k, l) \quad (\text{II-18})$$

et qui sert à extraire le point k de l'intégrale (II-10) ce qui forme une exigence incompatible avec ce que l'on sait de l'intégration ordinaire. En effet, contrairement au cas d'une série, il est possible de supprimer un point dans une intégrale sans modifier sa valeur, *pourvu que l'intégrant ait une valeur finie au point que l'on supprime ou une discontinuité d'amplitude finie* [13], c'est-à-dire le point k peut être supprimé de l'intégrale avant qu'il soit enlevé en utilisant (II-18) ! Il semble donc que l'on est dans une impasse vis-à-vis de (II-12).

En réalité, il existe une issue : supprimer un point ne change rien si, comme on l'a indiqué, l'intégrant est *fini*, mais tout peut changer si on ôte un point où l'intégrant est infini, *la combinaison du zéro et de l'infini peut donner tout et n'importe quoi, y compris un nombre fini* [13]. Il est donc raisonnable d'imaginer une procédure limite par laquelle on peut enlever le "bon" point, celui où une "bonne" divergence se produit, et comme $E(k; t)$ est une fonction régulière presque partout, alors la grandeur $\delta(k, l)$ doit présenter une singularité au point $l = k$ et comme ce dernier constitue le point à extraire cette grandeur doit s'annuler ailleurs, d'où on peut écrire :

$$\forall k, l \in \mathfrak{R} : \delta(k, l) = \begin{cases} \infty & k = l \\ 0 & k \neq l \end{cases} \quad (\text{II-19})$$

Ainsi, on a obtenu la définition de ce qu'on appelle *fonction de Dirac*¹, notée pour ce cas ;

$$\forall k, l \in \mathfrak{R} : \delta(k, l) = \delta(l - k) = \begin{cases} \infty & k = l \\ 0 & k \neq l \end{cases} \quad (\text{II-20})$$

et introduite pour la première fois en 1926 par P. A. M. Dirac en physique [7, 14, 26, 50], et dont les propriétés sont les suivantes [7, 14, 26, 50] :

$$\delta(x) = \delta(-x) \quad (\text{II-21-a})$$

$$\delta^{(n)}(ax) = \frac{1}{|a|^{n+1}} \delta^{(n)}(x), \quad a \neq 0, n \geq 0 \quad (\text{II-21-b})$$

¹ Parfois elle est appelée mesure de Dirac [53].

$$\delta(f(x)) = \sum_n \frac{1}{|f'(x_n)|} \delta(x - x_n), \quad f(x_n) = 0 \wedge f'(x_n) \neq 0 \quad (\text{II-21-c})$$

$$x \delta(x) = 0 \quad (\text{II-21-d})$$

$$f(x) \delta(x - x_0) = f(x_0) \delta(x - x_0) \quad (\text{II-21-e})$$

$$\delta^{(n)}(x) = \frac{i^n}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} k^n e^{ikx} dk, \quad n \geq 0 \quad (\text{II-21-f})$$

$$\int f(x) \delta^{(n)}(x - x_0) dx = (-1)^n \left. \frac{\partial^n f(x)}{\partial x^n} \right|_{x_0} \quad (\text{II-21-g})$$

avec $x, x_0, a \in \mathfrak{R}$ et $f(x)$ une fonction quelconque.

Cette dernière règle constitue la règle fondamentale de l'utilisation de la fonction de Dirac, par exemple, si on substitue (II-18) dans (II-10) et en tenant compte de (II-20) et (II-21-g) on trouve (II-12), en effet :

$$\begin{aligned} H(t) |\tilde{\varphi}(k;t)\rangle &= \int_l E(k;t) \delta(l-k) |\tilde{\varphi}(l;t)\rangle dl \\ &= E(k;t) |\tilde{\varphi}(k;t)\rangle \end{aligned}$$

En particulier, si $f(x)$ est la fonction qui vaut 1 partout, on a :

$$\int \delta(x - x_0) dx = 1 \quad (\text{II-21-h})$$

De cette dernière relation il résulte que si la variable x a une dimension physique, δ aura la dimension inverse, par exemple si x est une longueur, $\delta(x)$ est homogène à l'inverse d'une longueur (un nombre d'onde par exemple), si x est une fréquence, alors $\delta(x)$ est homogène à un temps, ... etc.

Clairement, il ne s'agit pas d'une fonction au sens ordinaire du terme, mais d'un *cas limite* de ce qu'on appelle en mathématique *une distribution*¹ ; une fonctionnelle linéaire et continue définie sur l'ensemble $D(O)$ des fonctions indéfiniment dérivables à support compact définies sur un ouvert O [7, 53]. C'est là la différence essentielle entre les deux notions ; si une fonction ordinaire est définie pour un point, alors une distribution est définie pour un intervalle, prenant par exemple la distribution δ_ϵ définie par :

¹ Pour plus de détails voir [7, 50, 53].

$$(\delta_\varepsilon, f) = \int \delta_\varepsilon(x) f(x) dx = f(0), \quad \forall f \in D(\mathfrak{R}) \quad (\text{II-22})$$

où $\delta_\varepsilon(x)$ est représentée par la figure 4 et définie par

$$\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\varepsilon} e^{-\frac{|x|}{\varepsilon}} \quad (\text{II-23})$$

à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ on obtient la définition de la fonction de Dirac $\delta(x)$; donc s'il faut la prendre infinie au seul point où elle n'est pas nulle c'est parce qu'elle est non nulle sur un intervalle de largeur nulle. Par conséquent, La relation (II-21-g), ainsi que tous les raisonnements sur le spectre continu qui vont suivre¹, doit toujours être perçue comme résultant d'un processus de limite et c'est ainsi que l'on peut se convaincre de la pertinence des relations symboliques ci-dessus.

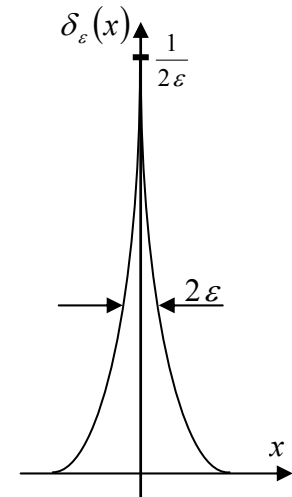


Figure 4 : Exemple de fonctions dont la limite est égale à la fonction de Dirac.

Finalement, on peut remarquer que les relations de fonctionnement de la fonction de Dirac généralisent bien celles du symbole de Kronecker, par suite, la généralisation la plus naïve dont on peut imaginer pour le passage du cas discret au cas continu consiste à remplacer le symbole de Kronecker par la fonction de Dirac, bien sur en changeant les signes de sommation par des intégrales. En réalité, c'est autour de cette idée que tourne toutes les généralisations à expliciter dans ce travail, il reste seulement à donner une interprétation de ce que peut représenter la singularité présentée par la fonction de Dirac en physique et comment peut on fixer les problèmes dus à cette dernière ?

4) Orthonormalisation :

1. Orthogonalité :

En fait, comme l'espace de Hilbert est un espace vectoriel muni d'un produit scalaire², à travers un procédé dû à E. Schmidt [33, 49, 68] dit d'orthogonalisation¹ et qui sert à

¹ Comme on va le voir tout au long de ce travail, on peut surmonter les difficultés dues aux systèmes continus en les traitant comme des cas limites de certains systèmes définies sur des intervalles de largeurs $\varepsilon \rightarrow 0$ (voir surtout la dernière partie du chapitre suivant).

² Une application bilinéaire $\langle \cdot | \cdot \rangle$ telle que [7, 14, 49] :

$$E \times E \rightarrow \mathbb{C}$$

$$(\psi, \varphi) \rightarrow \langle \psi | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) d^3 r$$

construire un système de vecteurs orthogonaux à partir d'un système de vecteurs linéairement indépendants, c'est-à-dire remplacer la condition de l'indépendance linéaire des éléments d'une base \mathcal{E} par la condition suivante :

- Les éléments de \mathcal{E} sont deux à deux orthogonaux :

$$\forall k, l \in I / k \neq l : \langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_k(t) \rangle = 0 \quad (\text{II-24})$$

On note que cette condition ne dépend pas de la nature de l'ensemble I , c'est-à-dire on doit avoir pour le cas continu² :

$$\forall k, l \in I / k \neq l : \langle \tilde{\varphi}(l; t) | \tilde{\varphi}(k; t) \rangle = 0 \quad (\text{II-25})$$

Si, jusque là, les résultats pour un ensemble continu semblent marcher en parallèle avec ceux d'un ensemble discret, on va voir que cette analogie sera perdue dans ce qui va suivre. En effet, multiplions pour commencer les deux équations (II-13) et (II-14) par les bras³ $\langle \tilde{\varphi}_l(t) |$ et $\langle \tilde{\varphi}(l; t) |$ respectivement ce qui donne :

$$\sum_{k \in I} C_k(t) E_k(t) \langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_k(t) \rangle = \sum_{k \in I} i\hbar \dot{C}_k(t) \langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_k(t) \rangle + \sum_{k \in I} C_k(t) i\hbar \langle \tilde{\varphi}_l(t) | \dot{\tilde{\varphi}}_k(t) \rangle \quad (\text{II-26})$$

$$\begin{aligned} \int_I C(k; t) E(k; t) \langle \tilde{\varphi}(l; t) | \tilde{\varphi}(k; t) \rangle dk &= \int_I i\hbar \dot{C}(k; t) \langle \tilde{\varphi}(l; t) | \tilde{\varphi}(k; t) \rangle dk \\ &+ \int_I C(k; t) i\hbar \langle \tilde{\varphi}(l; t) | \dot{\tilde{\varphi}}(k; t) \rangle dk \end{aligned} \quad (\text{II-27})$$

En utilisant la condition (II-24) on obtient *directement* le système d'équation suivant pour le cas discret :

$$\forall l \in I : C_l(t) E_l(t) \langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_l(t) \rangle = i\hbar \dot{C}_l(t) \langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_l(t) \rangle + \sum_{k \in I} C_k(t) i\hbar \langle \tilde{\varphi}_l(t) | \dot{\tilde{\varphi}}_k(t) \rangle$$

d'où

$$\forall l \in I : i\hbar \dot{C}_l(t) \langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_l(t) \rangle = C_l(t) E_l(t) \langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_l(t) \rangle - \sum_{k \in I} C_k(t) i\hbar \langle \tilde{\varphi}_l(t) | \dot{\tilde{\varphi}}_k(t) \rangle \quad (\text{II-28})$$

Avec $\langle \psi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle^*$, $\langle \lambda. \psi + \beta. \phi | \varphi \rangle = \lambda \langle \psi | \varphi \rangle + \beta \langle \phi | \varphi \rangle$ / $\lambda, \beta \in \mathbb{C}$, $\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$ et $\langle \psi | \psi \rangle = 0 \Rightarrow \psi = 0$

¹ En fait, le procédé est dit d'Orthonormalisation mais on ne va s'intéresser ici que de l'orthogonalisation, la normalisation sera considérée par la suite.

² Des discussions plus détaillées sur cette assertion seront données dans le paragraphe suivant.

³ On entend par un bra, selon la notation de Dirac, une forme linéaire appartenant à l'espace dual \mathcal{H}^* et dont l'application sur un élément de \mathcal{H} , dit ket, donne la définition du produit scalaire [7, 14, 49, 68].

Une opération qui n'est pas évidente pour le cas de l'équation (II-27). On va voir dans le paragraphe suivant comment on peut se débarrasser des quantités $\langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_l(t) \rangle$ et comment trouver l'analogue de (II-28) dans le cas continu ?

2. Normalisation :

Si les conditions d'orthogonalité (II-24) et (II-25) donnent les valeurs des produits scalaires entre toutes les paires d'éléments différents d'une base, on va s'intéresser dans ce paragraphe aux valeurs des produits scalaires de chaque élément de la base considérée avec lui-même, mais cette fois on verra que les deux spectres vont être traités par des méthodes différentes.

a) Cas discret :

Avant de commencer, on rappelle une propriété importante des bases d'un espace vectoriel ; en fait, si un ensemble de vecteurs forment une base, alors si on multiplie chacun de ces éléments par un scalaire quelconque, les scalaires ne sont pas nécessairement égaux, les nouveaux vecteurs forment aussi une base de l'espace [7, 14].

Par définition, les termes $\langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_l(t) \rangle$ qui apparaissent dans le système d'équation (II-28) représentent les carrés des normes $N_l(t)$, $l \in I$ des éléments de la base discrète considérée et qui sont définies par [68] :

$$\|\tilde{\varphi}_l(t)\|^2 = \langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_l(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\varphi}_l(\vec{r}, t)|^2 d^3r \quad (\text{II-29})$$

d'où¹

$$N_l(t) = \|\tilde{\varphi}_l(t)\| = \sqrt{\langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_l(t) \rangle} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\varphi}_l(\vec{r}, t)|^2 d^3r} \quad (\text{II-30})$$

Comme les fonctions d'onde, et en particuliers les éléments de la base², doivent appartenir à l'espace l^2 (cf. Ch. I. §II-1), alors les normes $N_l(t)$, $l \in I$ sont *finies* ; donc,

¹ Ce résultat est assuré par la troisième propriété d'un produit scalaire, voir la première note de page précédente.

² On rappelle que cette propriété n'est vraie que pour le cas discret (cf. Ch. I).

selon la propriété ci-dessus, on peut diviser chaque vecteur $|\tilde{\varphi}_l(t)\rangle$ par sa norme ce qui donne¹ :

$$\forall l \in I; \quad |\varphi_l(t)\rangle = \frac{1}{N_l(t)} |\tilde{\varphi}_l(t)\rangle \quad (\text{II-31})$$

Ainsi, on a défini une base dont les éléments sont dits *normalisés à l'unité*², ou *normalisés* tout simplement [68], en effet, si on calcule les normes de ses éléments on trouve :

$$\|\varphi_l(t)\| = \sqrt{\langle \varphi_l(t) | \varphi_l(t) \rangle} = \sqrt{\frac{\langle \tilde{\varphi}_l(t) | \tilde{\varphi}_l(t) \rangle}{N_l^2(t)}} = \sqrt{\frac{N_l^2(t)}{N_l^2(t)}} = 1 \quad (\text{II-32})$$

On note que cette opération ne change rien en ce qui concerne les résultats précédents. En effet, si les $|\tilde{\varphi}_l(t)\rangle$ constituent l'ensemble des vecteurs propres de l'hamiltonien, alors les nouveaux vecteurs $|\varphi_l(t)\rangle$ le sont aussi, c'est ce qu'on obtient d'après (II-31) et (II-11) :

$$\begin{aligned} \forall l \in I; \quad H(t)|\varphi_k(t)\rangle &= \frac{1}{N_l(t)} H(t)|\tilde{\varphi}_l(t)\rangle = \frac{E_k(t)}{N_l(t)} |\tilde{\varphi}_k(t)\rangle \\ &= E_k(t) |\varphi_k(t)\rangle \end{aligned} \quad (\text{II-33})$$

En réunissant maintenant la condition d'orthogonalité (II-24) et celle de normalisation (II-31) et en prenant compte de la définition du symbole de Kronecker donnée par (II-17), on obtient ce qu'on appelle la condition d'*orthonormalisation* pour le spectre discret :

$$\forall k, l \in I: \quad \langle \varphi_l(t) | \varphi_k(t) \rangle = \delta_{lk} \quad (\text{II-34})$$

En utilisant cette expression, et après avoir choisi la base normalisée tirée de la base précédente en appliquant (II-31), le système d'équation (II-28) devient :

$$\forall l \in I: \quad i\hbar \dot{C}_l(t) = C_l(t) E_l(t) - \sum_{k \in I} C_k(t) i\hbar \langle \varphi_l(t) | \dot{\varphi}_k(t) \rangle \quad (\text{II-35})$$

b) Cas continu :

Revenons maintenant à l'équation (II-27), on remarque que la substitution directe de la condition d'orthogonalité (II-25) dans cette dernière va supprimer les terme qui

¹ On note que la norme d'un élément de la base ne peut pas être nulle, en effet, selon la quatrième propriété du produit scalaire, voir la première note de la page 36, un vecteur de norme nulle est forcément égal à l'élément nul qui n'appartient à aucune base [7].

² On verra par la suite que la normalisation des éléments de la base n'est pas un simple choix mathématique mais, en plus, une nécessité imposée par l'interprétation probabiliste !

contiennent les points telles que $k \neq l$ d'où il ne restera qu'un seul point, celui qui vérifie $k = l$, de sorte que l'intégration sera effectuée sur un intervalle de longueur nulle ce qui doit, pour des cas ordinaires, donner un résultat nul ! Ce qui ne doit pas être le cas ici, c'est-à-dire le point $k = l$ est un point singulier, par conséquent, on doit y avoir :

$$\langle \tilde{\varphi}(l;t) | \tilde{\varphi}(l;t) \rangle = \infty \quad (\text{II-36})$$

On se retrouve ainsi dans une situation analogue à celle rencontrée lorsqu'on a défini la fonction de Dirac ; en effet, en rassemblant les deux expressions (II-27) et (II-36) on obtient la définition (II-20) de la fonction de Dirac. Mais, à l'inverse du symbole de Kronecker pour le cas discret (voir la discussion ci-dessous) tout ce qu'on peut dire dans ce cas c'est que le produit scalaire d'un élément $|\tilde{\varphi}(l;t)\rangle$ d'une base continue avec un autre élément quelconque $|\tilde{\varphi}(k;t)\rangle$ est *proportionnel* à la fonction de Dirac, c'est-à-dire on a :

$$\forall k, l \in I : \langle \tilde{\varphi}(l;t) | \tilde{\varphi}(k;t) \rangle \propto \delta(l-k) \quad (\text{II-37})$$

Ce résultat est dû essentiellement à la condition (II-36), car la multiplication de l'infini par n'importe quelle grandeur *non nulle* est toujours infini d'où (II-37) peut s'écrire dans sa forme générale :

$$\forall k, l \in I : \langle \tilde{\varphi}(l;t) | \tilde{\varphi}(k;t) \rangle = N(l, k; t)^2 \delta(l-k) \quad (\text{II-38})$$

Ici $N(l, k; t)$ est l'analogue de la constante de normalisation $N_l(t)$ dans le cas discret, avec la différence que celle-ci est une fonction au vrai sens du terme¹ et qui doit vérifier la condition suivante :

$$N(l, k = l; t) \neq 0 \quad (\text{II-39})$$

En utilisant maintenant la propriété (II-21-e) et en prenant compte de la condition ci-dessus, (II-38) s'écrit :

$$\forall k, l \in I : \langle \tilde{\varphi}(l;t) | \tilde{\varphi}(k;t) \rangle = N(l; t)^2 \delta(l-k) \quad (\text{II-40})$$

Ainsi, on peut étendre la notion de normalisation pour les états $|\tilde{\varphi}(l;t)\rangle$ en appelant *vecteurs normalisés* les vecteurs :

¹ Pour des raisons de simplicité, $N(l, k; t)$ ainsi que les $N_l(t)$ sont choisies réelles ; on peut en effet, comme lorsque le système est entièrement discret, modifier arbitrairement les phases de chacune des fonctions propres de sorte que $N(l, k; t)$ soit réelle [7].

$$\forall l \in I; \quad |\varphi(l;t)\rangle = \frac{1}{N(l;t)} |\tilde{\varphi}(l;t)\rangle \quad (\text{II-41})$$

La même remarque faite pour le cas discret concernant le passage des états $|\tilde{\varphi}(l;t)\rangle$ aux états $|\varphi(l;t)\rangle$ est valable pour le cas continu (voir page 38 surtout l'équation aux valeurs propres (II-33)). On obtient donc la condition d'*orthonormalisation* suivante pour le spectre continu [7, 14, 50] :

$$\forall k, l \in I : \langle \varphi(l;t) | \varphi(k;t) \rangle = \delta(l-k) \quad (\text{II-42})$$

En remplaçant maintenant le terme $\langle \tilde{\varphi}(l;t) | \tilde{\varphi}(k;t) \rangle$ dans l'équation (II-27) par la fonction de Dirac, à travers (II-41) et (II-42), et en utilisant la propriété (II-21-g) on trouve :

$$\forall l \in I : \quad i\hbar \dot{C}(l;t) = C(l;t)E(l;t) - \int_I C(k;t) i\hbar \langle \tilde{\varphi}(l;t) | \tilde{\varphi}(k;t) \rangle dk \quad (\text{II-43})$$

qui représente la généralisation du système d'équation (II-35) dans le cas discret.

3. Discussion :

Avant de commencer cette discussion, on note qu'on ne va pas contredire les résultats obtenus dans le paragraphe précédent, mais on va seulement rappeler que ces résultats ne sont que des cas limites du genre rencontré pour la fonction de Dirac et montrer que la généralisation directe des résultats obtenus pour le spectre discret au spectre continu va engendrer des contradictions et des difficultés lors de l'application de ces dernières.

Dans le paragraphe précédent on a donné la définition de ce qu'on appelle vecteur normalisé soit dans le cas discret ou bien continu et cela en divisant les vecteurs de la base considérée par les quantités $N_l(t)$ et $N(l;t)$ respectivement. Si maintenant les premières quantités $N_l(t)$ sont déterminées directement par la formule (II-30), la détermination de $N(l;t)$ n'est pas si évidente. En fait, ce problème est dû à l'ambiguïté que présente l'adjectif « *normalisés* » pour les vecteurs du spectre continu. En effet, le processus de normalisation dans le cas discret est assuré par le fait que les fonctions d'onde ont des normes finies [7], pour cette raison on dit qu'on normalise à l'unité les vecteurs d'une base discrète. Par contre, dans le cas continu les vecteurs propres ont des normes (longueurs dans l'espace fonctionnel) infinies [7] c'est se qu'on peut voir à travers la formule (II-36), par conséquent, le processus

de normalisation donné ci-dessus pour le spectre discret n'aura aucun sens. Alors, on doit trouver une autre méthode pour déterminer la fonction $N(l;t)$. Mais avant, on va faire un rappel sur la notion d'orthogonalité.

En toute rigueur, il n'est pas vraiment exact d'écrire (formule (II-25)) :

$$\forall k, l \in I / k \neq l : \langle \tilde{\varphi}(l;t) | \tilde{\varphi}(k;t) \rangle = 0$$

car le produit scalaire diverge en général [7], ce résultat est dû à la raison suivante : reprenons l'équation aux valeurs propres (II-12), c'est une équation du seconde ordre par rapport aux coordonnées (cf. Ch. I. §II) qui peut s'écrire en représentation position, en prenant compte de (II-3), à une dimension pour simplifier¹ :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\varphi}(x, k; t) + (E(k; t) - V(x, t)) \tilde{\varphi}(x, k; t) = 0 \quad (\text{II-44})$$

Réécrivons maintenant le conjugué complexe de cette équation mais pour une autre solution $|\tilde{\varphi}(l;t)\rangle$:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\varphi}^*(x, l; t) + (E(l; t) - V(x, t)) \tilde{\varphi}^*(x, l; t) = 0 \quad (\text{II-45})$$

En soustrayant ces deux équations on trouve :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{\varphi}(x, k; t) \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\varphi}^*(x, l; t) - \tilde{\varphi}^*(x, l; t) \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\varphi}(x, k; t) \right) = (E(k; t) - E(l; t)) \tilde{\varphi}(x, k; t) \tilde{\varphi}^*(x, l; t)$$

On obtient ainsi la définition du Wronskien W [7, 17, 49] dans le premier membre de l'équation ci-dessus, d'où on écrit :

$$\frac{\partial}{\partial x} W(\tilde{\varphi}(x, k; t), \tilde{\varphi}^*(x, l; t)) = (E(k; t) - E(l; t)) \tilde{\varphi}(x, k; t) \tilde{\varphi}^*(x, l; t) \quad (\text{II-46})$$

En intégrant sur tout l'axe de la coordonnée x on trouve :

$$W(\tilde{\varphi}(x, k; t), \tilde{\varphi}^*(x, l; t)) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = (E(k; t) - E(l; t)) \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}(x, k; t) \tilde{\varphi}^*(x, l; t) dx \quad (\text{II-47})$$

On voit apparaître la définition du produit scalaire $\langle \tilde{\varphi}(l;t) | \tilde{\varphi}(k;t) \rangle$, on a donc :

¹ L'énergie et le potentiel ont été ajustés de façon à inclure les paramètres de l'équation (II-12) tels que la masse, la constante de Planck...etc.

$$W(\tilde{\varphi}(x, k; t), \tilde{\varphi}^*(x, l; t)) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = (E(k; t) - E(l; t)) \langle \tilde{\varphi}(l; t) | \tilde{\varphi}(k; t) \rangle \quad (\text{II-48})$$

Le Wronskien oscille indéfiniment vers l'une au moins des limites de l'intervalle d'intégration, par conséquent le produit $\langle \tilde{\varphi}(l; t) | \tilde{\varphi}(k; t) \rangle$ possède la même propriété [7]. Pour concrétiser ce résultat, on prend l'exemple des fonctions suivantes¹ [29] :

$$\tilde{\varphi}(x, k) = [ik - k_1 t h[k_1 x]] \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{II-49})$$

avec k_1 un paramètre. Le produit scalaire $\langle \tilde{\varphi}(l) | \tilde{\varphi}(k) \rangle$ correspondant est égale à² :

$$\langle \tilde{\varphi}(l) | \tilde{\varphi}(k) \rangle = (k^2 + k_1^2) \delta(l - k) - \frac{k_1}{\pi} \lim_{L \rightarrow \infty} \cos[(k - l)L] \quad (\text{II-50})$$

On voit bien apparaître la fonction de Dirac dans le premier terme, c'est ce que prédit la formule (II-40). Le deuxième terme pose problème ; en effet, on voit apparaître le terme oscillant représenté par $\cos[(k - l)x]$, pour $k \neq l$ on remarque que ce deuxième terme est indéfini !

De plus, les vecteurs $|\tilde{\varphi}(l; t)\rangle$ dans le cas général ne font pas partie de l'espace l^2 , formule (II-36). Cependant, les discussions du chapitre précédent suggèrent une possibilité d'extension de la théorie des espaces hilbertiens exposée dans le chapitre précédent, dans laquelle on partirait toujours de l'équation aux valeurs propres (II-12) en imposant aux solutions propres des conditions moins restrictives que celles d'appartenir à l'espace de l^2 . A cet effet, on va voir dans la suite comment on peut étendre à ces solutions propres de norme infinie les notions, si importantes dans toute cette théorie, d'orthogonalité et de normalisation.

Presque toutes les méthodes utilisées pour surmonter les difficultés du spectre continu reposent sur l'idée de remplacer le problème de valeurs propres (II-12) par un autre problème où la suite des valeurs propres est entièrement discrète et dont le problème initial peut être considéré comme un cas limite lorsqu'on modifie les conditions de façon appropriée. Ainsi, au lieu de fonder toute cette analyse sur le problème de valeurs propres et de faire intervenir, si besoin est, des solutions propres situées en dehors de l'espace l^2 , on peut, *suivant une méthode due à Von Neumann* [46], traiter le problème rigoureusement et sans

¹ Cet exemple sera considéré avec plus de détails dans la suite, voir chapitre IV.

² Voir l'appendice.

jamais sortir de l'espace l^2 . La méthode consiste à chercher, ce qu'on appelle en mathématiques, la décomposition de l'unité dans l'espace de Hilbert et montrer qu'à chaque observable de la mécanique ondulatoire est associée une décomposition de l'unité particulière¹ [7, 46].

A partir de cette idée, H. Weyl a proposé une partition qui divise le spectre continu en des régions discrètes de longueurs δk (voir la figure 5 ci-contre), à travers l'utilisation de la notion de *différentielles propres* [7, 73] : une sorte de superposition de fonctions propres du spectre continu correspondant à des valeurs voisines de l'énergie, et qui est définie comme suit :

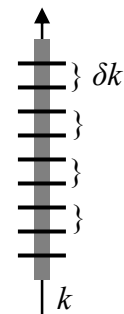


Figure 5 : Décomposition du spectre continu selon J. Von Neumann.

$$|\delta\tilde{\varphi}(k;t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{\delta k}} \int_k^{k+\delta k} |\tilde{\varphi}(k';t)\rangle dk' \quad (\text{II-51})$$

Le facteur $\sqrt{\delta k}$ a été introduit dans la définition de la différentielle propre de sorte que sa norme reste finie à la limite $\delta k \rightarrow 0$, dans tout ce qui va suivre on va omettre ce facteur pour alléger l'écriture mais il est toujours sous entendu², donc (II-51) devient [73] :

$$|\delta\tilde{\varphi}(k;t)\rangle = \int_k^{k+\delta k} |\tilde{\varphi}(k';t)\rangle dk' \quad (\text{II-52})$$

Ainsi, une différentielle propre est un paquet d'onde particulier [14] qui a une extension spatiale finie [50, 73], donc elle doit s'annuler à l'infini et peut être regardée comme un état lié³, par conséquent, elle vérifie la condition d'orthonormalisation (II-34) au même titre que ce dernier [73]. On va voir qu'au passage à la limite $\delta k \rightarrow 0$ cette condition d'orthonormalisation va impliquer la condition (II-42).

Alors, on a construit des fonctions propres de carrés sommables pour le spectre continu ; en effet, en calculant la valeur moyenne de l'hamiltonien $H(t)$ avec la fonction (II-52) on obtient [7] :

¹ Pour plus de détails voir la référence [46].

² En fait, on peut tout simplement faire le changement suivant : $|\tilde{\varphi}(k';t)\rangle \leftarrow \frac{1}{\sqrt{\delta k}} |\tilde{\varphi}(k';t)\rangle$.

³ La différence est qu'au cours du temps ce paquet se propage sans restriction et le système peut se trouver à l'infini ainsi il reste toujours libre [50], ce qui assure la propriété principale du spectre continu.

$$\langle H(t) \rangle = \frac{\langle \delta\tilde{\varphi}(k;t) | H(t) | \delta\tilde{\varphi}(k;t) \rangle}{\langle \delta\tilde{\varphi}(k;t) | \delta\tilde{\varphi}(k;t) \rangle} \xrightarrow{\delta k \rightarrow 0} E(k;t) + O(\delta k) \quad (\text{II-53})$$

on peut donc considérer, de façon précise, $E(k;t)$ comme la valeur propre correspondant à la différentielle propre $|\delta\tilde{\varphi}(k;t)\rangle$, avec un écart quadratique de la distribution des valeurs propres de l'hamiltonien autour de sa valeur moyenne qui tend vers zéro comme $\sqrt{E(k;t)\delta k}$ lorsque δk tend vers zéro [7].

Revenons maintenant à la relation d'orthonormalisation des différentielles propre qui est établie comme suit [73] : par intégration de l'équation aux valeurs propres (II-12) sur un intervalle δk et en utilisant (II-52) on obtient :

$$H(t) |\delta\tilde{\varphi}(k;t)\rangle = \int_k^{k+\delta k} E(k';t) |\tilde{\varphi}(k';t)\rangle dk' \quad (\text{II-54})$$

Le conjugué hermitien de cette équation correspondant à $k = l$ est donné par :

$$\langle \delta\tilde{\varphi}(l;t) | H^+(t) = \int_l^{l+\delta l} E(l';t) \langle \tilde{\varphi}(l';t) | dl' \quad (\text{II-55})$$

En soustrayant ces deux équations, après avoir multiplié la première par le bra $\langle \delta\tilde{\varphi}(l;t) |$ et la deuxième par le ket $|\delta\tilde{\varphi}(k;t)\rangle$, on trouve :

$$\begin{aligned} \langle \delta\tilde{\varphi}(l;t) | H(t) | \delta\tilde{\varphi}(k;t) \rangle - \langle \delta\tilde{\varphi}(l;t) | H^+(t) | \delta\tilde{\varphi}(k;t) \rangle = \\ = \int_l^{l+\delta l} \int_k^{k+\delta k} (E(k';t) - E(l';t)) \langle \tilde{\varphi}(l';t) | \tilde{\varphi}(k';t) \rangle dk' dl' \end{aligned}$$

le premier terme de cette équation est nul à cause du fait que l'hamiltonien est un opérateur hermitien, de plus, comme δk et δl doivent être très petits, en utilisant le théorème de la valeur moyenne [73], on peut faire sortir le terme $(E(k';t) - E(l';t))$ de la double intégrale, ce qui donne :

$$(E(k;t) - E(l;t)) \langle \delta\tilde{\varphi}(l;t) | \delta\tilde{\varphi}(k;t) \rangle = 0 \quad (\text{II-56})$$

Quand les deux intervalles δk et δl (fig. 6-(a)) ne se recouvrent pas on a $k \neq l$ et par conséquent¹ :

¹ Cette affirmation n'est vraie que si $E(k;t)$ est une fonction *monotone* de k , un caractère assuré par le fait que les spectres considérés ici sont des spectres non dégénérés.

$$\langle \delta\tilde{\varphi}(l;t) | \delta\tilde{\varphi}(k;t) \rangle = 0 \quad (\text{II-57})$$

Par contre, si l'intersection de ces derniers n'est pas un ensemble vide (fig. 6-(b)) on montre que le produit scalaire ci-dessus est proportionnel à l'intervalle le plus grand [73], soit δk selon la figure, par une normalisation appropriée, soit (II-41), on peut mettre :

$$\langle \delta\varphi(l;t) | \delta\varphi(k;t) \rangle = \delta k, \quad \delta k \rightarrow 0 \quad (\text{II-58})$$

En outre, à la limite¹ $\delta k \rightarrow 0$, on peut faire la transformation suivante :

$$|\delta\varphi(k;t)\rangle = |\varphi(k;t)\rangle \delta k, \quad \delta k \rightarrow 0 \quad (\text{II-59})$$

Par injection de cette formule, les deux formules (II-57) et (II-58) peuvent s'écrire, après division par δk , sous la forme suivante [7, 73] :

$$\langle \delta\varphi(l;t) | \varphi(k;t) \rangle = \begin{cases} 1 & k = l \\ 0 & k \neq l \end{cases}, \delta k \rightarrow 0 \quad (\text{II-60})$$

On entend par l'écriture $k = l$ ou $k \neq l$ le fait que k appartient ou non à l'intervalle δl , le petit intervalle dans l'exemple de la figure précédente. On voit apparaître la définition du symbole de Kronecker (II-17), on a donc :

$$\langle \delta\varphi(l;t) | \varphi(k;t) \rangle = \delta_{lk}, \quad \delta k \rightarrow 0 \quad (\text{II-61})$$

On a obtenu ainsi la *vraie*, si on peut le dire, relation d'orthonormalisation pour le spectre continu et qui représente la généralisation de (II-34) dans le cas discret. On peut prendre comme exemple une onde plane unidimensionnelle² [14] :

$$\varphi(k, x; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (\text{II-62})$$

Le produit scalaire pour deux valeurs du paramètre k correspondant à cette fonction vaut :

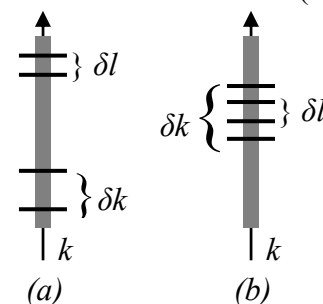


Figure 6 : Différent cas possible pour les positions des intervalles δk et δl .

¹ On comprend par *limite* le passage à cette dernière sans jamais l'atteindre !

² L'onde plane est parmi les fonctions qui vérifie parfaitement la condition (II-42), et on la cite ici qu'à titre d'exemple.

$$\langle \varphi(l;t) | \varphi(k;t) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-l)x} dx = \delta(k-l) \quad (\text{II-63})$$

on a utilisé ici la propriété (II-21-f). En intégrant cette formule sur l'intervalle δl on obtient :

$$\langle \delta\varphi(l;t) | \varphi(k;t) \rangle = \int_l^{l+\delta l} \delta(k-l') dl' \quad (\text{II-64})$$

On distingue deux cas : si k appartient à l'intervalle δl l'intégrale ci-dessus vaut 1, sinon elle vaut 0, et cela en utilisant les propriétés (II-21), donc on retrouve (II-61). Si maintenant on prend comme deuxième exemple la fonction (II-49) précédente, on vérifie aisément qu'elle vérifie bien cette condition. En utilisant la formule (A-8) de l'appendice équivalente à (II-50), et en intégrant de cette dernière sur un intervalle δl on trouve :

$$\langle \delta\tilde{\varphi}(l) | \tilde{\varphi}(k) \rangle = (k^2 + k_1^2) \int_l^{l+\delta l} \delta(k-l') dl' - k_1 th[k_1(x-x_0)] \int_l^{l+\delta l} \frac{1}{2\pi} e^{i(k-l')x} dl' \Bigg|_{-\infty}^{+\infty}$$

d'où

$$\langle \delta\tilde{\varphi}(l;t) | \tilde{\varphi}(k;t) \rangle = (k^2 + k_1^2) \int_l^{l+\delta l} \delta(k-l') dl' + th[k_1(x-x_0)] \frac{1}{2i\pi x} e^{i(k-l)x} (e^{-i\delta l x} - 1) \Bigg|_{-\infty}^{+\infty}$$

Comme les fonctions qui apparaissent dans le numérateur du deuxième terme sont bornées, ce dernier va s'annuler, donc il ne restera que le premier terme, donc on obtient le même résultat (II-64), d'où la même conclusion, mais avec la différence que la constante de normalisation dans ce cas n'est pas égale à l'unité¹.

Comme on l'a dit précédemment, la condition d'orthonormalisation (II-42) est un résultat de la condition d'orthonormalisation des différentielles propres (II-61), en effet, prenant le cas où k appartient à l'intervalle δl , c'est-à-dire prendre le cas :

$$\langle \delta\varphi(l;t) | \varphi(k;t) \rangle = 1 \quad (\text{II-64})$$

qui s'écrit d'après (II-52) :

$$\int_l^{l+\delta l} \langle \varphi(l';t) | \varphi(k;t) \rangle dl' = 1 \quad (\text{II-65})$$

¹ Pour la déterminer voir page 49.

La quantité sous le signe d'intégration doit être aigue dans l'intervalle δl qui est aussi petit que l'on veut, avec la condition $k \in [l, l + \delta]$ toujours vérifiée. Ce comportement nous rappelle la fonction (II-23) représentée par la figure 4, ainsi, en prolongeant l'intégrale sur tout l'axe réel en prenant l'intégrand identique à zéro dans les régions du prolongement, on obtient :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle \varphi(l'; t) | \varphi(k; t) \rangle dl' = 1 \quad (\text{II-66})$$

En comparant cette dernière relation avec (II-21-h) on déduit que la quantité sous l'intégrale n'est que la fonction de Dirac [73], d'où on retrouve (II-42).

En conclusion, deux fonctions propres appartenant à des valeurs propres distinctes sont orthogonales, convention étant faite que l'une au moins des fonctions propres doit être remplacée par sa différentielle propre dans la relation d'orthonormalisation lorsque les deux fonctions propres appartiennent au spectre continu [7]. Dans la pratique cette notion de différentielle propre n'est jamais utilisée mais elle est sous entendue lorsqu'on veut appliquer la relation d'orthonormalisation (II-42). Il suffit que les vecteurs propres pour un spectre continu vérifient la relation (II-61) pour qu'on puisse appliquer la relation (II-42) sans prendre en compte des termes indéterminés qui disparaissent pour les différentielles propres, tel que le deuxième terme de la formule (II-50). En effet, ce dernier peut prendre n'importe quelle valeur entre -2 et 2 donc on peut le choisir nul.

Il ne reste maintenant qu'à savoir comment déterminer la grandeur $N(k; t)$? En fait, il n'y a pas une méthode vraiment rigoureuse pour répondre à cette question, toutes les méthodes proposées s'appuient en général sur l'intuition, ou bien elles servent comme un outil de vérification, et dans les meilleurs des cas elles sont applicables seulement pour des situations particulières. Voici quelques exemples :

Parmi ces méthodes les plus puissantes on a la méthode de l'intégration sur tout le spectre continu, elle repose sur la formule (II-66) et la propriété (II-21-h) de la fonction de Dirac ; en effet, en intégrant la relation (II-40) par rapport à k et en utilisant cette propriété on trouve :

$$N(l; t)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \tilde{\varphi}(l; t) | \tilde{\varphi}(k; t) \rangle dk \quad (\text{II-67})$$

d'où

$$N(l;t) = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \langle \tilde{\varphi}(l;t) | \tilde{\varphi}(k;t) \rangle dk} \quad (\text{II-68})$$

On remarque qu'on a obtenu une relation analogue à la relation (II-30) pour le spectre discret. Le problème lié à cette méthode c'est qu'il n'est pas toujours évident sur le plan technique d'évaluer l'intégrale sous la racine.

La deuxième méthode consiste à intégrer l'équation (II-46) sur un intervalle $[-L, L]$ ce qui donne :

$$\int_{-L}^{+L} \tilde{\varphi}(x, k; t) \tilde{\varphi}^*(x, l; t) dx = \frac{1}{(E(k; t) - E(l; t))} W(\tilde{\varphi}(x, k; t), \tilde{\varphi}^*(x, l; t)) \Big|_{-L}^{+L} \quad (\text{II-69})$$

puis essayer d'écrire le deuxième terme sous la forme de l'une des fonctions qui approchent la fonction de Dirac, par exemple la fonction (II-23), à la limite $L \rightarrow \infty$ le premier terme donne le produit scalaire tandis que ces fonctions donnent la fonction de Dirac à un facteur près qui n'est que la quantité $N(k; t)$.

La troisième méthode est généralement utilisée dans les problèmes de diffusion, dans lesquelles on envoie une particule qui va entrer en interaction avec une cible puis on cherche à détecter les produits de cette opération. Généralement, dans ce type de problèmes on rencontre des spectres continus dont la détermination exacte de $N(k; t)$ tout au cours du processus de l'interaction n'est pas toujours nécessaire, car il suffit de choisir la bonne onde incidente qui représente la particule envoyée, c'est-à-dire celle qui satisfait à la condition initiale qui exige que la densité du courant doit être constante et dans la direction selon laquelle on a envoyé notre particule [50, 76]. Puis en laissant évoluer cette onde on peut déterminer $N(k; t)$ dans le reste des étapes de l'interaction. A la fin, cette grandeur ne reste pas une simple constante de normalisation arbitraire, mais elle aura d'autres significations importantes car à travers cette dernière on peut déterminer les différents grandeurs liées à la diffusion ; les coefficients de transmission et de réflexion, les amplitudes de transition et les sections efficaces (voir le dernier exemple du quatrième chapitre). On peut illustrer cette méthode en prenant l'exemple (II-49). Si initialement la particule incidente est supposée libre et représentée par une onde plane, alors pour la région $x \rightarrow -\infty$ et en utilisant les propriétés de la tangente hyperbolique on obtient :

$$\tilde{\varphi}(x, k) \underset{x \rightarrow -\infty}{=} [ik + k_1] \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}$$

par conséquent, on a :

$$N(k) = \frac{1}{k_1 + ik}$$

La dernière méthode repose sur la même idée que la précédente, elle est donnée par L. D. Landau et E. M. Lifshitz [50]. Elle consiste à déterminer le coefficient de normalisation directement en fonction de l'expression asymptotique de la fonction d'onde. Pour les problèmes à une dimension et pour les grandes valeurs de la coordonnée spatiale on a la règle suivante [50] : « [...] *mettant l'expression asymptotique de la fonction d'onde sous la forme de la somme de deux ondes planes courant en sens inverses, il faut choisir le coefficient de normalisation de sorte que la densité du courant de probabilité dans l'onde courant dans la direction de l'origine des coordonnées (ou fuyant l'origine) soit égale à $\frac{1}{2\pi\hbar}$* ». Cette règle est valable si on a un mouvement dans un seul sens, si maintenant le mouvement est dans les deux sens la règle devient [50] : « [...] *La fonction d'onde sera normalisée [...] si la somme des courants de probabilité dans les ondes convergeant de part et d'autre vers l'origine sur l'axe des x est égale à $\frac{1}{2\pi\hbar}$* ».

Avant de terminer cette discussion on rappelle le résultat important suivant : en réalité la condition d'orthonormalisation (II-42) n'est pas unique [7, 50], car il existe un arbitraire dans la normalisation des fonctions propres du spectre continu qui est dû essentiellement à la propriété (II-21-c) de la fonction de Dirac ; on peut, en effet, remplacer l'indice continu k par l'indice $\Phi \equiv \Phi(k)$, où $\Phi(k)$ est une fonction¹ *continu, dérivable et monotone*² de k . La relation (II-42) s'écrit pour ce nouvel indice comme suit :

$$\langle \varphi(\Phi(l); t) | \varphi(\Phi(k); t) \rangle = \delta(\Phi(l) - \Phi(k)) \quad (\text{II-70})$$

En utilisant la propriété (II-21-c) on trouve :

$$\langle \varphi(\Phi(l); t) | \varphi(\Phi(k); t) \rangle = \frac{1}{|d\Phi(l)/dl|} \delta(l - k) \quad (\text{II-71})$$

¹ La fonction $\Phi(k)$ peut représenter l'énergie du système, son impulsion ou n'importe quelle autre grandeur.

² Cette condition est analogue à dire que le spectre est non dégénéré.

On a donc le résultat suivant ; les fonctions propres ci-dessus sont normalisées par rapport à l'indice $\Phi(k)$ et non pas pour k , par conséquent, la constante de normalisation $N(k;t)$ va dépendre de la nature de l'indice qui peut varier selon le choix de la fonction $\Phi(k)$, qui est bien sûre quelconque. Pour enlever cette ambiguïté on fait la transformation suivante chaque fois on fait un changement d'indice [7, 50] :

$$|\varphi(\Phi(k);t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{d\Phi(k)/dk}} |\varphi(k;t)\rangle \quad (\text{II-72})$$

On vérifie facilement que les fonctions précédentes sont normalisées quelque soit l'indice choisie.

5) *Projecteurs dans l'espace de Hilbert :*

Dans le paragraphe précédent on s'est intéressé de la première condition nécessaire pour avoir une base dans l'espace de Hilbert et on a donné une version plus utile pour cette condition, celle d'orthonormalisation. Dans ce paragraphe on va faire la même chose pour l'autre condition.

1. **Relations de fermetures :**

Si la première condition implique l'unicité du développement d'un vecteur de l'espace de Hilbert sur les éléments de la base considérée, d'après (II-5) ou (II-6) selon la nature du spectre, alors, c'est la deuxième condition qui assure la possibilité de développer n'importe quel vecteur de l'espace de Hilbert sur les éléments de la base, pour cette raison, on dit que les éléments de cette base forment un ensemble *complet* [7, 17]. De plus, comme ce système est orthonormé (d'après le chapitre précédent) alors l'ensemble est dit *fermé*¹, théorème [17, 68]. On va donner maintenant une règle analogue à celle d'orthonormalisation et qui permet d'exprimer cette propriété.

Pour faire, on remarque que cette propriété implique que les coefficients $C_k(t)$ et $C(k;t)$ des développements (II-5) et (II-6) Resp. doivent dépendre, en plus des éléments de la base choisie, de la fonction $|\psi(t)\rangle$ à développer. En effet, multiplions les deux équations précédente par $\langle\varphi_l(t)|$ et $\langle\varphi(l;t)|$ Resp. on obtient, après avoir normalisé les éléments des bases en utilisant (II-31) et (II-41) Resp. :

¹ Un système orthonormé est dit fermé s'il vérifie l'égalité de Parseval [33].

$$\langle \varphi_l(t) | \psi(t) \rangle = \sum_{k \in I} C_k(t) \langle \varphi_l(t) | \varphi_k(t) \rangle \quad (\text{II-73})$$

$$\langle \varphi(l;t) | \psi(t) \rangle = \int_I C(k;t) \langle \varphi(l;t) | \varphi(k;t) \rangle dk \quad (\text{II-74})$$

En utilisant les relations (II-34) et (II-42) Resp. on trouve [13] :

$$\langle \varphi_l(t) | \psi(t) \rangle = \sum_{k \in I} C_k(t) \delta_{lk} = C_l(t) \quad (\text{II-75})$$

$$\langle \varphi(l;t) | \psi(t) \rangle = \int_I C(k;t) \delta(l-k) dk = C(l;t) \quad (\text{II-76})$$

On a utilisé ici les propriétés (II-17) et (II-21-g) Resp.. Ces relations sont valables quelque soit $l \in I$, dans le cas discret ou continu.

Réinjectons maintenant ces deux définitions des coefficients $C_l(t)$ et $C(l;t)$ dans les équations (II-5) et (II-6) Resp., ce qui donne :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{k \in I} \langle \varphi_k(t) | \psi(t) \rangle |\varphi_k(t)\rangle \quad (\text{II-77})$$

$$|\psi(t)\rangle = \int_I \langle \varphi(k;t) | \psi(t) \rangle |\varphi(k;t)\rangle dk \quad (\text{II-78})$$

qui s'écrivent sous les formes suivantes [13] :

$$|\psi(t)\rangle = \left[\sum_{k \in I} |\varphi_k(t)\rangle \langle \varphi_k(t)| \right] |\psi(t)\rangle \quad (\text{II-79})$$

$$|\psi(t)\rangle = \left[\int_I |\varphi(k;t)\rangle \langle \varphi(k;t)| dk \right] |\psi(t)\rangle \quad (\text{II-80})$$

d'où on tire les deux relations importantes suivantes :

$$\sum_{k \in I} |\varphi_k(t)\rangle \langle \varphi_k(t)| = 1 \quad (\text{II-81})$$

$$\int_I |\varphi(k;t)\rangle \langle \varphi(k;t)| dk = 1 \quad (\text{II-82})$$

Ce sont les relations demandées et qui expriment la condition de fermeture en question pour le spectre discret (II-81) et continu (II-82) Resp., pour cette raison, elles sont dites *relation de fermeture* pour le spectre discret et continu Resp. [7, 14, 17, 50]. En effet, *chaque* fonction de l'espace de Hilbert peut s'écrire :

$$|\psi(t)\rangle = 1 |\psi(t)\rangle \quad (\text{II-83})$$

en remplaçant l'identité par l'une des relations (II-81) ou (II-82), selon la nature du spectre, et en suivant les étapes précédentes dans le sens inverse on montre que n'importe quelle fonction de l'espace peut s'écrire comme une combinaison linéaire et unique des éléments de la base orthonormée choisie. En joignant les relations de fermeture (II-81) et (II-82) aux relations d'orthonormalisation (II-34) et (II-42) Resp. on obtient un ensemble de conditions *nécessaires et suffisantes* pour que la base choisie soit *orthonormée et complète* (ou *fermée*) [7].

En se mettant dans la représentation position, les relations (II-75) et (II-76) s'écrivent Resp. :

$$C_k(t) = \int \varphi_k^*(\vec{r}';t) \psi(\vec{r}';t) d^3 r' \quad (\text{II-84})$$

$$C(k;t) = \int \varphi^*(\vec{r}',k;t) \psi(\vec{r}';t) d^3 r' \quad (\text{II-85})$$

Par injection dans (II-5) et (II-6) mises en représentation position Resp. on trouve :

$$\psi(\vec{r};t) = \sum_{k \in I} \int \varphi_k^*(\vec{r}';t) \psi(\vec{r}';t) d^3 r' \varphi_k(\vec{r};t) \quad (\text{II-86})$$

$$\psi(\vec{r};t) = \int \int_I \varphi^*(\vec{r}',k;t) \psi(\vec{r}';t) d^3 r' \varphi(\vec{r},k;t) dk \quad (\text{II-87})$$

d'où

$$\psi(\vec{r};t) = \int \left[\sum_{k \in I} \varphi_k^*(\vec{r}';t) \varphi_k(\vec{r};t) \right] \psi(\vec{r}';t) d^3 r' \quad (\text{II-88})$$

$$\psi(\vec{r};t) = \int \left[\int_I \varphi^*(\vec{r}',k;t) \varphi(\vec{r},k;t) dk \right] \psi(\vec{r}';t) d^3 r' \quad (\text{II-89})$$

En comparant ces deux équations avec la propriété (II-21-g) on constate que la quantités entre crochets dans les deux équations ne sont que la fonction de Dirac, en effet :

$$\sum_{k \in I} \varphi_k^*(\vec{r}';t) \varphi_k(\vec{r};t) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{II-90})$$

$$\int_I \varphi^*(\vec{r}',k;t) \varphi(\vec{r},k;t) dk = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{II-91})$$

Ces deux formules représentent les relations de fermeture dans la représentation position [73]. On peut considérer ces deux derniers comme les développements de la fonction de Dirac sur les deux bases discrète et continue respectivement, d'où, on a le résultat suivant [73] : « Si une fonction aussi singulière que la fonction de Dirac peut être développée sur l'ensemble des vecteurs d'une base, ce dernier doit être complet (ou fermé) ; d'où l'appellation relation de fermeture ».

On va maintenant considérer ces relations de fermeture d'un autre point de vue, en introduisant la notion de projecteur.

2. Les projecteurs :

Par définition, un projecteur P_φ est un opérateur hermitien défini par [14] :

$$P_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi| \quad (\text{II-92})$$

avec $|\varphi\rangle$ un état quelconque de l'espace de Hilbert, et qui vérifie la propriété suivante :

$$P_\varphi^2 = P_\varphi \quad (\text{II-93})$$

L'action de cet opérateur sur un ket $|\psi\rangle$ quelconque est :

$$P_\varphi|\psi\rangle = |\varphi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle|\varphi\rangle \quad (\text{II-94})$$

c'est un nouveau ket proportionnel à $|\varphi\rangle$, avec un coefficient de proportionnalité qui est égal au produit scalaire des deux kets. La signification géométrique de cette opération est donc claire : c'est la projection orthogonale du ket $|\psi\rangle$ sur le ket $|\varphi\rangle$, d'où le nom de cette opérateur. On va voir maintenant deux exemples de projecteurs qui auront une grande importance dans les chapitres suivants.

a) Projecteur sur une base discrète :

Soit une base discrète composée de vecteurs normés $|\varphi_k(t)\rangle$, $k \in I$, par définition, le projecteur correspondant à chacun de ces vecteurs s'écrit d'après (II-92) :

$$P_k(t) = |\varphi_k(t)\rangle\langle\varphi_k(t)|, \quad k \in I \quad (\text{II-95})$$

Voyons si cet opérateur vérifie les propriétés d'un projecteur ; il est clair qu'il est hermitien et en utilisant (II-34) on a :

$$P_k^2(t) = |\varphi_k(t)\rangle\langle\varphi_k(t)|\varphi_k(t)\rangle\langle\varphi_k(t)| = |\varphi_k(t)\rangle\langle\varphi_k(t)| = P_k(t) \quad (\text{II-96})$$

CQFD.

Pour illustrer le rôle de ces projecteurs, appliquons l'un d'eux, soit $P_l(t)$, sur un état quelconque $|\psi(t)\rangle$, en utilisant le développement (II-5) et la propriété (II-34) on trouve :

$$P_l(t)|\psi(t)\rangle = \sum_{k \in I} C_k(t) |\varphi_k(t)\rangle\langle\varphi_l(t)|\varphi_k(t)\rangle = \sum_{k \in I} C_k(t) |\varphi_k(t)\rangle \delta_{lk} = C_l(t) |\varphi_l(t)\rangle \quad (\text{II-97})$$

qui représente la projection de $|\psi(t)\rangle$ sur le vecteur de la base $|\varphi_l(t)\rangle$, de plus, si on compare cette expression avec (II-94) on retrouve la relation (II-75).

Cette définition du projecteur peut se généraliser pour donner un projecteur qui projette non sur un seul vecteur mais sur une partie de la base¹ ; on peut prendre comme exemple les vecteurs $|\varphi_k(t)\rangle$, $k = k_1, k_2, k_3$, on vérifie facilement que l'opérateur suivant est un projecteur :

$$P(t) = \sum_{k=k_1, k_2, k_3} P_k(t) = \sum_{k=k_1, k_2, k_3} |\varphi_k(t)\rangle\langle\varphi_k(t)| \quad (\text{II-98})$$

qui vérifie :

$$P_l(t)|\psi(t)\rangle = \sum_{k=k_1, k_2, k_3} C_k(t) |\varphi_k(t)\rangle \quad (\text{II-99})$$

Si maintenant on étend la sommation (II-98) sur toutes les valeurs possibles de k , on obtient :

$$P_T(t) = \sum_{k \in I} P_k(t) = \sum_{k \in I} |\varphi_k(t)\rangle\langle\varphi_k(t)| \quad (\text{II-100})$$

qui donne d'après (II-81) :

$$P_T(t) = \sum_{k \in I} P_k(t) = 1 \quad (\text{II-101})$$

On a donc une nouvelle définition de la relation de fermeture précédente ; *la projection d'un vecteur quelconque sur tous les vecteurs d'une base donne le même vecteur.*

¹ Ou, dans le cas général, sur un sous-espace de l'espace de Hilbert ; ce résultat correspond aux cas dégénérés [14].

La relation (II-101) représente ce qu'on appelle en mathématique une *décomposition de l'unité* [7, 44, 46].

b) Projecteur sur une base continue :

Considérons maintenant une base continue de vecteurs normés¹ $|\varphi(k;t)\rangle, k \in I$.

L'extension directe de la notion de projecteur pour ces vecteurs permet d'écrire :

$$P(k;t) = |\varphi(k;t)\rangle\langle\varphi(k;t)|, k \in I \quad (\text{II-102})$$

Comme pour le cas ci-dessus, examinons si c'est un projecteur ; il est clair que c'est hermitien. Pour la deuxième condition, d'après (II-42) on a :

$$P^2(k;t) = |\varphi(k;t)\rangle\langle\varphi(k;t)|\varphi(k;t)\rangle\langle\varphi(k;t)| = |\varphi(k;t)\rangle\delta(0)\langle\varphi(k;t)| \neq P(k;t) \quad (\text{II-103})$$

On est ainsi en face d'un nouveau problème lié au spectre continu ; comment on peut généraliser la notion de projecteur pour les éléments d'une base continue ?

L'origine de ce problème est due en réalité au fait que l'application d'un projecteur sur un vecteur de l'espace de Hilbert est analogue à l'utilisation d'un outil de mesure pour calculer la possibilité pour que le système soit dans un état particulier ; l'état sur lequel on projette. On peut prendre comme exemple un filtre optique ; quelque soit la sélectivité de ce dernier, il laisse toujours passer une bande de fréquence $\Delta\nu$ qui peut être aussi petite que l'on puisse réaliser, mais elle n'est jamais nulle [14]. Ainsi, si on veut une fréquence bien déterminée, soit $\bar{\nu}$, on va utiliser un filtre qui laisse passer une bande $\Delta\nu$ qui contient cette fréquence, par exemple $\left[\bar{\nu} - \frac{\Delta\nu}{2}, \bar{\nu} + \frac{\Delta\nu}{2} \right]$ [14, 15]. Par analogie, pour le spectre continu, seulement des projections insuffisamment sélectives qui puissent être utilisées car il est impossible d'imaginer un outil physique qui permet d'isoler un seul vecteur appartenant à un ensemble continu [14].

Donc la généralisation cherchée pour la notion de projecteur repose sur les arguments ci-dessus. En effet, si on ne peut pas faire une projection sur un seul élément de la base continue, on peut faire une projection sur un ensemble d'état aussi voisin que l'on veut et qui correspondent à des valeurs k appartenant à un certain intervalle δk , qui peut être arbitrairement petit mais qui n'est jamais nul [7], on obtient un tel opérateur on intégrant (II-102) sur l'intervalle δk ce qui donne :

¹ Au sens donné précédemment.

$$\delta P(k; t) = \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k'; t)\rangle \langle \varphi(k'; t)| dk', \quad k \in I \quad (\text{II-104})$$

cet opérateur s'appelle *projecteur différentiel* [7]. On vérifie que c'est un projecteur, en effet :

$$\begin{aligned} \delta P^2(k; t) &= \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k''; t)\rangle \langle \varphi(k''; t)| dk'' \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k'; t)\rangle \langle \varphi(k'; t)| dk' \\ &= \int_k^{k+\delta k} \int_k^{k+\delta k} \langle \varphi(k'; t) | \varphi(k''; t) \rangle |\varphi(k'; t)\rangle \langle \varphi(k''; t)| dk' dk'' \end{aligned} \quad (\text{II-105})$$

ce qui donne, en utilisant (II-42) et (II-21-g) :

$$\begin{aligned} \delta P^2(k; t) &= \int_k^{k+\delta k} \int_k^{k+\delta k} \delta(k' - k'') |\varphi(k'; t)\rangle \langle \varphi(k''; t)| dk' dk'' \\ &= \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k'; t)\rangle \langle \varphi(k'; t)| dk' = \delta P(k; t) \end{aligned} \quad (\text{II-106})$$

CQFD.

Voyons maintenant l'action de ce projecteur sur une fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$. En utilisant le développement (II-6) et la relation (II-42) on obtient :

$$\begin{aligned} \delta P(l; t) |\psi(t)\rangle &= \int_l^{l+\delta l} |\varphi(l'; t)\rangle \langle \varphi(l'; t)| dl' \int_l^{l+\delta l} C(k; t) |\varphi(k; t)\rangle dk \\ &= \int_l^{l+\delta l} \int_l^{l+\delta l} C(k; t) \langle \varphi(l'; t) | \varphi(k; t) \rangle |\varphi(l'; t)\rangle dk dl' = \int_l^{l+\delta l} \int_l^{l+\delta l} C(k; t) \delta(k - l') |\varphi(l'; t)\rangle dk dl' \end{aligned}$$

ce qui donne, d'après (II-21-g) :

$$\delta P(l; t) |\psi(t)\rangle = \int_l^{l+\delta l} \langle \varphi(l'; t) | \psi(t) \rangle |\varphi(l'; t)\rangle dl' = \int_l^{l+\delta l} C(l'; t) |\varphi(l'; t)\rangle dl' \quad (\text{II-107})$$

Comme pour le cas discret, on retrouve le résultat (II-76). De plus, la formule ci-dessus est quelque part similaire à la notion de différentielle propre $|\delta\varphi(k; t)\rangle$ précédente [73]. A la limite $\delta l \rightarrow 0$ on peut sortir le coefficient $C(l; t)$ de l'intégrale (II-107) ce qui donne d'après (II-52) :

$$\delta P(l; t) |\psi(t)\rangle = C(l; t) \int_l^{l+\delta l} |\varphi(l'; t)\rangle dl' = C(l; t) |\delta\tilde{\varphi}(k; t)\rangle \quad (\text{II-108})$$

Ainsi, on peut dire que le rôle du projecteur dans le cas continu est la projection sur la différentielle propre correspondante.

Comme pour le spectre discret, on peut généraliser la définition (II-104) pour projeter sur différents intervalles δk , soient par exemple δk_1 , δk_2 et δk_3 , un tel projecteur est défini comme suit :

$$\delta P(k_1, k_2, k_3; t) = \delta P(k_1; t) + \delta P(k_2; t) + \delta P(k_3; t) \quad (\text{II-109})$$

En sommant maintenant sur tout le domaine I on obtient :

$$P_T(t) = \int \delta P(k; t) = \int_I |\varphi(k; t)\langle \varphi(k; t) | dk \quad (\text{II-110})$$

qui donne d'après (II-82) :

$$P_T(t) = \int \delta P(k; t) = 1 \quad (\text{II-111})$$

On tire donc le même résultat que pour le spectre discret mais avec une nouvelle décomposition de l'unité [7, 44, 46].

III. Conclusion :

Le but de ce chapitre était de donner une réponse sur la question du titre et d'introduire une méthode pour la résolution de l'équation de Schrödinger (II-1). D'après tout ce qu'on a vu dans ce chapitre, il y a une grande analogie entre le traitement du spectre discret et celui du spectre continu. En effet, pour passer de l'un vers l'autre il suffit de faire les changements suivants sur les relations en question¹ [14] :

$$\begin{aligned} k \text{ est un indice discret} &\longleftrightarrow k \text{ est un indice continu} \\ \sum_{k \in I} &\longleftrightarrow \int_I dk \\ \delta_{kl} &\longleftrightarrow \delta(k-l) \end{aligned} \quad (\text{II-112})$$

mais avec la différence que les vecteurs propres dans le cas discret peuvent représenter un état physique réel, par contre, ceux du spectre continu ne peuvent jamais représenter un état physique car ils ne sont que des intermédiaires qui présentent plusieurs avantages dans les calculs pratiques [14]. Une situation analogue est rencontrée en optique classique où la notion d'onde monochromatique plane est très utile dans les formules mathématiques, mais

¹ Pour plus de détails, voir le tableau (II-4) page 107 de la référence [14].

physiquement elle n'est qu'une idéalisation irréalisable [14]. En outre, les relations correspondant à un spectre continu doivent toujours être aperçues comme un cas limite, comme on l'a vu pour la fonction de Dirac, et que les vraies relations sont ceux vérifiées par les différentielles propres.

En ce qui concerne la résolution de l'équation de Schrödinger, on est arrivé aux systèmes d'équation (II-35) et (II-43) pour le cas discret et continu Resp.. Les discussions liées à la résolution de ces deux systèmes sont rapportées aux chapitres suivants.

Il reste à dire un mot sur l'interprétation probabiliste. Bien que les vecteurs $|\varphi(k;t)\rangle$, $k \in I$ d'une base continue ne puissent pas représenter un état physique, elles permettent de calculer les différentes probabilités liées aux différents processus de mesure ; en effet, la probabilité d'obtenir, après une mesure sur un état normalisé $|\psi(t)\rangle$, un résultat entre k et $k + \delta k$ est donnée par [14] :

$$\delta\wp(k;t) = |\langle\varphi(k;t)|\psi(t)\rangle|^2 \delta k \quad (\text{II-113})$$

En utilisant (II-76) cette relation devient [13] :

$$\delta\wp(k;t) = |C(k;t)|^2 \delta k \quad (\text{II-114})$$

Si l'indice k désigne la position \vec{r} , $C(k;t)$ n'est autre que la fonction d'onde $\Psi(\vec{r};t)$, et la formule ci-dessus devient :

$$\delta\wp(\vec{r};t) = |C(\vec{r};t)|^2 \delta \vec{r} \quad (\text{II-115})$$

qui désigne selon M. Born [56] la probabilité élémentaire d'observer le système dans l'intervalle spatial $[\vec{r}, \vec{r} + \delta \vec{r}]$.

Finalement, on rappelle qu'un système orthonormé fermé, s'il existe, n'est pas unique [7]. De plus, on remarque que les conditions d'orthonormalisation (II-34) et (II-42) et de fermeture (II-81) et (II-82) ne dépendent pas du paramètre du temps, cet effet implique qu'à chaque instant t les vecteurs $|\varphi_k(t)\rangle$ et $|\varphi(k;t)\rangle$, fonctions propres de l'hamiltonien $H(t)$, forment Resp. une base discrète et une base continue de l'espace de Hilbert, ces dernières sont dites *bases instantanées* de l'espace de Hilbert [5]. Ce résultat aura une grande importance dans les développements ultérieurs.

Chapitre III

Solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps et théorème adiabatique

SOLUTION DE L'EQUATION DE SCHRÖDINGER DEPENDANT DU TEMPS ET THEOREME ADIABATIQUE

I. Solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps :

Jusqu'à présent on a essayé de trouver une solution pour l'équation de Schrödinger (II-1) sous sa forme la plus générale, en partant des développements (II-5) et (II-6), selon la nature du spectre, de la solution $|\psi(t)\rangle$ cherchée sur les vecteurs propres normalisés¹ de l'hamiltonien. Après injection de ces derniers dans l'équation (II-1), on a abouti aux systèmes d'équation (II-35) et (II-43) Resp., à savoir :

$$\forall l \in I : i\hbar \dot{C}_l(t) = C_l(t)E_l(t) - \sum_{k \in I} C_k(t) i\hbar \langle \varphi_l(t) | \dot{\varphi}_k(t) \rangle \quad (\text{II-35})$$

$$\forall l \in I : i\hbar \dot{C}(l;t) = C(l;t)E(l;t) - \int_I C(k;t) i\hbar \langle \varphi(l;t) | \dot{\varphi}(k;t) \rangle dk \quad (\text{II-43})$$

Alors, supposés résolus les problèmes aux valeurs propres (II-11) et (II-12), pour trouver la solution $|\psi(t)\rangle$ on doit résoudre ces deux équations pour déterminer les coefficients $C_l(t)$ et $C(l;t)$ Resp.. Comme on est en train de résoudre une équation différentielle, on doit d'abord fixer les conditions initiales ; à l'instant initial $t = t_0$ le système physique est supposé dans l'état $|\psi(t_0)\rangle$, en utilisant les développements (II-5) et (II-6) on a Resp. :

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{k \in I} C_k(t_0) |\varphi_k(t_0)\rangle \quad (\text{III-1})$$

$$|\psi(t_0)\rangle = \int_I C(k;t_0) |\varphi(k;t_0)\rangle dk \quad (\text{III-2})$$

Ainsi, On voit apparaître dans les formules ci-dessus deux nouvelles bases instantanées² ; $\{|\varphi_k(t_0)\rangle\}_{k \in I}$ et $\{|\varphi(k;t_0)\rangle\}_{k \in I}$ Resp., pour trouver les conditions initiales correspondant aux coefficients $C_l(t)$ et $C(l;t)$ dans les premières bases $\{|\varphi_k(t)\rangle\}_{k \in I}$ et $\{|\varphi(k;t)\rangle\}_{k \in I}$ Resp. on développe la fonction $|\psi(t_0)\rangle$ sur ces dernières, ce qui donne :

¹ Dans tout le reste de ce travail, on suppose réglé le problème de normalisation des vecteurs propres utilisés soit dans le cas discret ou continu, voir les discussions du chapitre précédent.

² Voir le dernier paragraphe du chapitre précédent.

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{k \in I} C_k^t(t_0) |\varphi_k(t)\rangle \quad (\text{III-3})$$

$$|\psi(t_0)\rangle = \int_I C^t(k; t_0) |\varphi(k; t)\rangle dk \quad (\text{III-4})$$

On a ajouté un indice supérieur sur les coefficients pour distinguer les différents développements sur les différentes bases.

Maintenant pour trouver les relations entre les différents coefficients, on injecte les relations de fermeture (II-81) et (II-82) dans (III-1) et (III-2) Resp., on trouve :

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{k \in I} \left[\sum_{k' \in I} C_{k'}^t(t_0) \langle \varphi_k(t) | \varphi_{k'}(t_0) \rangle \right] |\varphi_k(t)\rangle \quad (\text{III-5})$$

$$|\psi(t_0)\rangle = \int_I \left[\int_I C(k'; t_0) \langle \varphi(k; t) | \varphi(k'; t_0) \rangle dk' \right] |\varphi(k; t)\rangle dk \quad (\text{III-6})$$

Par comparaison avec (III-3) et (III-4) Resp., on trouve¹ :

$$C_k^t(t_0) = \sum_{k' \in I} C_{k'}^t(t_0) \langle \varphi_k(t) | \varphi_{k'}(t_0) \rangle \quad (\text{III-7})$$

$$C^t(k; t_0) = \int_I C(k'; t_0) \langle \varphi(k; t) | \varphi(k'; t_0) \rangle dk' \quad (\text{III-8})$$

Si on prend comme exemple un système où les fonctions propres sont indépendantes du temps, les systèmes d'équation (II-35) et (II-43) se résolvent exactement :

$$i\hbar \dot{C}_l(t) = C_l(t) E_l(t) \quad (\text{III-9})$$

$$i\hbar \dot{C}(l; t) = C(l; t) E(l; t) \quad (\text{III-10})$$

Par une simple intégration on obtient² Resp. :

$$C_l(t) = C_l(t_0) e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_l(t') dt'} \quad (\text{III-11})$$

$$C(l; t) = C(l; t_0) e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t E(l; t') dt'} \quad (\text{III-12})$$

¹ Cette opération est permise du fait que le développement d'un vecteur sur une base est unique, première condition dans la définition d'une base, page 29.

² Dans ce cas les différents coefficients dans (III-7) et (III-8) Resp. coïncident.

En réalité, résoudre les systèmes d'équation (II-35) et (II-43) avec les conditions initiales (III-7) et (III-8) Resp. n'est pas toujours une chose évidente. Pour illustrer cette affirmation, prenant l'exemple le plus simple et connu en mécanique quantique, celui de l'oscillateur harmonique à une dimension, l'hamiltonien pour ce système est donné par [14] :

$$H(t) = \frac{P^2}{2m(t)} + \frac{1}{2}m(t)\omega(t)^2 x^2 \quad (\text{III-13})$$

avec $m(t)$ la masse de la particule et $\omega(t)$ sa fréquence. On démontre que cet hamiltonien admet comme vecteurs propres les fonctions suivantes [14] :

$$\varphi_k(x;t) = \left(\frac{\beta(t)^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\beta(t)^2 x^2}{2\hbar}} \chi_k(\beta(t)x) \quad (\text{III-14})$$

où les $\chi_k(\beta(t)x)$ sont les polynômes d'Hermite [10] et $\beta(t)$ est définie par :

$$\beta(t) = \sqrt{\frac{m(t)\omega(t)}{\hbar}} \quad (\text{III-15})$$

avec les valeurs propres suivantes :

$$E_k(t) = \left(k + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega(t) \quad (\text{III-16})$$

En utilisant les propriétés des polynômes d'Hermite [10], on démontre que le système d'équation (II-34) s'écrit pour cet exemple comme suit :

$$i\dot{C}_0(t) = C_0(t)E_0(t) + iC_2(t)\frac{\dot{\beta}(t)\sqrt{2}}{\beta(t)} \quad (\text{III-17-a})$$

$$i\dot{C}_1(t) = C_1(t)E_1(t) + iC_3(t)\frac{\dot{\beta}(t)\sqrt{6}}{\beta(t)} \quad (\text{III-17-b})$$

$$i\dot{C}_k(t) = C_k(t)E_k(t) - iC_{k-2}(t)\frac{\dot{\beta}(t)\sqrt{k(k-1)}}{\beta(t)} + C_{k+2}(t)\frac{\dot{\beta}(t)\sqrt{(k+2)(k+1)}}{\beta(t)} \quad (\text{III-17-c})$$

Il est clair que ce système n'admet pas une solution analytique. En effet, pour déterminer un coefficient k on est besoin du coefficient $k+2$, et comme k prend ces valeurs de 0 à l'infini, le système ne peut pas être résolu.

1) Les différentes méthodes pour la résolution de l'équation de Schrödinger :

En fait, cette méthode n'est pas la seule pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps. En générale, le but de la résolution de l'équation de Schrödinger (II-1)

est de trouver la solution $|\psi(t)\rangle$ correspondant à la condition initiale $|\psi(t_0)\rangle$, on peut donc imaginer un opérateur linéaire, soit $U(t, t_0)$, qui détermine exactement¹ cette solution en l'appliquant sur le vecteur d'état initial, par conséquent ce dernier doit vérifier [7, 13, 14, 73] :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (\text{III-18})$$

Il est clair, d'après la formule ci-dessus, que le rôle de cet opérateur est de déterminer l'évolution de l'état $|\psi(t_0)\rangle$ à tout l'instant t , pour cette raison il est dit *opérateur d'évolution*. En injectant (III-18) dans l'équation de Schrödinger (II-1), on tire l'équation à laquelle obéit ce dernier, soit :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0) \quad (\text{III-19})$$

avec la condition initiale :

$$U(t_0, t_0) = 1 \quad (\text{III-20})$$

Ainsi, on a obtenu une équation équivalente à l'équation de Schrödinger qui revient à déterminer l'opérateur d'évolution et, par conséquent, la solution $|\psi(t)\rangle$ en utilisant (III-18). On note que l'équation (II-19) présente le même degré de difficulté que l'équation de Schrödinger, mais elle présente plus d'avantage lors de l'utilisation des méthodes d'approximation, comme on va le voir dans les paragraphes suivants.

La description précédente de la mécanique quantique en termes des solutions de l'équation de Schrödinger dépendant du temps constitue ce qu'on appelle *représentation de Schrödinger*. En réalité, elle n'est pas la seule représentation possible. En fait, il n'est pas toujours nécessaire de trouver la solution de l'équation de Schrödinger $|\psi(t)\rangle$ qui contient souvent trop d'information par rapport aux questions que l'on se pose et alors, l'intégration explicite de l'équation (II-1), ou (III-19), nécessite un effort inutile et excessif [13]. Bien sur, si on veut se réserver la possibilité de calculer les valeurs moyennes de *toutes* les observables, c'est $|\psi(t)\rangle$ qu'il convient de trouver. Cette dernière situation n'est pas la plus fréquente en pratique : on est le plus souvent intéressé par l'obtention des valeurs moyennes à l'instant t de *certaines* observables et non pas de toutes, ou de trouver les équations du mouvement pour ces observables elles-mêmes [7, 13]. Pour faire, en effectue ce qu'on appelle *changement de représentation* à l'aide de certains opérateurs unitaires qui conservent toutes

¹ Cette assertion n'est vraie que pour les systèmes isolés de toute intervention extérieure [7].

les prévisions faites dans le cadre de la représentation de Schrödinger. Parmi ces représentations on a par exemple : la *représentation de Heisenberg* et la *représentation interaction*¹. Ces représentations sont strictement équivalentes, mais leur utilité réside dans le fait que certaines propriétés quantiques sont plus immédiatement apparentes dans l'une que dans l'autre [7] ; par exemple l'analogie formelle entre les théories classique et quantique est particulièrement frappantes dans la représentation de Heisenberg.

En appliquant des transformations unitaires sur un système dépendant du temps on peut le rendre indépendant du temps, à condition de trouver de telles opérateurs unitaires. Une étude d'une classe d'hamiltonien non linéaires dépendants du temps à un seul degré de liberté et faite par [59], dans laquelle, ces systèmes sont transformés en des systèmes indépendants du temps, à des facteurs dépendants du temps près, à l'aide de quelques transformations appropriées.

Parmi les méthodes les plus importantes pour la résolution exacte de l'équation de Schrödinger dépendant du temps on a aussi la méthode *des invariants* [31, 32] qui consiste à trouver une relation entre les vecteurs propres de l'invariants² du système et la solution de l'équation de Schrödinger. Cette méthode a permis la résolution de plusieurs systèmes dépendants du temps au moins sur le plan formelle.

2) *La nécessité des méthodes approximatives :*

Toutes ces méthodes se ressemblent dans le fait qu'elles sont soit formelles soit elles ne sont applicables que pour des cas limités [15, 18, 59]. Pour cette raison, on fait appel à des méthodes d'approximation. Bien qu'elles ne donnent pas des solutions analytiques, ces dernières sont généralement très puissantes et applicables à de nombreux systèmes physiques, selon la méthode, où elles offrent des résultats à un ordre de précision élevé. Ces méthodes sont surtout utilisées dans les domaines de la physique appliquée ; tels que la physique du solide [71], physique des plasmas, l'information quantique [16, 70, 80]...etc. Entre autres, on cite :

1. **La théorie des perturbations dépendant du temps :**

Revenons à l'équation (III-19), cette dernière peut s'écrire, en prenant compte de la condition (III-20), sous la forme intégrale suivante [8] :

¹ Parfois elle est dite : représentation intermédiaire [7]. Cette dernière sera utilisée vers la fin de ce travail.

² Ou constantes du mouvement qui constituent ce qu'on appelle en mathématique des intégrales premières [7, 33, 59].

$$U(t, t_0) = 1 - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt' \quad (\text{III-21})$$

Prenons le cas d'un système où l'hamiltonien est sous la forme suivante :

$$H(t) = H_0(t) + V(t) \quad (\text{III-22})$$

où $H_0(t)$ est un hamiltonien d'une équation de Schrödinger que l'on sait intégrer exactement et $V(t)$ une fonction quelconque.

On montre que la solution de l'équation (III-21) est donnée par la série suivante [8] :

$$U(t, t_0) = U^{(0)}(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t, t_0) \quad (\text{III-23})$$

où $U^{(0)}(t, t_0)$ vérifie l'équation suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^{(0)}(t, t_0) = H_0(t) U^{(0)}(t, t_0) \quad (\text{III-24})$$

avec la condition initiale :

$$U^{(0)}(t_0, t_0) = 1 \quad (\text{III-25})$$

et les $U^{(n)}(t, t_0)$, $\forall n \geq 1$ sont données par :

$$U^{(n)}(t, t_0) = (i\hbar)^{-n} \int_{t > \tau_n > \tau_{n-1} > \dots > \tau_1 > t_0} d\tau_n d\tau_{n-1} \dots d\tau_1 U^{(0)}(t, \tau_n) V(\tau_n) U^{(0)}(\tau_n, \tau_{n-1}) V(\tau_{n-1}) \dots U^{(0)}(\tau_2, \tau_1) V(\tau_1) U^{(0)}(\tau_1, t_0) \quad (\text{III-26})$$

La théorie des perturbations s'applique en générale aux cas où $H_0(t)$ est indépendant du temps et la où la partie dépendant du temps $V(t)$ est petite par rapport à H_0 et peut être considérée comme une perturbation [18], c'est-à-dire on peut toujours l'écrire sous la forme suivante [8, 15] :

$$V(t) = \varepsilon \tilde{V}(t) \quad (\text{III-27})$$

avec

$$\varepsilon \ll 1 \quad (\text{III-28})$$

et $\tilde{V}(t)$ est de l'ordre de grandeur de H_0 .

Dans ce cas, l'équation (III-24) s'intègre aisément (cf. l'exemple (III-9)). De plus, (III-23) représente le développement de l'opérateur d'évolution en série de puissances du paramètre ε .

A l'inverse de la théorie des perturbations indépendant du temps, on ne peut pas parler ici des corrections des valeurs propres car les énergie dans ce cas ne sont pas conservées [50]. Mais cette méthode permet de calculer approximativement les fonctions d'onde à partir des états stationnaires du système non perturbé [50]. De plus, elle permet de calculer les différentes probabilités de transitions entre les différents états propres de H_0 , parmi ces applications on a l'émission et l'absorption des radiations par un atome [18].

2. L'approximation soudaine :

Supposons maintenant que le système, supposé bien déterminé à l'instant t_0 , sera soumis à un champ extérieur pendant un intervalle de temps T . L'exemple type est celui d'un système atomique que l'on plonge dans un champ magnétique. On cherche à savoir la modification de l'état dynamique qui résulte de l'action de ce champ sur le système. En règle générale, les résultats obtenus dépendent de façon critique du temps T nécessaire pour effectuer cette modification de l'hamiltonien [3, 8, 18].

On appelle *approximation soudaine*, l'approximation appliquée dans le cas limite $T \rightarrow 0$, elle s'énonce comme suit [3, 8, 18, 50] : « ... A la limite où $T \rightarrow 0$, c'est-à-dire dans le cas du passage infiniment rapide, l'état dynamique du système reste inchangé ... ». C'est-à-dire l'opérateur d'évolution vérifie :

$$\lim_{T \rightarrow 0} U(T + t_0, t_0) = 1 \quad (\text{III-29})$$

Les démonstrations et les discussions de ce résultat se trouvent bien détaillés dans les références [8, 18].

3. L'approximation adiabatique :

Si maintenant, dans le type de problèmes physiques décrits ci-dessus, on considère l'autre cas extrême, celui d'une modification très lente de l'hamiltonien, c'est-à-dire $T \rightarrow \infty$. Dans ce cas, on applique l'une des méthodes les plus importantes en mécanique quantique : *l'approximation adiabatique*.

C'est à l'étude de cette approximation que l'on va consacrer le reste de ce travail.

II. Approximation adiabatique :

1) *L'approximation adiabatique avant la mécanique quantique :*

L'adjectif *adiabatique* est souvent utilisé en physique même avant la mécanique quantique ; en thermodynamique, par exemple, il qualifie l'expansion ou la compression d'un système sans perte ou gain de chaleur [48, 51]. En fait, pour un système thermodynamique, les parois qui limitent le volume de ce dernier jouent le rôle d'un champ externe, une barrière de potentiel, qui confine les molécules du système dans son volume. Supposons que le système n'est soumis qu'à des variations suffisamment *lentes* (quasi-statiques) de ses conditions externes¹ décrites par certains paramètres dépendant du temps, un tel processus est dit *adiabatique*. Dans un processus adiabatique on montre que l'entropie du système reste constante et que le processus est *réversible* [48, 51] ; en effet, si la variation des paramètres est suffisamment lente le système peut être regardé à tout instant comme étant dans un état d'équilibre correspondant aux conditions externes régnantes, c'est-à-dire le système n'aura pas assez de temps pour changer d'état² [48, 51].

En mécanique classique, l'adjectif adiabatique était de la même importance. Considérons un système mécanique animé d'un mouvement caractérisé par un paramètre $\lambda(t)$ définissant les propriétés du système lui-même ou du champ extérieur dans lequel il se trouve. Supposons que sous l'influence de certaines causes extérieures, le paramètre $\lambda(t)$ varie *lentement* avec le temps; on appelle « lente » une transformation pour laquelle $\lambda(t)$ varie peu au cours d'une période T du mouvement du système [52] :

$$T \frac{d\lambda(t)}{dt} \ll \lambda(t) \quad (\text{III-30})$$

Un tel système n'est pas fermé et son énergie $E(t)$ ne se conserve pas. Mais du fait que $\lambda(t)$ varie lentement, on peut poser que la vitesse $\dot{E}(t)$ de variation de l'énergie est proportionnelle à la vitesse $\dot{\lambda}(t)$, de variation du paramètre. Cela signifie que lorsque $\lambda(t)$ varie, l'énergie du système se comporte comme une fonction de ce dernier. Autrement dit, il existe une relation entre $E(t)$ et $\lambda(t)$ qui reste inchangée au cours du mouvement du système; cette grandeur est un exemple de ce qu'on appelle *invariant adiabatique*³ [30, 52].

¹ Les positions des parois par exemple.

² On va voir par la suite qu'on obtiendra un résultat analogue pour les systèmes quantiques !

³ L'invariant adiabatique le plus généralement utilisé en physique des plasmas, par exemple, est le moment magnétique d'une particule chargée qui est en mouvement spirale autour d'une ligne de champ magnétique [17].

A la première Conférence de Solvay (The First Solvay Conference) en 1911 [30] qui s'est préoccupée aux problèmes de l'introduction des notions quantique dans la physique, un problème trompeusement simple dans la mécanique classique a été réveillé : Considérons le pendule représenté dans la figure 7. Imaginons maintenant que la corde est tirée vers le haut, à travers un petit trou dans le plafond, ou a laissé vers le bas *lentement*, tellement lentement qu'il y a peu de changement dans la longueur du pendule pendant une période d'oscillation. La question qui se pose est de savoir qu'est-ce qui va se passer à la fréquence $\nu(t)$ d'oscillation durant ce processus ?

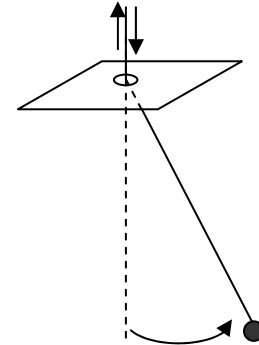


Figure 7 : Le fil du pendule est tiré vers le haut puis lâché vers le bas lentement.

Il est clair que l'énergie $E(t)$ du pendule n'est pas conservée. Selon, au moins un rapport de la conférence¹, Einstein a démontré que pour un changement très lent de la longueur de la corde le rapport $\frac{E(t)}{\nu(t)}$, qui représente l'action, est constant [18, 30]. Ainsi l'invariance des variables d'action sous un changement lent, *adiabatique*, des paramètres était une propriété très satisfaisante aux physiciens développant la mécanique quantique [3, 30], puisqu'il était bien connu que les variations lentes de l'environnement atomique, les champs électromagnétiques externes par exemple, n'induisent pas des transitions entre les états spécifiques du système atomique.

2) L'approximation adiabatique en mécanique quantique :

Les premiers travaux sur l'approximation adiabatique en mécanique quantique sont dus à M. Born et V. Fock² et qui constituent une extension des travaux d'Ehrenfest³ en mécanique classique et l'ancienne théorie des Quanta [8, 18, 28, 72]. Dès lors, aucune intention pour examiner l'approximation adiabatique n'est concernée. Mais à partir des années cinquante, il y avait un réveil d'intérêt intense dans le sujet [3]. Des applications pratiques ont été trouvées en physique des plasmas, technologie de fusion, accélérateurs des particules chargées, et même dans l'astronomie galactique [30].

¹ Abhandlungen der Deutschen Bunsen-Gesellschaft, No. 7, 1914, p, 364 [30].

² M. Born and V. Fock, "Beweis des Adiabatenatzes," Z. Phys. **51**, 165-180 (1928) [8, 18, 28, 72].

³ P. Ehrenfest, "Adiabatische Invarianten und Quantentheorie," Ann. Phys. **51**, 327-352 (1916) [8, 18, 28, 72].

Considérons un système quantique représenté par l'équation de Schrödinger (II-1) dont l'hamiltonien dépend du temps à travers un paramètre¹ $R(t)$, c'est-à-dire :

$$H(t) \equiv H(R(t)) \quad (\text{III-31})$$

avec $R(t)$ peut être lié soit au système lui-même en tant que degré interne de liberté [8, 28], tel que sa masse, sa charge, ...etc. ou à un certain champ externe [8, 28, 72] ; une particule plongée dans un champ magnétique qui tourne lentement, un champ électrique, ... etc.

Supposant maintenant que le paramètre $R(t)$ est une fonction qui dépend lentement du temps, c'est-à-dire que l'hamiltonien passe de façon *continue* d'une certaines valeurs initiales $H(R(t_0))$ à l'instant t_0 à une certaine valeur finale $H(R(t_1))$ à l'instant t_1 . Posons :

$$T = t_1 - t_0 \quad (\text{III-32})$$

qui représente le temps nécessaire pour effectuer cette modification de l'hamiltonien (cf. Ch. III. § II-2)-2), et qui vérifie $T \gg$ (modification adiabatique). Soit aussi :

$$s = \frac{t - t_0}{T} \quad (\text{III-33})$$

qui vérifie :

$$s \in [0, 1] \quad (\text{III-34})$$

et désignons par $H(s)$, qui est une fonction *continue* de s , la valeur prise par l'hamiltonien à l'instant²

$$t = t_0 + sT \quad (\text{III-35})$$

Ainsi, on a deux types de temps, ou plus exactement deux échelles de temps, à savoir [72] :

- L'échelle s ; ou l'échelle des temps *rapides* ou *microscopiques*.
- L'échelle t ; ou l'échelle des temps *lents* ou *macroscopiques*.

qui sont liés par la relation (III-35), avec T est dit le *paramètre adiabatique* [8, 72] et qui contrôle le décalage entre les deux échelles.

L'équation de Schrödinger s'écrit dans l'échelle rapide comme suit :

¹ Dans le cas général, on peut rencontrer plusieurs paramètres $X(t), Y(t), Z(t), \dots$

² On va omettre le paramètre R pour des raisons de simplification !

$$\frac{i\hbar}{T} \frac{\partial}{\partial s} |\psi(s)\rangle = H(s) |\psi(s)\rangle \quad (\text{III-36})$$

Ceci posé, l'évolution du système de l'instant t_0 à l'instant t_1 ne dépend plus que du paramètre T qui mesure la rapidité avec laquelle s'effectue le passage de $H(R(t_0)) \equiv H(0)$ à $H(R(t_1)) \equiv H(1)$.

La question qui se pose maintenant est de savoir quelle forme va prendre la fonction d'onde lorsque le paramètre adiabatique est très grand $T \gg ?$

Pour répondre à cette question, on revient à la théorie des perturbations décrite précédemment ; on montre que lorsque la perturbation $V(t)$ est assez lente, la probabilité de transition du système d'un état à un autre tend vers zéro [3, 8, 18, 50].

La généralisation de cet important résultat pour un système dépendant du temps dans le cas général constitue *le théorème adiabatique*¹ sur lequel repose toute l'approximation adiabatique.

3) *Le théorème adiabatique dans le cas discret :*

C'est l'un des plus anciens et importants théorèmes en mécanique quantique [8, 75], et qui est largement appliqué soit en physique théorique ou expérimentale [19]. Il s'agit d'une propriété des états du *spectre discret*² de l'hamiltonien d'un système subissant une évolution adiabatique [3, 8, 72].

L'opérateur d'évolution s'écrit dans l'échelle microscopique comme suit :

$$U(t, t_0) = U_T(s) \quad (\text{III-37})$$

Le but de l'approximation adiabatique est essentiellement de déterminer l'opérateur d'évolution $U(t_1, t_0)$, c'est-à-dire $U_T(1)$, et d'examiner sa dépendance en T .

Désignons par $E_k(s)$, $k \in I$ la suite des valeurs propres constituant le spectre de $H(s)$ (cf. formule (II-11)), supposé entièrement discret, et par $P_k(s)$, $k \in I$ les projecteurs sur leurs sous-espaces respectifs³ et qui sont définis par (II-95). Ce sont par hypothèse des fonctions *continues* de s . On suppose, en outre, que [3, 8] :

¹ On lui donne aussi le nom de *théorème d'Ehrenfest* [8, 18].

² La généralisation pour le spectre continu sera considérée ultérieurement.

³ Comme on s'intéresse aux cas non dégénérés, ces sous-espaces ne contiennent qu'un seul état.

- Les valeurs propres restent *distinctes* les unes des autres pendant toute la période de transition¹ :

$$\forall s / 0 \leq s \leq 1 : E_k(s) \neq E_l(s), \quad \forall l \text{ et } k \quad (\text{III-38})$$

- Les dérivées $\frac{dP_k(s)}{ds}$ et $\frac{d^2P_k(s)}{ds^2}$ sont *bien définies* et *continues* dans tout cet intervalle, mises à part d'éventuelle discontinuités de première espèce.

1. L'énoncé du théorème adiabatique :

A la limite où $T \rightarrow \infty$ c'est-à-dire dans le cas du passage infiniment lent ou passage adiabatique, le théorème adiabatique stipule que [8, 42, 50, 64] : « si le système se trouve à l'instant initial dans un état propre de $H(0)$, il passe au temps t_1 , sous les conditions précisées ci-dessus, dans l'état propre de $H(1)$ qui s'en déduit par continuité ».

Ainsi, le résultat ci-dessus est équivalent à dire que le nombre quantique est un *invariant adiabatique* [5], ce qui constitue l'analogie de l'invariance adiabatique de l'action en mécanique classique (cf. § précédent). En effet, si on prépare le système quantique dans l'un des états propres de l'hamiltonien à l'instant t_0 , le système à un instant ultérieur reste dans le même état propre mis à l'instant considéré à un *facteur de phase près*² [3, 5, 8, 20, 34, 64], alors que sa valeur propre évolue continûment [75] ; les vecteurs propres constituent donc de bonnes approximations de la solution exacte pour un système adiabatique [20]. Ce résultat est dû au fait que bien que la modification adiabatique puisse être considérable, elle prend lieu dans un temps assez long pour que la transition entre les différents niveaux d'énergie soit négligeable³ [28].

Pour illustrer le théorème adiabatique, prenons l'exemple représenté dans la figure 8 ci-dessus [18] : la figure (a) représente une particule dans l'état fondamental d'un puits de potentiel infini de largeur a , dans la figure (b) on déplace le mur à droite très lentement jusqu'à ce que la largeur du puits devienne $2a$; selon le théorème adiabatique, la particule passe de son état initial à l'état fondamental correspondant au puits formé à l'instant qui vient juste après, et ainsi de suite, à la fin du processus on trouve la particule dans l'état fondamental du puits final. Par contre, si on refait le même processus mais cette fois de

¹ C'est-à-dire que les valeurs propres restent non dégénérées à tout instant s .

² Voir le chapitre suivant.

³ Cette idée est équivalente à celle rencontrée en thermodynamique (cf. § précédent).

manière brusque, la particule est laissée momentanément dans son état initial tandis que la largeur du puits est devenue $2a$, ce qui implique une modification dans l'état de la particule.

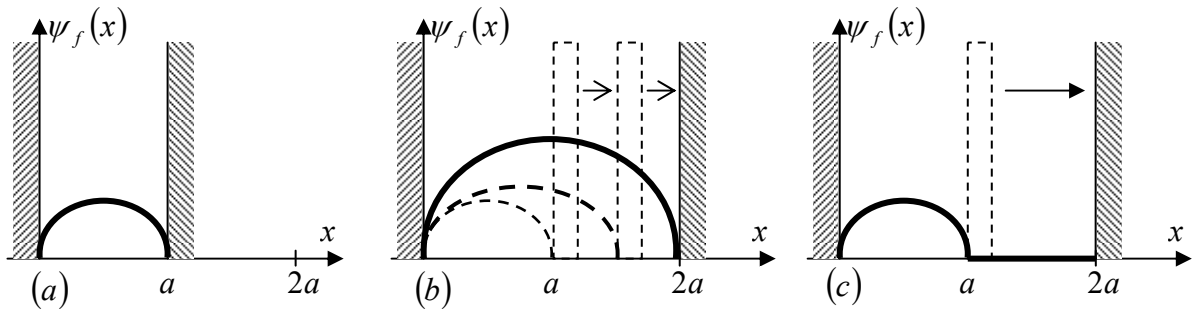


Figure 8 : Particule dans un puits infini de potentiel dans l'un des deux murs est mobile.

2. Démonstration du théorème adiabatique :

a) Introduction :

Le théorème adiabatique a connu plusieurs démonstrations dans la littérature [1] ; la première démonstration dans le cadre de la mécanique quantique moderne est dû à M. Born et V. Fock¹ [8, 18, 72]. En 1961, L. Landau a donné une démonstration du théorème dans le cadre de la limite quasi-classique [50] ; en effet, La variation lente de la perturbation signifie que la durée T du processus de transition entre deux états différents est très longue, et donc le changement de l'action pendant cette période, donnée par l'intégrale :

$$S(T) = - \int_{t_0}^{t_0+T} E(t) dt \quad (\text{III-39})$$

est grande, dans ce sens le problème est quasi-classique. Comme on l'a mentionné précédemment, une autre démonstration est donnée par [18, 50] dans le cas où la modification adiabatique est une perturbation (cf. Ch. III. § I-2)-1). Parmi les démonstrations les plus récentes on a la démonstration de Reichardt² et celle A. Ambainis et O. Regev [1] qui trouvent leurs application surtout en information quantique.

b) Démonstration type du théorème adiabatique :

La méthode que l'on va décrire dans ce paragraphe, qui est l'une des plus importantes démonstrations du théorème adiabatique, est traitée par A. Messiah [8] et par A. Galindo et P.

¹ M. Born and V. Fock, "Beweis des Adiabatenatzes," Z. Phys. 51, 165-180 (1928) [8, 18, 28, 72].

² B. Reichardt. The quantum adiabatic optimization algorithm and local minima. In *Proc. 36th STOC*, pages 502–510, 2004 [1].

Pascual [3] et qui est due à T. Kato¹ [3, 37, 42]. On va donner ci-dessous les grandes lignes de cette démonstration qui sera fournie ultérieurement avec plus de détails lors de la démonstration du théorème adiabatique généralisé dans le cas d'un spectre continu.

Pour établir le théorème adiabatique précédent, on le met souvent sous une forme plus pratique [7]. En fait, en supposant les conditions de continuité, de non croisement et de dérivabilité indiquées plus haut vérifiées, Le théorème adiabatique stipule que l'opérateur d'évolution $U_T(s)$ possède la propriété asymptotique suivante [3, 7, 42, 37, 72] :

$$\forall k \in I : \lim_{T \rightarrow \infty} U_T(s) P_k(0) = P_k(s) \lim_{T \rightarrow \infty} U_T(s) \quad (\text{III-40})$$

En effet, si $|\varphi_k(0)\rangle$ est le vecteur propre de $H(0)$ représentant l'état du système à l'instant $s = 0$, on a (cf. formule (II-95)) :

$$P_k(0)|\varphi_k(0)\rangle = |\varphi_k(0)\rangle$$

et la propriété (III-40) donne :

$$\lim_{T \rightarrow \infty} U_T(s)|\varphi_k(0)\rangle = P_k(s) \lim_{T \rightarrow \infty} U_T(s)|\varphi_k(0)\rangle$$

Le vecteur $U_T(s)|\varphi_k(0)\rangle$ tend donc bien vers un vecteur du sous-espace de $E_k(s)$ lorsque $T \rightarrow \infty$.

En prenant compte de (III-19) et (III-33), l'opérateur d'évolution $U_T(s)$ est solution de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial U_T(s)}{\partial s} = T H(s) U_T(s) \quad (\text{III-41})$$

avec la condition initiale :

$$U_T(0) = 1 \quad (\text{III-42})$$

En utilisant la relation de fermeture (II-101) et la définition (II-95) ainsi que l'équation aux valeurs propres (II-11), l'hamiltonien $H(s)$ s'écrit :

$$H(s) = \sum_{k \in I} E_k(s) P_k(s) \quad (\text{III-43})$$

¹ T. Kato. *On the adiabatic theorem of quantum mechanics*, Phys. Soc. Jap. **5**, 435–439 (1950) [3, 8, 40, 72].

Parmi les méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dont on a cité (cf. Ch. II. §I-1), on a l'utilisation des transformations unitaires pour simplifier cette dernière. De plus, comme on l'a indiqué précédemment, l'intégration rigoureuse de l'équation de Schrödinger n'est plus possible parce que les axes propres¹ de l'hamiltonien $H(s)$ sont animés d'un certain mouvement de rotation dans l'espace de Hilbert. Alors en utilisant une transformation unitaire appropriée, l'auteur va d'abord essayer d'éliminer aussi complètement que possible ce mouvement de rotation des axes. La représentation obtenue est dite *des axes tournants* [8].

Soit $A(s)$ cet opérateur *unitaire* possédant la propriété :

$$P_k(s) = A(s)P_k(0)A^+(s), \quad \forall k \in I \quad (\text{III-44})$$

Dans la transformation unitaire $A(s)$ tout vecteur propre de $H(0)$ se transforme en l'un des vecteurs propres de $H(s)$ qui s'en déduisent par continuité [3].

$A(s)$ est défini sans ambiguïté par la condition initiale :

$$A(0) = 1 \quad (\text{III-45})$$

et par l'équation différentielle :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} A(s) = K(s)A(s) \quad (\text{III-46})$$

Le générateur $K(s)$ [3] est un opérateur hermitien approprié qui obéit aux relations de commutation² :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} P_k(s) = [K(s), P_k(s)] \quad (\text{III-47})$$

Les relations ci-dessus *ne définissent pas* $K(s)$ *de façon unique*. En effet, on vérifie que tout opérateur $K'(s)$ tel que :

$$K'(s) = K(s) + \sum_k P_k(s) f_k(s) P_k(s) \quad (\text{III-48})$$

obéissent à (III-47), où les $f_k(s)$ sont des opérateurs quelconques dépendants de s .

¹ En effet, comme les vecteurs propres de l'hamiltonien forment une base à tout instant, on peut assimiler leurs variations au cours du temps par un mouvement de rotation dans l'espace de Hilbert.

² Ces relations sont nécessaires et suffisantes pour que les conditions (III-44) soient satisfaites.

Pour une raison qui *deviendra claire ultérieurement*, l'auteur lève l'arbitraire en imposant la condition supplémentaire¹ :

$$P_k(s)K(s)P_k(s) = 0, \quad k \in I \quad (\text{III-49})$$

Qui est équivalente à la condition suivante sur le choix des opérateurs $f_k(s)$:

$$P_l(s)f_l(s)P_l(s) = 0 \quad (\text{III-50})$$

En multipliant la formule (III-47) par $P_k(s)$ et en utilisant la propriété (II-93) et la relation de fermeture (II-101) après avoir sommé sur tout le spectre, on trouve :

$$K(s) = \sum_k i\hbar \frac{\partial}{\partial s} P_k(s)P_k(s) \quad (\text{III-51})$$

En effectuant la transformation unitaire $A^+(s)$ sur les vecteurs et les opérateurs de la représentation de Schrödinger, on passe à la représentation des axes tournants. L'hamiltonien $H(s)$, compte tenu des équations (III-43) et (III-44), se transforme notamment en :

$$H^{(A)}(s) = A^+(s)H(s)A(s) = \sum_k E_k(s)P_k(0) \quad (\text{III-52})$$

De même $K(s)$ se transforme en :

$$K^{(A)}(s) = A^+(s)K(s)A(s) \quad (\text{III-53})$$

L'opérateur d'évolution de cette nouvelle représentation défini par :

$$U^{(A)}(s) = A^+(s)U(s) \quad (\text{III-54})$$

vérifie, d'après (III-41) et les définitions ci-dessus l'équation suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U^{(A)}(s) = [T H^{(A)}(s) - K^{(A)}(s)]U^{(A)}(s) \quad (\text{III-55})$$

de plus, d'après (III-42), on a :

$$U^{(A)}(0) = 1 \quad (\text{III-56})$$

L'équation (III-55) s'intègre sans difficulté si on peut *négliger* $K^{(A)}$ à côté de $T H^{(A)}$. Désignons par $\Phi_T(s)$ la solution de l'équation de Schrödinger ainsi formée, soit :

¹ Cette condition est analogue au choix d'une jauge approprié en électrodynamique.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \Phi_T(s) = T H^{(A)}(s) \Phi_T(s) \quad (\text{III-57})$$

$$\Phi_T(0) = 1 \quad (\text{III-58})$$

On trouve :

$$\Phi_T(s) = \sum_{k \in I} e^{\frac{-iT\phi_k(s)}{\hbar}} P_k(0) \quad (\text{III-59})$$

avec

$$\phi_k(s) = \int_0^s E_k(s') ds' \quad (\text{III-60})$$

Si le vecteur d'état du système à l'instant t_0 est un vecteur propre de $H(0)$ correspondant à la valeur propre $E_k(0)$, son vecteur d'état à l'instant t_1 n'en diffère donc que par le facteur de phase $e^{\frac{-iT\phi_k(s)}{\hbar}}$.

D'après (III-52) et (III-53), on constate que $H^{(A)}(s)$ et $K^{(A)}(s)$ sont indépendants de T . On s'attend donc à ce qu'à la limite $T \rightarrow \infty$ l'effet de $K^{(A)}(s)$ au second membre de l'équation (III-55) soit complètement masqué par celui de $T H^{(A)}(s)$ et que $U^{(A)}(s)$ tende vers $\Phi_T(s)$. Comme on va le voir, cette propriété est bien vérifiée et donne, d'après (III-54), le résultat suivant :

$$U_T(s) \underset{T \rightarrow \infty}{\approx} A(s) \Phi_T(s) \quad (\text{III-61})$$

Pour le montrer, l'auteur fait une nouvelle transformation unitaire en posant :

$$W(s) = \Phi_T^+(s) U^{(A)}(s) = \Phi_T^+(s) A^+(s) U_T(s) \quad (\text{III-62})$$

qui vérifie d'après (III-55) et (III-57) :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} W(s) = -\bar{K}(s) W(s) \quad (\text{III-63})$$

avec

$$\bar{K}(s) = \Phi^+(s) K^{(A)}(s) \Phi(s) \quad (\text{III-64})$$

Sous sa forme intégrale, l'équation (III-63) s'écrit :

$$W(s) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^s \bar{K}(s') W(s') ds' \quad (\text{III-65})$$

Pour évaluer cette intégrale, l'auteur montre que le noyau $\bar{K}(s)$ est une somme de fonctions oscillantes dont les fréquences augmentent indéfiniment avec T et qu'en conséquence l'intégrale du second membre de l'équation de Volterra [68] (III-65) tend vers zéro lorsque $T \rightarrow \infty$.

En utilisant la relation de fermeture (II-101), $\bar{K}(s)$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \bar{K}(s) &= \sum_l \sum_k P_l(0) \bar{K}(s) P_k(0) \\ &= \sum_l \sum_k \bar{K}_{lk}(s) \end{aligned} \quad (\text{III-66})$$

avec

$$\bar{K}_{lk}(s) = P_l(0) \bar{K}(s) P_k(0) \quad (\text{III-67})$$

ce qui donne d'après (III-64), (III-59) et (III-44) :

$$K_{lk}^{(A)}(s) = A^+(s) P_l(s) K(s) P_k(s) A(s) \quad (\text{III-68})$$

Suivant la condition (III-49), les $K_{ll}^{(A)}$, $l \in I$ sont tous nuls, donc les parties diagonales \bar{K}_{ll} de la décomposition de \bar{K} sont toutes rigoureusement nulles :

$$\bar{K}_{ll}(s) = 0 \quad (\text{III-69})$$

Quant aux parties non diagonales \bar{K}_{lk} , $l \neq k$ elles contiennent, d'après (III-60), le facteur oscillant :

$$e^{\frac{iT(\phi_l(s) - \phi_k(s))}{\hbar}} = \exp \left[iT \hbar^{-1} \int_0^s [E_l(s') - E_k(s')] ds' \right]$$

En dérivant la phase de l'exponentielle par rapport à s , on obtient la fréquence circulaire des oscillations soit :

$$T \hbar^{-1} [E_l(s) - E_k(s)]$$

Suivant l'hypothèse (III-38) la différence $E_l(s) - E_k(s)$ n'est jamais nulle, donc, d'après l'auteur, la fréquence augmente proportionnellement à T lorsque $T \rightarrow \infty$.

En intégrant par partie l'intégrale du second membre de l'équation (III-65) on trouve :

$$W(s) = 1 + \frac{i}{\hbar} F(s)W(s) - \frac{i}{\hbar} \int_0^s F(s') \frac{\partial W(s')}{\partial s'} ds' \quad (\text{III-70})$$

avec

$$F(s) = \int_0^s \bar{K}(s') ds' \quad (\text{III-71})$$

Suivant la propriété (III-69), les éléments diagonaux de cet opérateur sont tous nuls :

$$F_{ll}(s) = 0 \quad (\text{III-72})$$

quant aux éléments non diagonaux, ils ont pour expression :

$$F_{lk}(s) = \int_0^s e^{\frac{iT}{\hbar}(\phi_l(s') - \phi_k(s'))} K_{lk}^{(A)}(s') ds', \quad l \neq k \quad (\text{III-73})$$

En intégrant par partie, on trouve :

$$F_{lk}(s) = \frac{\hbar}{iT} \left[e^{\frac{iT}{\hbar}(\phi_l(s') - \phi_k(s'))} \frac{K_{lk}^{(A)}(s')}{E_l(s') - E_k(s')} \right]_0^s - \int_0^s e^{\frac{iT}{\hbar}(\phi_l(s') - \phi_k(s'))} \frac{\partial}{\partial s'} \left[\frac{K_{lk}^{(A)}(s')}{E_l(s') - E_k(s')} \right] ds' \quad (\text{III-74})$$

Il est clair que l'expression entre crochets reste finie si $K_{lk}^{(A)}$ et les dérivées de $K_{lk}^{(A)}$, $E_l(s)$ et $E_k(s)$ par rapport à s restent finis, donc F_{lk} tend asymptotiquement vers zéro comme $\frac{1}{T}$. En conclusion, lorsque $T \rightarrow \infty$, on a :

$$F(s) = O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (\text{III-75})$$

Si l'on tient compte de l'équation différentielle (III-63), les deux derniers termes de l'expression (III-70) contiennent en facteur l'opérateur F et tendent donc vers zéro comme $\frac{1}{T}$ lorsque $T \rightarrow \infty$. Par conséquent, on trouve :

$$W(s) = 1 + O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (\text{III-76})$$

En reportant à la définition (III-62) de W , on tire le résultat annoncé :

$$U_T(s) \underset{T \rightarrow \infty}{\approx} A(s)\Phi_T(s) \left[1 + O\left(\frac{1}{T}\right) \right] \quad (\text{III-77})$$

Comme $\Phi_T(s)$ commute avec les projecteurs $P_l(0)$ (cf. formule (III-59)), et comme l'opérateur unitaire $A(s)$ possède la propriété (III-44), on a

$$A(s)\Phi_T(s)P_l(0) = P_l(s)A(s)\Phi_T(s) \quad (\text{III-78})$$

L'expression asymptotique (III-61) de $U_T(s)$ qu'on vient d'obtenir vérifie donc bien les relations (III-40). CQFD.

c) Validité de l'approximation adiabatique :

Si on se tient au premier ordre, l'approximation adiabatique consiste, d'après les résultats ci-dessus, à remplacer l'opérateur d'évolution $U_T(1)$ par sa forme asymptotique :

$$U(t_1, t_0) = U_T(1) \approx A(1)\Phi_T(1) \quad (\text{III-79})$$

Soit $|\varphi_n(0)\rangle$ le vecteur normalisé représentant l'état du système à l'instant t_0 . Une mesure de l'erreur que comporte cette approximation est donnée par la probabilité η de trouver le système à l'instant t_1 dans un état différent de $A(1)\Phi_T(1)|\varphi_n(0)\rangle$, on montre que [8] :

$$\eta = \langle \varphi_n(0) | [F(1)]^2 | \varphi_n(0) \rangle - [\langle \varphi_n(0) | F(1) | \varphi_n(0) \rangle]^2 = \left(\frac{\Delta F}{\hbar} \right)^2 \quad (\text{III-80})$$

où ΔF désigne l'écart quadratique de l'observable F dans l'état $|\varphi_n(0)\rangle$. La condition $\eta \ll 1$, condition de validité de l'approximation adiabatique [8], s'écrit donc :

$$\Delta F \ll \hbar \quad (\text{III-81})$$

Mais sous cette forme très générale, ce résultat est beaucoup moins utile, car l'observable F qui intervient ici est en effet difficile à construire ; pour cette raison, on remplace toujours cette condition par la condition équivalente suivante [8, 19, 28] :

$$\left| \frac{\hbar \langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_n(t) \rangle}{E_k(t) - E_n(t)} \right| \ll 1, \quad \forall k \neq n, t \in [t_0, t_1] \quad (\text{III-82})$$

Ainsi, l'ordre de grandeur de l'erreur commise dans l'approximation adiabatique ne dépend que des quantités $\langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_n(t) \rangle$ qui représentent les vitesses de rotation des axes propres de l'hamiltonien et les fréquences de Bohr correspondant aux transitions $n \rightarrow k$ représentées par les différences $E_k(t) - E_n(t)$ [72].

4) Généralisation du théorème adiabatique pour le spectre continu :

Dans le reste de ce chapitre on va voir comment on peut généraliser le théorème adiabatique précédent dans le cas où le spectre est continu. De cette généralisation on va aboutir à de très importants résultats qui forment l'objet de ce travail (voir le chapitre suivant). Mais avant, on va d'abord voir quelles sont les difficultés qui empêchent de telle généralisation ainsi qu'un bref rappel sur les différentes généralisations qui ont précédé cette dernière et qui constituent des étapes indispensables avant de l'établir. On va donner ensuite un aperçu sur les travaux récents faits à ce sujet et qui sont dus essentiellement à J. E. Avron et A. Elgart [40]. Finalement, en suivant la même approche comparative considérée depuis le début de ce travail, on va donner une démonstration rigoureuse, simple et directe de cette généralisation et qui repose sur les mêmes idées que celle suivie ci-dessus dans le cas du spectre discret.

1. Les difficultés de la généralisation :

On va citer ci-dessous les différentes difficultés liées à la nature du spectre continu et qui empêchent d'appliquer le théorème adiabatique sous sa forme donnée précédemment dans le cas du spectre continu.

a) Le rôle du gap :

D'après la relation (III-82) on voit que la validité du théorème adiabatique précédent dépend des différences $E_k(t) - E_n(t)$, en effet, pour une particule qui se trouve initialement dans l'état $|\varphi_n(0)\rangle$ plus ces différences, ou plutôt la quantité¹ (fig. 9) :

$$g_n = \min_{k \in I} [E_k(t) - E_n(t)] \tag{ III-83 }$$

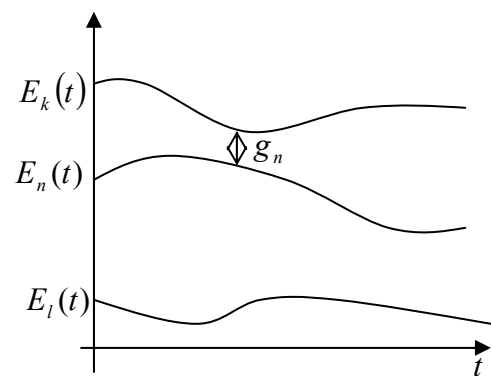


Figure 9 : La variation de la différence entre les niveaux d'énergie en fonction du temps.

¹ Il est clair que si g_n est suffisamment grand, les autres différences le sont aussi.

sont grandes plus le premier membre de l'inégalité (III-82) est petit. De plus, on voit, d'après les relations (III-74), que si le *gap* g_n est assez petit alors toute la démonstration du théorème adiabatique ne sera pas exacte, en outre, la condition arbitraire (III-49) sur laquelle repose cette dernière n'aura aucun sens. Dans la démonstration de T. Kato¹ l'existence du *gap* est nécessaire pour qu'il obtienne des solutions bornées à ces équations.

En fait, le rôle du *gap* ne se réduit pas à l'argument ci-dessus [72]; l'existence du *gap* est une condition nécessaire pour que la régularité de l'hamiltonien en tant que fonction du temps implique celle des projecteurs $P_k(t)$. La largeur du *gap* permet aussi de fixer la valeur minimale du paramètre adiabatique T qui en dépend inversement pour que l'approximation en question soit applicable [2, 38, 39, 40, 41, 70, 72]. S. Jansen *et al* [70] ont donné une estimation de la valeur minimale du *gap* nécessaire pour une valeur fixée de T .

En conclusion, on dit que le *gap* *protège* l'état du système contre les fuites vers d'autres sous-espaces [40, 41]. Ainsi, L'existence d'un *gap* entre les niveaux d'énergie est une condition nécessaire pour assurer la validité de l'approximation adiabatique [2, 19, 54, 72], une exigence qui n'est pas vérifiée dans le cas d'un spectre continu.

b) La nature de la dynamique du spectre :

La validité de l'approximation adiabatique dans le cas du spectre discret est due aussi à la périodicité et la réversibilité de la dynamique du système. Pour illustrer cet effet, reprenons l'exemple de la figure 8, on voit que le « contact² » entre la particule et la paroi mobile se répète chaque fois la particule effectue une oscillation, donc, après chaque période l'état de la particule s'adapte avec la nouvelle position de la paroi. De plus, on vérifie que si on inverse le sens du temps dans le cas de la figure (b) on revient à la position initiale de la figure (a)³. Par contre, dans le cas où le spectre est continu, le mouvement du système est infini et sa dynamique est irréversible [13], on dit qu'on est dans la situation d'avoir une jauge *non-abélienne* comme connexion [66]. Par conséquent, si on prend l'exemple de la diffusion d'une particule par un potentiel qui dépend d'une manière adiabatique du temps, après son premier contact avec le potentiel la particule se propage vers l'infini et ne sentira donc pas les modifications du potentiel au cours des instants suivants. Si maintenant on inverse le sens du

¹ T. Kato. *On the adiabatic theorem of quantum mechanics*, Phys. Soc. Jap. **5**, 435–439 (1950) [3, 8, 40, 72].

² On a utilisé cette description classique seulement pour clarifier l'idée voulue. En fait, de telles descriptions sont en contradiction avec les postulats de la mécanique quantique [14].

³ On a la même propriété en thermodynamique où il est montré que tout processus adiabatique est réversible (l'inverse n'est pas vrai) [52].

temps le potentiel revient à sa forme initiale mais la particule continue toujours à se propager vers l'infini !

c) L'invariance du nombre quantique :

Comme on l'a dit précédemment, le théorème adiabatique implique que le nombre quantique est un *invariant adiabatique* [5], en effet, au cours de l'évolution adiabatique le système qui se trouve initialement dans un état repéré par le nombre n reste toujours repéré par le même nombre malgré que son énergie a été modifiée.

Dans le cas du spectre continu c'est l'énergie elle-même qui joue le rôle du nombre quantique, cette affirmation laisse l'intention que l'état du système lui aussi doit changer.

2. Généralisations au spectre continu :

Depuis sa formulation, le théorème adiabatique a connu de différentes généralisations. Dans ce paragraphe on va citer quelques unes de ces dernières qui constituent une introduction à la généralisation pour le cas d'un spectre continu.

L'histoire du théorème adiabatique dans la mécanique quantique a débuté avec les travaux de M. Born et V. Fock (cf. Ch. III. §I-1)) qui l'ont montré pour les hamiltoniens bornés de spectres purement discrets et non dégénérés [38, 42].

En 1950 T. Kato (cf. Ch. III. §II-2)-2-a)) a généralisé ces travaux en introduisant un caractère purement *géométrique* à l'évolution adiabatique (voir le chapitre suivant) [38].

En utilisant cette idée, Kato a prolongé le domaine d'application aux hamiltoniens qui contiennent en plus du spectre discret des parties continues (fig. 1, cas (c), (d) et (e)) à condition que le système départ dans les régions discrètes [3, 38, 40, 42]. En particulier cette généralisation a été appliquée au cas d'un état discret séparé de la région continu par un gap comme le montre la figure 10, de telles situations sont souvent rencontrées en physique atomique.

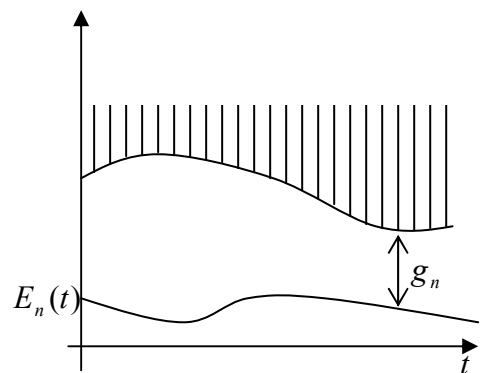


Figure 10 : Exemple d'un état discret séparé d'un continuum d'états par un gap.

A. Lenard¹, L. M. Garrido² et S. J. Sancho³ ont formellement prolongé le travail de Kato à des ordres supérieurs en $\frac{1}{T}$ [72]. En 1981, G. Nenciu⁴ montre un théorème adiabatique pour des opérateurs auto adjoints bornés et annonce une généralisation aux opérateurs non bornés. Pour des hamiltonien $H(t)$ analytiques en t , L. D. Landau et E. M. Lifshitz [42, 50] ont décrit une méthode formelle pour calculer le passage par effet tunnel hors des bandes d'énergie d'un spectre continu.

Toutes ces généralisations dépendent de l'existence du gap dans le cas du spectre discret. On va maintenant s'intéresser de la généralisation du théorème adiabatique pour le cas du spectre continu qui constitue l'objet de ce travail et auquel on va consacrer le paragraphe suivant ainsi que la deuxième partie du chapitre suivant.

3. Le théorème adiabatique sans la condition du gap :

On a cité au début de ce paragraphe l'ensemble des difficultés rencontrées lors de l'application directe du théorème adiabatique précédent pour le spectre continu. En fait, on a vu depuis le début de ce travail que le prolongement direct des notions définies initialement pour le spectre discret vers le spectre continu est généralement trompeur, et conduit à des problèmes. Pour éviter ces derniers on a vu que le spectre continu nécessite un traitement spécial qui consiste à définir les notions voulues pour le spectre continu directement. Vers la fin on cherche à donner des formes analogues aux résultats du spectre discret pour ces nouvelles notions. En réalité c'est ce qu'on va faire dans ce paragraphe dans le cas du théorème adiabatique où on va voir comment la première difficulté liée au gap (III-83) a été surmontée.

Dans un très récent papier, D. M. Tong *et al* [19] ont montré que les conditions qualitatives du gap (III-82) sont insuffisantes pour assurer la validité du théorème adiabatique [70]. De plus, la régularité des projecteurs peut être supposée vérifiée dès le début [72]. Pour l'ordre de grandeur du paramètre adiabatique, on peut toujours imaginer d'autres quantités qui peuvent jouer le rôle du gap lorsque ce dernier n'existe pas [38, 72]. Pour illustrer cette dernière affirmation on prend l'exemple d'un système quantique chargé à deux

¹ A. Lenard, Adiabatic invariants to all orders, Ann. Phys. **6**, 261-276 (1959) [42, 72].

² L. M. Garrido, Generalized adiabatic in variance, J. Math. Phys. **5**, 355-362 (1964) [42, 72, 38].

³ S. J. Sancho, m-th order adiabatic in variance for quantum systems, Proc. Phys. Soc. Lond. **89**, 1-5 (1966) [42].

⁴ G. Nenciu, Adiabatic theorem and spectral concentration. Commun. Math. Phys. **82**, 121-135(1981) [42].

niveaux, initialement dans l'état fondamental, et qui est tourné lentement¹. Le théorème adiabatique échouerait si le nombre de photons produits par la rotation lente ne tend pas à zéro dans la limite adiabatique. A. Ori [40] montre que le nombre de photons rayonnés est de l'ordre de T^{-2} , il tend vers zéro dans la limite adiabatique. On voit dans cet exemple que, dans le cadre de l'électrodynamique quantique, la condition du gap est remplacée par une condition sur le nombre de photons rayonnés.

Avant d'y arriver aux cas où le gap est complètement absent, on va d'abord commencer par des cas plus simples :

a) Cas d'un état discret séparé du spectre continu par un gap :

Considérons l'exemple suivant [39] : supposons que l'hamiltonien possède une valeur propre séparée du reste du spectre qui est supposé continu par un gap (fig. 10), la perte vers le spectre continu est de l'ordre de $\frac{1}{T}$. On s'attend qu'une fois une partie du système passe dans le spectre continu elle doit se propager vers l'infini (cf. Ch. I. §II-3)). Si c'est le cas, après un temps T il est difficile de comprendre comment la fonction d'onde se reconstruit de sorte que la partie qui se trouve dans le spectre continu est aussi petite que n'importe quelle puissance de $\frac{1}{T}$. Comme le montre J. E. Avron et A. Elgart, cette partie bien qu'elle soit dans le spectre continu elle est toujours liée à la valeur propre instantanée en question et disparaît après T ; elle ne se propage pas. Par conséquent, c'est cet effet décrit ci-dessus qui *protège* l'état du système est non pas le gap.

b) Cas de croisement de deux valeurs propres :

Considérons maintenant le cas où la condition (III-38) n'est pas vérifiée, c'est-à-dire on a (fig. 11) :

$$\exists n, l \in I; \exists s_0 \in [0, 1] / E_n(s_0) = E_l(s_0) \quad (\text{III-84})$$

Dans ce cas on a, d'après sa définition (III-83), le gap g_n est égal à zéro. Dans leur papier, M. Born et V. Fock [38, 40] ont traité le cas d'un croisement linéaire de valeurs propres. Ils montraient que la condition du gap sera remplacée par la différence entre les pentes des deux valeurs propres à l'instant du croisement et qui est donnée par :

¹ Il n'existe pas de gap pour un tel système car il sera couplé à un champ rayonnant [39, 40, 41].

$$\alpha = \dot{E}_n(s_0) - \dot{E}_l(s_0) \quad (\text{III-85})$$

Cette différence détermine un nouveau paramètre adiabatique donné par $\sqrt{\frac{1}{\alpha}}$ car le paramètre original qui est liée à $\frac{1}{g_n}$ diverge dans ce cas.

T. Kato [38, 72] a considéré aussi une telle situation, mais au lieu de mettre des hypothèses sur la manière avec laquelle procèdent les valeurs propres au point de croisement, il suppose que les projecteurs $P_k(s)$ doivent être continu à ce point et qu'il y a plusieurs croisements. Dans un récent papier, G. Hagedorn¹ étudia le théorème adiabatique dans ce cas et montre que l'erreur est toujours de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{T}}$ pour les croisements linéaires.

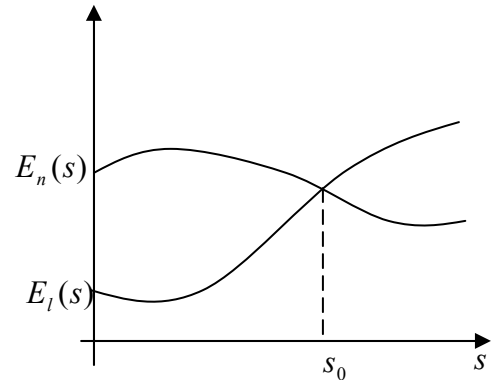


Figure 11 : Exemple de deux niveaux d'énergies qui se croisent à un instant donné.

c) Cas général :

La généralisation du théorème adiabatique vers les systèmes qui ne vérifient pas la condition du gap est très récente et est due essentiellement aux travaux de F. Bornemann² et à Joseph E. Avron et Alexander Elgart [38, 39, 40]. Leur résultat consiste à remplacer la condition du gap par une condition de différentiabilité [38, 72] des projecteurs. Le théorème adiabatique généralisé de Avron et Elgart s'énonce comme suit³ [38, 40, 41, 72] : « soit $P(s)$ une projection spectrale régulière⁴ d'ordre finie correspondant à un hamiltonien $H(s)$ borné et régulier. Donc, l'évolution de l'état initial $\psi_T(0) \in \text{gamme}P(0)$ est de sorte que dans la limite adiabatique $\psi_T(s) \in \text{gamme}P(s)$ pour toute valeur de s ». Dans une version plus forte de cet énoncé et qui est due aux mêmes auteurs la condition de régularité a été remplacée par

¹ G. Hagedorn, Adiabatic Expansions near Eigenvalue Crossings. Ann. Phys. **196**, 278-295 1989 [39].
² F. Bornemann, Homogenization in Time of Singularly Perturbed Mechanical Systems, Lecture Notes in Mathematics **1687** (Springer, Heidelberg, 1998) [72].
³ En fait, cet énoncé est une combinaison des différents énoncés des références citées. Pour ne pas perdre le vraie sens du théorème voici la version anglaise du quelle il a été traduit : « Suppose that $P(s)$ is smooth finite rank spectral projection, for the bounded, smooth Hamiltonian $H(s)$. Then, the evolution of the initial state $\psi_T(0) \in \text{range}P(0)$ is such that in the adiabatic limit $\psi_T(s) \in \text{range}P(s)$ for all s ».
⁴ Par l'adjectif « régulière » on entend un opérateur dont la dérivée par rapport au paramètre de temps s est bornée [41].

le fait que la projection spectrale $P(s)$ doit être, en plus, doublement différentiable par morceaux. Les différentes discussions et démonstrations de ce théorème ainsi que ses applications¹ se trouvent donner dans [38, 40, 41, 72].

Dans un papier récent, Alain Joye [54] a considéré le cas où on a un hamiltonien $H_0(t)$, supposé satisfaisant à la condition du gap, qui est perturbé par un terme de la forme $\varepsilon H_1(t)$, ici $\varepsilon \rightarrow 0$ joue le rôle du paramètre adiabatique. La perturbation est telle que l'hamiltonien total $H_0(t) + \varepsilon H_1(t)$ ne vérifie pas à la condition du gap. A. Joye montre que pour certains cas particuliers un théorème adiabatique peut être démontré dans cette situation.

4. Le théorème adiabatique généralisé pour le spectre continu :

On a vu ci-dessus comment la première difficulté a été surmontée, ce qui permet de généraliser le théorème adiabatique pour les systèmes qui ne vérifient pas la condition du gap. Néanmoins, cette généralisation est tout à fait récente et sa compréhension n'est pas encore bien développée [72]. La condition du gap est généralement associée à des stabilités spectrales, par conséquent, les situations où le gap n'existe pas conduit à des instabilités spectrales. Ainsi, il est difficile d'établir des projections spectrales régulières, qui est une condition nécessaire² pour la validité du théorème généralisé dans l'application pratique [38]. Par exemple, pour des applications à la physique atomique, où le spectre essentiel est absolument continu, les valeurs propres incluses tendent à se dissoudre aux résonances ainsi il est peu probable que la projection associée à une telle valeur propre serait continue. En fait, le théorème adiabatique généralisé, selon l'approche de Avron et Elgart, convient beaucoup plus pour les systèmes qui ne vérifient pas la condition du gap et qui ont une origine discrète. On peut citer par exemple ; l'état fondamental d'un atome dans un champ rayonnant quantifié [38], l'état fondamental pour le modèle de Dicke dans un champ magnétique tournant lentement [41] et le cas des valeurs propres discrètes à la frontière d'un spectre continu [2, 38].

De plus, parmi les importunités de l'approche de Avron et Elgart, qui repose sur l'idée de remplacer la condition du gap par la condition sur la régularité des projections spectrales, on a le fait qu'elle ne fournit aucune information sur le taux auquel la limite adiabatique est approchée [2, 38, 70]. Une situation analogue est d'ailleurs rencontrée pour les résultats de

¹ Parmi les applications on a les exemples donnés précédemment.

² En plus elle joue le rôle de la condition du gap.

Born et Fock et de Kato dans le cas de croisement des valeurs propres, la différence est que dans ce cas on peut utiliser le nouveau paramètre adiabatique $\sqrt{\frac{1}{\alpha}}$ (cf. formule (III-85)) pour assurer une telle information. Finalement, dans leur démonstration il utilisaient des projections associées à des valeurs propres nulles [38], une chose qui n'est pas permise du point de vue mathématique.

Dans le cadre de ce travail on va proposer une nouvelle approche du théorème adiabatique généralisé précédent. Cette approche consiste à donner une forme plus simple et pratique de ce dernier ainsi qu'une démonstration aussi simple, rigoureuse et directe. Le but d'une telle proposition est d'appliquer l'approximation adiabatique à des systèmes dont l'hamiltonien possède un spectre complètement continu¹, supposée non dégénéré pour des raisons de simplicité et qui vérifie un certain nombre de conditions qui seront données ultérieurement.

L'idée est complètement opposée à celle décrite ci-dessus. Dans l'approche précédente le but est de chercher à se débarrasser de la condition du gap [54] et d'essayer de limiter son rôle en la remplaçant avec d'autres propriétés telles que : la régularité² des projections spectrales, la distance à une résonance voisine dans le modèle de Dicke [41], l'échelle de temps intrinsèque³ dans le cas d'un état discret à la frontière d'un spectre continu [2], le nombre de photons rayonnés en électrodynamique quantique, ...etc. Alors, au lieu de faire tous ces remplacements, on garde la condition du gap pour le cas du spectre continu, mais ce dernier ne possède pas un gap entre les niveaux d'énergie ?

Pour résoudre ce paradoxe on doit créer ou définir une sorte de gap, *un vrai gap*, pour le spectre continu. En effet, comme on l'a vu dans les deux chapitres premiers, pour résoudre un problème lié au spectre continu on le considère comme un problème limite d'un problème discret en utilisant le processus de décomposition de l'unité de Von Neumann [7, 46] (voir figure 5), et du fait que pour une mesure dans le cas du spectre continu on ne peut avoir un résultat qu'à l'intérieur d'un certain intervalle liée à l'appareil de mesure (cf. Ch. II. §II-5)-1-b)). Alors au lieu de dire que l'évoluer d'un système qui se trouvait initialement dans l'état

¹ Ces résultats peuvent aussi être appliqués aux systèmes ayant des spectres divisés en une partie discrète et une autre continue, à condition que les deux soient séparés par un gap. Dans de telle situation on applique le théorème adiabatique ordinaire à la partie discrète du spectre et celui généralisé à la partie continue.

² En fait, cette condition est toujours nécessaire même pour cette approche.

³ Cette dernière puisse être extraite à partir de la continuité de Hölder de la partie continue de la mesure spectrale à proximité de la valeur propre [2].

$|\varphi(l; t_0)\rangle$ est l'état¹ $|\varphi(l; t)\rangle$ on dit qu'il appartient à un certain intervalle ouvert² autour de la valeur³ l . Ainsi, on ne va pas interdire toutes les transitions du type $l \rightarrow k$, avec $k \in I$. Seules les transitions interdites sont les transitions vers une valeurs de k à l'extérieur de cet intervalle. Par conséquent, on dit que l'intervalle protège l'état contre les fuites vers son extérieur, l'intervalle joue donc le rôle d'un gap. La différence avec l'approche précédente est que l'intervalle lui-même est un gap ; il a les mêmes dimensions, en plus, il (sa nature et non pas sa valeur) est unique quelque soit le système quantique considéré ; c'est-à-dire il suffit de prendre un bande autour de la valeur de l'indice considéré pour définir un intervalle. Dans la situation précédente la condition de différenciabilité n'a rien à avoir avec la nature du gap. Les conditions auxquelles doit satisfaire cet intervalle seront données dans le paragraphe suivant au cours de la démonstration du théorème adiabatique.

Avant de donner l'énoncé et la démonstration du théorème adiabatique généralisé, voyons d'abord comment surmonter les deux autres difficultés posées tout au début de cette discussion.

En fait, malgré la réversibilité et le mouvement libre dans le cas du spectre continu on va voir que l'approximation adiabatique est utilisée autrement. En effet, le but de l'utilisation du théorème adiabatique est de donner une nouvelle méthode pour résoudre les problèmes indépendant du temps par une approche dépendant du temps où de nouvelles propriétés physiques apparaissent (voir les résultats du chapitre suivant). De plus, on peut imaginer des situations où le système peut toujours rester sous l'influence d'un champ adiabatique qui englobe tout l'espace (le laboratoire par exemple) sans qu'il soit dans un état lié. Le champ gravitationnelle est un exemple d'un champ qui se trouve partout dans l'espace où on peut, au lieu de considérer les différences dans son intensité correspondant a de différentes positions, le considérer comme dépendant adiabatiquement du temps.

D'après le deuxième chapitre on a vu qu'il existe un arbitraire dans la normalisation des fonctions propres du spectre continu, par conséquent en effectuant la transformation (II-72) on peut toujours trouver un indice k autre que l'énergie et qui soit indépendant du

¹ On montre dans le chapitre suivant qu'une telle affirmation est contradictoire (voir formule (IV-28)).

² L'intervalle est supposé ouvert pour éviter toute sorte de frontière.

³ Il est clair qu'on est en train de décrire le théorème adiabatique généralisé de Avron et Elgart, en effet, comme on l'a dit ci-dessus, le but ce n'est pas de donner un nouveau théorème, mais seulement de le traiter d'un autre point de vue en lui donnant une nouvelle interprétation !

temps, c'est l'analogie de l'invariance adiabatique du nombre quantique dans le cas du spectre discret.

5. L'énoncé du théorème adiabatique généralisé :

Pour simplifier, on suppose que *le spectre de H est entièrement continu* et qu'il est non dégénéré. De plus, comme pour le spectre discret, on va se mettre dans l'échelle microscopique (cf. formule (III-33)). La démonstration qui sera donnée pour le théorème adiabatique consiste à suivre les mêmes étapes de la démonstration de A. Messiah [8] considérée plus haut pour le spectre discret. Pour cette raison et en suivant l'approche comparative adoptée dans ce travail on va essayer de conserver autant que possible les arguments de Messiah pour que le lecteur puisse comparer entre les deux démonstrations pour faire mieux apparaître les astuces de calculs utilisées pour surmonter les difficultés du spectre continu.

D'après les notations de ce travail, $E(k; s), k \in I$ représentent la suite des valeurs propres de $H(s)$ et $\delta P(k; s), k \in I$ représentent les projecteurs sur leurs sous-espaces respectifs et qui sont définis par (II-104). Par hypothèse ils doivent vérifier les deux conditions suivantes :

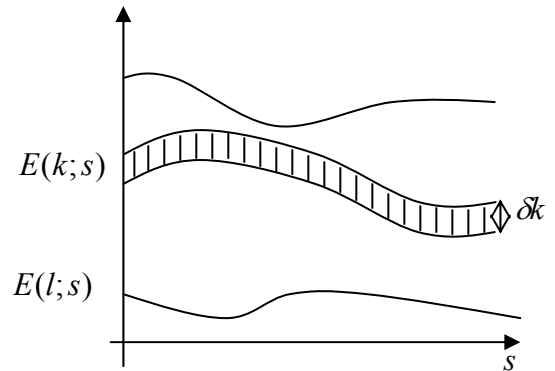


Figure 12 : Evolution d'une gamme d'énergie de largeur δk en fonction du temps.

- Pour un intervalle $[k, k + \delta k]$ où les conditions auxquelles δk seront données au cours de la démonstration, les valeurs propres supposées continues vérifient :

$$\forall s / 0 \leq s \leq 1 : E(k'; s) \neq E(l; s), \quad \forall k' \in [k, k + \delta k] \text{ et } l \notin [k, k + \delta k] \quad (\text{III-86})$$

Cette condition est l'analogie de la condition de non croisement (III-38) (voir figure 12).

- les dérivées $\frac{d[\delta P(k; s)]}{ds}$ et $\frac{d^2[\delta P(k; s)]}{ds^2}$ sont bien définies et continues dans tout cet intervalle, mises à part d'éventuelle discontinuités de première espèce. On voit que la condition de régularité posée par Avron et Elgart est toujours nécessaire, la différence est que dans leur travail elle remplace la condition du gap, par contre ici elle est supposée au même titre que la condition du gap.

L'opérateur d'évolution $U_T(s)$ est donc solution de l'équation (III-41) et l'hamiltonien $H(s)$ s'écrit :

$$H(s) = \int_I E(k;s) |\varphi(k;s)\rangle \langle \varphi(k;s)| dk \quad (\text{III-87})$$

Le but de ce travail est essentiellement de déterminer $U(t_1, t_0)$, c'est-à-dire $U_T(1)$, et d'examiner sa dépendance en T . A la limite $T \rightarrow \infty$ le théorème adiabatique généralisé s'énonce comme suit : « *sous les deux conditions ci-dessus, si le système se trouve à l'instant initial dans un état appartenant à un intervalle $[k, k + \delta k]$, autrement dit, à la différentielle propres de $H(0)$ construite sur l'intervalle δk dont les conditions qu'il doit vérifier seront données aux cours de la démonstration, il passe au temps t_1 dans la différentielle propre de $H(1)$ qui s'en déduit par continuité, c'est-à-dire il reste dans le même intervalle* ».

Cet important résultat représente une deuxième forme analogue de celle donnée plus haut par Avron et Elgart. En termes des vecteurs propres $|\varphi(k;s)\rangle$, ce théorème prend la forme simplifiée suivante : « *sous les deux conditions ci-dessus, si le système est représenté à l'instant initial par l'état $|\varphi(k;0)\rangle$, il reste à tout instant s dans un intervalle $[k, k + \delta k]$, les conditions auxquelles doit vérifiée δk seront données aux cours de la démonstration* ».

Comme pour le spectre discret, formellement, le théorème adiabatique généralisé stipule que $U_T(s)$ possède la propriété asymptotique suivante (voir la formule (IV-36)) :

$$\forall k \in I : \lim_{T \rightarrow \infty} U_T(s) \delta P(k;0) = \delta P(k;s) \lim_{T \rightarrow \infty} U_T(s) \quad (\text{III-88})$$

Alors, c'est cette relation qu'on va démontrer dans le paragraphe suivant :

6. démonstration du théorème adiabatique généralisé :

Pour le but annoncé précédemment, on va emprunter les mêmes démarches ainsi que l'organisation de la démonstration de Messiah [8].

a) Représentation des axes tournants :

Tout comme pour le spectre discret, les axes propres de l'hamiltonien $H(s)$ sont animés d'un certain mouvement de rotation dans l'espace de Hilbert. En vue d'éliminer ce mouvement, on se met dans la représentation des axes tournants en utilisant l'opérateur unitaire $A(s)$ dont l'action est donnée par :

$$|\varphi(k; s)\rangle = A(s)|\varphi(k; 0)\rangle, \quad \forall k \in I \quad (\text{III-89})$$

Les projecteurs $\delta P(k; s)$ vérifient donc :

$$\delta P(k; s) = A(s)\delta P(k; 0)A^+(s), \quad \forall k \in I \quad (\text{III-90})$$

Dans la transformation unitaire $A(s)$, tout système de base de $H(0)$ se transforme en un système de base de $H(s)$, chaque vecteur propre de $H(0)$ se transforme en l'un des vecteurs propres de $H(s)$ qui s'en déduisent par continuité. Il est clair que $A(s)$ vérifie la condition initiale suivante :

$$A(0) = 1 \quad (\text{III-45})$$

et est donné par l'équation différentielle :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} A(s) = K(s)A(s) \quad (\text{III-46})$$

où $K(s)$ est un opérateur hermitien approprié :

$$K(s) = K^+(s) \quad (\text{III-91})$$

Pour que les conditions (III-90) soient satisfaites, il faut et il suffit que $K(s)$ obéisse aux relations de commutation suivantes :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \delta P(k; s) = [K(s), \delta P(k; s)] \quad (\text{III-92})$$

En effet, en dérivant (III-90) par rapport à s on a :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \delta P(k; s) = i\hbar \frac{\partial}{\partial s} A(s)\delta P(k; 0)A^+(s) + A(s)\delta P(k; 0)i\hbar \frac{\partial}{\partial s} A^+(s)$$

en utilisant (III-46) et sa conjuguée hermitien on trouve :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} A^+(s) = -A^+(s)K(s) \quad (\text{III-93})$$

ce qui donne :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \delta P(k; s) = K(s)A(s)\delta P(k; 0)A^+(s) - A(s)\delta P(k; 0)A^+(s)K(s)$$

d'après (III-90), on obtient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \delta P(k; s) = K(s) \delta P(k; s) - \delta P(k; s) K(s)$$

CQFD.

Ces relations de commutations *sont nécessaires*, car elles s'obtiennent, comme on l'a vu, en dérivant les équations (III-90). Elles *sont suffisantes* car, si $A(s)$ et $\delta P(k; s)$ vérifient les équations (III-46) et (III-92) respectivement, l'expression :

$$A^+(s) \delta P(k; s) A(s)$$

à une dérivée nulle par rapport à s ; elle est donc égale à sa valeur initiale $\delta P(k; 0)$. En effet :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} [A^+(s) \delta P(k; s) A(s)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial s} A^+(s) \delta P(k; s) A(s) + A^+(s) i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \delta P(k; s) A(s) + A^+(s) \delta P(k; s) i\hbar \frac{\partial}{\partial s} A(s)$$

ce qui donne d'après (III-46), (III-92) et (III-93) :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial s} [A^+(s) \delta P(k; s) A(s)] &= -A^+(s) K(s) \delta P(k; s) A(s) + A^+(s) K(s) \delta P(k; s) A(s) \\ &\quad - A^+(s) \delta P(k; s) K(s) A(s) + A^+(s) \delta P(k; s) K(s) A(s) = 0 \\ \Rightarrow A^+(s) \delta P(k; s) A(s) &= C^{te} \equiv \delta P(k; 0) \end{aligned}$$

Les relations (III-92) *ne définissent pas* $K(s)$ *de façon unique*. En effet, elles restent satisfaites lorsqu'on ajoute à $K(s)$ l'opérateur :

$$\int_I \langle \varphi(k; s) | f(k; s) | \varphi(k; s) \rangle | \varphi(k; s) \rangle \langle \varphi(k; s) | dk$$

où $f(k; s)$ est un opérateur quelconque dépendant de s ; autrement dit, les projections :

$$\delta P(k; s) K(s) \delta P(k; s), \quad k \in I$$

peuvent être arbitrairement fixées¹. En effet, en posant :

$$K'(s) = K(s) + \int_I \langle \varphi(k; s) | f(k; s) | \varphi(k; s) \rangle | \varphi(k; s) \rangle \langle \varphi(k; s) | dk \quad (\text{III-94})$$

le commutateur de cet opérateur avec $\delta P(l; s)$ donne :

¹ Cette propriété constitue la clef de toute la démonstration soit dans le cas discret ou continu.

$$\begin{aligned}
 K'(s)\delta P(l;s) - \delta P(l;s)K'(s) &= \\
 &= K(s)\delta P(l;s) - \delta P(l;s)K(s) + \int_I \langle \varphi(k;s) | f(k;s) | \varphi(k;s) \rangle | \varphi(k;s) \rangle \langle \varphi(k;s) | \delta P(l;s) dk - \\
 &\quad - \int_I \langle \varphi(k;s) | f(k;s) | \varphi(k;s) \rangle \delta P(l;s) | \varphi(k;s) \rangle \langle \varphi(k;s) | dk
 \end{aligned}$$

d'après la définition (II-104) et les propriétés (II-21-g) et (II-42) on trouve :

$$\begin{aligned}
 K'(s)\delta P(l;s) - \delta P(l;s)K'(s) &= \\
 &= \underbrace{K(s)\delta P(l;s) - \delta P(l;s)K(s)}_{\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \delta P(l;s)} + \int_I \int_I \langle \varphi(k;s) | f(k;s) | \varphi(k;s) \rangle \delta(l-k) | \varphi(k;s) \rangle \langle \varphi(l;s) | dk dl - \\
 &\quad - \int_I \int_I \langle \varphi(k;s) | f(k;s) | \varphi(k;s) \rangle \delta(l-k) | \varphi(l;s) \rangle \langle \varphi(k;s) | dk dl
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 K'(s)\delta P(l;s) - \delta P(l;s)K'(s) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \delta P(l;s) + \int_I \langle \varphi(l;s) | f(l;s) | \varphi(l;s) \rangle | \varphi(l;s) \rangle \langle \varphi(l;s) | dl - \\
 &\quad - \int_I \langle \varphi(l;s) | f(l;s) | \varphi(l;s) \rangle | \varphi(l;s) \rangle \langle \varphi(l;s) | dl
 \end{aligned}$$

$K'(s)$ vérifie donc (III-92).

Pour une raison qui *deviendra claire ultérieurement*, on peut lever l'arbitraire dans le choix de $K(s)$ en imposant la condition supplémentaire :

$$\delta P(k;s)K(s)\delta P(k;s) = 0, \quad k \in I \tag{ III-95 }$$

ou, plus exactement, la condition (cf. formule (II-104)) :

$$\langle \varphi(k;s) | K(s) | \varphi(k';s) \rangle = 0 \quad \text{pour } k' \in [k, k + \delta k] \tag{ III-96 }$$

cette dernière implique :

$$\begin{aligned}
 \delta P(l;s)K'(s)\delta P(l;s) &= \underbrace{\delta P(l;s)K(s)\delta P(l;s)}_{=0} + \\
 &\quad + \int_I \langle \varphi(k;s) | f(k;s) | \varphi(k;s) \rangle \delta P(l;s) | \varphi(k;s) \rangle \langle \varphi(k;s) | \delta P(l;s) dk \\
 \delta P(l;s)K'(s)\delta P(l;s) &= \int_I \langle \varphi(k;s) | f(k;s) | \varphi(k;s) \rangle \int_I \langle \varphi(l';s) | \varphi(l';s) \rangle dl' | \varphi(k;s) \rangle \langle \varphi(k;s) | \delta P(l;s) dk \\
 \delta P(l;s)K'(s)\delta P(l;s) &= \int_I \langle \varphi(l';s) \rangle \int_I \langle \varphi(k;s) | f(k;s) | \varphi(k;s) \rangle \delta(k-l') \langle \varphi(k;s) | \delta P(l;s) dk dl' \\
 \delta P(l;s)K'(s)\delta P(l;s) &= \int_I \langle \varphi(l';s) \rangle \langle \varphi(l';s) | f(l';s) | \varphi(l';s) \rangle \int_I \delta(l'-l'') \langle \varphi(l'';s) \rangle dl'' dl'
 \end{aligned}$$

et comme l' et l'' appartiennent au même intervalle, on trouve :

$$\delta P(l; s) K'(s) \delta P(l; s) = \int_l^{l+\delta l} \langle \varphi(l'; s) | f(l'; s) | \varphi(l'; s) \rangle \langle \varphi(l'; s) | \varphi(l'; s) \rangle dl'$$

comme le premier membre doit s'annuler, on doit avoir :

$$\int_l^{l+\delta l} \langle \varphi(l'; s) | f(l'; s) | \varphi(l'; s) \rangle \langle \varphi(l'; s) | \varphi(l'; s) \rangle dl' = 0, \quad \forall l \in I$$

et comme l'intervalle δl est arbitrairement petit, on peut choisir $f(l; s)$ de sorte qu'elle vérifie la condition :

$$\langle \varphi(l; s) | f(l; s) | \varphi(l; s) \rangle = 0 \quad (\text{III-97})$$

En fait, on peut toujours trouver un tel opérateur, on peut prendre par exemple le groupe d'opérateurs suivants ainsi que toutes leurs combinaisons :

$$f(l; s; \tau, \nu) = |\varphi(l + \tau; s)\rangle \langle \varphi(l + \nu; s)|, \quad \forall \tau, \nu \in I \wedge \tau, \nu \neq 0 \quad (\text{III-98})$$

En multipliant la formule (III-92) par $|\varphi(k; s)\rangle \langle \varphi(k; s)|$ on obtient, en tenant compte de (III-96) :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \left[\int_k^{k+\delta k} |\varphi(k'; s)\rangle \langle \varphi(k'; s)| dk' \right] |\varphi(k; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| &= K(s) \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k'; s)\rangle \langle \varphi(k'; s)| dk' |\varphi(k; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| \\ &- \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k'; s)\rangle \langle \varphi(k'; s)| dk' K(s) |\varphi(k; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| \\ i\hbar \int_k^{k+\delta k} [&|\dot{\varphi}(k'; s)\rangle \langle \varphi(k'; s)| + |\varphi(k'; s)\rangle \langle \dot{\varphi}(k'; s)|] dk' |\varphi(k; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| = \\ &= K(s) \int_k^{k+\delta k} \delta(k - k') |\varphi(k'; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| dk' - \underbrace{\int_k^{k+\delta k} \langle \varphi(k'; s) | K(s) | \varphi(k; s) \rangle}_{=0} |\varphi(k'; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| dk' \\ i\hbar \int_k^{k+\delta k} [&\delta(k - k') \dot{\varphi}(k'; s) \rangle \langle \varphi(k; s)| + \langle \dot{\varphi}(k'; s) | \varphi(k; s) \rangle |\varphi(k'; s)\rangle \langle \varphi(k; s)|] dk' = \\ &= K(s) \int_k^{k+\delta k} \delta(k - k') |\varphi(k'; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| dk' - \int_k^{k+\delta k} \underbrace{\langle \varphi(k'; s) | K(s) | \varphi(k; s) \rangle}_{\rightarrow 0} |\varphi(k'; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| dk' \end{aligned}$$

En dérivant la relation (II-42) par rapport au temps, on trouve la propriété suivante :

$$\frac{\partial}{\partial s} \langle \varphi(l; s) | \varphi(k; s) \rangle = \frac{\partial}{\partial s} \delta(l - k) = 0$$

par conséquent :

$$\langle \dot{\varphi}(l; s) | \varphi(k; s) \rangle = -\langle \varphi(l; s) | \dot{\varphi}(k; s) \rangle \quad (\text{III-99})$$

En utilisant cette propriété et la propriété (II-21-g) de la fonction de Dirac, on obtient :

$$i\hbar |\dot{\varphi}(k; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| - i\hbar \delta P(k; s) |\dot{\varphi}(k; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| = K(s) |\varphi(k; s)\rangle \langle \varphi(k; s)|$$

par intégration sur tout le spectre et en utilisant la relation de fermeture (II-82) on trouve :

$$K(s) = i\hbar \int_I |\dot{\varphi}(k; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| dk - i\hbar \int_I \delta P(k; s) |\dot{\varphi}(k; s)\rangle \langle \varphi(k; s)| dk \quad (\text{III-100})$$

On remarque que cet opérateur vérifie la condition (III-96) et par conséquent (III-95). En effet, multiplions (III-100) par le ket $|\varphi(l; s)\rangle$ ce qui donne (cf. formules (II-42) et (II-21-g)) :

$$K(s) |\varphi(l; s)\rangle = i\hbar |\dot{\varphi}(l; s)\rangle - i\hbar \delta P(l; s) |\dot{\varphi}(l; s)\rangle$$

appliquons maintenant un bra $\langle \varphi(l'; s)|$ quelconque :

$$\langle \varphi(l'; s) | K(s) | \varphi(l; s) \rangle = i\hbar \langle \varphi(l'; s) | \dot{\varphi}(l; s) \rangle - i\hbar \int_l^{l+\delta} \langle \varphi(l'; s) | \varphi(l''; s) \rangle \langle \varphi(l''; s) | \dot{\varphi}(l; s) \rangle dl''$$

si $l' \in [l, l + \delta]$ on trouve :

$$\langle \varphi(l'; s) | K(s) | \varphi(l; s) \rangle = i\hbar \langle \varphi(l'; s) | \dot{\varphi}(l; s) \rangle - i\hbar \langle \varphi(l'; s) | \dot{\varphi}(l; s) \rangle = 0$$

d'où la condition (III-96).

Dans la représentation des axes tournant, l'observable $H(s)$, compte tenu des équations (III-87), (III-89) et (III-90), se transforme notamment en :

$$H^{(A)}(s) = A^+(s) H(s) A(s) = \int_I E(k; s) |\varphi(k; 0)\rangle \langle \varphi(k; 0)| dk \quad (\text{III-101})$$

De même $K(s)$ se transforme en :

$$K^{(A)}(s) = A^+(s) K(s) A(s) \quad (\text{III-53})$$

L'opérateur d'évolution de cette nouvelle « représentation » est :

$$U^{(A)}(s) = A^+(s)U(s) \quad (\text{III-54})$$

En dérivant cette expression on trouve :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U^{(A)}(s) = i\hbar \frac{\partial}{\partial s} A^+(s)U(s) + A^+(s)i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U(s)$$

ce qui donne d'après (III-41), (III-53), (III-54) et le fait que $A(s)$ est unitaire :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U^{(A)}(s) = -A^+(s)K(s)U(s) + T A^+(s)H(s)U(s)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U^{(A)}(s) = -A^+(s)K(s)A(s)A^+(s)U(s) + TA^+(s)H(s)A(s)A^+(s)U(s)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U^{(A)}(s) = -K^{(A)}(s)U^{(A)}(s) + T H^{(A)}(s)U^{(A)}(s)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U^{(A)}(s) = [T H^{(A)}(s) - K^{(A)}(s)]U^{(A)}(s) \quad (\text{III-55})$$

de plus on a :

$$U^{(A)}(0) = 1 \quad (\text{III-56})$$

b) Démonstration du théorème :

L'équation (III-55) s'intégrerait sans difficulté si on pouvait négliger $K^{(A)}$ à côté de $T H^{(A)}$. Désignons par $\Phi_T(s)$ la solution de l'équation de Schrödinger ainsi formée :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \Phi_T(s) = T H^{(A)}(s)\Phi_T(s) \quad (\text{III-57})$$

$$\Phi_T(0) = 1 \quad (\text{III-58})$$

on trouve :

$$\Phi_T(s) = \int_I e^{\frac{-iT\phi(k;s)}{\hbar}} |\varphi(k;0)\rangle \langle \varphi(k;0)| dk \quad (\text{III-102})$$

on a utilisé la notation

$$\phi(k;s) = \int_0^s E(k;s') ds' \quad (\text{III-103})$$

Or, si l'on se reporte aux définitions (III-101) et (III-53), on constate que $H^{(A)}(s)$ et $K^{(A)}(s)$ sont indépendants de T . On s'attend donc à ce qu'à la limite $T \rightarrow \infty$, l'effet de $K^{(A)}(s)$ au second membre de l'équation (III-55) soit complètement masqué par celui de $T H^{(A)}(s)$ et que $U^{(A)}(s)$ tende vers $\Phi_T(s)$. Comme on va le voir, cette propriété est bien vérifiée et donne, d'après (III-54), le résultat suivant :

$$U_T(s) \underset{T \rightarrow \infty}{\approx} A(s)\Phi_T(s) \quad (\text{III-61})$$

Pour le montrer, on fait une nouvelle transformation unitaire en posant

$$W(s) = \Phi_T^+(s)U^{(A)}(s) = \Phi_T^+(s)A^+(s)U_T(s) \quad (\text{III-62})$$

Des équations (III-55) et (III-57), il est facile de déduire l'équation de l'évolution de ce nouvel opérateur unitaire, en effet, en dérivant (III-62) on a :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} W(s) = i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \Phi^+(s)U^{(A)}(s) + \Phi^+(s)i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U^{(A)}(s)$$

avec

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \Phi^+(s) = -T \Phi^+(s)H^{(A)}(s)$$

d'où

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} W(s) = -T \Phi^+(s)H^{(A)}(s)U^{(A)}(s) + \Phi^+(s)(T H^{(A)}(s) - K^{(A)}(s))U^{(A)}(s)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} W(s) = -\Phi^+(s)K^{(A)}(s)U^{(A)}(s) \quad (\text{III-104})$$

et comme $\Phi_T(s)$ est unitaire, on a :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} W(s) = -\Phi^+(s)K^{(A)}(s)\Phi(s)\Phi^+(s)U^{(A)}(s)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} W(s) = -\bar{K}(s)W(s) \quad (\text{III-63})$$

avec

$$\bar{K}(s) = \Phi^+(s)K^{(A)}(s)\Phi(s) \quad (\text{III-64})$$

ou, d'après (III-53)

$$\bar{K}(s) = \Phi^+(s)A^+(s)K(s)A(s)\Phi(s) \quad (\text{III-105})$$

Sous sa forme intégrale, l'équation (III-104) s'écrit :

$$W(s) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^s \bar{K}(s')W(s')ds' \quad (\text{III-65})$$

On va montrer que le noyau $\bar{K}(s)$ est une somme de fonctions oscillantes dont les fréquences augmentent indéfiniment avec T et qu'en conséquence l'intégrale du second membre de l'équation de Volterra (III-65) tend vers zéro lorsque $T \rightarrow \infty$ [68].

En utilisant la relation de fermeture (II-82), $\bar{K}(s)$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \bar{K}(s) &= \int_I \int_I \langle \varphi(k;0) | \bar{K}(s) | \varphi(l;0) \rangle | \varphi(k;0) \rangle \langle \varphi(l;0) | \\ &= \int_I \int_I \bar{K}(k,l;s) dl dk \end{aligned} \quad (\text{III-106})$$

avec

$$\bar{K}(k,l;s) = \langle \varphi(k;0) | \bar{K}(s) | \varphi(l;0) \rangle | \varphi(k;0) \rangle \langle \varphi(l;0) | \quad (\text{III-107})$$

ce qui donne d'après (III-64) :

$$\bar{K}(k,l;s) = \langle \varphi(k;0) | \Phi^+(s)K^{(A)}(s)\Phi(s) | \varphi(l;0) \rangle | \varphi(k;0) \rangle \langle \varphi(l;0) |$$

la formule (III-102) permet d'écrire :

$$\begin{aligned} \bar{K}(k,l;s) &= \int_I e^{\frac{iT\phi(k';s)}{\hbar}} \langle \varphi(k;0) | \varphi(k';0) \rangle \langle \varphi(k';0) | dk' K^{(A)}(s) \times \\ &\quad \times \int_I e^{\frac{-iT\phi(k'';s)}{\hbar}} | \varphi(k'';0) \rangle \langle \varphi(k'';0) | \varphi(l;0) \rangle dk'' | \varphi(k;0) \rangle \langle \varphi(l;0) | \\ \bar{K}(k,l;s) &= e^{\frac{iT}{\hbar}(\phi(k;s)-\phi(l;s))} \langle \varphi(k;0) | K^{(A)}(s) | \varphi(l;0) \rangle | \varphi(k;0) \rangle \langle \varphi(l;0) | \end{aligned}$$

on obtient donc en utilisant la notation (III-107) pour $K^{(A)}$:

$$\bar{K}(k,l;s) = e^{\frac{iT}{\hbar}(\phi(k;s)-\phi(l;s))} K^{(A)}(k,l;s) \quad (\text{III-108})$$

en utilisant maintenant la formule (III-90) on écrit :

$$K^{(A)}(k,l;s) = | \varphi(k;0) \rangle \langle \varphi(k;0) | A^+(s)K(s)A(s) | \varphi(l;0) \rangle \langle \varphi(l;0) |$$

$$K^{(A)}(k, l; s) = A^+(s) \langle \varphi(k; s) | \langle \varphi(k; s) | K(s) | \varphi(l; s) \rangle \langle \varphi(l; s) | A(s) \rangle \quad (\text{III-109})$$

Suivant la condition (III-96), pour k fixé, on a $K^{(A)}(k, l; s)$ est nul pour tout $l \in [k, k + \delta k]$, donc on a le résultat important suivant :

$$\forall k \in I : \quad \bar{K}(k, l; s) = 0 \quad / l \in [k, k + \delta k] \quad (\text{III-110})$$

quant aux valeurs de $\bar{K}(k, l; s)$ telles que $l \notin [k, k + \delta k]$, elles contiennent le facteur oscillant (cf. formule (II-15)) :

$$e^{\frac{iT(\phi(k; s) - \phi(l; s))}{\hbar}} = \exp \left[iT \hbar^{-1} \int_0^s [E(k; s') - E(l; s')] ds' \right]$$

La fréquence circulaire des oscillations s'obtient en dérivant la phase de l'exponentielle par rapport à s , ce qui donne

$$T \hbar^{-1} [E(k; s) - E(l; s)]$$

Suivant l'hypothèse (III-86) la différence $E(k; s) - E(l; s)$, pour $l \notin [k, k + \delta k]$, n'est jamais nulle, donc la fréquence augmente proportionnellement à T lorsque $T \rightarrow \infty$.

L'intégration par parties du second membre de l'équation (III-65) donne :

$$W(s) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^s \bar{K}(s') W(s') ds' = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^{s'} \bar{K}(s'') ds'' W(s') \Big|_0^s - \frac{i}{\hbar} \int_0^s \int_0^{s'} \bar{K}(s'') ds'' \frac{\partial W(s')}{\partial s'} ds'$$

Considérons l'opérateur :

$$F(s) = \int_0^s \bar{K}(s') ds' \quad (\text{III-71})$$

on trouve :

$$W(s) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^s \bar{K}(s') W(s') ds' = 1 + \frac{i}{\hbar} F(s) W(s) \Big|_0^s - \frac{i}{\hbar} \int_0^s F(s') \frac{\partial W(s')}{\partial s'} ds'$$

soit encore

$$W(s) = 1 + \frac{i}{\hbar} F(s) W(s) - \frac{i}{\hbar} \int_0^s F(s') \frac{\partial W(s')}{\partial s'} ds' \quad (\text{III-70})$$

Suivant la propriété (III-110), on vérifie que :

$$\forall k \in I : F(k, l; s) = 0 \quad / l \in [k, k + \delta k] \quad (\text{III-111})$$

D'autre part, on a :

$$F(k, l; s) = \int_0^s e^{\frac{iT}{\hbar}(\phi(k; s') - \phi(l; s'))} K^{(A)}(k, l; s') ds', \quad / l \notin [k, k + \delta k] \quad (\text{III-112})$$

$K^{(A)}(k, l; s)$ est une fonction continue de s indépendante de T . Quant à l'exponentielle, il est clair [68] que sa phase n'est jamais stationnaire. $F(k, l; s)$ est donc de la forme :

$$\int_0^s e^{iT\alpha(s')} f(s') ds'$$

où $f(s')$ est une fonction continue et $\alpha(s')$ une fonction continue et monotone ; on sait [68] qu'une telle intégrale tend vers zéro lorsque $T \rightarrow \infty$. En intégrant (III-112) par partie, il vient d'ailleurs :

$$F(k, l; s) = \frac{\hbar}{iT} \left[e^{\frac{iT}{\hbar}(\phi(k; s') - \phi(l; s'))} \frac{K^{(A)}(k, l; s')}{E(k; s') - E(l; s')} \Big|_0^s - \int_0^s e^{\frac{iT}{\hbar}(\phi(k; s') - \phi(l; s'))} \frac{\partial}{\partial s'} \left[\frac{K^{(A)}(k, l; s')}{E(k; s') - E(l; s')} \right] ds' \right] \quad (\text{III-113})$$

Il est clair que l'expression entre crochets reste finie si $K^{(A)}(k, l; s)$ et les dérivées de $K^{(A)}(k, l; s)$, $E(k; s)$ et $E(l; s)$ par rapport à s restent finis¹. Donc $F(k, l; s)$ tend asymptotiquement vers zéro comme $\frac{1}{T}$. En conclusion, lorsque $T \rightarrow \infty$, on a :

$$F(s) = O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (\text{III-75})$$

En fait, à l'inverse du cas discret, la différence $E(k; s) - E(l; s)$ peut être aussi petite de sorte qu'elle annule l'influence du terme $\frac{1}{T}$, pour s'assurer que ça ne sera pas le cas, on doit ajouter la condition supplémentaire suivante : *la longueur δk de l'intervalle $[k, k + \delta k]$ est choisie de sorte que :*

$$[E(k; s) - E(l; s)] \gg \frac{1}{T} \quad (\text{III-114})$$

¹ Ces conditions sont assurées par les hypothèses (III-86) et celle qui vient juste après, ainsi que la condition (III-96) dont on voit l'utilité.

Il suffit par exemple de prendre $\delta k = \frac{1}{\sqrt{T}}$. A la limite $T \rightarrow \infty$, δk peut être choisi aussi petit que l'on veut. La condition (III-114) fixe donc δk en lui donnant la valeur minimale en fonction du paramètre adiabatique, elle constitue l'analogie des résultats de S. Jansen *et al* [70].

Si l'on tient compte de l'équation différentielle (III-63). Les deux termes de l'expression (III-70) contiennent en facteur l'opérateur F et tendent donc vers zéro comme $\frac{1}{T}$ lorsque $T \rightarrow \infty$. Par conséquent, on a :

$$W(s) = 1 + O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (\text{III-76})$$

En se reportant à la définition (III-62) de $W(s)$, on tire le résultat annoncé :

$$U_T(s) \underset{T \rightarrow \infty}{\approx} A(s)\Phi_T(s) \left[1 + O\left(\frac{1}{T}\right) \right] \quad (\text{III-77})$$

Comme $\Phi_T(s)$ commute avec les projecteurs $\delta P(k;0)$ (cf. formule (III-102)), et que l'opérateur unitaire $A(s)$ possède la propriété (III-90), on a :

$$A(s)\Phi_T(s)\delta P(k;0) = \delta P(k;s)A(s)\Phi_T(s) \quad (\text{III-115})$$

L'expression asymptotique de $U_T(s)$ qu'on vient d'obtenir vérifie donc bien les relations (III-88). CQFD.

c) L'approximation adiabatique :

Si T est suffisamment grand, on peut, en première approximation, remplacer l'opérateur d'évolution $U_T(1)$ par sa forme asymptotique :

$$U(t_1, t_0) = U_T(1) \approx A(1)\Phi_T(1) \quad (\text{III-116})$$

c'est l'approximation adiabatique.

Examinons les conditions de validité de l'approximation adiabatique dans l'hypothèse où l'état initial est un état propre de $H(0)$. Soit $|\varphi(n;0)\rangle$ le vecteur normalisé représentant l'état du système à l'instant t_0 . L'approximation adiabatique consiste à écrire :

$$U(t_1, t_0)|\varphi(n;0)\rangle \approx A(1)\Phi_T(1)|\varphi(n;0)\rangle \quad (\text{III-117})$$

Une mesure de l'erreur que comporte cette approximation est donnée par la probabilité η de trouver le système à l'instant t_1 dans un état hors de l'intervalle de $[n, n + \delta n]$, δn vérifie bien sûre la condition (III-114). Comme l'espace orthogonal à ce vecteur, à l'instant $s = 0$, a pour projecteur :

$$Q_0 = 1 - \delta P(n;0) \quad (\text{III-118})$$

on a, à l'instant $s = 1$:

$$Q_1 = A(1)\Phi(1)Q_0\Phi^+(1)A^+(1) \quad (\text{III-119})$$

Alors la probabilité est donnée par :

$$\eta = \langle \varphi(n;0) | U^+(t_1, t_0) Q_1 U(t_1, t_0) | \varphi(n;0) \rangle \quad (\text{III-120})$$

d'où

$$\eta = \langle \varphi(n;0) | U^+(t_1, t_0) A(1)\Phi(1)Q_0\Phi^+(1)A^+(1)U^+(t_1, t_0) | \varphi(n;0) \rangle$$

il vient, d'après (III-62) :

$$\eta = \langle \varphi(n;0) | W^+(1)Q_0W(1) | \varphi(n;0) \rangle \quad (\text{III-121})$$

Les corrections à l'approximation adiabatique peuvent être calculées par la méthode de perturbation. La méthode consiste à ne retenir que les premiers termes du développement de W obtenu par itération de l'équation intégrale (III-65). Si l'on s'en tient au premier ordre, on trouve :

$$W(1) = 1 + \frac{i}{\hbar} F(1) \quad (\text{III-122})$$

Ce développement peut aussi être utilisé pour évaluer η en suivant les étapes suivantes :

$$\eta = \langle \varphi(n;0) | \left(1 - \frac{i}{\hbar} F(1) \right) Q_0 \left(1 + \frac{i}{\hbar} F(1) \right) | \varphi(n;0) \rangle$$

$$\eta = \langle \varphi(n;0) | \left(Q_0 - \frac{i}{\hbar} F(1) Q_0 \right) \left(1 + \frac{i}{\hbar} F(1) \right) | \varphi(n;0) \rangle$$

$$\eta = \langle \varphi(n;0) | \mathcal{Q}_0 - \frac{i}{\hbar} F(1) \mathcal{Q}_0 + \mathcal{Q}_0 \frac{i}{\hbar} F(1) - \frac{i}{\hbar} F(1) \mathcal{Q}_0 \frac{i}{\hbar} F(1) | \varphi(n;0) \rangle$$

$$\eta = \langle \varphi(n;0) | \mathcal{Q}_0 | \varphi(n;0) \rangle + \hbar^{-2} \langle \varphi(n;0) | F(1) \mathcal{Q}_0 F(1) | \varphi(n;0) \rangle$$

ce qui donne en utilisant (III-118) et la définition (II-104) :

$$\eta = \langle \varphi(n;0) | \varphi(n;0) \rangle - \langle \varphi(n;0) | \int_n^{n+\delta n} |\varphi(n';0)\rangle \langle \varphi(n';0) | \varphi(n;0) \rangle dn' +$$

$$+ \hbar^{-2} \langle \varphi(n;0) | [F(1)]^2 | \varphi(n;0) \rangle - \hbar^{-2} \int_n^{n+\delta n} \langle \varphi(n;0) | F(1) | \varphi(n';0) \rangle \langle \varphi(n';0) | F(1) | \varphi(n;0) \rangle dn'$$

$$\eta = \langle \varphi(n;0) | \varphi(n;0) \rangle - \langle \varphi(n;0) | \varphi(n;0) \rangle +$$

$$+ \hbar^{-2} \langle \varphi(n;0) | [F(1)]^2 | \varphi(n;0) \rangle - \hbar^{-2} \int_n^{n+\delta n} \langle \varphi(n;0) | F(1) | \varphi(n';0) \rangle \langle \varphi(n';0) | F(1) | \varphi(n;0) \rangle dn'$$

$$\eta = \hbar^{-2} \langle \varphi(n;0) | F(1) F(1) | \varphi(n;0) \rangle - \hbar^{-2} \int_n^{n+\delta n} \langle \varphi(n;0) | F(1) | \varphi(n';0) \rangle \langle \varphi(n';0) | F(1) | \varphi(n;0) \rangle dn'$$

en faisant entrer la relation de fermeture (II-104) dans le premier terme du second membre de cette formule, on trouve :

$$\eta = \hbar^{-2} \int_{I/[n, n+\delta n]} \langle \varphi(n;0) | F(1) | \varphi(n';0) \rangle \langle \varphi(n';0) | F(1) | \varphi(n;0) \rangle dn'$$

$$\eta = \hbar^{-2} \int_{I/[n, n+\delta n]} |\langle \varphi(n;0) | F(1) | \varphi(n';0) \rangle|^2 dn' \quad (\text{III-123})$$

On utilisera désormais la variable t directement sans passer par l'intermédiaire de s . On désigne par $A(t)$ l'opérateur de « passage aux axes tournants », par $\Phi(t)$ l'opérateur $\Phi_T(s)$. Les définitions (III-87) et (III-102) sont donc remplacées par les définitions :

$$H(s) = \int_I E(k;t) |\varphi(k;t)\rangle \langle \varphi(k;t)| dk \quad (\text{III-124})$$

$$\Phi(t) = \int_I e^{\frac{-i\phi(k;t)}{\hbar}} |\varphi(k;0)\rangle \langle \varphi(k;0)| dk \quad (\text{III-125})$$

Les équations (III-45) et (III-46) qui définissent A sont remplacées par :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A(t) = K'(t) A(t) \quad (\text{III-126})$$

$$A(t_0) = 1 \quad (\text{III-127})$$

avec¹

$$K'(t) = \frac{K(s)}{T} = i\hbar \int_I |\dot{\varphi}(k;t)\rangle \langle \varphi(k;t)| dk - i\hbar \int_I \delta P(k;t) |\dot{\varphi}(k;t)\rangle \langle \varphi(k;t)| dk \quad (\text{III-128})$$

De sa définition (III-71), on tire :

$$F \equiv F(t) = \int_{t_0}^t \Phi^+(t') A^+(t') K'(t') A(t') \Phi(t) dt' \quad (\text{III-129})$$

Par définition, les vecteurs du système d'axe propres de $H(t)$ se déduisent des vecteurs propres de $H(t_0)$ par la transformation $A(t)$. On a quel que soit t (cf. formule (III-89)) :

$$|\varphi(k;t)\rangle = A(t) |\varphi(k;t_0)\rangle, \quad k \in I \quad (\text{III-130})$$

A l'approximation adiabatique, le vecteur état du système à l'instant t_1 , est égal à :

$$|\varphi(k;t_1)\rangle = A(t_1) |\varphi(k;t_0)\rangle \quad (\text{III-131})$$

à un facteur de phase près :

$$U(t_1, t_0) |\varphi(n;t_0)\rangle = \exp \left[-i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t_1} E(k;t') dt' \right] |\varphi(n;t_1)\rangle \quad (\text{III-132})$$

En servant des équations (III-123), (III-125), (III-128) et (III-129) et des propriétés de $|\varphi(k;t)\rangle$ données par l'équation (III-130), il vient :

$$\langle \varphi(n';t_0) | F(t_1) | \varphi(n;t_0) \rangle = \int_{t_0}^{t_1} \langle \varphi(n';t_0) | \Phi^+(t') A^+(t') K'(t') A(t') \Phi(t) | \varphi(n;t_0) \rangle dt'$$

$$\langle \varphi(n';t_0) | F(t_1) | \varphi(n;t_0) \rangle = \int_{t_0}^{t_1} e^{i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t'} [E(n';t'') - E(n;t'')] dt''} \langle \varphi(n';t') | K'(t') | \varphi(n;t') \rangle dt'$$

$$\langle \varphi(n';t_0) | F(t_1) | \varphi(n;t_0) \rangle = i\hbar \int_{t_0}^{t_1} e^{i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t'} [E(n';t'') - E(n;t'')] dt''} \left[\langle \varphi(n';t') | \dot{\varphi}(n;t') \rangle - \langle \varphi(n';t') | \delta P(n;t') | \dot{\varphi}(n;t') \rangle \right] dt'$$

¹ Ici le point signifie la dérivé par rapport à t , tandis que c'était par rapport à s dans (III-100).

Comme on est en train de chercher la probabilité η , alors on doit y avoir $n' \notin [n, n + \delta n]$, donc le deuxième terme entre crochet dans la formule ci-dessus est nul, d'où :

$$\langle \varphi(n'; t_0) | F(t_1) | \varphi(n; t_0) \rangle = i\hbar \int_{t_0}^{t_1} e^{i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t'} [E(n'; t'') - E(n; t'')] dt''} \langle \varphi(n'; t') | \dot{\varphi}(n; t') \rangle dt' \quad (\text{III-133})$$

On vérifie que le module carré de cette grandeur n'est que la densité de probabilité de trouver le système dans l'intervalle $[n', n' + \delta n'] \subset I/[n, n + \delta n]$ et qui est donnée, selon la définition (II-113), par :

$$\begin{aligned} \delta\wp(n \rightarrow n'; t) &= \left| \langle \varphi(n'; t_0) | F(t_1) | \varphi(n; t_0) \rangle \right|^2 \delta n' = \\ &= \left| i\hbar \int_{t_0}^{t_1} e^{i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t'} [E(n'; t'') - E(n; t'')] dt''} \langle \varphi(n'; t') | \dot{\varphi}(n; t') \rangle dt' \right|^2 \delta n' \end{aligned} \quad (\text{III-134})$$

$\langle \varphi(n'; t) | \dot{\varphi}(n; t) \rangle$ est une grandeur caractéristique de la vitesse de rotation des axes propres de l'hamiltonien : c'est la composante suivant $|\varphi(n'; t)\rangle$ de la vitesse de l'axe $|\varphi(n; t)\rangle$. $E(n'; t) - E(n; t)$ est la « fréquence de Bohr » de la transition¹ $n \rightarrow n'$.

L'intégrant du second membre de l'équation (III-133) est le produit de la fonction $\langle \varphi(n'; t) | \dot{\varphi}(n; t) \rangle$ par une exponentielle oscillante de fréquence $E(n'; t) - E(n; t)$. Si ces deux quantités varient dans le temps de façon suffisamment régulière, la probabilité (III-134) est au plus de l'ordre de grandeur de la valeur maximum atteinte par le rapport de ces deux dernières dans l'intervalle $[t_0, t_1]$, c'est-à-dire :

$$\delta\wp(n \rightarrow n'; t) \approx \max_{t \in [t_0, t_1]} \frac{|\langle \varphi(n'; t) | \dot{\varphi}(n; t) \rangle|^2}{|E(n'; t) - E(n; t)|} \delta n' \quad (\text{III-135})$$

En prenant compte de (III-134), on voit que la probabilité (III-123) n'est que l'intégrale sur l'intervalle $I/[n, n + \delta n]$ des différentes probabilités de transition vers $n' \notin [n, n + \delta n]$, ce qui donne :

$$\eta = \hbar^{-2} \int_{I/[n, n + \delta n]} \delta\wp(n \rightarrow n'; t) \quad (\text{III-136})$$

Comme les probabilités (III-134) sont des grandeurs positives, alors la condition :

¹ Cette grandeur n'est jamais nulle, car n' vérifie $n' \notin [n, n + \delta n]$.

$$\eta \ll 1 \quad (III-137)$$

condition de validité de l'approximation adiabatique, implique que :

$$\max_{n' \notin [n, n+\delta n]} \delta \phi(n \rightarrow n'; t) \ll \ll 1 \quad (III-138)$$

D'après (III-135) cette condition peut s'écrire :

$$\forall t \in [t_0, t_1]: \max_{n' \notin [n, n+\delta n]} |\langle \phi(n'; t) | \dot{\phi}(n; t) \rangle| \ll \ll \min_{n' \notin [n, n+\delta n]} |E(n'; t) - E(n; t)| \quad (III-139)$$

Ainsi, on a obtenu un critère de validité de l'approximation adiabatique dans le cas du spectre continu, une chose qui n'était pas possible dans l'approche de Avron et Elgart. A la limite $T \rightarrow \infty$, comme pour δn le deuxième membre de l'inégalité ci-dessus peut être aussi petit que l'on veut ; ainsi, on peut prendre dans la pratique :

$$n' \notin [n, n + \delta n], \forall t \in [t_0, t_1]: \langle \phi(n'; t) | \dot{\phi}(n; t) \rangle \rightarrow 0 \quad (III-140)$$

Chapitre IV

La phase géométrique généralisée

LA PHASE GEOMETRIQUE GENERALISEE

I. Les applications du théorème adiabatique :

L'application du théorème adiabatique a connu un intérêt croissant dans les différents domaines de la physique [19, 72], tels que la transition de Landau-Zener en physique moléculaire [75], la théorie quantique des champs [5, 57, 69], l'électrodynamique quantique [40, 41, 72], physique nucléaire et chimie physique [5]. Parmi ses applications les plus récentes on cite : l'effet Hall quantique [42, 72] ; où les auteurs de [42] ont montré que le flux moyenné du transport de charge est un nombre entier dans la limite adiabatique. L'information quantique [69] ; telle que l'information quantique géométrique [75], les problèmes d'optimisation [1] et la construction de nouveaux algorithmes basés sur l'approximation adiabatique [75]. Finalement, on a la phase géométrique de Berry [64], qui constitue l'une des plus importantes applications du théorème adiabatique [9], et pour laquelle on va consacrer ce chapitre.

On va se mettre dans tout le reste de ce chapitre dans l'échelle macroscopique (cf. formule (III-35)).

II. La phase géométrique de Berry :

1) *Introduction :*

D'après le théorème adiabatique dans ses deux versions ordinaire ou généralisée (cf. Ch. III.) le système, préparé initialement dans un état propre de l'hamiltonien, reste à tout instant dans le même état propre à un facteur de phase près si le spectre est discret, et dans un intervalle vérifiant la condition (III-114) autour de cet état si le spectre est continu. En effet, si on prend le cas trivial suivant :

$$P_k(t) = P_k(t_0) = P_k \quad (IV-1)$$

$$|\varphi(k;t)\rangle\langle\varphi(k;t)| = |\varphi(k;t_0)\rangle\langle\varphi(k;t_0)| = |\varphi(k)\rangle\langle\varphi(k)| \quad (IV-2)$$

d'où (cf. définition (II-104))

$$\delta P(k;t) = \delta P(k;t_0) = \delta P(k) \quad (IV-3)$$

Dans ce cas l'hamiltonien (cf. formules (III-43) et (III-87) Resp.) :

$$H(t) = \sum_{k \in I} E_k(t) P_k \quad (\text{IV-4})$$

$$H(t) = \int_I E(k;t) |\varphi(k)\rangle \langle \varphi(k)| dk \quad (\text{IV-5})$$

commute avec chaque projecteur P_k et $\delta P(k)$ Resp. quel que soit t ; chaque P_k et $\delta P(k)$ est donc une constante du mouvement :

$$U(t, t_0) P_k U^+(t, t_0) = P_k \quad (\text{IV-6})$$

$$U(t, t_0) \delta P(k) U^+(t, t_0) = \delta P(k) \quad (\text{IV-7})$$

les relations (III-40) et (III-88) sont donc vérifiées quel que soit T et *a fortiori* lorsque $T \rightarrow \infty$.

Dans ce cas, l'équation (III-41) s'intègre exactement et donne :

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right] \\ &= \sum_{k \in I} e^{\frac{-i\phi_k(t)}{\hbar}} P_k \end{aligned} \quad (\text{IV-8})$$

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right] \\ &= \int_I e^{\frac{-i\phi(k;t)}{\hbar}} |\varphi(k;t_0)\rangle \langle \varphi(k;t_0)| dk \end{aligned} \quad (\text{IV-9})$$

où les $\phi_k(t)$ et $\phi(k;t)$ sont définies par (III-60) et (III-103) Resp. On remarque que l'opérateur d'évolution dans ce cas ce n'est que l'opérateur $\Phi_T(t)$ (cf. formules (III-59) ou (III-102)).

Si le vecteur d'état du système à l'instant t_0 est un vecteur propre de $H(t_0)$ correspondant à la valeur propre $E_l(t_0)$ ou $E(l;t_0)$ (cf. formules (III-9) et (III-10)), son vecteur d'état à l'instant t_1 n'en diffère donc que par le facteur de phase $e^{\frac{-i\phi_k(t)}{\hbar}}$ ou $e^{\frac{-i\phi(k;t)}{\hbar}}$ Resp., en effet, d'après (III-18), (IV-8) et (IV-9), on a :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\varphi_l(t_0)\rangle = \sum_{k \in I} e^{\frac{-i\phi_k(t)}{\hbar}} P_k |\varphi_l(t_0)\rangle = e^{\frac{-i\phi_l(t)}{\hbar}} |\varphi_l(t_0)\rangle \quad (\text{IV-10})$$

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\varphi(l; t_0)\rangle = \int_I e^{\frac{-i\phi(k;t)}{\hbar}} |\varphi(k; t_0)\rangle \langle \varphi(k; t_0) | \varphi(l; t_0)\rangle dk = e^{\frac{-i\phi(l;t)}{\hbar}} |\varphi(l; t_0)\rangle \quad (\text{IV-11})$$

2) La phase de Berry dans le cas discret :

Born et Fock ont obtenu un résultat analogue à (IV-10) pour les systèmes adiabatiques à la limite $T \rightarrow \infty$ [17], ce dernier a été généralisé récemment [64] par M. V. Berry au cas où le système quantique dépendant du temps à travers un ensemble de paramètres $R_i(t), i = 1, 2, \dots$ revient à son état initial après une période T , c'est-à-dire (cf. formules (III-31) et (III-32)) :

$$H(R_i(t_1)) = H(R_i(t_0)) \quad (\text{IV-12})$$

ce qui implique, d'après (II-11), que les valeurs et fonctions propres vérifient :

$$\forall k \in I, \quad E_k(t_1) = E_k(t_0) \quad (\text{IV-13})$$

$$\forall k \in I, \quad |\varphi_k(t_1)\rangle = |\varphi_k(t_0)\rangle \quad (\text{IV-14})$$

la période T est supposée très grande pour qu'on puisse appliquer l'approximation adiabatique précédente, cette propriété (IV-12) est équivalente à dire que le système effectue une évolution le long d'une courbe fermée C dans l'espace des paramètres $\{R_i(t)\}_{i=1,2,\dots}$ définie par les équations suivantes :

$$R_i(t_1) = R_i(t_0), \quad i = 1, 2, \dots \quad (\text{IV-15})$$

Berry a montré qu'en plus de la phase dynamique $\frac{-\phi_i(t)}{\hbar}$ qui est due à l'opérateur $\Phi_T(t)$ [3, 6, 20, 22, 34, 64, 77], le système acquiert également une nouvelle phase dont on peut attribuer à l'opérateur $A(t)$ d'après (III-61) ; en effet, si on suppose que le système se trouve à l'instant initial t_0 dans l'un des états propres de l'hamiltonien, soit :

$$|\psi(t_0)\rangle = |\varphi_l(t_0)\rangle \quad (\text{IV-16})$$

En comparant cette expression avec (III-1) on trouve les conditions initiales suivantes sur les coefficients :

$$C_k^{t_0}(t_0) = \delta_{kl} \quad (\text{IV-17})$$

En appliquant l'expression (III-40) sur le ket $|\psi(t_0)\rangle$ et en prenant compte de la définition¹ (II-95), on trouve² :

$$U(t, t_0)P_l(t_0)|\varphi_l(t_0)\rangle = P_l(t)U(t, t_0)|\varphi_l(t_0)\rangle$$

d'où

$$U(t, t_0)|\varphi_l(t_0)\rangle = P_k(t)U(t, t_0)|\varphi_l(t_0)\rangle$$

en utilisant (III-18) et (II-75), on obtient :

$$|\psi(t)\rangle = \langle\varphi_l(t)|\psi(t)\rangle|\varphi_l(t)\rangle = C_l(t)|\varphi_l(t)\rangle \quad (\text{IV-18})$$

par comparaison avec (II-5) on a :

$$\begin{cases} C_k(t) = 0 & k \neq l \\ C_k(t) \neq 0 & k = l \end{cases} \quad (\text{IV-19})$$

Le système d'équation (II-35) se réduit donc à l'équation suivante :

$$i\hbar\dot{C}_l(t) = C_l(t)(E_l(t) - i\hbar\langle\varphi_l(t)|\dot{\varphi}_k(t)\rangle)$$

en prenant compte de (IV-17), cette équation s'intègre facilement en donnant :

$$C_l(t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[-\phi_l(t) + \gamma_l^G(t)]\right\} \quad (\text{IV-20})$$

avec

$$\gamma_l^G(t) = \int_{t_0}^t \langle\varphi_l(t')|i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}|\varphi_l(t')\rangle dt' \quad (\text{IV-21})$$

par conséquent, l'état du système à l'instant t est donné par :

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[-\phi_l(t) + \gamma_l^G(t)]\right\}|\varphi_l(t)\rangle \quad (\text{IV-22})$$

Cette phase supplémentaire est connue sous le nom de *la phase de Berry*. Après une période T le système revient à son état initial selon (IV-12), d'où on obtient :

¹ Le spectre est toujours supposé non dégénéré.

² On a omis l'expression $\lim_{T \rightarrow \infty}$ car on a supposé que le système est adiabatique, c'est-à-dire, on est dans la limite $T \rightarrow \infty$.

$$|\psi(t_1)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}[-\phi(t_1)+\gamma_I^G(t_1)]} |\varphi_I(t_1)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}[-\phi(t_1)+\gamma_I^G(t_1)]} |\varphi_I(t_0)\rangle \quad (IV-23)$$

3) Interprétation de La phase de Berry :

Berry a montré que la phase $\gamma_I^G(t_1)$ ne s'annule pas, bien que le système revienne à son état initial [74], et qu'elle ne dépend que de la surface¹ engendrée par la courbe C [3, 64], c'est-à-dire de la géométrie de cette dernière [34] et non pas du temps mis pour la parcourir par opposition à la phase dynamique ; en effet, si on se met dans l'échelle microscopique il est clair d'après les définitions (III-60) et (IV-21) que la phase dynamique dépend du paramètre adiabatique et que la phase de Berry n'en dépend pas. Pour cette raison, cette dernière est dite aussi *phase géométrique* [12, 20, 77] et est interprétée topologiquement comme la courbure d'une connexion dans l'espace des vecteurs d'unité [3, 24, 47, 77].

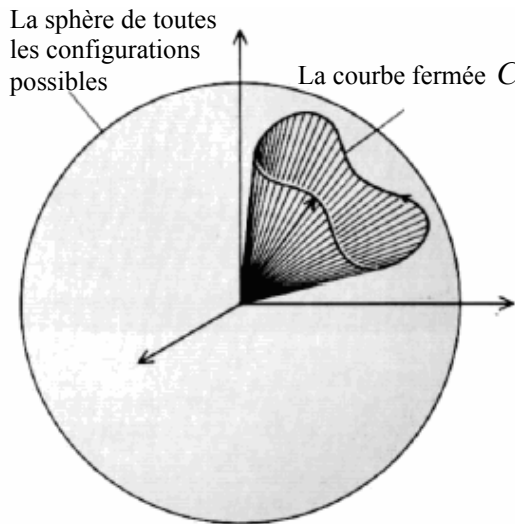


Figure 14 : L'angle solide enfermé par la courbe [61].

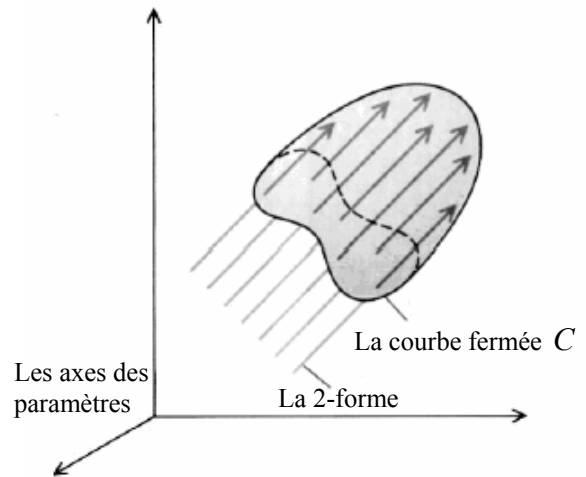


Figure 14 : Le flux d'une 2-forme à travers une surface enfermée par une courbe [61].

Dans le cas le plus simple la phase géométrique est exprimée en termes de l'aire de n'importe quelle surface enfermée par la courbe C . Si la surface est sphérique (figure 13-a), l'aire est à l'angle solide avec lequel la courbe C est vue du centre de la sphère [61, 64]. En particulier, Berry a décrit la phase géométrique pour les particules ayant un spin, qui est le cas par exemple d'un spineur correspondant à une valeur s de la composante de spin le long d'une direction \vec{r} dans l'espace des paramètres. Si la direction est prise autour de la courbe fermée C sur la sphère de rayon r , l'état du système acquiert une phase géométrique donnée par le produit de la composante s du spin avec l'angle solide à un signe moins près [62].

¹ De ce fait, si on a un seul paramètre la phase de Berry sur tout le circuit s'annule [64]

La phase géométrique peut être généralisée facilement aux espaces de paramètre ayant plus de trois dimensions si elle est exprimée en termes de quantité mathématique appelée 2-forme. Une 2-forme peut être considérée en tant qu'un flux, ou un écoulement, d'une quantité par l'espace (figure 13-b). La phase géométrique peut alors être calculée par l'intégration de la 2-forme n'importe quelle surface enfermée par le circuit [61].

De plus, B. Simon a donné une interprétation géométrique à la phase de Berry en terme d'*holonomie*¹ [3, 6, 64, 74] ; en effet, l'évolution adiabatique du système le long du cycle C est analogue à un transport parallèle du vecteur d'état de ce dernier le long du cycle. Après un cycle, le vecteur revient à son point de départ mais déphasé par rapport au vecteur initial. Un tel système est dit non holonome et le déphasage qui est proportionnel à l'angle solide enfermé par le cycle représente la phase de Berry en question [61]. Un phénomène analogue est rencontré en mécanique classique ; le pendule de Foucault [18], et en optique : la phase de Pancharatnam² [60].

D'après Berry [64], lorsque le système subit une évolution adiabatique cyclique il retournera à son état initial. Néanmoins ses horloges internes ont enregistré l'écoulement du temps : c'est l'origine de la phase dynamique habituelle. Le système enregistre également par où il passe : c'est l'origine de la phase géométrique de Berry.

4) les différentes applications de La phase de Berry :

Depuis sa découverte en 1983, la phase de Berry a suscité un grand intérêt soit sur le plan théorique ou expérimental³ [12, 27, 45, 67, 69, 74] ce qui montre que cette dernière n'est pas une phase ordinaire. En fait, il est connu que la dynamique des systèmes quantiques ne dépend que du module carré de la fonction d'onde quelque soit la phase attribuée à cette dernière, ce qui laisse l'intention que la phase de Berry ne peut pas être mesurée expérimentalement, ce qui n'est pas le cas [18, 64]. En effet, on peut imaginer une expérience où on divise un faisceau de particules en deux parties : la première est soumise à une modification adiabatique, et la deuxième est laissée libre, puis avec un mécanisme approprié on recombine les deux parties ce qui donne une image d'interférence qui permet de mesurer cette phase [12, 18, 77]. Parmi ces expériences d'interférence, on a, par exemple, celles

¹ B. Simon, Phys. Rev. Lett. **51**, 2157 (1983) [47, 77].

² S. Pancharatnam, Proc. Ind. Acad. Sci. A **44**, 247-262 (1956). S. Pancharatnam, Collected Works of S. Pancharatnam (Oxford: University Press 1975) [63].

³ A. Shapere, F. Wilczek, Geometric Phases in Physics (World Scientific, Singapore, 1989) [72].

effectuées par des neutrons dans des champs magnétiques hélicoïdaux¹ ou avec des photons polarisés dans des fibres optiques tordues² [24, 35, 77]. Elle est aussi observée dans les expériences de résonance quadripolaire nucléaire (RQN), voir la figure 14 [34].

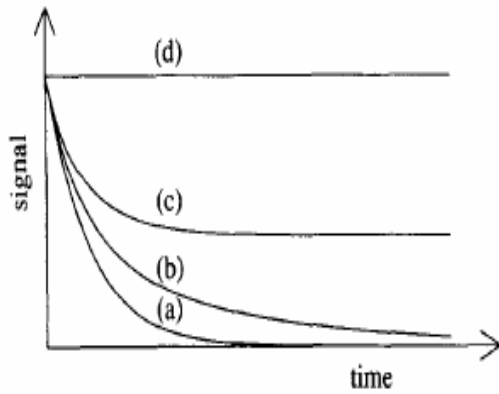


Figure 16 : Le Déphasage de Berry dû à la diffusion des atomes de Xénon [34].

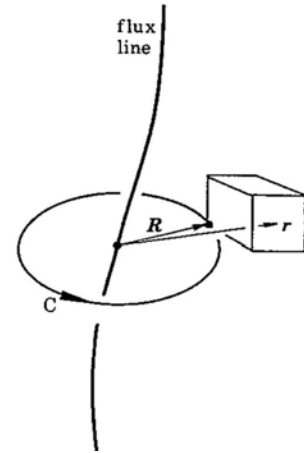


Figure 15 : L'effet Aharonov-Bohm dans une boîte transportée autour d'une ligne de Flux.

La phase de Berry a de nombreuses applications [5, 47] qui s'étendent de l'effet Hall quantique [42, 72], l'effet Aharonov-Bohm (fig. 15) [36, 37, 63, 76], l'effet Young-Taylor [47] et l'effet Güoy [17, 67] qui ne peuvent être expliquées qu'en terme de la phase de Berry, à la compréhension de l'atténuation des excitations collectives dans les systèmes finis de Fermi [5], ainsi qu'aux transitions de phase quantique qui se trouvent en dehors du modèle habituel de Landau-Ginzburg-Wilson [4, 69]. En outre, le théorème et la phase adiabatiques de Berry ont joué des rôles importants dans la conception des algorithmes quantique et l'exécution des calculs géométriques de l'information quantique [5, 27, 69, 75].

L'acquisition d'une phase géométrique dans une évolution adiabatique n'est pas confinée aux phénomènes quantiques, en effet, J. H. Hannay³ a montré que l'analogue classique de la phase de Berry existe [6, 9, 23, 36, 45, 65, 74]. Cette dernière, notée $\Delta\theta^G(t)$, est souvent connue sous le nom de *l'angle de Hannay*. Pour les systèmes intégrables⁴, 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, (cf. formule (IV-15)), dans l'espace de paramètre [6]. Dans un autre

¹ T. Bitter, D. Dubbers, Phys. Rev. Lett. **59**, 251 (1987) [3].

² A. Tomita, R. Y. Chiao, Phys. Rev. Lett. **57**, 937 (1986) [3].

³ J. H. Hannay, J. Phys. A **18**, 221 (1985) [6, 9, 36, 45].

⁴ Là où il est possible d'écrire l'hamiltonien du système en termes de variables d'action et d'angle [6].

papier, Berry et Hannay ont établi une relation semi-classique entre la phase de Berry et l'angle de Hannay, soit [74] :

$$\Delta\theta^G(t) = -\frac{\partial\gamma_k^G(t)}{\partial k} \quad (\text{IV-24})$$

III. Généralisation de la phase de Berry pour le cas continu :

1) Les différentes généralisations de la phase de Berry :

En plus de l'intérêt expérimental dont la phase de Berry a reçu, cette dernière a incité une multitude d'activité sur le plan théorique qui ont conduit à de différentes généralisations de cette notion [20, 28]. En effet, la définition originale de la phase de Berry est faite sous les conditions d'une évolution *adiabatique*, *unitaire* et *cyclique* d'un système *quantique hermitien non dégénéré* (cf. §. Précédent). Parmi ces généralisations on cite :

1. Evolutions non adiabatiques :

En 1987, Y. Aharonov et J. Anandan [77] ont montré que l'existence d'une phase géométrique ne se restreint pas aux systèmes adiabatiques [6, 12, 20, 28, 34, 35, 36, 58, 59, 74], et qu'un état quantique acquière une phase géométrique dans n'importe quelle évolution cyclique due à l'holonomie de la connexion dans l'espace des vecteurs d'unité [35, 45]. Cette phase généralisée tend exactement à la phase de Berry dans la limite adiabatique [77]. A l'inverse de la phase de Berry, la phase géométrique obtenue dans le cas général est un invariant de jauge [35, 77]. La découverte de cette phase a permis de prolonger le champ d'application de la phase de Berry [45, 58, 77] et a permis de résoudre quelques problèmes liés à cette dernière ; elle a permis d'enlever, par exemple, le mystère de pourquoi la phase de Aharonov-Bohm [76], devrait émerger de la phase de Berry quoique l'effet de Aharonov-Bohm soit indépendant de l'approximation adiabatique [77]. Cette même généralisation pour les systèmes non adiabatiques a été étendue à l'angle de Hannay dans le cas classique [6, 9, 36, 45, 74].

2. Systèmes non cycliques :

Comme on l'a vu précédemment, la phase de Berry est calculée lorsque le système effectue une évolution le long d'une courbe fermée C dans l'espace des paramètres définie par (IV-15). Ce résultat a été généralisé par J. Samuel, R. Bhandari¹ dans le cas d'une

¹ J. Samuel, R. Bhandari, Phys. Rev. Lett. **60**, 2339 (1988) [6, 20, 28].

évolution non cyclique et non unitaire [6, 20, 28], c'est-à-dire le cas où la courbe C est ouverte :

$$R_i(t_1) \neq R_i(t_0), \quad i = 1, 2, \dots \quad (\text{IV-25})$$

Comme pour le cas non adiabatique, cette généralisation s'étend aussi aux cas classiques [6], et entre dans différentes applications physiques [28].

3. Systèmes non hermitiens :

La majorité des études sur la phase de Berry ont été consacrées aux systèmes hermitien, mais il est montré¹ aussi que les systèmes non hermitien ou dissipatives admettent aussi une phase analogue, la seule différence est que cette dernière est complexe [12] tandis que la phase de Berry est réelle [64].

4. Autres généralisations :

D'autre part, la phase géométrique a été généralisée pour les cas dégénérés [34, 64], les systèmes non linéaires², le cas d'une *mesure incomplète*, par opposition à une mesure complète d'un ensemble complet d'observable qui commutent (ECOC) qui projette l'état dans un sous espace unidimensionnel de cet ensemble [35], et a des phases qui sont des invariants de jauge introduites par Bragmann³ [34, 36, 67].

2) La phase de Berry pour le spectre continu :

On a présenté ci-dessus les différentes généralisations que la phase de Berry a connu depuis sa découverte en 1983 [64]. Toutes ces généralisations se rencontrent dans le fait qu'elles ne sont applicables que dans le cas d'un spectre discret. Cet effet est dû essentiellement au fait que la phase de Berry repose sur le théorème adiabatique, dans sa version ordinaire, qui n'est valable que pour le cas du spectre discret (cf. les discussions du Ch. III.). De plus, on vérifie que la généralisation directe de la forme (IV-21) au spectre continu donne une quantité infinie, comme on va le voir dans les exemples qui seront traités ultérieurement. En effet, l'ancien théorème adiabatique implique que si à l'instant initial on a :

$$|\psi(t_0)\rangle = |\varphi(t; t_0)\rangle \quad (\text{IV-26})$$

¹ C. Z. Ning, H. Haken, Phys. Rev. Lett. **68**, 2109 (1992); J. C. Garrison, Phys. Lett. **128**, 177 (1988); S. I. Chu, Z. C. Wu, E. Layton, Chem. Phys. Lett. **157**, 151 (1989); Y. C. Ge, M. S. Child, Phys. Rev. A **58**, 872 (1998) [12].

² J. C. Garrison, R. Y. C'hiao, Phys. Rev. Lett. **60**, 165 (1988) [35].

³ V. Bargmann, J. Math. Phys. **5**, 862 (1964) [67].

alors l'état du système à l'instant t doit être :

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\gamma(t)}|\varphi(l;t)\rangle \quad (\text{IV-27})$$

où $\gamma(t)$ est une fonction ordinaire définie par l'injection de (IV-27) dans l'équation de Schrödinger (II-1), ce qui donne d'après (II-12) :

$$-\frac{\partial\gamma(t)}{\partial t}|\varphi(l;t)\rangle + i\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(l;t)\rangle = E(l;t)|\varphi(l;t)\rangle$$

en appliquant le bra $\langle\varphi(k;t)|$, compte tenu de (II-42), on trouve :

$$\langle\varphi(k;t)|i\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(l;t)\rangle = \left(E(l;t) + \frac{\partial\gamma(t)}{\partial t} \right) \delta(k-l) \quad (\text{IV-28})$$

D'après la définition (II-20) de la fonction de Dirac, on voit que lorsque on a $k=l$, l'intégrant de (IV-21) devient infini. CQFD.

En fait, le résultat ci-dessus implique que la quantité $\langle\varphi(k;t)|i\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(l;t)\rangle$ est une distribution dont le support ne contient qu'un seul point, à savoir $k=l$. D'après la théorie de distribution [53] une telle quantité peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\langle\varphi(k;t)|i\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(l;t)\rangle = \sum_n C_n(k,l) \delta^{(n)}(k-l) \quad (\text{IV-29})$$

où $\delta^{(n)}(k-l)$ est la $n^{\text{ème}}$ dérivée de la fonction de Dirac et les $C_n(k,l)$ sont des fonctions complexes. Un exemple illustrant cette affirmation sera traitée ultérieurement (cf. Ch. IV. §IV-2)).

D'autre côté, les tentatives pour la généralisation de la phase de Berry pour le spectre continu n'ont apparu que très récemment. La première tentative est celle de R. G. Newton en 1994 [66] où il a pu donner un aspect géométrique à la matrice S de diffusion. Deux ans plus tard, Z. Tang et D. Finkelstein appliquent les résultats de Berry au cas d'un spectre d'énergie continu correspondant à de certain cas des théories de jauge [79]. Un mois plus tard, G. Ghosh [29] a publié un travail qui renforce l'idée de R. G. Newton mais pour des cas particuliers de diffusion¹. Néanmoins, ces travaux ne peuvent pas être considérés comme de vraies généralisations de la phase de Berry mais de simples extensions des résultats obtenus

¹ Les travaux de R. G. Newton et G. Ghosh seront considérés avec plus de détails dans le §V de ce chapitre.

dans le cadre du spectre discret. En effet, les auteurs ne se sont pas interrogés sur la validité du théorème adiabatique dans le cas continu, un problème qui n'a pas encore été résolu. De plus, les résultats obtenus sont soit implicites ou traitant des cas particuliers.

Dans le cadre de ce travail et d'après les résultats du chapitre précédent, dans le cas du spectre continu on doit appliquer la version *généralisée* du théorème adiabatique. Ainsi on va donner une généralisation de la phase de Berry dans le cas du spectre continu. Considérons un système quantique subissant une évolution adiabatique le long d'un circuit fermé C défini par le système d'équation (IV-15), comme pour le cas discret, ces équations impliquent les conditions suivantes sur les valeurs et vecteurs propres de l'hamiltonien¹ qui vérifie (IV-12) :

$$\forall k \in I, \quad E(k; t_1) = E(k; t_0) \quad (IV-30)$$

$$\forall k \in I, \quad |\varphi(k; t_1)\rangle = |\varphi(k; t_0)\rangle \quad (IV-31)$$

Cette évolution s'effectue pendant la période T qui est supposée très grande pour qu'on puisse appliquer l'approximation adiabatique généralisée.

Comme pour le spectre discret, on va obtenir en plus de la phase dynamique $\frac{-\phi(l; t)}{\hbar}$ qui apparaît dans la formule (IV-11) et qui est due à l'opérateur $\Phi_T(t)$ définie par (III-102), une phase supplémentaire dont on peut attribuer à l'opérateur $A(t)$ d'après (III-61) ; en effet, supposons que le système se trouve à l'instant initial t_0 dans l'un des états propres de l'hamiltonien, soit :

$$|\psi(t_0)\rangle = |\varphi(l; t_0)\rangle \quad (IV-32)$$

en utilisant la propriété (II-21-g), les coefficients du développement (III-2) sont donnée par :

$$C^{t_0}(k; t_0) = \delta(k - l) \quad (IV-33)$$

D'après le théorème adiabatique généralisé², le système passe à l'instant t dans l'état $|\psi(t)\rangle$ appartenant à l'intervalle $[l, l + \delta l]$, pour que cette approximation soit valable, δl doit vérifié la condition (III-114). Cette affirmation est analogue à appliquer l'égalité (III-88) sur le ket initial (IV-32), ce qui donne :

¹ Dont le spectre est supposé complètement continu et non dégénéré.

² Dans sa forme simplifiée, page 93.

$$U(t, t_0) \delta P(l; t_0) |\varphi(l; t_0)\rangle = \delta P(l; t) U(t, t_0) |\varphi(l; t_0)\rangle \quad (\text{IV-34})$$

d'après la définition (II-104) projecteur $\delta P(l; t_0)$ on trouve :

$$U(t, t_0) \int_l^{l+\delta} \langle \varphi(l'; t_0) | \varphi(l; t_0) \rangle |\varphi(l'; t_0)\rangle dl' = \int_l^{l+\delta} |\varphi(l'; t)\rangle \langle \varphi(l'; t) | U(t, t_0) |\varphi(l; t_0)\rangle dl' \quad (\text{IV-35})$$

ce qui donne d'après (II-42), (II-21-g) et (III-18) :

$$U(t, t_0) \int_l^{l+\delta} \delta(l'-l) |\varphi(l'; t_0)\rangle dl' = |\psi(t)\rangle = \int_l^{l+\delta} |\varphi(l'; t)\rangle \langle \varphi(l'; t) | \psi(t)\rangle dl'$$

En remplaçant $|\psi(t)\rangle$ dans le dernier membre de cette équation par son développement (II-6), on trouve :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \int_l^{l+\delta} \int_l^{l+\delta} C(k'; t) \langle \varphi(l'; t) | \varphi(k'; t)\rangle |\varphi(l'; t)\rangle dk' dl' \\ &= \int_l^{l+\delta} \int_l^{l+\delta} C(k'; t) \delta(k'-l') |\varphi(l'; t)\rangle dk' dl' \end{aligned}$$

d'où

$$|\psi(t)\rangle = \int_l^{l+\delta} C(l'; t) |\varphi(l'; t)\rangle dl' \quad (\text{IV-36})$$

Par comparaison avec (II-6), les coefficients $C(l'; t)$ vérifient :

$$\begin{cases} C(l'; t) = 0, & l' \notin [l, l + \delta] \\ C(l'; t) \neq 0, & l' \in [l, l + \delta] \end{cases} \quad (\text{IV-37})$$

La probabilité pour que le système soit dans un état à l'extérieur de l'intervalle s'obtient en intégrant la définition (II-114) sur l'ensemble $I/[l, l + \delta]$, c'est-à-dire :

$$\int_{I/[l, l+\delta]} \delta \wp(k; st) = \int_{I/[l, l+\delta]} |C(k; t)|^2 \delta k \quad (\text{IV-38})$$

d'après (IV-37), il est clair que cette dernière est nulle, ce qui est en accord avec le théorème adiabatique généralisé.

Il reste maintenant à déterminer les coefficients $C(l'; t)$, $l' \in [l, l + \delta]$; en substituant (IV-37) dans l'équation (II-14) définissant ces derniers, on obtient :

$$\int_l^{l+\delta} C(l';t)E(l';t)|\varphi(l';t)\rangle dl' = \int_l^{l+\delta} i\hbar\dot{C}(l';t)|\varphi(l';t)\rangle dl' + \int_l^{l+\delta} C(l';s)i\hbar|\dot{\varphi}(l';t)\rangle dl' \quad (\text{IV-39})$$

En appliquant le bra $\langle\delta\varphi(l;t)|$ correspondant à la différentielle propre (II-52) sur cette équation, on obtient en prenant compte de (II-61) :

$$\int_l^{l+\delta} C(l';t)E(l';t) dl' = \int_l^{l+\delta} i\hbar\dot{C}(l';t) dl' + \int_l^{l+\delta} C(l';t)\langle\delta\varphi(l;t)|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(l';t)\rangle dl' \quad (\text{IV-40})$$

Cette équation est valable quelque soit l qui peut balayer tout l'ensemble I , ce qui revient à la liberté du choix de la condition initiale (IV-32), en outre, l'intervalle δl est très petit¹, et tend vers zéro lorsqu'on passe à la limite $T \rightarrow \infty$; par conséquent, l'égalité (IV-40) entre intégrales implique l'égalité entre intégrands, d'où :

$$i\hbar\dot{C}(l';t) = C(l';t)E(l';t) - C(l';t)\langle\delta\varphi(l;t)|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(l';t)\rangle, \quad l' \in [l, l + \delta l] \quad (\text{IV-41})$$

Cette équation s'intègre facilement en donnant :

$$C(l';t) = C^{t_0}(l';t_0) \exp \left[\int_{t_0}^t \frac{-i}{\hbar} E(l';t') dt' - \int_{t_0}^t \langle\delta\varphi(l;t')|\frac{\partial}{\partial t'}|\varphi(l';t')\rangle dt' \right], \quad (\text{IV-42})$$

$$l' \in [l, l + \delta l]$$

ce qui donne d'après (IV-33) :

$$C(l';t) = \delta(l'-l) \exp \left[\int_{t_0}^t \frac{-i}{\hbar} E(l';t') dt' - \int_{t_0}^t \langle\delta\varphi(l;t')|\frac{\partial}{\partial t'}|\varphi(l';t')\rangle dt' \right], \quad (\text{IV-43})$$

$$l' \in [l, l + \delta l]$$

En injectant cette expression dans (IV-36), on obtient l'évoluer $|\psi(t)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = \int_l^{l+\delta} \delta(l'-l) \exp \left[\int_{t_0}^t \frac{-i}{\hbar} E(l';t') dt' - \int_{t_0}^t \langle\delta\varphi(l;t')|\frac{\partial}{\partial t'}|\varphi(l';t')\rangle dt' \right] |\varphi(l';t)\rangle dl'$$

d'où

$$|\psi(t)\rangle = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [-\phi(l;t) + \gamma^G(l;t)] \right\} |\varphi(l;t)\rangle \quad (\text{IV-44})$$

¹ De sorte que la condition (III-114) reste toujours vérifiée.

avec $\phi(l;t)$ la phase dynamique obtenu dans le cas trivial précédent (cf. formule (IV-11)) et définie par (III-103), et $\gamma^G(l;t)$ est défini par :

$$\gamma^G(l;t) = \int_{t_0}^t \langle \delta\phi(l;t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \phi(l;t') \rangle dt' \quad (\text{IV-45})$$

Ce résultat (IV-44) constitue la généralisation de la phase de Berry (IV-21) pour le cas du spectre continu. On appelle *la phase géométrique généralisée* la grandeur donnée par l'expression (IV-45). D'après (IV-29), il est clair que cette dernière est complexe, d'où, contrairement à la phase de Berry, la phase géométrique généralisée peut jouer le rôle d'une amplitude géométrique si elle est purement imaginaire. De plus, on montre qu'elle a un caractère *géométrique* ; en effet, comme pour le spectre discret, après une période T le système revient à son état initial selon (IV-12), et on obtient :

$$|\psi(t_1)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}[-\phi(l;t_1)+\gamma^G(l;t_1)]} |\phi(l;t_1)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}[-\phi(l;t_1)+\gamma^G(l;t_1)]} |\phi(l;t_0)\rangle \quad (\text{IV-46})$$

avec

$$\gamma^G(l;t_1) = \int_{t_0}^{t_1} \langle \delta\phi(l;t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \phi(l;t') \rangle dt' \quad (\text{IV-47})$$

qui s'écrit en fonctions des paramètres $R_i(t)$, $i = 1, 2, \dots$ comme suit :

$$\gamma^G(l;t_1) = \gamma^G(l;C) = \oint_C \langle \delta\phi(l;\vec{R}) | i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{R}} | \phi(l;\vec{R}) \rangle d\vec{R} \quad (\text{IV-48})$$

\vec{R} représente un vecteur de l'espace des paramètres défini par :

$$\vec{R} = (R_1, R_2, R_3, \dots) \quad (\text{IV-49})$$

et $\vec{\nabla}_{\vec{R}}$ l'opérateur gradient suivant les axes de l'espace des paramètres défini par :

$$\vec{\nabla}_{\vec{R}} = \left(\frac{\partial}{\partial R_1}, \frac{\partial}{\partial R_2}, \frac{\partial}{\partial R_3}, \dots \right) \quad (\text{IV-50})$$

En appliquant le théorème de Stokes [64], on obtient :

$$\gamma^G(l;C) = \iint_S \vec{\nabla}_{\vec{R}} \wedge \langle \delta\phi(l;\vec{R}) | i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{R}} | \phi(l;\vec{R}) \rangle d\vec{S} \quad (\text{IV-51})$$

avec S la surface engendrée par la courbe fermée C , et comme cette dernière n'est pas nulle, la phase $\gamma^G(l; C)$ est différente de zéro, ou plus exactement de $\gamma^G(l; t_0)$, d'où la caractère géométrique de celle-ci. En effet, d'après (IV-51) on voit que cette phase ne dépend que de la surface S et non pas de la manière avec laquelle le circuit C est traversé. De plus, d'après la propriété (IV-29) assure le fait que l'évolution du vecteur d'état du système le long du cycle C peut être considérés comme un transport parallèle ce vecteur le long de cette courbe, d'où la possibilité d'interpréter cette nouvelle phase en terme d'holonomie ; en effet, pour les particule ayant un spin s , on montre que cette phase représente le produit du spin avec l'angle solide enfermé par le cycle C à un signe moins près, mais cette fois l'angle solide n'est pas nécessairement vue à partir de l'origine des axes de l'espace du paramètres. Ce résultat sera illustré plus bas en considérant l'exemple d'une particule de spin $\frac{1}{2}$ dans un champ électromagnétique.

Ainsi, on a obtenu un résultat *analogue* à celui obtenu par Berry dans le cas discret et qui vérifie les mêmes propriétés de ce dernier. En fait, d'après (IV-21) et (IV-45), on constate que la seule différence entre les deux phases est l'existence de l'intégrale sur l'intervalle \mathcal{I} apporté par la différentielle propre dans la phase (IV-45). En fait, comme l'état $|\psi(t)\rangle$, donné par (IV-44), est une solution de l'équation de Schrödinger, alors, d'après (IV-28) et pour simplifier¹, on a :

$$\langle \varphi(l'; t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(l; t) \rangle \propto \delta(l' - l) \quad (IV-52)$$

Cette relation peut s'écrire comme suit :

$$\langle \varphi(l'; t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(l; t) \rangle = f(l, l'; t) \delta(l' - l) \quad (IV-53)$$

où la fonction $f(l, l'; t)$ joue le rôle de la constante de proportionnalité. D'après la propriété (II-21-e), (IV-53) devient :

¹ En réalité, la grandeur $\langle \varphi(l'; t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(l; t) \rangle$ vérifie la propriété (VI-29), dans ce cas (VI-55) devient

$$\langle \delta\varphi(l; t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(l; t) \rangle = \sum_n (-1)^n \left. \frac{\partial^n C_n(l', l)}{\partial l'^n} \right|_{l'=l}.$$

$$\langle \varphi(l';t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(l;t) \rangle = f(l,l;t) \delta(l'-l) \equiv f(l;t) \delta(l'-l) \quad (\text{IV-54})$$

par conséquent, on obtient :

$$\langle \delta\varphi(l;t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(l;t) \rangle = f(l;t) \quad (\text{IV-55})$$

Alors, le rôle de l'intégration se réduit à l'élimination de la singularité présentée par la distribution de Dirac. En effet, dans le cas du spectre discret, l'analogie de (IV-55) peut s'écrire :

$$\langle \varphi_i(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_i(t) \rangle = f_i(t) \quad (\text{IV-56})$$

Cette analogie entre les deux phases permet de mesurer $\gamma^G(l;t_0)$ expérimentalement au même titre que la phase de Berry. De plus, d'après les résultats de Z. Tang et D. Finkelstein [79], la phase géométrique généralisée offre un nouvel aperçu sur l'origine des termes topologiques comme le terme de Chern-Simon et le terme de Wess-Zumino et par la même occasion sur les anomalies et le spin des solitons de la théorie de jauge [78]. En plus, on va voir que cette phase généralisée (IV-50) est liée directement avec la matrice S de diffusion. En effet, on va voir que les éléments diagonaux de la matrice S, ou plus exactement les amplitudes de transmission, dans le cas d'un spectre non dégénéré¹ sont proportionnels aux différentes phases géométriques correspondantes aux différentes valeurs de l'indice continu.

On propose ci-dessous trois exemples d'application pour illustrer le résultat obtenu ; dans le premier on va calculer la phase géométrique généralisée pour une équation de Dirac dans un champ électromagnétique. Dans le deuxième, on va traiter un exemple dans lequel la phase géométrique ne présente pas un grand intérêt en elle-même car elle s'annule après une période, mais se dernier va nous permettre d'illustrer l'assertion (IV-29). Dans le dernier exemple, après avoir établi la relation entre la matrice S et la phase géométrique généralisée (IV-45), on va étudier le cas d'une particule soumise à un potentiel qui ne contient que des termes de transmission, dont la solution exacte est connu, avec un approche dépendant du temps pour illustrer cette dernière.

¹ Le cas d'un spectre dégénéré nécessite une étude plus détaillée !

Avant de commencer l'application de la phase géométrique généralisée pour les exemples ci-dessus, on va l'écrire en fonction des vecteurs propres $|\varphi(k;t)\rangle$ au lieu des différentielles propres. En effet, d'après les discussions du deuxième chapitre on a vu que les *vraies* résultats pour le spectre contenu sont les résultats obtenus en fonction des différentielles propres, comme on l'a fait ici pour la généralisation de la phase de Berry, mais ça n'empêche pas de les écrire directement en fonction des vecteurs propres, les résultats obtenus de cette manière sont plus pratiques (cf. Ch. I. et II.). En effet, d'après la propriété (IV-52), en utilisant les définitions (II-52) de la différentielle propre et (II-20) de la fonction de Dirac, on peut prolonger le domaine d'intégration $[l, l + \delta l]$ vers l'ensemble global I , d'où :

$$\gamma^G(l;t) = \int_{t_0}^t \int_I \langle \varphi(l';t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(l;t') \rangle dl' dt' \quad (IV-57)$$

IV. Exemples d'application de la phase géométrique généralisée :

1) *L'équation de Dirac dans un champ électromagnétique :*

1. Description du problème :

Dans ce paragraphe on va traiter l'exemple d'une particule relativiste de spin $\frac{1}{2}$ et de masse $m(t)$ dans un champ électromagnétique dépendant du temps, l'évolution temporelle de cette dernière est supposée suffisamment lente, ou adiabatique, cette évolution est décrite par l'équation de Dirac *unidimensionnelle* suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H_D(t) |\psi(t)\rangle \quad (IV-58)$$

l'hamiltonien $H_D(t)$ est donné par :

$$H_D(t) = c\alpha^3 \left(p - \begin{pmatrix} f(t) \cdot \mathbf{1} & \emptyset \\ \emptyset & f^*(t) \cdot \mathbf{1} \end{pmatrix} \right) + \beta \cdot m(t)c^2 \quad (IV-59)$$

avec $f(t)$ est une fonction dépendante du temps, $f^*(t)$ son conjugué complexe, le terme qui contient ces deux grandeurs constitue le champ électromagnétique en question comme on va le voir en passant à la limite non relativiste plus bas, c la vitesse de la lumière dans le vide et α^3 et β représentent les matrices de Dirac, données dans la représentation standard par [8] :

$$\alpha^3 = \begin{pmatrix} \emptyset & \sigma^3 \\ \sigma^3 & \emptyset \end{pmatrix} \quad (\text{IV-60})$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \emptyset \\ \emptyset & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (\text{IV-61})$$

avec σ^3 la matrice de Pauli suivant l'axe z [14], \emptyset et $\mathbb{1}$ les matrices nulle et unité respectivement, ces trois matrices sont des matrices 2×2 . Par conséquent, l'hamiltonien $H_D(t)$ est une matrice 4×4 qui s'écrit :

$$H_D(t) = \begin{pmatrix} m(t).c^2.\mathbb{1} & c\sigma^3[p - f(t)] \\ c\sigma^3[p - f^*(t)] & -m(t).c^2.\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (\text{IV-62})$$

ou, d'une manière condensée :

$$H_D(t) = m(t).c^2 |1\rangle\langle 1| - m(t).c^2 |2\rangle\langle 2| + c\sigma^3[p - f(t)]|1\rangle\langle 2| + c\sigma^3[p - f^*(t)]|2\rangle\langle 1| \quad (\text{IV-63})$$

où les kets $|1\rangle$ et $|2\rangle$ représentent les vecteurs de la base canonique de l'espace des bispineurs définis par :

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{IV-64})$$

$$|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{IV-65})$$

et qui vérifient les relations d'orthonormalisation suivantes :

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2 \quad (\text{IV-66})$$

2. Recherche des vecteurs et valeurs propres :

On vérifie facilement que $H_D(t)$ est un opérateur hermitien. Alors, comme le système quantique décrit ci-dessus est adiabatique, on peut appliquer le théorème adiabatique ordinaire ou généralisé selon la nature du spectre, pour faire, on doit d'abord résoudre l'équation aux valeurs propres suivante :

$$H_D(t)|\varphi(t)\rangle = E(t)|\varphi(t)\rangle \quad (\text{IV-67})$$

avec $E(t)$ l'énergie de la particule ou la valeur propre, et $|\varphi(t)\rangle$ le bispineur propre correspondant.

Pour résoudre cette équation, développons le bispineur $|\varphi(t)\rangle$ sur la base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, soit¹ :

$$|\varphi(t)\rangle = \varphi_1(z;t)|1\rangle + \varphi_2(z;t)|2\rangle \quad (\text{IV-68})$$

pour déterminer $\varphi_1(z;t)$ et $\varphi_2(z;t)$, on injecte (IV-68) dans (IV-67) ce qui donne en prenant (IV-63) et (IV-64) en compte :

$$E(t)\varphi_1(z;t)|1\rangle + E(t)\varphi_2(z;t)|2\rangle = \{m(t).c^2 \varphi_1(z;t) + c\sigma^3 [p - f(t)] \varphi_2(z;t)\}|1\rangle + \{-m(t).c^2 \varphi_2(z;t) + c\sigma^3 [p - f^*(t)] \varphi_1(z;t)\}|2\rangle \quad (\text{IV-69})$$

En utilisant la définition suivante de l'impulsion p [14] :

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{IV-70})$$

on obtient le système d'équation suivant :

$$\begin{cases} c\sigma^3 \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial z} + f(t) \right] \varphi_2(z;t) = [m(t).c^2 - E(t)] \varphi_1(z;t) \\ c\sigma^3 \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial z} + f^*(t) \right] \varphi_1(z;t) = -[m(t).c^2 + E(t)] \varphi_2(z;t) \end{cases} \quad (\text{IV-71})$$

De la première équation on tire :

$$\varphi_1(z;t) = \frac{c\sigma^3 \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial z} + f(t) \right]}{[m(t).c^2 - E(t)]} \varphi_2(z;t) \quad (\text{IV-72})$$

En substituant cette de dernière dans la deuxième équation du système (IV-71), on trouve :

$$[c\sigma^3]^2 \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + i\hbar(f(t) + f^*(t)) \frac{\partial}{\partial z} + f(t)f^*(t) \right] \varphi_2(z;t) = [E^2(t) - m^2(t).c^4] \varphi_2(z;t) \quad (\text{IV-73})$$

Posons :

$$f(t) = f_R(t) + i f_I(t) \quad (\text{IV-74})$$

alors, en d'après la propriété suivante de la matrice de Pauli [14] :

¹ On va se mettre à partir de cette formule en représentation position.

$$(\sigma^3)^2 = 1 \quad (\text{IV-75})$$

l'équation (IV-73) devient :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2if_R(t)}{\hbar} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{c^2 \hbar^2} [E^2(t) - m^2(t)c^4 - f_R^2(t)c^2 - f_I^2(t)c^2] \right] \varphi_2(z;t) = 0 \quad (\text{IV-76})$$

La solution de cette équation est donnée par :

$$\varphi_2(k, z; t) = N(k; t) e^{\frac{i}{\hbar} k \cdot z} \quad (\text{IV-77})$$

avec¹

$$k = f(t) - g(k; t) \quad (\text{IV-78})$$

où²

$$g(k; t) = \frac{1}{c} \sqrt{E^2(k; t) - m^2(t)c^4 - f_I^2(t)c^2} + if_I(t) \quad (\text{IV-79})$$

Pour obtenir $\varphi_2(k, z; t)$, on substitue (IV-77) dans (IV-72), d'où :

$$\varphi_1(k, z; t) = \frac{c\sigma^3[-k + f(t)]}{[m(t)c^2 - E(k; t)]} N(k; t) e^{\frac{i}{\hbar} k \cdot z} \quad (\text{IV-80})$$

Par conséquent, les vecteurs propres de $H_D(t)$ sont données, d'après (IV-68), par :

$$|\varphi(k; t)\rangle = \left\{ \frac{c\sigma^3[-k + f(t)]}{[m(t)c^2 - E(k; t)]} |1\rangle + |2\rangle \right\} N(k; t) e^{\frac{i}{\hbar} k \cdot z} \quad (\text{IV-81})$$

Les valeurs propres correspondants sont déterminés en calculant le module de $g(t)$, en effet :

$$E^2(k; t) = m^2(t)c^4 + |g(k; t)|^2 c^2 \quad (\text{IV-82})$$

Ce qui donne en posant :

$$E^\pm(k; t) = \pm \hbar \omega(k; t) \quad (\text{IV-83})$$

avec

¹ On note que le cas $k = f(t) + g(t)$ est aussi solution, mais on ne va s'intéresser ici que du premier cas pour simplifier, en fait, ça revient à choisir une constante d'intégration nulle pour cette deuxième solution.

² On va voir que les valeurs et vecteurs propres dépendent de k , pour cette raison on écrit ces derniers comme fonctions de k .

$$\hbar\omega(k;t) = c\sqrt{m^2(t).c^2 + |g(k;t)|^2} \quad (\text{IV-84})$$

Selon les résultats obtenus ci-dessus, il est clair que le spectre de l'hamiltonien est continu, alors la solution de l'équation (IV-58) est donnée par l'application du théorème adiabatique généralisé. Mais avant de faire, on doit d'abord déterminer la constante de normalisation $N(k;t)$. Le produit scalaire des vecteurs (IV-81) donne en utilisant (IV-66) :

$$\langle \varphi^\pm(l;t) | \varphi^\pm(k;t) \rangle = \left\{ \left(\frac{c\sigma^3[-l+f^*(t)]}{[m(t).c^2 - E^\pm(l;t)]} \right) \left(\frac{c\sigma^3[-k+f(t)]}{[m(t).c^2 - E^\pm(k;t)]} \right) + 1 \right\} |N(k;t)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(k-l).z} dz$$

ce qui donne d'après (II-21-b), (II-21-e), (II-21-f) et (IV-75) :

$$\langle \varphi^\pm(l;t) | \varphi^\pm(k;t) \rangle = \left\{ \left(\frac{c^2[k^2 - (f(t) + f^*(t))k + f(t)f^*(t)]}{[m(t).c^2 - E^\pm(k;t)]^2} \right) + 1 \right\} |N(k;t)|^2 2\pi\hbar\delta(k-l) \quad (\text{IV-85})$$

d'où

$$\langle \varphi^\pm(l;t) | \varphi^\pm(k;t) \rangle = \left(\frac{c^2[k^2 - 2f_R(t)k + f_R^2(t) + f_I^2(t)] + [m(t).c^2 - E^\pm(k;t)]^2}{[m(t).c^2 - E^\pm(k;t)]^2} \right) |N(k;t)|^2 2\pi\hbar\delta(k-l)$$

en utilisant (IV-78), (IV-79) et (IV-82), on trouve :

$$\langle \varphi^\pm(l;t) | \varphi^\pm(k;t) \rangle = \left(\frac{[m(t).c^2 - E^\pm(k;t)]^2 + |g(k;t)|^2 c^2}{[m(t).c^2 - E^\pm(k;t)]^2} \right) |N(k;t)|^2 2\pi\hbar\delta(k-l) \quad (\text{IV-86})$$

par comparaison avec la relation d'orthonormalisation (II-42) on trouve :

$$N^\pm(k;t) = \left(\frac{[m(t).c^2 - E^\pm(k;t)]}{\left[[m(t).c^2 - E^\pm(k;t)]^2 + |g(k;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (\text{IV-87})$$

les vecteurs propres deviennent donc, d'après (IV-81) et (IV-78) :

$$|\varphi^\pm(k;t)\rangle = \left\{ \frac{c\sigma^3 g(k;t)}{\left[[m(t).c^2 - E^\pm(k;t)]^2 + |g(k;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} |1\rangle + \frac{[m(t).c^2 - E^\pm(k;t)]}{\left[[m(t).c^2 - E^\pm(k;t)]^2 + |g(k;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} |2\rangle \right\} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}k.z}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

d'où

$$|\varphi^\pm(k;t)\rangle = \left\{ \frac{c\sigma^3 g(k;t)}{\left[[m(t).c^2 \mp \hbar\omega(k;t)]^2 + |g(k;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} |1\rangle + \frac{m(t).c^2 \mp \hbar\omega(k;t)}{\left[[m(t).c^2 \mp \hbar\omega(k;t)]^2 + |g(k;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} |2\rangle \right\} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}k.z}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (\text{IV-88})$$

3. Calcul de la phase géométrique généralisée :

Supposant pour commencer, que la particule se trouve à l'instant initial dans l'état :

$$|\psi(t_0)\rangle = |\varphi^+(l;t_0)\rangle \quad (\text{IV-89})$$

D'après le théorème adiabatique généralisé et les résultats du paragraphe précédent, la particule se trouve à l'instant t dans l'état (cf. formule (IV-44)) :

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[-\phi^+(l;t) + \gamma^{G^+}(l;t) \right] \right\} |\varphi^+(l;t)\rangle \quad (\text{IV-90})$$

avec, (cf. formules (III-103) et (IV-84)) :

$$\phi^+(k;t) = \int_{t_0}^t c \sqrt{m^2(t).c^2 + |g(k;t)|^2} dt' \quad (\text{IV-91})$$

et (cf. formule (IV-57))

$$\gamma^{G^+}(l;t) = \int_{t_0}^t \int_l \langle \varphi^+(l';t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi^+(l;t') \rangle dl' dt' \quad (\text{IV-92})$$

Pour déterminer $\gamma^{G^+}(l;t)$ on utilise (IV-66) et (IV-88), ce qui donne :

$$\begin{aligned} \langle \varphi^+(l';t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi^+(l;t) \rangle &= \left\{ \frac{c\sigma^3 g^*(l';t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l';t)]^2 + |g(l';t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \times \right. \\ &\times i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{c\sigma^3 g(l;t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2 + |g(l;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right) + \frac{m(t).c^2 - \hbar\omega(l';t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l';t)]^2 + |g(l';t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \times \\ &\left. \times i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2 + |g(l;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right) \right\} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(l-l').z}}{2\pi\hbar} dz \end{aligned}$$

en utilisant (II-21-f) on trouve :

$$\begin{aligned} \langle \varphi^+(l';t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi^+(l;t) \rangle &= \left\{ \frac{c\sigma^3 g^*(l';t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l';t)]^2 + |g(l';t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \times \right. \\ &\times i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{c\sigma^3 g(l;t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2 + |g(l;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right) + \frac{m(t).c^2 - \hbar\omega(l';t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l';t)]^2 + |g(l';t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \times \\ &\left. \times i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2 + |g(l;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right) \right\} \delta(l-l') \end{aligned}$$

On remarque que ce résultat confirme parfaitement la condition (IV-52). Donc, après intégration par rapport à l' , on obtient :

$$\begin{aligned} \int_l \langle \varphi^+(l';t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi^+(l;t) \rangle dl' &= \left\{ \frac{c\sigma^3 g^*(l;t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2 + |g(l;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \times \right. \\ &\left. i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{c\sigma^3 g(l;t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2 + |g(l;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right) + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2 + |g(l;t)|^2 c^2 \right]} \right) \right\} \end{aligned} \quad (IV-93)$$

d'où

$$\begin{aligned} \int_l \langle \varphi^+(l';t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi^+(l;t) \rangle dl' &= \left\{ \frac{c^2 g^*(l;t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2 + |g(l;t)|^2 c^2 \right]} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} g(l;t) + \right. \\ &+ \frac{c^2 g^*(l;t)g(l;t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2 + |g(l;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2 + |g(l;t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right) + \\ &\left. + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l;t)]^2 + |g(l;t)|^2 c^2 \right]} \right) \right\} \end{aligned}$$

par intégration par rapport au temps, on obtient :

$$\int_{t_0}^t \int_{l'} \langle \varphi^+(l'; t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi^+(l; t') \rangle dl' dt' = \int_{t_0}^t \left\{ \frac{c^2 g^*(l; t')}{\left[[m(t')c^2 - \hbar\omega(l; t')]^2 + |g(l; t')|^2 c^2 \right]} i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} g(l; t') + \frac{c^2 g^*(l; t') g(l; t')}{2} i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \left(\frac{1}{\left[[m(t')c^2 - \hbar\omega(l; t')]^2 + |g(l; t')|^2 c^2 \right]} \right) + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t'} \left(\frac{[m(t')c^2 - \hbar\omega(l; t')]^2}{\left[[m(t')c^2 - \hbar\omega(l; t')]^2 + |g(l; t')|^2 c^2 \right]} \right) \right\} dt'$$

d'où

$$\int_{t_0}^t \int_{l'} \langle \varphi^+(l'; t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi^+(l; t') \rangle dl' dt' = \left\{ \int_{t_0}^t \frac{i\hbar c^2 g^*(l; t') \dot{g}(l; t')}{\left[[m(t')c^2 - \hbar\omega(l; t')]^2 + |g(l; t')|^2 c^2 \right]} dt' - \int_{t_0}^t \frac{i\hbar}{2} \frac{c^2 (\dot{g}^*(l; t') g(l; t') + g^*(l; t') \dot{g}(l; t'))}{\left[[m(t')c^2 - \hbar\omega(l; t')]^2 + |g(l; t')|^2 c^2 \right]} dt' + \frac{i\hbar}{2} \left(\frac{[m(t')c^2 - \hbar\omega(l; t')]^2 + c^2 |g(l; t')|^2}{\left[[m(t')c^2 - \hbar\omega(l; t')]^2 + |g(l; t')|^2 c^2 \right]} \right) \Big|_{t_0}^t \right\}$$

par conséquent, on trouve :

$$\gamma^{G^+}(l; t) = \frac{i\hbar c^2}{2} \int_{t_0}^t \frac{g^*(l; t') \dot{g}(l; t') - \dot{g}^*(l; t') g(l; t')}{\left[[m(t')c^2 - \hbar\omega(l; t')]^2 + |g(l; t')|^2 c^2 \right]} dt' \quad (\text{IV-94})$$

Après une période T , cette phase devient d'après (IV-78) :

$$\gamma^{G^+}(l; t_0 + T) = \frac{i\hbar c^2}{2} \int_{t_0}^{t_0+T} \frac{f^*(t') \dot{f}(t') - \dot{f}^*(t') f(t') + l (\dot{f}^*(t') - \dot{f}(t'))}{\left[[m(t')c^2 - \hbar\omega(l; t')]^2 + |g(l; t')|^2 c^2 \right]} dt' \quad (\text{IV-95})$$

en utilisant (IV-74) on trouve (cf. formule (IV-48)) :

$$\gamma^{G^+}(l; t_0 + T) = \hbar c^2 \oint \frac{f_l^2(t) d\left(\frac{f_R(t)}{f_l(t)}\right) + l df_l(t)}{c \left[[m(t')c^2 - \hbar\omega(l; t')]^2 + |g(l; t')|^2 c^2 \right]} \quad (\text{IV-96})$$

Ainsi, on a obtenu la phase géométrique généralisée correspondante à une particule relativiste qui évolue adiabatement dans un champ électromagnétique. Comme pour la phase de Berry ordinaire, il est clair, d'après le résultat ci-dessus, que la phase géométrique généralisée est aussi réelle.

4. Interprétation de la phase géométrique généralisée :

Comme on l'avait dit ci-dessus, on va montrer que la phase géométrique généralisée (IV-96) dans l'exemple en cours n'est que le produit du spin de la particule, qui vaut $\frac{1}{2}$, avec l'angle solide enfermé par le cycle parcouru dans l'espace des paramètres. Le résultat central dont on va obtenir consiste en ce que l'angle solide obtenu représente celui à travers lequel le cycle est vu à partir d'un point de coordonnées $(l, 0, 0)$ dans l'espace des paramètres, où l est l'indice quantique, en non pas du point $(0, 0, 0)$ dans le cas du spectre discret [60, 61, 62, 64]. Ainsi, le résultat décrit dans ces références n'est qu'un cas particulier, c'est-à-dire $l = 0$, de celui obtenu ici.

Alors pour le faire, on se met dans les coordonnées sphériques de l'espace des paramètres. Soit le changement de variable suivant¹ :

$$f_R + k = \frac{1}{c} E^+(k) \sin(\theta) \cos(\varphi) \quad (IV-97)$$

$$f_I = \frac{1}{c} E^+(k) \sin(\theta) \sin(\varphi) \quad (IV-98)$$

$$m c = \frac{1}{c} E^+(k) \cos(\theta) \quad (IV-99)$$

En utilisant (IV-82) et (IV-83) la phase (IV-96) devient :

$$\gamma^{G^+}(l; t_0 + T) = \hbar c^2 \oint_c \frac{f_I(t) df_R(t) - (f_R(t) - l) df_I(t)}{2E^+(l)[E^+(l) - m c^2]}$$

ou encore

$$\gamma^{G^+}(l; t_0 + T) = \hbar c^2 \oint_c \frac{f_I^2(t) d\left(\frac{f_R(t) - l}{f_I(t)}\right)}{2E^+(l)[E^+(l) - m c^2]} \quad (IV-100)$$

En utilisant les coordonnées sphériques ci-dessus on trouve :

$$\gamma^{G^+}(l; t_0 + T) = \frac{\hbar}{2} \oint_c \frac{\sin^2(\theta) \sin^2(\varphi) d\left(\frac{\cos(\varphi)}{\sin(\varphi)}\right)}{[1 - \cos(\theta)]} \quad (IV-101)$$

¹ Dans le reste de ce paragraphe on va omettre le variable du temps pour alléger l'écriture.

en utilisant la propriété suivante :

$$\cos^2(\theta) + \sin^2(\theta) = 1 \quad (\text{IV-102})$$

on trouve :

$$\gamma^{\sigma^+}(l; t_0 + T) = -\frac{\hbar}{2} \oint_C (1 + \sin(\theta)) d\varphi \quad (\text{IV-103})$$

Comme le système subit une évolution cyclique, alors le premier terme de la formule ci-dessus s'annule, en effet :

$$\oint_C d\varphi = \varphi(t_0 + T) - \varphi(t_0) = 0 \quad (\text{IV-104})$$

et le second terme n'est que l'angle solide enfermé par le cycle C et dont le centre avec lequel on voit est selon les relations (IV-97), (IV-98) et (IV-99) le point de coordonnées $(f_R = l, f_I = 0, m = 0)$, voir la figure 16, on a donc :

$$\gamma^{\sigma^+}(l; t_0 + T) = -\frac{\hbar}{2} \Omega'(l) \quad (\text{IV-105})$$

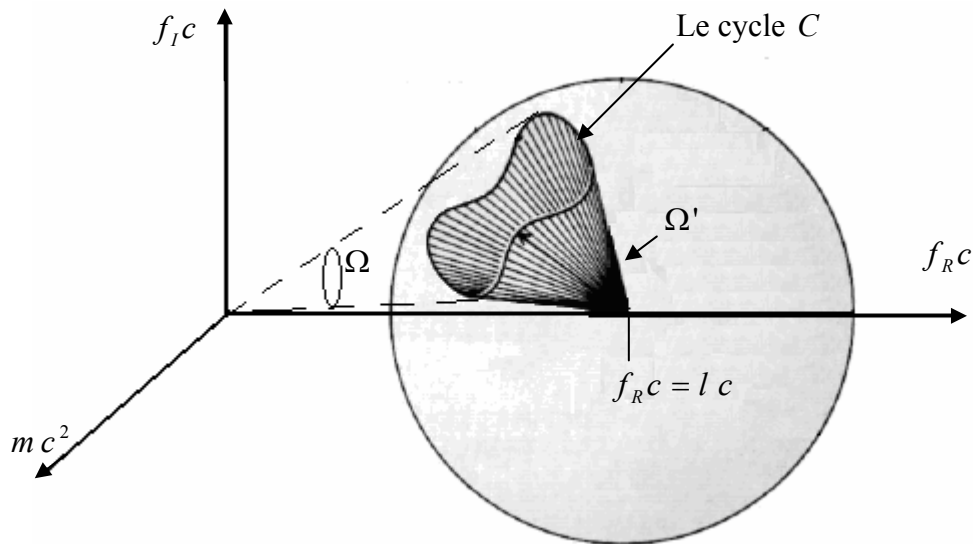


Figure 17 : L'angle solide dans le cas du spectre continu.

où le facteur $\frac{1}{2}$ représente exactement la valeur du spin de la particule en question ce qui est en accord avec les résultats obtenus dans le cas discret. Il est clair que l'angle solide $\Omega'(l)$ est différent de l'angle solide Ω obtenu par [60, 61, 62, 64] et qui ne représente qu'un cas particulier de $\Omega'(l)$, en effet :

$$\Omega'(l=0) = \Omega \quad (\text{IV-106})$$

5. La limite non relativiste :

Dans ce paragraphe, on va voir que la phase géométrique donnée par (IV-96) ou encore (IV-105) n'est qu'un effet purement relativiste qui disparaît en passant à la limite non relativiste du système (IV-58). En passant à cette limite on va voir qu'effectivement ce dernier représente exactement une particule dans un champ électromagnétique où on va identifier les parties réelle et imaginaire du champ complexe $f(t)$ avec un potentiel scalaire et un vecteur potentiel respectivement. Alors, d'après [8], pour passer à la limite non relativiste on effectue la transformation unitaire suivante :

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow e^{-\frac{ic^2}{\hbar} \int_{t_0}^t m(t') dt'} |\psi(t)\rangle \quad (\text{IV-107})$$

par conséquent l'équation (IV-58) devient :

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + m c^2 \right) |\psi(t)\rangle = H_D(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{IV-108})$$

ce qui donne d'après (IV-63) :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = [-2m(t).c^2 |2\rangle\langle 2| + c\sigma^3 [p - f(t)] |1\rangle\langle 2| + c\sigma^3 [p - f^*(t)] |2\rangle\langle 1|] |\psi(t)\rangle \quad (\text{IV-109})$$

En écrivant $|\psi(t)\rangle$ dans la base des bispineurs $|1\rangle$ et $|2\rangle$, c'est-à-dire :

$$|\psi(t)\rangle = \psi_1(z;t) |1\rangle + \psi_2(z;t) |2\rangle \quad (\text{IV-110})$$

on obtient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(z;t) |1\rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2(z;t) |2\rangle = c\sigma^3 [p - f(t)] \psi_2(z;t) |1\rangle + (c\sigma^3 [p - f^*(t)] \psi_1(z;t) - 2m(t).c^2 \psi_2(z;t)) |2\rangle \quad (\text{IV-111})$$

d'où

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(z;t) = c\sigma^3 [p - f(t)] \psi_2(z;t) \quad (\text{IV-112})$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + 2m(t).c^2 \right) \psi_2(z;t) = c\sigma^3 [p - f^*(t)] \psi_1(z;t) \quad (\text{IV-113})$$

la limite non relativiste consiste à prendre [8] :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \ll 2m(t).c^2 \quad (\text{IV-114})$$

donc, (IV-113) devient :

$$\psi_2(z;t) = \frac{\sigma^3 [p - f^*(t)]}{2m(t).c} \psi_1(z;t) \quad (\text{IV-115})$$

en substituant cette relation dans (IV-112) et en utilisant la propriété (IV-75) on obtient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(z;t) = \frac{[p - f(t)][p - f^*(t)]}{2m(t)} \psi_1(z;t) \quad (\text{IV-116})$$

ou encore en utilisant (IV-74) :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(z;t) = H^{NR}(t) \psi_1(z;t) \quad (\text{IV-117})$$

où

$$H^{NR}(t) = \frac{[p - f_R(t)]^2}{2m(t)} + \frac{f_I^2}{2m(t)} \quad (\text{IV-118})$$

qui est l'hamiltonien non relativiste correspondant à (IV- 59). Il est clair que cet hamiltonien représente une particule dans un champ électrique déterminé par le potentiel scalaire définie comme suit :

$$e V(t) = \frac{f_I^2}{2m(t)} \quad (\text{IV-119})$$

et un champ magnétique défini par le vecteur potentiel suivant :

$$e A(t) = f_R(t) \quad (\text{IV-120})$$

L'hamiltonien (IV-118) admet comme vecteurs propres les fonctions d'onde suivantes :

$$\psi_1(z, k; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\left(k + \frac{f_R}{\hbar}\right)z} \quad (\text{IV-121})$$

correspondant aux énergies suivantes :

$$E(k;t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m(t)} + \frac{f_I^2}{2m(t)} \quad (\text{IV-122})$$

En appliquant les résultats de ce chapitre, la phase géométrique généralisée correspondant à ce système est donnée selon (IV-57) par :

$$\gamma^G(l;t) = \int_{t_0}^t \frac{1}{2\pi} \int_I \int e^{-i\left(l+\frac{f_R}{h}\right)z} i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} e^{i\left(l+\frac{f_R}{h}\right)z} dz dl' dt' = - \int_{t_0}^t \frac{\dot{f}_R}{2\pi} \int_I \int z e^{i(l-l')z} dz dl' dt' \quad (\text{IV-123})$$

ce qui donne en dérivant (II-21-f) :

$$\dot{\gamma}^G(l;t) = -i \int_{t_0}^t \dot{f}_R \int_I \delta^{(1)}(l-l') dl' dt' = 0 \quad (\text{IV-124})$$

Ainsi, on voit que dans la limite non relativiste le système (IV-58) n'admet pas une phase géométrique généralisée.

2) Une particule dans un champ homogène :

Considérons maintenant une particule dans un champ homogène décrite par l'hamiltonien suivant [50], (voir fig. 3) :

$$H(t) = \frac{p^2}{2m(t)} - F(t)x \quad (\text{IV-125})$$

où $m(t)$ et $F(t)$ sont des fonctions qui dépendent adiabatiquement du temps. D'après [50] les vecteurs propres de cet hamiltonien sont donnés par :

$$\varphi(x, k; t) = N Ai \left[-\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(x + \frac{k}{F} \right) \right] \quad (\text{IV-126})$$

avec Ai la fonction d'Airy définie comme suit :

$$Ai(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda x} e^{i\frac{\lambda^3}{3}} d\lambda \quad (\text{IV-127})$$

et N la constante de normalisation définie par la condition d'orthonormalisation (II-42). On a donc :

$$\langle \varphi(k'; t) | \varphi(k; t) \rangle = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[i(\lambda' - \lambda) \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x \right] \exp \left[i \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(\lambda' \frac{k'}{F} - \lambda \frac{k}{F} \right) \right] e^{-i\frac{\lambda'^3}{3}} e^{i\frac{\lambda^3}{3}} dx d\lambda' d\lambda$$

ce qui donne en utilisant les propriétés (II-21-b) et (II-21-b) :

$$\langle \varphi(k'; t) | \varphi(k; t) \rangle = 2\pi N^2 \sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{2mF}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\lambda' - \lambda) \exp \left[i \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(\lambda' \frac{k'}{F} - \lambda \frac{k}{F} \right) \right] e^{-i \frac{\lambda'^3}{3}} e^{i \frac{\lambda^3}{3}} d\lambda' d\lambda$$

d'où

$$\langle \varphi(k'; t) | \varphi(k; t) \rangle = 2\pi N^2 \sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{2mF}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[i \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(\frac{k'}{F} - \frac{k}{F} \right) \lambda \right] d\lambda$$

donc

$$\langle \varphi(k'; t) | \varphi(k; t) \rangle = 4\pi^2 N^2 \sqrt[3]{\frac{\hbar^4 F}{4m^2}} \delta(k - k') \quad (\text{IV-128})$$

alors on obtient :

$$N = \frac{1}{2\pi} \sqrt[6]{\frac{4m^2}{\hbar^4 F}} \quad (\text{IV-129})$$

et la solution (IV-126) devient :

$$\varphi(x, k; t) = \frac{1}{2\pi} \sqrt[6]{\frac{4m^2}{\hbar^4 F}} Ai \left[- \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(x + \frac{k}{F} \right) \right] \quad (\text{IV-130})$$

Pour calculer la phase géométrique généralisée (IV-57) on a :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x, l; t) &= \frac{i\hbar}{6} \frac{\partial}{\partial t} \log \left[\frac{4m^2}{\hbar^4 F} \right] \varphi(x, l; t) - \\ &- \frac{i\hbar}{2\pi} \sqrt[6]{\frac{4m^2}{\hbar^4 F}} \frac{\partial}{\partial t} \left[\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(x + \frac{l}{F} \right) \right] \frac{\partial}{\partial \xi} Ai[\xi] \end{aligned} \quad (\text{IV-131})$$

avec

$$\xi = \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(x + \frac{k}{F} \right) \quad (\text{IV-132})$$

En utilisant la définition (IV-127) on a :

$$\frac{\partial}{\partial \xi} Ai(\xi) = i \int_{-\infty}^{\infty} \lambda e^{i\lambda\xi} e^{i \frac{\lambda^3}{3}} d\lambda \quad (\text{IV-133})$$

donc en substituant dans (IV-131) et en multipliant par $\langle \varphi(l'; t) |$ on trouve :

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi(l';t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(l;t) \rangle &= \frac{i\hbar}{6} \frac{\partial}{\partial t} \log \left[\frac{4m^2}{\hbar^4 F} \right] \delta(l-l') + \frac{\hbar}{4\pi^2} \sqrt[3]{\frac{4m^2}{\hbar^4 F}} \times \\
 &\times \left[\frac{\partial}{\partial t} \left[\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x \lambda \exp \left(i\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} (\lambda - \lambda') x \right) e^{i\frac{\lambda^3 - \lambda'^3}{3}} \exp \left(i\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} (\lambda l - \lambda' l') \right) d\lambda' d\lambda dx \right. \right. \\
 &\left. \left. + \frac{\partial}{\partial t} \left[\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \exp \left(i\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} (\lambda - \lambda') x \right) \exp \left(i\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} (\lambda l - \lambda' l') \right) e^{i\frac{\lambda^3 - \lambda'^3}{3}} d\lambda' d\lambda dx \right] \right]
 \end{aligned}$$

ce qui donne en utilisant les propriétés (II-21) de la fonction de Dirac :

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi(l';t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(l;t) \rangle &= \frac{i\hbar}{6} \frac{\partial}{\partial t} \log \left[\frac{4m^2}{\hbar^4 F} \right] \delta(l-l') + \hbar \sqrt[3]{\frac{4m^2}{\hbar^4 F}} \times \\
 &\times \left[i\sqrt[3]{\frac{\hbar^4}{4m^2 F^2}} \frac{\partial}{\partial t} \left[\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \right] \left[\sqrt[3]{\frac{\hbar^8 F^8}{16m^4}} \delta^{(3)}(l-l') + \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 F^2}{2m}} l' \delta^{(1)}(l-l') \right] - \right. \\
 &\left. - i\sqrt[3]{\frac{\hbar^6}{8m^4 F^4}} \frac{\partial}{\partial t} \left[\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} \right] \delta^{(1)}(l-l') \right] \quad (IV-134)
 \end{aligned}$$

Ainsi, on voit d'après la formule ci-dessus que l'élément $\langle \varphi(l';t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(l;t) \rangle$ vérifie effectivement la relation (IV-29). Pour calculer maintenant la phase géométrique généralisée il suffit d'intégrer la relation (IV-134) par rapport à toutes les valeurs possibles de k' ce qui donne :

$$\dot{\gamma}^G(l;t) = \frac{i\hbar}{6} \left[\frac{\partial}{\partial t} \log \left[\frac{4m^2}{\hbar^4 F} \right] - \frac{\partial}{\partial t} \log \left[\frac{4m^2 F^2}{\hbar^4} \right] \right]$$

d'où

$$\dot{\gamma}^G(l;t) = -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \log[F] \quad (IV-135)$$

On rappelle que le résultat obtenu ici n'a pas une grande importance en ce qui concerne la phase géométrique généralisée, car il est clair qu'après une période le résultat (IV-135) s'annule, en effet :

$$\dot{\gamma}^G(l;t_0 + T) = -\frac{i\hbar}{2} \log \left[\frac{F(t_0 + T)}{F(t_0)} \right] = 0 \quad (IV-136)$$

V. L'aspect géométrique de la matrice S :

1) *Introduction :*

La théorie de diffusion joue un rôle central en physique dans ses différents domaines (physique des particules, physique nucléaire, ...etc.), pour cette raison, elle est considérée parmi les théories physique qui ont reçus un grand intérêt soit sur le plan théorique ou expérimental et dont la majorité des développements sont presque parfaitement établies. Cette théorie s'occupe en générale des phénomènes de collisions entres particules¹. En mécanique classique, ça revient à déterminer les différentes vitesses et énergies de ces particules ainsi que le paramètre d'impact de la collision [30, 52]. Par contre, en mécanique quantique, comme la notion de trajectoire est éliminée et à cause du fait que les différents résultats de la mécanique quantique sont incertain [7, 14, 50], tout ce qu'on peut faire est de calculer les différentes probabilités des différents résultats possibles. Parmi les grandeurs les plus importantes dans la théorie de diffusion quantique, on a *la matrice de diffusion* ou *la matrice S*² ; en effet, les différentes probabilités précédentes se déduisent directement à travers les éléments de la matrice S.

Le but de ce paragraphe est d'établir un lien direct entre la matrice S et la phase géométrique généralisée obtenu plus haut dans le cas d'une diffusion élastique, ou plus précisément, le cas où l'énergie reste constante (conservée) tout au long du processus de diffusion. Ce résultat est dû au fait que dans la théorie de diffusion on a généralement affaire avec des spectres continus. De plus, il est connu qu'en suivant un approche dépendant du temps on aboutit à des résultats analogues à ceux obtenus par la théorie de diffusion (voir l'exemple du paragraphe suivant) : par exemple, en utilisant la règle d'or de Fermi, on obtient les même résultats concernant la section efficace de diffusion, qui est liée à la matrice S, que celles obtenus dans le cadre de l'approximation de Born [8, 15, 50].

En effet, R. G. Newton a démontré, dans un travail récent [66], par une méthode directe et rigoureuse, mais implicite, que la matrice S se réduit à un facteur de phase géométrique dans le cas du spectre continu (formule (8) de [66]). Mais comme on l'avait dit précédemment, l'inconvénient du résultat de Newton réside dans le fait qu'il l'a obtenu sans donner aucune forme explicite de cette phase géométrique ou poser la question sur la validité

¹ Le mot particule employé ici peut signifier une galaxie en astrophysique comme il peut signifier un gluon ou un quark en chromodynamique quantique.

² La lettre « S » signifie le mot anglais « Scattering ».

du théorème adiabatique dans le cas du spectre continu, des questions qui n'avait pas encore eu de réponse. En outre, G. Ghosh a démontré [29], pour des cas particuliers, un résultat analogue à celui de R. G. Newton, mais cette fois en donnant une forme explicite de la phase géométrique. Pour surmonter les difficultés liées à l'apparition de la fonction de Dirac dans la forme de la phase (cf. formules (IV-28) et (IV-52)), G. Ghosh a utilisé des produits entre fonctions, au lieu d'utiliser des produits scalaires, où il a écrit la phase géométrique sous forme d'une série (formule (6) de [29]). Comme pour R. G. Newton, G. Ghosh a appliqué directement le théorème adiabatique ordinaire pour le cas du spectre continu, une chose qui n'est pas évidente d'après les discussions du chapitre précédent.

Dans ce travail on va établir les mêmes résultats obtenus par R. G. Newton et G. Ghosh, c'est-à-dire on va montrer par une méthode directe et simple que dans le cas où la diffusion est élastique la matrice S est liée à la phase géométrique généralisée qu'on a obtenu précédemment¹, et ça en appliquant le théorème adiabatique généralisé. L'avantage que présente le travail en cours est qu'on va écrire la matrice S en fonction de la phase géométrique de façon explicite. A titre d'application, on va reprendre dans le paragraphe suivant l'un des exemples traités par G. Ghosh pour qu'on puisse comparer les résultats. Dans cet exemple, qui a une solution exacte dans la théorie de diffusion, on va voir qu'en utilisant un approche dépendant du temps on trouve une solution très proche de la solution exacte où on peut identifier la phase géométrique généralisée au coefficient de transmission.

2) *Représentation interaction et matrice S :*

Tous les développements faits jusqu'ici étaient dans le cadre de la représentation de Schrödinger, mais comme on l'a dit précédemment (cf. Ch. III. § I-1)) cette représentation n'est pas la seule utilisée. Pour définir la matrice S , on doit d'abord se mettre dans la représentation interaction. Cette dernière est intermédiaire entre la représentation de Schrödinger et celle de Heisenberg où soit les vecteurs d'état ou les opérateurs dépendent du temps respectivement. Par contre, dans la représentation interaction les deux grandeurs dépendent du temps. En effet, considérons l'équation de Schrödinger (II-1) où l'hamiltonien $H(t)$ est défini par la formule (III-22) et dont l'énergie est supposé constante quelque soit le temps t , c'est-à-dire :

$$E(k;t) = E(k), \quad \forall t \quad (IV-137)$$

Pour simplifier les calculs on s'intéresse au cas particulier suivant :

¹ On note que R. G. Newton et G. Ghosh ont aussi considéré que le cas où l'énergie reste constante [66, 29].

$$H_0(t) = H_0 = C^{te} \quad (IV-138)$$

c'est-à-dire :

$$H(t) = H_0 + V(t) \quad (IV-139)$$

avec H_0 est l'hamiltonien libre et $V(t)$ l'interaction ou le potentiel sur lequel sera diffusée la particule libre. Aucune condition sur l'ordre de grandeur du potentiel n'est imposée, sauf qu'il doit vérifier les deux conditions suivantes :

$$V(t) = 0 \quad (IV-140)$$

$t \rightarrow t_0$

$$V(t) = 0 \quad (IV-141)$$

$t \rightarrow t_0 + T = t_1$

Comme on traite ici la théorie de diffusion, on suppose que les spectres de $H(t)$ et H_0 sont continus, de plus on se restreint dans ce travail aux cas non dégénérées.

D'après les conditions ci-dessus, pour $t \leq t_0$ l'évolution de la particule en question est régie par l'hamiltonien libre H_0 , c'est-à-dire, on ait dans le cas trivial (III-9), l'état de la particule est donnée par¹ :

$$|\psi(t)\rangle = \int_I \hat{C}^{t_0}(k;t) |\varphi(k;t_0)\rangle dk \quad (IV-142)$$

où les fonctions $|\varphi(k;t_0)\rangle$ sont solutions de l'équation aux valeurs propres suivante :

$$H_0 |\varphi(k;t_0)\rangle = E(k) |\varphi(k;t_0)\rangle \quad (IV-143)$$

et les coefficients $\hat{C}^{t_0}(k;t)$ sont donnés par (III-12) :

$$\hat{C}^{t_0}(k;t) = C^{t_0}(k;-\infty) e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^t E(k).dt'} \quad (IV-144)$$

pour simplifier, on suppose que la particule se trouve à $t = -\infty$ dans l'état $k = l$, c'est-à-dire :

$$C^{t_0}(k;-\infty) = \delta(k-l) \quad (IV-145)$$

Pour $t > t_0$, l'état de la particule est donnée par :

$$|\psi(t)\rangle = \int_I C(k;t) |\varphi(k;t)\rangle dk \quad (IV-146)$$

¹ Comme pour les formules (III-3) et (III-4), on ajoute un indice supérieur sur les coefficients du développement lorsqu'on effectue un développement sur une base définie à un instant différent de l'instant en cours.

avec $|\varphi(k;t)\rangle$ les vecteur propres de $H(t)$ et les $C(k;t)$ sont solutions du système d'équation (II-43). En outre, la fonction $|\psi(t)\rangle$ peut être développée sur la base des vecteurs $|\varphi(k;t_0)\rangle$, on obtient :

$$|\psi(t)\rangle = \int_I C^{t_0}(k;t) |\varphi(k;t_0)\rangle dk \quad (IV-147)$$

où les coefficients $C^{t_0}(k;t)$ sont liée aux coefficients $C(k;t)$ par les relations (III-8) où on interchange les positions de t et t_0 , c'est-à-dire :

$$C^{t_0}(k;t) = \int_I C(k';t) \langle \varphi(k;t_0) | \varphi(k';t) \rangle dk' \quad (IV-148)$$

Les coefficients $C^{t_0}(k;t)$ représentent les éléments de l'opérateur d'évolution $U(t;t_0)$ dans la base $|\varphi(k;t_0)\rangle$; en effet, d'après (IV-143), (IV-145) et (IV-146), on a :

$$|\psi(t_0)\rangle = e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_0} E(l).dt'} |\varphi(l;t_0)\rangle$$

en utilisant (II-76) et (III-18), on obtient :

$$C^{t_0}(k;t) = \langle \varphi(k;t_0) | \psi(t) \rangle = \langle \varphi(k;t_0) | U(t,t_0) | \psi(t_0) \rangle = e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_0} E(l).dt'} \langle \varphi(k;t_0) | U(t,t_0) | \varphi(l;t_0) \rangle$$

ce qui donne :

$$\langle \varphi(k;t_0) | U(t,t_0) | \varphi(l;t_0) \rangle = e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_0} E(l).dt'} C^{t_0}(k;t) \quad (IV-149)$$

Pour se mettre dans la représentation interaction, on applique la transformation unitaire $e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)}$ sur les opérateurs et les fonctions d'onde de l'espace de Hilbert. En effet la fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$ se transforme comme suit :

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} |\psi(t)\rangle \quad (IV-150)$$

En l'injectant dans l'équation (II-1), $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ vérifie l'équation de Schrödinger suivante :

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{V}(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (IV-151)$$

avec

$$\tilde{V}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} V(t) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} \quad (\text{IV-152})$$

En appliquant la transformation (IV-150) sur la relation (IV-146), on obtient :

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \int_I C(k;t) |\tilde{\varphi}(k;t)\rangle dk \quad (\text{IV-153})$$

où les vecteurs de base $|\varphi(k;t)\rangle$ se transforment selon la formule suivante :

$$|\tilde{\varphi}(k;t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} |\varphi(k;t)\rangle \quad (\text{IV-154})$$

De la même manière, (IV-147) se transforme en :

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \int_I \tilde{C}^{t_0}(k;t) |\varphi(k;t_0)\rangle dk \quad (\text{IV-155})$$

avec

$$\tilde{C}^{t_0}(k;t) = e^{\frac{i}{\hbar}E(k)(t-t_0)} C^{t_0}(k;t) \quad (\text{IV-156})$$

en effet, d'après (IV-143), (IV-147) et (IV-150), on a :

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} |\psi(t)\rangle = \int_I C^{t_0}(k;t) e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} |\varphi(k;t_0)\rangle dk = \int_I C^{t_0}(k;t) e^{\frac{i}{\hbar}E(k)(t-t_0)} |\varphi(k;t_0)\rangle dk$$

De plus, l'opérateur d'évolution $U(t;t_0)$ se transforme en :

$$\tilde{U}(t;t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} U(t;t_0) \quad (\text{IV-157})$$

Cet opérateur constitue l'opérateur d'évolution dans la représentation interaction. Ses éléments sont liés à ceux de $U(t;t_0)$ par :

$$\langle \varphi(k;t_0) | U(t;t_0) | \varphi(l;t_0) \rangle = \langle \varphi(k;t_0) | e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} \tilde{U}(t;t_0) | \varphi(l;t_0) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E(k)(t-t_0)} \langle \varphi(k;t_0) | \tilde{U}(t;t_0) | \varphi(l;t_0) \rangle$$

d'où

$$\langle \varphi(k;t_0) | \tilde{U}(t;t_0) | \varphi(l;t_0) \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}E(k)(t-t_0)} \langle \varphi(k;t_0) | U(t;t_0) | \varphi(l;t_0) \rangle \quad (\text{IV-158})$$

ce qui donne d'après (IV-149) et (IV-156) :

$$\langle \varphi(k;t_0) | \tilde{U}(t;t_0) | \varphi(l;t_0) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E(l) dt'} \tilde{C}^{t_0}(k;t) \quad (\text{IV-159})$$

D'après les conditions (IV-140) et (IV-141), les vecteurs $|\varphi(k; t_0)\rangle$ vérifient la propriété suivante :

$$|\varphi(k; t \leq t_0)\rangle = |\varphi(k; t_0)\rangle = |\varphi(k; t \geq t_1)\rangle \quad (\text{IV-160})$$

Par conséquent, pour un instant $t \geq t_1$, c'est-à-dire après l'interaction, on a :

$$\langle \varphi(k; t) | \tilde{U}(t, t_0) | \varphi(l; t_0) \rangle = e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_0} E(l). dt'} \tilde{C}^{t_0}(k; t) \quad (\text{IV-161})$$

En passant aux limites $t_0 \rightarrow -\infty$ et $t \rightarrow +\infty$ dans l'opérateur d'évolution dans la représentation interaction on obtient la définition de la matrice S [8, 50, 66, 73], en effet :

$$S = \lim_{t_0 \rightarrow -\infty, t \rightarrow +\infty} \tilde{U}(t; t_0) \quad (\text{IV-162})$$

Alors, pour déterminer les éléments de la matrice S, on substitue (IV-161) dans la définition ci-dessus, on trouve¹ (cf. formule (IV-160) :

$$\langle \varphi(k; +\infty) | S | \varphi(l; -\infty) \rangle = \langle \varphi(k; +\infty) | \lim_{t_0 \rightarrow -\infty, t \rightarrow +\infty} \tilde{U}(t, t_0) | \varphi(l; -\infty) \rangle = \tilde{C}^{-\infty}(k; +\infty) \quad (\text{IV-163})$$

Donc, pour déterminer la matrice S il suffit de déterminer les coefficients $\tilde{C}^{-\infty}(k; +\infty)$. D'après (IV-148) ce dernier sont bien définies si on détermine les coefficients $C(k; t)$. Pour faire, on va s'intéresser du cas où l'évolution est adiabatique, c'est-à-dire $T \rightarrow \infty$, où on a vu comment on peut déterminer les coefficients $C(k; t)$.

3) Limite adiabatique et phase géométrique :

Dans le cadre de l'approximation adiabatique, on a vu que la solution du système d'équation (II-43) est donnée par les expressions (IV-37) et (IV-43). D'après la définition (II-20), ces deux expressions peuvent être regroupées en une seule formule, en effet, pour tout $k \in I$ on a :

$$C(k; t) = \delta(k - l) \exp \left[\int_{t_0}^t \frac{-i}{\hbar} E(k) dt' - \int_{t_0}^t \langle \delta \varphi(k; t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k; t') \rangle dt' \right] \quad (\text{IV-164})$$

D'après les relations (IV-148), les coefficients $C^{t_0}(k; t)$ sont données par :

¹ Il est clair que le terme $e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_0} E(l). dt'}$ devient égal à l'identité !

$$C^{t_0}(k;t) = \langle \varphi(k;t_0) | \varphi(l;t) \rangle \exp \left[\int_{t_0}^t \frac{-i}{\hbar} E(l) dt' - \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(l;t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(l;t') \rangle dt' \right] \quad (\text{IV-165})$$

De leurs définitions (IV-156), on obtient pour les coefficients $\tilde{C}^{t_0}(k;t)$, les expressions suivantes :

$$\tilde{C}^{t_0}(k;t) = \langle \varphi(k;t_0) | \varphi(l;t) \rangle \exp \left[- \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(l;t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(l;t') \rangle dt' \right] \quad (\text{IV-166})$$

En passant aux limites $t_0 \rightarrow -\infty$ et $t \rightarrow +\infty$, on obtient, selon (IV-164) :

$$\langle \varphi(k;+\infty) | S | \varphi(l;-\infty) \rangle = \langle \varphi(k;-\infty) | \varphi(l;+\infty) \rangle \exp \left[- \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \delta\varphi(l;t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(l;t') \rangle dt' \right] \quad (\text{IV-167})$$

En prenant compte de la propriété (IV-160) et de (IV-45), la formule ci-dessus devient :

$$\langle \varphi(k;+\infty) | S | \varphi(l;-\infty) \rangle = \delta(k-l) e^{\frac{i}{\hbar} \gamma^G(l;+\infty)} \quad (\text{IV-168})$$

Il est clair d'après cette formule que, dans le cadre de l'approximation adiabatique, la matrice S est diagonale dans la base construite par les vecteurs $|\varphi(k;t_0)\rangle$. En fait, (IV-168) est équivalente à l'équation aux valeurs propres suivantes :

$$S |\varphi(k;t_0)\rangle = S_k |\varphi(k;t_0)\rangle \quad (\text{IV-169})$$

par conséquent, les kets $|\varphi(k;t_0)\rangle$ constituent les vecteurs propres de l'opérateur S correspondant aux valeurs propres :

$$S_k = e^{\frac{i}{\hbar} \gamma^G(k;+\infty)} \quad (\text{IV-170})$$

Cette expression, exprime le lien cherché entre la matrice de diffusion et la phase géométrique généralisée, d'où l'aspect géométrique de la matrice S. Par conséquent, la relation (IV-170) permet d'interpréter la phase géométrique généralisée obtenue plus haut comme le logarithme des valeurs propres S_k de la matrice S. En termes du langage de la théorie de diffusion, les valeurs propres S_k représentent les amplitudes de transmission $t(k)$ [14, 29, 50], la relation (IV-170) devient :

$$t(k) = e^{\frac{i}{\hbar} \gamma^G(k;+\infty)} \quad (\text{IV-171})$$

Cet important résultat, est une bonne confirmation de la validité du théorème adiabatique généralisé considéré dans le chapitre précédent, ainsi que des résultats obtenues dans ce chapitre sur la phase géométrique généralisée. En effet, il n'est pas nécessaire, dans une première étape, de chercher à confirmer l'existence de la phase géométrique généralisée dans le laboratoire, quoique une telle confirmation expérimentale soit indispensable. Il suffit d'appliquer les raisonnements de ce travail sur un exemple qui admet une solution exacte dans le cadre de la théorie de diffusion et de comparer l'amplitude de transmission ainsi obtenue avec la phase géométrique généralisée correspondant. Dans le paragraphe suivant, on va reprendre l'un des exemples traités par G. Ghosh [29] où on va voir que la phase géométrique généralisée est une bonne approximation de l'argument de l'amplitude de transmission.

4) Diffusion par un potentiel sans réflexion :

Considérons une particule libre de masse m représentée par une onde plane unidimensionnelle à l'instant $t = -\infty$, c'est-à-dire, selon les notations considérées dans ce travail, on a :

$$\varphi(x, l; -\infty) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ilx} \quad (\text{IV-172})$$

L'hamiltonien H_0 correspondant est donné par :

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} \quad (\text{IV-173})$$

avec p_x l'impulsion de la particule définie, d'après (IV-70), par :

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (\text{IV-174})$$

L'énergie de la particule correspondant à l'état (IV-172) est :

$$E(l) = \frac{\hbar^2 l^2}{2m} \quad (\text{IV-175})$$

1. Approche indépendant du temps (solution exacte) :

A cette instant, $t = -\infty$, on suppose que la particule se trouve à $x = -\infty$. Cette particule se propage vers les valeurs croissantes de x où il sera diffusé par un potentiel situé au point $x = x_0$ (fig.17), et qui est défini par la formule suivante [29] :

$$V(x) = -\frac{2\hbar^2 k_1 A_1 e^{2k_1 x}}{m \left[1 + \left(\frac{A_1}{2k_1} \right) e^{2k_1 x} \right]^2} \quad (\text{IV-176})$$

où k_1 et A_1 sont des paramètres liés à x_0 par :

$$A_1 = 2k_1 e^{-2k_1 x_0} \quad (\text{IV-177})$$

Il est clair d'après la figure ci-dessus, que le potentiel ne contient pas des parties qui donnent naissance à des réflexions, cette propriété permet de traiter ce système comme si il est non dégénéré, malgré qu'il est doublement dégénéré. En effet, une particule qui se propage dans une direction ne sera pas réfléchi par le potentiel (IV-176), d'où

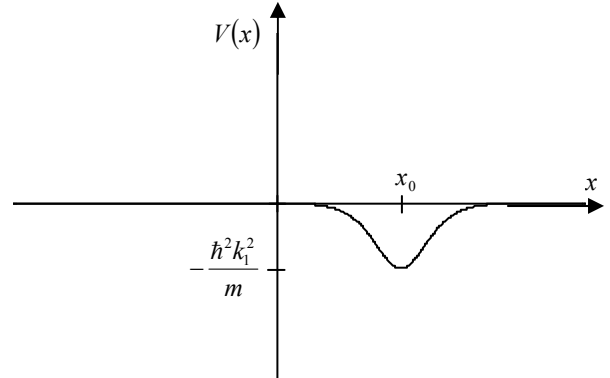


Figure 18 : La courbe représentant le potentiel (IV-176).

il n'y aura pas des transitions entre les états d'un même sous-espace et qui est due à la dégénérescence. Alors, le fait que le spectre est dégénéré ou non ne change rien.

L'hamiltonien total auquel est soumise la particule considérée est :

$$H = \frac{p_x^2}{2m} - \frac{2\hbar^2 k_1 A_1 e^{2k_1 x}}{m \left[1 + \left(\frac{A_1}{2k_1} \right) e^{2k_1 x} \right]^2} \quad (\text{IV-178})$$

L'équation aux valeurs propres correspondante est donnée, en prenant compte de (IV-174), par :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x, k; A_1) + V(x) \varphi(x, k; A_1) = E(k) \varphi(x, k; A_1) \quad (\text{IV-179})$$

Pour résoudre cette équation, posons :

$$e^{2k_1 y} = \frac{A_1}{2k_1} e^{2k_1 x} \quad (\text{IV-180})$$

le potentiel (IV-176) devient :

$$V(y) = -\frac{4\hbar^2 k_1^2 e^{2k_1 y}}{m[1 + e^{2k_1 y}]^2} = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{m} \left[\frac{2}{e^{-k_1 y} + e^{k_1 y}} \right]^2 = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{m[ch(k_1 y)]^2} \quad (\text{IV-181})$$

et l'équation (IV-179) s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \varphi(y, k; A_1) + V(y)\varphi(y, k; A_1) = E(k)\varphi(y, k; A_1) \quad (\text{IV-182})$$

Effectuant maintenant le changement de variable suivant [50] :

$$\xi = th(k_1 y) \quad (\text{IV-183})$$

d'où, on obtient l'équation suivante :

$$(1 - \xi^2) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \varphi(\xi, k; A_1) - 2\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \varphi(\xi, k; A_1) + \left(2 + \frac{2mE}{\hbar^2 k_1^2 (1 - \xi^2)} \right) \varphi(\xi, k; A_1) = 0 \quad (\text{IV-184})$$

En posant

$$n = 1 \quad (\text{IV-185})$$

et

$$k^2 = \frac{2mE(k)}{\hbar^2} \quad (\text{IV-186})$$

on obtient l'équation de Legendre [7, 10, 50] :

$$(1 - \xi^2) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} u - 2\xi \frac{\partial}{\partial \xi} u + \left[n(n+1) - \frac{k^2}{k_1^2 (1 - \xi^2)} \right] u = 0 \quad (\text{IV-187})$$

On distingue deux cas :

- $E(k) < 0$: on a un seul état lié représenté par le polynôme de Legendre associé $P_n^\xi(\xi)$ correspondant à l'énergie

$$E_{\substack{n=1 \\ k=k_1}} = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \quad (\text{IV-188})$$

- $E(k) > 0$: on a, d'après le premier chapitre, un spectre continu dont les états propres $\varphi(x, k; A_1)$ sont données par [29] :

$$\varphi(x, k; A_1) = \left[1 - \frac{A_1 e^{2k_1 x}}{(k_1 + ik) \left[1 + \left(\frac{A_1}{2k_1} \right) e^{2k_1 x} \right]} \right] \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{IV-189})$$

qui correspondent aux valeurs propres $E(k)$ données par (IV-186) :

$$E(k) = \frac{2mk^2}{\hbar^2}$$

En utilisant (IV-177) le potentiel (IV-181) devient :

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{m[c\hbar[k_1(x-x_0)]]^2} \quad (\text{IV-190})$$

et les fonctions (IV-187) s'écrivent :

$$\varphi(x, k; x_0) = [ik - k_1 \text{th}[k_1(x-x_0)]] \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + ik)} \quad (\text{IV-191})$$

D'après l'appendice et les discussions du deuxième chapitre, on montre que ces fonctions vérifient la relation d'orthonormalisation (II-42).

Selon la théorie de diffusion, l'amplitude de transmission $t(k)$ est définie par la forme asymptotique de la solution $\varphi(x, l; t)$ pour $x \rightarrow +\infty$, en effet, pour $x \rightarrow -\infty$ cette dernière coïncide avec l'onde incidente (IV-172) :

$$\varphi(x, l; -\infty) = \left[il - k_1 \text{th}[k_1(x-x_0)] \right] \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + il)} = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}$$

Pour $x \rightarrow +\infty$ on obtient :

$$\varphi(x, l; x_0) = \left[il - k_1 \text{th}[k_1(x-x_0)] \right] \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + il)} = \frac{(-k_1 + il)e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + il)} = t(l)\varphi(x, l; -\infty) \quad (\text{IV-192})$$

On obtient alors l'expression suivante pour l'amplitude de transmission ;

$$t(l) = \frac{-k_1 + il}{k_1 + il} = e^{2i \arctg(\frac{k_1}{l})} \quad (\text{IV-193})$$

la valeur exacte de l'argument (la phase) est donc :

$$\delta = 2 \operatorname{arctg}\left(\frac{k_1}{k}\right) \quad (\text{IV-194})$$

Il est clair que le module carré de $t(l)$ est égale à 1, et par conséquent l'amplitude de réflexion $r(l)$ liée à $t(l)$ par la relation [7, 14,50] :

$$|t(l)|^2 + |r(l)|^2 = 1$$

est nulle, d'où il n'y a pas de réflexion.

2. Approche dépendant du temps :

Pour confirmer les résultats du paragraphe précédent on va, au lieu de traiter cette exemple en se basant sur la forme asymptotique des solutions, considérer cette exemple comme un système dépendant du temps. En effet, comme la notion de trajectoire n'a aucune signification en mécanique quantique, au lieu de dire que la particule se propage de $x = -\infty$ vers $x = +\infty$ en passant par x_0 où

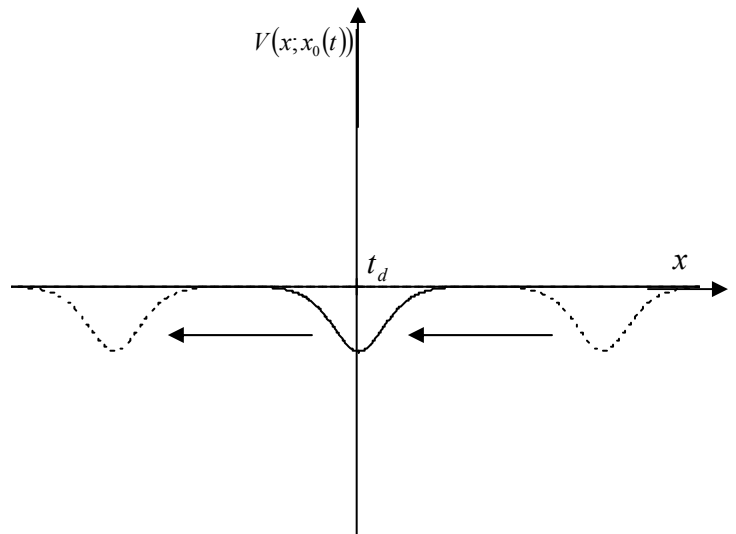


Figure 19 : Les différentes positions du potentiel au cours du temps.

se trouve le potentiel (IV-176), on suppose que c'est le potentiel qui va changer de position au cours du temps et non pas la particule. Cette position est équivalente à se mettre dans le repère lié à la particule où on voit le potentiel se rapprochant de la particule puis il s'éloigne après la diffusion dans le sens inverse sans changer de forme. Pour cette raison, on va faire dépendre le paramètre de position x_0 du temps de sorte qu'il vérifie les conditions suivante :

$$x_0(t) = +\infty \quad (\text{IV-195})$$

$t \rightarrow -\infty$

$$x_0(t) = -\infty \quad (\text{IV-196})$$

$t \rightarrow +\infty$

c'est-à-dire, pour $t \rightarrow -\infty$ le potentiel se trouve localisé à $x = +\infty$ très loin de la particule, à l'instant t_d le potentiel devient assez proche de la particule pour qu'elle soit diffusé, et pour $t \rightarrow +\infty$ le potentiel s'éloigne vers $x = -\infty$ et la particule devient libre à nouveau (fig. 16).

Par conséquent, le potentiel auquel est soumise la particule est, d'après (IV-190) :

$$V(x;t) = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{m[ch[k_1(x-x_0(t))]]^2} \quad (\text{IV-197})$$

L'hamiltonien de la particule prend donc la forme (IV-139), où H_0 est défini par (IV-173). On vérifie que cet hamiltonien admet les fonctions suivantes comme vecteurs propres normalisés (cf. Ch. II et appendice) :

$$\varphi(x, k; x_0(t)) = [ik - k_1 \hbar [k_1(x-x_0(t))]] \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + ik)} \quad (\text{IV-198})$$

correspondant aux valeurs propres¹ $E(k)$ données par (IV-186).

Pour appliquer les résultats de ce travail, on suppose que le paramètre $x_0(t)$ dépend adiabatiquement du temps. Par conséquent, le système qui se trouve à l'instant $t_0 = -\infty$ dans l'état donné par (IV-172) évolue à l'instant t , d'après (IV-44), vers l'état :

$$\psi(x;t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[-\phi(l;t) + \gamma^G(l;t)]\right\} \varphi(x, l; x_0(t)) \quad (\text{IV-199})$$

avec (cf. formules (III-144) et (IV-186)) :

$$\phi(l;t) = \int_{t_0}^t E(l) dt' = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (t - t_0) \quad (\text{IV-200})$$

et (cf. formule (IV-57)) :

$$\gamma^G(l;t) = \int_{t_0}^t \int_{l=-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x, l'; x_0(t')) i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \varphi(x, l; x_0(t')) dx dl' dt' \quad (\text{IV-201})$$

Pour comparer ce résultat avec celui obtenu dans le cadre de la théorie de diffusion on doit d'abord se mettre dans la représentation interaction, ce qui donne d'après (IV-150) et (IV-154) :

¹ On remarque que les valeurs propres sont indépendantes du temps, la diffusion est donc élastique.

$$\tilde{\psi}(x;t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[-\phi(l;t) + \gamma^G(l;t)]\right\} \tilde{\varphi}(x,l;x_0(t)) \quad (\text{IV-202})$$

En passant aux limites $t_0 \rightarrow -\infty$ et $t \rightarrow +\infty$ on s'attend d'après le paragraphe précédent que $\gamma^G(l;+\infty)$ est une valeur approchée de l'argument δ défini par (IV-194). En effet, lorsque le potentiel s'éloigne vers $x = -\infty$ et la particule devient libre, par conséquent, on obtient, d'après (IV-154) :

$$\tilde{\varphi}(x,l;x_0(+\infty)) = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} e^{\frac{iH_0(t-t_0)}{\hbar}} \varphi(x,l;x_0(+\infty)) = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} e^{\frac{iE(l)(t-t_0)}{\hbar}} \varphi(x,l;x_0(-\infty)) \quad (\text{IV-203})$$

ce qui donne d'après (IV-172) et (IV-200) :

$$\tilde{\psi}(x;+\infty) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \gamma^G(l;+\infty)\right\} \varphi(x,l;x_0(-\infty)) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \gamma^G(l;+\infty)}}{\sqrt{2\pi}} e^{il.x} \quad (\text{IV-204})$$

Pour ces limites (IV-201) donne :

$$\gamma^G(l;+\infty) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} [il' + k_1 th[k_1(x - x_0(t'))]] \frac{\partial}{\partial t'} [k_1 th[k_1(x - x_0(t'))]] \frac{e^{i(l-l')x}}{(k_1 + il)(k_1 - il')} dx dl' dt'$$

en intégrant par rapport au temps on trouve :

$$\gamma^G(l;+\infty) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ il' [k_1 th[k_1(x - x_0(t'))]]_{-\infty}^{+\infty} + \frac{1}{2} [[k_1 th[k_1(x - x_0(t'))]]^2]_{-\infty}^{+\infty} \right\} \frac{e^{i(l-l')x}}{(k_1 + il)(k_1 - il')} dx dl'$$

en utilisant les propriétés de la tangente hyperbolique, on obtient :

$$\gamma^G(l;+\infty) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i 2l' k_1 e^{i(l-l')x}}{(k_1 + il)(k_1 - il')} dx dl'$$

ce qui donne d'après (II-21-f) :

$$\gamma^G(l;+\infty) = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2l' k_1 \delta(l-l')}{(k_1 + il)(k_1 - il')} dl'$$

d'où

$$\gamma^G(l;+\infty) = \hbar \frac{2k_1 l}{(k_1 + il)(k_1 - il)} = \frac{2\hbar k_1 l}{k_1^2 + l^2} \quad (\text{IV-205})$$

On a obtenu donc la phase géométrique généralisée correspondant au système ci-dessus ; il est clair d'après (IV-205) que $\gamma^G(l;+\infty)$ est réelle. Alors, (IV-204) donne :

$$\tilde{\psi}(x;+\infty) = \frac{e^{i \frac{2k_1 l}{k_1^2 + l^2}}}{\sqrt{2\pi}} e^{il.x} \quad (\text{IV-206})$$

En posant :

$$\delta_0 = \frac{\gamma^G(l;+\infty)}{\hbar} = \frac{2k_1 l}{k_1^2 + l^2} \quad (\text{IV-207})$$

on voit qu'on obtenu exactement le même résultat de G. Ghosh (formule (12) de [29]). En effectuant les développements de Taylor de δ_0 et δ en fonctions du rapport $\frac{k_1}{l}$ on obtient :

$$\delta = 2\frac{k_1}{l} - \frac{2}{3}\left(\frac{k_1}{l}\right)^3 + \frac{2}{5}\left(\frac{k_1}{l}\right)^5 + \dots \quad (\text{IV-208})$$

$$\delta_0 = 2\frac{k_1}{l} - 2\left(\frac{k_1}{l}\right)^3 + 2\left(\frac{k_1}{l}\right)^5 + \dots \quad (\text{IV-209})$$

On remarque qu'en premier ordre on a :

$$\delta = \delta_0 \quad (\text{IV-210})$$

En réalité, l'approximation ci-dessus ne présente pas une grande erreur (voir la figure 19); en effet, d'après la figure 17, la valeur maximale du potentiel est donnée par :

$$|V_{\max}| = \frac{\hbar^2 k_1^2}{m} \quad (\text{IV-211})$$

par conséquent, pour les valeurs de l tels que :

$$E(l) \leq |V_{\max}|$$

c'est-à-dire, pour :

$$\frac{k_1}{l} \geq \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (\text{IV-212})$$

la particule sera piégée par le potentiel et appartient à l'état lié $P_n^e(\xi)$ correspondant à l'énergie (IV-188), on sort donc du spectre continu. Par conséquent, pour qu'on reste dans le spectre continu on a la condition suivante :

$$\frac{k_1}{l} \ll \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (\text{IV-213})$$

La figure 19, représente les courbes de δ_0 et δ comme fonctions du rapport $\frac{l}{k_1}$. On voit que pour les valeurs de l qui vérifient la condition (IV-213) les deux courbes coïncident l'une avec l'autre, et plus l'énergie de la particule est grande¹, plus l'erreur commise dans (IV-210) est petite.

Ainsi, on a obtenu les mêmes résultats en utilisant deux approches différentes et on a confirmé le résultat (IV-171), d'où la confirmation de l'aspect géométrique de la matrice S.

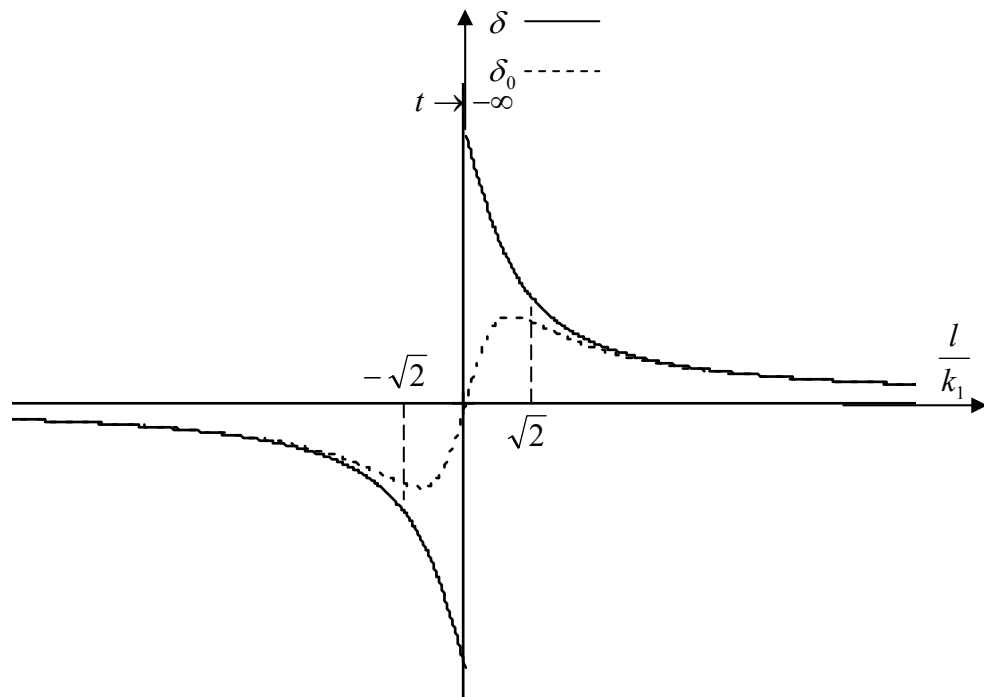


Figure 20 : Les courbes de la phase géométrique généralisée et de l'argument de l'amplitude de transmission.

¹ L'ordre de grandeur dépend de la valeur de k_1 .

CONCLUSION

Ce travail était de généraliser le théorème adiabatique au cas du spectre continu. Après avoir clarifié les différentes difficultés liées au spectre continu et les différents résultats obtenus pour le spectre discret on a présenté les résultats récents dans ce domaine. Et, comme on l'a vu, ces derniers sont assez restreints et reposent sur des hypothèses qui sont difficiles à réaliser dans la pratique.

On a donné une nouvelle interprétation de ces résultats à travers une forme simple et pratique du théorème adiabatique généralisé reposant sur l'idée de la décomposition de l'unité de Von Neumann. De plus, on est arrivée à une démonstration rigoureuse, simple et directe de ce théorème et qui est en plus analogue à celle utilisée dans le cas discret. On a donné aussi les différentes conditions de validité pour cette démonstration, à savoir : la propriétés de non croisement, la régularité des projecteur et la longueur de l'intervalle de projection en fonction du paramètre adiabatique.

Parmi les importantes conséquences de cette généralisation, on a traité en détaille deux applications. La première constitue la généralisation de la phase de Berry pour le spectre continu. Comme on l'a vu, on a établi une forme analogue à celle de Berry pour cette phase et dont elle vérifie l'ensemble des propriétés. On lui a donnée aussi une forme plus pratique dans les calculs. Pour illustrer ce résultat on a donné deux exemples de calcul détaillés.

L'autre important résultat, est celui concernant l'aspect géométrique de la matrice S , où on a obtenu des résultats plus améliorés que ceux obtenus par R. G. Newton et G. Ghosh. En effet, on a donnée une forme explicite à la relation entre la phase géométrique généralisée et la matrice S et qui utilise des produits scalaires au lieu d'utiliser des produits entre fonctions. On a appliqué ce résultat pour un exemple qui admet une solution exacte dans le cadre de la théorie de diffusion où, en utilisant une approche dépendant du temps, on a établi un résultat égal à celui obtenu par la méthode de G. Ghosh et qui est très proche de la solution exacte où on a pu identifier la phase géométrique généralisée avec l'amplitude de transmission.

On note vers la fin, que les résultats de ce travail sont obtenus dans des cas particuliers ; les spectres sont complètement continus et non dégénérés. En fait, la généralisation établie ici constitue une première étape qui ouvre la porte pour d'autre

généralisation. En effet, comme pour le cas discret, on s'attend que la phase géométrique généralisée puisse être aussi généralisée aux systèmes classiques (une sorte d'angle de Hannay généralisée peut apparaître pour les phénomènes de collision), les systèmes non adiabatiques et les systèmes non cycliques. Finalement, la généralisation qui peut être d'une grande importance est la généralisation vers les spectres dégénérés, ce qui permettra si une telle généralisation est possible, de calculer les différentes grandeurs de la théorie de diffusion tels que les amplitudes de réflexion et les sections efficaces en plus des amplitudes de transmission dont on a établi dans ce travail.

APPENDICE : RELATION D'ORTHONORMALISATION POUR LE SPECTRE CONTINU

Considérons les fonctions suivantes (cf. formule (IV-191)) :

$$\varphi(x, k) = [ik - k_1 th[k_1 x]] \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + ik)} \quad (\text{A-1})$$

avec k_1 un paramètre, et $k \in I$ un indice continu.

Calculons maintenant le produit scalaire des fonctions (A-1) pour les valeurs k et l de l'indice continu, on a par définition :

$$\begin{aligned} \langle \varphi(k) | \varphi(l) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x, k) \varphi(x, l) dx \\ &= \frac{-1}{2\pi(k_1 - ik)(k_1 + il)} \int_{-\infty}^{+\infty} [ik + k_1 th[k_1 x]] [il - k_1 th[k_1 x]] e^{i(l-k)x} dx \end{aligned} \quad (\text{A-2})$$

ce qui donne :

$$\langle \varphi(k) | \varphi(l) \rangle = \frac{-1}{2\pi(k_1 - ik)(k_1 + il)} \int_{-\infty}^{+\infty} [-kl + i(l-k)k_1 th[k_1 x] - k_1^2 (th[k_1 x])^2] e^{i(l-k)x} dx \quad (\text{A-3})$$

en utilisant la propriété (II-21-f) de la fonction de Dirac le premier terme de l'intégrant donne :

$$\begin{aligned} \langle \varphi(k) | \varphi(l) \rangle &= \frac{kl \delta(k-l)}{(k_1 - ik)(k_1 + il)} - \\ &- \frac{1}{2\pi(k_1 - ik)(k_1 + il)} \int_{-\infty}^{+\infty} [i(l-k)k_1 th[k_1 x] - k_1^2 (th[k_1 x])^2] e^{i(l-k)x} dx \end{aligned} \quad (\text{A-4})$$

en intégrant par parties le deuxième terme et en utilisant la propriété (II-21-e) on trouve :

$$\begin{aligned} \langle \varphi(k) | \varphi(l) \rangle &= \frac{k^2 \delta(k-l)}{k_1^2 + k^2} - \frac{k_1}{2\pi(k_1 - ik)(k_1 + il)} [th[k_1 x] e^{i(l-k)x}]_{-\infty}^{+\infty} + \\ &+ \frac{1}{2\pi(k_1 - ik)(k_1 + il)} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[k_1 \frac{dth[k_1 x]}{dx} + k_1^2 (th[k_1 x])^2 \right] e^{i(l-k)x} dx \end{aligned} \quad (\text{A-5})$$

La dérivée de la tangente hyperbolique est donnée par :

$$\frac{dth[k_1 x]}{dx} = k_1 [1 - (th[k_1 x])^2] \quad (\text{A-6})$$

Ainsi, le deuxième terme de (A-6) s'annule avec celui de l'intégrant dans (A-5) qui devient :

$$\begin{aligned} \langle \varphi(k) | \varphi(l) \rangle &= \frac{k^2 \delta(k-l)}{k_1^2 + k^2} - \frac{k_1}{2\pi(k_1 - ik)(k_1 + il)} [th[k_1 x] e^{i(l-k)x}]_{-\infty}^{+\infty} + \\ &+ \frac{1}{2\pi(k_1 - ik)(k_1 + il)} \int_{-\infty}^{+\infty} k_1^2 e^{i(l-k)x} dx \end{aligned} \quad (\text{A-7})$$

d'où

$$\begin{aligned} \langle \varphi(k) | \varphi(l) \rangle &= \frac{k^2 \delta(k-l)}{k_1^2 + k^2} - \frac{k_1}{2\pi(k_1 - ik)(k_1 + il)} [th[k_1 x] e^{i(l-k)x}]_{-\infty}^{+\infty} + \\ &+ \frac{k_1^2 \delta(k-l)}{(k_1 - ik)(k_1 + il)} \end{aligned} \quad (\text{A-8})$$

ce qui donne finalement :

$$\langle \varphi(k) | \varphi(l) \rangle = \delta(k-l) - \frac{k_1}{2\pi(k_1 - ik)(k_1 + il)} [th[k_1 x] e^{i(l-k)x}]_{-\infty}^{+\infty} \quad (\text{A-9})$$

Alors, il reste à évaluer le terme

$$th[k_1 x] e^{i(l-k)x} \Big|_{-\infty}^{+\infty} = ? \quad (\text{A-10})$$

Pour faire, au lieu de calculer ce terme entre $\pm \infty$, on va le calculer entre $\pm L$, ensuite on passe à la limite $L \rightarrow \infty$:

$$th[k_1 x] e^{i(l-k)x} \Big|_{-L}^{+L} = [th[k_1 L] e^{i(l-k)L} - th[-k_1 L] e^{-i(l-k)L}] \quad (\text{A-11})$$

et comme la tangente hyperbolique est une fonction impaire on a :

$$th[k_1 x] e^{i(l-k)x} \Big|_{-L}^{+L} = th[k_1 L] [e^{i(l-k)L} + e^{-i(l-k)L}] \quad (\text{A-12})$$

En utilisant les propriétés des fonctions trigonométrique on trouve :

$$th[k_1 x] e^{i(l-k)x} \Big|_{-L}^{+L} = 2th[k_1 L] \cos[(l-k)L] \quad (\text{A-13})$$

En passant maintenant à la limite $L \rightarrow \infty$ et on utilisant la propriété :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} th(x) = 1 \quad (\text{A-14})$$

on obtient :

$$th[k_1 x] e^{i(l-k)x} \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 2 \lim_{L \rightarrow \infty} \cos[(l-k)L]$$

Ainsi, (A-9) devient :

$$\langle \varphi(k) | \varphi(l) \rangle = \delta(k-l) - \frac{k_1}{\pi(k_1 - ik)(k_1 + il)} \lim_{L \rightarrow \infty} \cos[(l-k)L] \quad (\text{A-9})$$

On remarque que le deuxième terme est indéfini, en effet, il oscille entre -1 et $+1$.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] A. Ambainis, O. Regev, An Elementary Proof of the Quantum Adiabatic Theorem, quant-ph/0411152.
- [2] A. Elgart, J. H. Schenker, Rev. Math. Phys. **14**, 569-584 (2002).
- [3] A. Galindo, P. Pascual, Quantum Mechanics (Springer, Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 1991).
- [4] A. Hamma, Berry Phases and Quantum Phase Transitions, quant-ph/0602091.
- [5] A. K. Pati, A. K. Rajagopal, Inconsistencies of the Adiabatic Theorem and the Berry Phase, quant-ph/0405129.
- [6] A. K. Pati, Annals of Physics, Volume **270**, Issue 1, p. 178-197.
- [7] A. Messiah, Mécanique Quantique T1 (Dunod, Paris, 1995) nouvelle édition.
- [8] A. Messiah, Mécanique quantique T2, (Dunod, Paris, 1995) nouvelle édition.
- [9] A. Mostafazadeh, Phys. Lett. A **232** 395-398 (1997).
- [10] A. Nikforov, V. Ougarov, Fonctions spéciales de la physique mathématique (Office des publications algérienne, traduit du russe par Vladimir Kotliar, version originale, édition Mir 1977).
- [11] B. Françoise, "Mouvement", *Encyclopædia Universalis*, version 10 nouveautés, Logiciel et moteur de recherche OPTI Media, Pari 2004.
- [12] B. P. Hou, S. J. Wang, Physics Letters A **311**, 106–110 (2003).
- [13] C. ASLANGUL, Physique Quantique II, en ligne [http:// www.edu.upmc.fr /physique /aslangul_04003 /licence1.pdf](http://www.edu.upmc.fr/physique/aslangul_04003/licence1.pdf) (fichier consulté le 29 Octobre 2006).
- [14] C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique T1 (Hermann, Paris, 1977) nouvelle édition revue, corrigée et augmentée.
- [15] C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique T2, (Hermann, Paris, 1977) nouvelle édition revue, corrigée et augmentée.
- [16] D. Ahrensmeir, Entanglement and Adiabatic Quantum Computation, quat-ph/0512066, to appear in the proceedings of Theory Canda I, special edition of Can. J. Phys. Vol **83**, 2005.
- [17] D. Basu, Dictionary of Material Science and High energy physics (CRC Press LLC 2001).
- [18] D. J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, (Prentice Hall, Inc. Toronto 1995).
- [19] D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek, C. H. Oh, Phys. Rev. Lett. **95**, 110407 (2005).
- [20] D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek, X. J. Fan, C. H. Oh, Physics Letters A, Volume **339**, Issue 3-5, p. 288-293.
- [21] D. R. Hofstadter, Gödel, Escher, Bach: an Eternal Golden Braid, (Basic Books, Inc., Publishers New York 1979).
- [22] D. Suter, G. Chingas, R. Harris, A. Pines, Mol. Phys. **61**, 1327–1340 (1987).
- [23] D. Xu, J. phys. A : Math. Gen. **35**, L455-L457 (2002).
- [24] E. J. Galvez, M. A. O'Connell, Nanomanipulation with Light. Edited by Andrews, David L. Proceedings of the SPIE, Volume **5736**, pp. 166-172 (2005).
- [25] E. Merzbacher, Quantum Mechanics (Wiley, New York 1970).
- [26] *Encyclopædia Universalis*, version 10 nouveautés, Logiciel et moteur de recherche OPTI Media, Pari 2004.
- [27] G. De Chiara, G. M. Palma, Phys. Rev. Lett. **91**, 090404 (2003).

- [28] G. G. de Polavieja, E. Sjöqvist, *Am. J. Phys.*, Volume **66**, Issue 5, pp.431-438 (1998).
- [29] G. Ghosh, *Phys. Lett. A* **210**, 40-44 (1996).
- [30] H. Goldstein, *Classical Mechanics* (Addison-Wesley 1980).
- [31] H. R. Lewis, JR., *J. Math. Phys* **9**, 1976-1986 (1968).
- [32] H. R. Lewis, JR., W. B. Riesenfeld, *J. Math. Phys* **10**, 1458-1473 (1969).
- [33] H. Reinhard, *Equations aux dérivées partielles : fondements et applications* (Dunod, Borgas, Paris 1987).
- [34] J. A. Jones, A. Pines, *Chemical Physics Letters*, **247**, Issue 3, p.215-220.
- [35] J. Anandan, A. Pines, *Phys. Lett. A* **141**, 335-339 (1989).
- [36] J. Anandan, Y. Aharonov, *Phys. Rev. D* **38**, 1863–1870 (1988).
- [37] J. E. Avron – *Adiabatic Quantum Transport* (Les Houches, E. Akkermans, *et. al.* eds., Elsevier Science 1995).
- [38] J. E. Avron, A. Elgart, *Commun. Math. Phys.* **203**, 445-463 (1999).
- [39] J. E. Avron, A. Elgart, *J. Phys. A: Math. Gen.* **32** No 50, L537-L546 (1999).
- [40] J. E. Avron, A. Elgart, *An Adiabatic Theorem without a Gap Condition*, math-ph/9810004.
- [41] J. E. Avron, A. Elgart, *Phys. Rev. A* **58**, 4300–4306 (1998).
- [42] J. E. Avron, R. Seiler, L. G. Yaffe, *Comm. Math. Phys.* **110**, 33-49 (1987).
- [43] J. Hladik, P. E. Hladik, *Le calcul tensoriel en physique, cours et exercices corrigés* (DUNOD, Paris 1999) troisième édition, (Masson, Paris, 1993, 1994 pour les premières éditions).
- [44] J. L. Basdevant, J. Dalibard, *Quantum Mechanics* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2002).
- [45] J. Liu, B. Hu, B. Li, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1749–1753 (1998).
- [46] J. Von Neumann, *les fondements quantiques de la mécanique quantique* (Jacques Gabay, Paris 1947).
- [47] K. Matsumoto, *Berry's phase in view of quantum estimation theory, and its intrinsic relation with the complex structure*, quant-ph/0006076.
- [48] K. Huang, *Statistical Mechanics* (Wiley, New York 1963).
- [49] L. Chambadal, J. L. Ovaert, "Hilbert (espace de)", *Encyclopædia Universalis*, version 10 nouveautés, Logiciel et moteur de recherche OPTI Media, Paris 2004.
- [50] L. D. Landau, E. Lifchitz, *Mécanique quantique* (Mir, Moscou, 1967) traduit du russe par Edouard Gloukhian, 2ème édition.
- [51] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Statistical Physics Part 2* (Pergamon Press 1980) Translated from the Russian by J. B. Sykes and M. J. Kearsley, Third edition, revised and enlarged.
- [52] L. Landau, E. Lifchitz, *Mécanique* (Mir, Moscou, réimpression 1988) traduit du russe par Claude Ligny, quatrième édition complétée 1982, 1ère édition 1964.
- [53] L. Schwartz, *Théorie des Distributions* (Hermann, Paris 1967).
- [54] M. B. Ruskai, *Comments on Adiabatic Quantum Algorithms*, quant-ph/0203127.
- [55] M. Born, *The statistical interpretation of quantum mechanics Nobel Lecture*, December 11, 1954.
- [56] M. Born, *Z. Physik*, **37**, 863 (1926); **38**, 803 (1926); *Gottinger Nachr. Math Physik*, 146 (1926).
- [57] M. Gell-Mann, F. Low, *Phys. Rev.* **84**, 350 (1951).
- [58] M. Maâmache, H. Bekkar, *J. Phys. A : Math. Gen.* **36**, L359-L364 (2003).

- [59] M. Maâmache, *J. Math. Phys.* **39** (1), 161-169, January 1998.
- [60] M. V. Berry, *J. Mod. Optics*, **34**, 1401-1407 (1987).
- [61] M. V. Berry, "The geometric phase", *Scientific American*, **259** (6), 26-34 (1988).
- [62] M.V. Berry, "Anticipations of the geometric phase", *Physics Today*, **43** (12) 34-40 (1990).
- [63] M. V. Berry, *J. Phys. A : Math. Gen.* **30** 8355-8362 (1997).
- [64] M.V. Berry, *Proc. Roy. Soc. London A* **392**, 45 (1984).
- [65] O. V. Usatenko, J-P. Provost, G. Vallée, *J. Phys A : Gen* **29**, 2607-2619 (1996).
- [66] R. G. Newton, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 954–956 (1994).
- [67] R. Simon, N. Mukunda, *Phys Rev Lett.* **70** (7), 880-883 (1993).
- [68] R. Courant, D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics V1* (Interscience Publishers. Inc., New York 1953).
- [69] S. Duki, H. Mathur, O. Narayan, Is the Adiabatic Approximation Inconsistent? quant-ph/0510131.
- [70] S. Jansen, M. B. Ruskai, R. Seiler, Bounds for the adiabatic approximation with applications to quantum computation, quant-ph/0603175.
- [71] S. Ryu, Y. Hatsugai, American Physical Society, APS March Meeting, March 13-17, (2006).
- [72] S. Teufel, *Adiabatic Perturbation Theory in Quantum Dynamics, Lecture Notes in Mathematics 1821* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 2003).
- [73] W. Greiner, *Quantum Mechanics : An Introduction* (Springer, Germany 2000) 4. ed.
- [74] X. B. Wang, L. C. Kwek, C. H. Oh, *Phys. Rev. A* **62**, 032105 (2000) [4 pages].
- [75] X. X. Yi, D. M. Tong, L. C. Kwek, C. H. OH, Effective Hamiltonian approach to adiabatic approximation in open systems, quant-ph/0606203.
- [76] Y. Aharonov, D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485-491 (1959).
- [77] Y. Aharonov, J. Anandan, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1593–1596 (1987).
- [78] Y. Gouverneur, " Phase de Berry et quantification de skyrmions", Mémoire présenté à l'université de Laval (1998).
- [79] Z. Tang et D. Finkelstein, Interpretation of the Topological Terms in Gauge System, hep-th/9604185 (1996), soumis à *Phys. Rev. Lett.*
- [80] Z. Wei, M. Ying, Quantum Adiabatic Evolutions That Can't Be Used to Design Efficient Algorithms, quant-ph/0604077.

Résumé :

On se propose de donner une généralisation du théorème adiabatique pour le cas du *spectre continu*. Une démonstration de cette généralisation est fournie ainsi qu'une discussion des résultats obtenus. On montre que cette dernière implique l'apparition d'un analogue de la phase de Berry ; *la phase géométrique généralisée*. En plus, dans les problèmes de diffusion on montre que, pour un spectre non dégénéré, cette phase n'est que l'élément diagonal de la matrice S. Des exemples d'application sont proposés.

Mots-clés : approximation adiabatique, théorème adiabatique, gap d'énergie, spectre discret, spectre continu, différentielles propres, phase de Berry, phase géométrique, matrice S.

Abstract :

We propose to give a generalization of the adiabatic theorem for the case of the continuous spectrum. A demonstration of this generalization is provided as well as a discussion of the results obtained. It is shown that the latter implies the appearance of an analogue of the Berry's phase; the generalized geometrical phase. Moreover, in the scattering problems we show that, for a non degenerate spectrum, this phase is no thing but the diagonal element of the S-matrix. Examples of application are proposed.

Keywords: adiabatic approximation, adiabatic theorem, energy's gap, discrete spectrum, continuous spectrum, eigendifferentials, Berry's phase, Geometric phase, S-matrix.

المخلص:

نقترح إعطاء تعميم للنظرية الكاظمة لحالة الطيف المستمر. هذا التعميم مرفق بالبرهان بالإضافة إلى مناقشة للنتائج. كما نرى بأن هذا الأخير ينتج عنه نظير لطور بيري: الطور الهندسي المعمم. علاوة على ذلك، نرى بأن، من أجل طيف غير منحل، هذا الطور ما هو إلا العنصر القطري لمصفوفة الانتشار. نقترح إعطاء أمثلة تطبيقية.

الكلمات المفتاحية: التقريب الكاظم، النظرية الكاظمة، فجوة الطاقة، الطيف المنقطع، الطيف المستمر، التفاضلات الذاتية، طور بيري، الطور الهندسي، مصفوفة الانتشار.